МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА

Факультет вычислительной математики и кибернетики

В.Б. Андреев

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Учебное пособие

3-я редакция

Исправленная и дополненная

МОСКВА - 2021

УДК 519.6(075.8)
ББК 22.193я73

Печатается по решению Редакционно-издательского совета факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М.В. Ломоносова

Рецензенты:
профессор А.В. Разгулин
профессор Н.В. Соснин

Андреев В.Б.

Численные методы: Учебное пособие.-

М.: Издательский отдел факультета ВМК МГУ им. М.В. Ломоносова(лицензия ИД N 05899 от 24.09.2001 г.); МАКС Пресс, 2013.- ISBN

ISBN

Учебное пособие посвящено изложению тех разделов вычислительной математики, которые на факультете ВМК МГУ им. М.В. Ломоносова изучаются на третьем курсе. Основными из указанных разделов являются вычислительная линейная алгебра и численные методы решения дифференциальных уравнений. В разделе линейной алгебры представлены прямые и итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений с квадратной невырожденной матрицей и методы решения задачи на собственные значения. Далее изложены методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений, разностные схемы для двухточечных краевых задач и уравнений теплопроводности и колебаний струны.

УДК 519.6(075.8)

ББК 22.193я73

ISBN

ISBN

Оглавление

Предисловие

Численные методы или, что то же самое, вычислительные методы, методы вычислений есть раздел математики, называемый также вычислительной математикой, который изучает методы (приближенные) решения различных математических задач. Под словом изучает понимается как разработка этих методов, так и исследование их свойств. Изучением методов решения математических задач занимаются и другие разделы математики. В чем же специфика математики вычислительной? Пусть, например, требуется вычислить определенный интеграл от действительной функции одной переменной. В математическом анализе — тоже разделе математики — в частности изучаются методы построения первообразных таких функций, и если средствами математического анализа первообразная интересующей нас функции может быть найдена, то рассматриваемая задача элементарно решается при помощи формулы Ньютона-Лейбница. Однако хорошо известно, что первообразные в элементарных и даже в специальных функциях выражаются далеко не всегда, а потому наша задача этим средствами тоже решена может быть не всегда. Здесь и наступает черед вычислительной математики, которая предлагает искать решение (приближенное) поставленной задачи при помощи квадратурных формул. Похожая ситуация возникает при решении обыкновенных дифференциальных уравнений, дифференциальных уравнений с частными производными и во многих других случаях.

Данная книга состоит из трех частей. Первая часть посвящена задачам линейной алгебры. Здесь изложены прямые и некоторые итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений с квадратной невырожденной матрицей, а также методы решения задачи на собственные значения. Во второй части кратко рассмотрено численное дифференцирование и методы решения нелинейных уравнений и систем. Здесь же изложен некоторый вспомогательный аппарат. Третья часть посвящена численному решению дифференциальных уравнений. Рассмотрены три класса задач: задача Коши для обыкновенных диффе-

ренциальных уравнений первого порядка, двухточечные краевые задачи для уравнения второго порядка и задачи для простейших уравнений с частными производными. Для задачи Коши изложены явные и неявные методы Рунге-Кутты и многошаговые методы. Разностные методы для двухточечных задач изложены и исследованы на равномерной, неравномерной и сгущающихся сетках. Из уравнений с частными производными рассмотрены одномерное нестационарное уравнение теплопроводности и уравнение колебаний струны.

Столь специфический отбор материала связан с тем, что именно эти разделы численных методов читаются на третьем курсе ВМК МГУ.

Автор приносит искреннюю благодарность И.Г. Белухиной за ее труд по оформлению книги.

Вычислительная линейная алгебра

Вычислительная линейная алгебра есть раздел численных методов и линейной алгебры, который занимается разработкой и исследованием практических алгоритмов решения на компьютерах задач линейной алгебры. Вычислительная линейная алгебра находит широкое применение в большинстве числовых вычислений во всех областях приложений, таких как физика, техника, химия, финансы и т.д. Имеются две основные задачи матричных вычислений:

* решение систем линейных уравнений,
* вычисление собственных значений и собственных векторов матриц.

Конечно, в линейной алгебре имеются и другие важные задачи, но эти две преобладают, и именно они будут изучены в данном курсе.

В силу теоремы Кронекера - Капелли система линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b$$

разрешима тогда и только тогда, когда ранг матрицы A равен рангу расширенной матрицы $[Ab]$. Это заведомо так, если матрица A квадратная и невырожденная, т.е. $\det A \neq 0$. В этом случае система не только разрешима при любых b, но и имеет единственное решение (разрешима однозначно). Именно этот случай мы и будем изучать.

Методы решения систем линейных алгебраических уравнений делятся на две группы. К первой группе принадлежат так называемые прямые методы — алгоритмы, позволяющие получить решение за конечное число арифметических действий. Сюда относятся известное правило Крамера нахождения решения при помощи определителей, метод исключения Гаусса, метод прогонки — метод решения систем с трехдиагональными матрицами. Существуют и другие методы, из которых отметим метод Холецкого (метод квадратных корней), применяемый к системам с симметричными положительно определенными матрицами, метод вращений и метод отражений.

Вторую группу составляют приближенные методы, в частности, итерационные. В итерационных методах решение системы получается как предел при стремлении числа итераций n к бесконечности. При конечных n, как правило, получаются лишь приближенные решения.

Прямые и итерационные методы имеют свою область применения: если размерность системы не слишком велика, то часто предпочтительнее

использовать прямые методы. Итерационные методы выгодны для систем большого порядка. Особенно в случае матриц специального вида.

I

Прямые методы решения линейных систем

1

Метод исключения Гаусса и треугольное (LU) разложение матрицы

Исключение Гаусса безусловно знакомо читателю хотя бы из курса линейной алгебры, а, может быть, и из школьного курса. Этот метод является простейшим методом решения системы линейных алгебраических уравнений. Он широко используется при ручном решении таких систем и в то же время является стандартным методом для их решения на компьютере. Мы сначала опишем исключение Гаусса в чистом виде, а позже добавим к нему процедуру выбора ведущего элемента, что существенно улучшит его устойчивость.

1.1 Метод исключения Гаусса

Метод Гаусса преобразует полную линейную систему $Ax = b$ к эквивалентной системе с верхней треугольной матрицей путем простейших преобразований. Существуют и другие методы, приводящие систему к указанному виду, но там преобразования более сложные, и о них речь пойдет позже. (Алгоритм также можно применять к комплексным и прямоугольным матрицам, но мы сосредоточим внимание на действительном квадратном случае.)

Система $Ax = b$ в развернутой форме имеет вид

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j = b_i, \qquad i = 1, \ldots, n. \tag{1.1}$$

Напомним требуемые рассуждения для случая $n = 3$. При этом значении n система (1.1) примет вид

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= b_2, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= b_3. \end{aligned}$$

Снабдим коэффициенты матрицы этой системы и элементы ее правой части верхним индексом $^{(0)}$, т.е. пусть $a_{ij} =: a_{ij}^{(0)}$, $b_j =: b_j^{(0)}$. Тогда

$$\begin{aligned} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + a_{13}^{(0)}x_3 &= b_1^{(0)}, \\ a_{21}^{(0)}x_1 + a_{22}^{(0)}x_2 + a_{23}^{(0)}x_3 &= b_2^{(0)}, \\ a_{31}^{(0)}x_1 + a_{32}^{(0)}x_2 + a_{33}^{(0)}x_3 &= b_3^{(0)}. \end{aligned} \tag{1.2}$$

Приведение данной системы к треугольному виду осуществляется в два шага. Коэффициент $a_{11}^{(0)}$ называется ведущим элементом первого шага исключения.

Первый шаг. Предположим, что $a_{11} = a_{11}^{(0)} \neq 0$. Поделим первое уравнение системы на этот коэффициент. Затем умножим полученное уравнение на $a_{21}^{(0)}$ и результат вычтем из второго уравнения

$$\left(a_{21}^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}a_{11}^{(0)}\right)x_1 + \left(a_{22}^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}a_{12}^{(0)}\right)x_2 + \left(a_{23}^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}a_{13}^{(0)}\right)x_3 = b_2^{(0)} - \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}b_1^{(0)}.$$

Коэффициент при x_1 в преобразованном втором уравнении равен нулю, и поэтому система (1.2) после этого преобразования принимает вид

$$\begin{aligned} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + a_{13}^{(0)}x_3 &= b_1^{(0)}, \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 &= b_2^{(1)}, \\ a_{31}^{(0)}x_1 + a_{32}^{(0)}x_2 + a_{33}^{(0)}x_3 &= b_3^{(0)}, \end{aligned} \tag{1.3}$$

где

$$a_{2j}^{(1)} = a_{2j}^{(0)} - l_{21}a_{1j}^{(0)}, \quad l_{21} = a_{21}^{(0)}/a_{11}^{(0)}, \quad b_2^{(1)} = b_2^{(0)} - l_{21}b_1^{(0)}.$$

Теперь преобразованное первое уравнение с единичным коэффициентом при x_1 умножим на $a_{31}^{(0)}$ и вычтем из третьего уравнения

$$\left(a_{31}^{(0)} - \frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}a_{11}^{(0)}\right)x_1 + \left(a_{32}^{(0)} - \frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}a_{12}^{(0)}\right)x_2 + \left(a_{33}^{(0)} - \frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}a_{13}^{(0)}\right)x_3 = b_3^{(0)} - \frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}b_1^{(0)}.$$

Коэффициент при x_1 равен нулю и в этом уравнении, а исходная система преобразуется к виду

$$\begin{aligned} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + a_{13}^{(0)}x_3 &= b_1^{(0)}, \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 &= b_2^{(1)}, \\ a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 &= b_3^{(1)}, \end{aligned} \tag{1.4}$$

где

$$a_{3j}^{(1)} = a_{3j}^{(0)} - l_{31}a_{1j}^{(0)}, \quad l_{31} = a_{31}^{(0)}/a_{11}^{(0)}, \quad b_3^{(1)} = b_3^{(0)} - l_{31}b_1^{(0)}.$$

Матрица с элементами $a_{ij}^{(1)}$ из (1.4) называется *ведущей подматрицей* (второго) шага. (На первом шаге ведущей подматрицей была сама матрица A.)

Второй шаг. Предположим, что $a_{22}^{(1)} \neq 0$, и поделим второе уравнение этой системы на $a_{22}^{(1)}$. Домножая полученное уравнение на $a_{32}^{(1)}$ и вычитая из третьего уравнения, придем к системе с треугольной матрицей

$$\begin{aligned} a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + a_{13}^{(0)}x_3 &= b_1^{(0)}, \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 &= b_2^{(1)}, \\ a_{33}^{(2)}x_3 &= b_3^{(2)}, \end{aligned} \tag{1.5}$$

где

$$a_{33}^{(2)} = a_{33}^{(1)} - l_{32}a_{23}^{(1)}, \quad l_{32} = a_{32}^{(1)}/a_{22}^{(1)}, \quad b_3^{(2)} = b_3^{(1)} - l_{32}b_2^{(1)}.$$

В общем случае процедура исключения аналогична описанной и состоит из $(n-1)$ шагов. Коэффициенты окончательной треугольной системы

$$\begin{array}{ccccccccccc} a_{11}^{(0)}x_1 & + & a_{12}^{(0)}x_2 & + & a_{13}^{(0)}x_3 & + & \dots & + & a_{1n}^{(0)}x_n & = & b_1^{(0)} \\ & & a_{22}^{(1)}x_2 & + & a_{23}^{(1)}x_3 & + & \dots & + & a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & & a_{ii}^{(i-1)}x_i & + & \dots & + & a_{in}^{(i-1)}x_n & = & b_i^{(i-1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & & & & & & a_{nn}^{(n-1)}x_n & = & b_n^{(n-1)}, \end{array} \tag{1.6}$$

и всех промежуточных, равно как и их правые части на k-ом шаге, $k = 1, 2, \dots, n-1$, вычисляются по формулам

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik}a_{kj}^{(k-1)}, \qquad i, j = k+1, \dots, n, \tag{1.7}$$

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - l_{ik} b_k^{(k-1)}, \qquad i = k+1, \ldots, n, \tag{1.8}$$

а

$$l_{ik} = a_{ik}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}, \qquad i = k+1, \ldots, n, \tag{1.9}$$

причем $a_{ij}^{(0)} = a_{ij}$, $b_i^{(0)} = b_i$.

Вычисления по формулам (1.7)-(1.9) называются *прямым ходом метода Гаусса* или прямой подстановкой. После этого неизвестные x_k последовательно, начиная с x_n, находятся из (1.6) по формулам

$$x_i = \left[b_i^{(i-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i-1)} x_j \right] \Big/ a_{ii}^{(i-1)}, \qquad i = n, \ldots, 1. \tag{1.10}$$

Вычисления по этим формулам называют *обратным ходом метода Гаусса* или *обратной подстановкой*.

Замечание 1.1. В формулах (1.6) при пребразованиях системы (1.1) первое уравнение осталось без изменения. С равным успехом может быть использован и другой вариант исключения, когда первое уравнение (1.1) делится на a_{11}, а вместо (1.6) получается система с единичными коэффициентами при x_j в j-ом уравнении.

Замечание 1.2. Вычисления по формулам (1.9), (1.10) , а, следовательно, и по формулам (1.7), (1.8) возможны лишь тогда, когда все числа

$$a_{ii}^{(i-1)} \neq 0, \qquad i = 1, \ldots, n. \tag{1.11}$$

Необходимые и достаточные условия выполнения (1.11) устанавливаются в доказываемой ниже теореме 1.2.

1.2 LU разложение матрицы.

Покажем, что метод Гаусса эквивалентен разложению матрицы A системы (1.1) в произведение нижней L и верхней U треугольных матриц с последующим решением вспомогательных систем с этими матрицами. Сделаем это на примере матрицы третьего порядка из (1.2). Для этого введем в рассмотрение матрицы

$$E_{21} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad E_{31} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad E_{32} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 \end{bmatrix} =: L_2^{-1},$$

где l_{ik} определяются соотношениями (1.9) Легко проверить, что переход от системы (1.2) к системе (1.3) может быть осуществлен умножением матрицы $A^{(0)}$ системы (1.2) и ее правой части $b^{(0)}$ на матрицу E_{21}, а от (1.3) к (1.4) — умножением соответствующей матрицы и вектора на матрицу E_{31}. Очевидно также, что

$$E_{31}E_{21} = E_{21}E_{31} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} =: L_1^{-1}$$

и, следовательно, переход от (1.2), минуя (1.3), сразу к (1.4) осуществляется умножением матрицы $A^{(0)}$ системы (1.2) и ее правой части $b^{(0)}$ на L_1^{-1}. Если $A^{(k)}$ — матрицы, получаемые на k-ом шаге, то

$$A^{(1)} = L_1^{-1}A^{(0)}, \qquad b^{(1)} = L_1^{-1}b^{(0)}.$$

Аналогично (будем говорить только о матрицах)

$$A^{(2)} = L_2^{-1}A^{(1)} = L_2^{-1}L_1^{-1}A^{(0)},$$

и, следовательно,

$$A = A^{(0)} = L_1L_2A^{(2)}. \tag{1.12}$$

Легко проверить, что

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad L_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & l_{32} & 1 \end{bmatrix},$$

т.е. при обращении L_k меняется только знак перед поддиагональными элементами l_{ik}, $i > k$. Далее,

$$L := L_1L_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix},$$

а матрица $A^{(2)}$ из (1.12), т.е. матрица системы (1.5), есть верхняя треугольная матрица. Обозначая ее через U и принимая во внимание вышесказанное, приходим к искомому разложению

$$A = LU, \tag{1.13}$$

где L — нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю.

Все вышесказанное остается справедливым и в общем случае матрицы A порядка n. Теперь матрицы L и U из (1.13) имеют вид

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{bmatrix}, \qquad U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}, \tag{1.14}$$

где элементы матрицы l_{ik} матрицы L вычисляются по формулам (1.9), а элементы $u_{kj} := a_{kj}^{(k-1)}$ матрицы U — по формулам (1.7).

Имея разложение (1.13), систему (1.1) можно переписать в виде

$$Ax = LUx = Ly = b, \qquad Ux = y,$$

после чего решение системы (1.1) распадается на решение двух систем с треугольными матрицами

$$Ly = b \qquad \text{и} \qquad Ux = y. \tag{1.15}$$

Решение первой из этих систем заменяет преобразование вектора правой части системы (1.1) по формулам (1.8) прямого хода метода Гаусса. Решение же x второй системы определяется формулами (1.10) обратной подстановки, где $b_i^{(i-1)} = y_i$, а $a_{ij}^{(i-1)} = u_{ij}$.

Замечание 1.3. Соотношения (1.7) содержат формулы для $u_{kj} = a_{kj}^{(k-1)}$ и промежуточные значения, которые тоже нужно запоминать и хранить. Мы сейчас преобразуем эти формулы к такому виду, при котором хранение промежуточных значений не требуется.

Пусть матрицы L и U имеют вид (1.14), т.е. их элементы

$$l_{ik} = 0 \quad \text{при} \quad k > i, \tag{1.16}$$

а

$$u_{kj} = 0 \quad \text{при} \quad k > j. \tag{1.17}$$

Поскольку $LU = A$, то по правилу умножения матриц находим, что

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}. \tag{1.18}$$

Преобразуем эту формулу двумя способами. В силу (1.14), (1.16)

$$\sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kj} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} + \overset{=1}{l_{ii}}u_{ij} + \sum_{k=i+1}^{n} \overset{=0}{l_{ik}}u_{kj} \ = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} + u_{ij},$$

а в силу (1.17)

$$\sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kj} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} + l_{ij}u_{jj} + \sum_{k=j+1}^{n} l_{ik}\overset{0}{\overset{\|}{u_{kj}}} \ = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} + l_{ij}u_{jj}.$$

Отсюда и из (1.18) имеем

$$\begin{aligned} u_{ij} &= \Big[a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}\Big] \quad i = 1,\dots,n; \quad j = i,\dots,n; \\ l_{ij} &= \frac{1}{u_{jj}}\Big[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj}\Big] \quad j = 1,\dots,n; \quad i = j+1,\dots,n. \end{aligned} \tag{1.19}$$

Очевидно, что реализация формул (1.19) возможна только тогда, когда все $u_{jj} = a_{jj}^{(j-1)}$ отличны от нуля (ср. с (1.11)).

Замечание 1.4. Формулы (1.19) устроены так, что нельзя сначала вычислить все u_{ij}, а затем все l_{ij} или наоборот. Можно предложить следующий порядок вычислений по этим формулам:

$$\begin{aligned} &u_{1j} = a_{1j}, \qquad j = 1,2,\dots,n; \\ &l_{i1} = a_{i1}/u_{11}, \qquad i = 2,3,\dots,n; \\ &u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j}, \qquad j = 2,3,\dots,n; \\ &l_{i2} = (a_{i2} - l_{i1}u_{12})/u_{22}, \qquad i = 3,4,\dots,n; \end{aligned} \tag{1.20}$$

и т.д., т.е. чередовать вычисление строк матрицы U и столбцов матрицы L.

После построения матриц L и U решение систем (1.15) с треугольными матрицами находятся по формулам

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k, \qquad i = 1,2,\dots,n, \tag{1.21}$$

(вычисления ведутся сверху вниз)— прямая подстановка,

$$x_k = \frac{1}{u_{kk}}\Big[y_k - \sum_{j=k+1}^{n} u_{kj}x_j\Big], \qquad k = n, n-1, \ldots, 1 \tag{1.22}$$

(вычисления ведутся снизу вверх) — обратная подстановка.

Одной из важнейших характеристик любого численного метода является его трудоемкость. Под трудоемкостью метода, предназначенного для решения системы (1.1), обычно понимают число арифметических действий, необходимых для нахождения искомого решения. Часто в трудоемкость метода включают лишь действия умножения и деления, как наиболее трудоемкие операции с точки зрения работы компьютера. Так будем поступать и мы.

Поскольку при треугольном разложении матрицы и при последовательном исключении неизвестных выполняются одни и те же арифметические операции, то вместо того, чтобы считать число действий, необходимых для реализации вычислений по формулам (1.19), подсчитаем число действий, требуемых последовательными исключениями при преобразовании матрицы. Заметим, что на каждом шаге последовательного исключения требуется провести те же самые вычисления, что и на предыдущем шаге, но для матрицы на единицу меньшей размерности. На i-ом шаге мы работаем с матрицей $(n-i+1)$-го порядка. При этом совершаем $(n-i)$ операций деления в первой строке и по $(n-i)$ операций умножения при преобразовании каждой из $(n-i)$-ой последующих строк. Общее число умножений и делений на этом шаге есть

$$(n-i+1)(n-i).$$

Поскольку всего шагов $(n-1)$, то общее число умножений и делений есть

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{i=1}^{n-1}(n-i+1)(n-i) = \sum_{k=2}^{n} k(k-1) = \sum_{k=1}^{n} k(k-1) = \\ &= \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} - \frac{n(n+1)}{2} = \frac{n(n^2-1)}{3} = \frac{n^3}{3} + O(n) \approx \frac{n^3}{3}. \end{aligned} \tag{1.23}$$

Упражнение 1.1. Найти общее число арифметических действий при треугольном разложении матрицы, включая сложения и вычитания.

Для вычислений по формулам (1.21) и (1.22) имеем соответственно

$$\overset{\circ}{q} = \sum_{i=1}^{n}(i-1) = \frac{n(n-1)}{2} \qquad \text{и} \qquad \overline{q} = \sum_{k=1}^{n}(n-k+1) = \frac{n(n+1)}{2}, \quad (1.24)$$

т.е. общее число действий для решения систем (1.15) по формулам (1.21), (1.22) есть

$$q = \overset{\circ}{q} + \overline{q} = n^2. \quad (1.25)$$

Замечание 1.5. Из формул (1.23) и (1.25) следует, что при больших n основной объем работы, которую нужно выполнить для решения системы (1.1) описанным методом, падает на преобразование коэффициентов матрицы системы, т.е. на построение треугольного разложения, в то время как преобразование вектора правой части (решение первой системы (1.15)) и на отыскание самого решения трудозатраты сравниетельно невелики. В связи с этим при больших n решение нескольких систем с различными правыми частями и одной и той же матрицей оказывается по трудоемкости практически таким же как и решение одной системы.

Выясним теперь условия, при которых вычисления по формулам (1.19)-(1.22) возможны, т.е. все u_{jj} отличны от нуля.

Теорема 1.1. *Пусть A — невырожденная матрица, L — нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю, а U — невырожденная верхняя треугольная матрица. Тогда, если $A = LU$, то это представление единственно.*

Для доказательства теоремы 1.1 нам потребуется

Лемма 1.1. *Пусть T есть нижняя треугольная матрица (соответственно, верхняя треугольная матрица). Тогда ее обратная (если она существует) также является нижней треугольной матрицей (соответственно, верхней треугольной) с диагональными элементами, равными обратным величинам диагональных элементов T. Пусть T' — другая нижняя треугольная матрица (соответственно, верхняя треугольная). Тогда произведение TT' есть также нижняя треугольная матрица (соответственно, верхняя треугольная) с диагональными элементами, равными произведениям соответствующих диагональных элементов T и T'.*

Упражнение 1.2. Доказать лемму 1.1.

Доказательство теоремы 1.1. Пусть $A = L_1U_1 = L_2U_2$. Тогда

$$L_1 = L_2U_2U_1^{-1} \qquad \text{и} \qquad L_2^{-1}L_1 = U_2U_1^{-1}.$$

Слева стоит произведение нижних треугольных матриц, а справа — верхних. Поэтому произведение есть диагональная матрица D, т.е. $L_2^{-1}L_1 = D$. Отсюда находим, что $L_1 = L_2D$. Поскольку главные диагонали L_1 и L_2 единичные, а главная диагональ L_2D совпадает с главной диагональю D, то $D = I$. Отсюда $L_1 = L_2$ и $U_1 = U_2$. Теорема доказана.

Замечание 1.6. Элементы l_{ik} и u_{kj} фигурирующих в теореме 1.1 матриц L и U определяются из нелинейной системы (1.18), содержащей n^2 уравнений. Самих же элементов у двух треугольных матриц $n(n+1)$, т.е. на n больше, чем уравнений. Недостающие уравнения для однозначного определения матриц L и U как раз и задаются условием $l_{ii} = 1, \quad i = 1, 2, \ldots, n$.

Теорема 1.2. *Пусть A — квадратная невырожденная матрица, L — нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю, а U — невырожденная верхняя треугольная матрица. Разложение $A = LU$ существует тогда и только тогда, когда все угловые миноры матрицы A отличны от нуля.*

Напомним, что *угловыми минорами* матрицы A называются величины

$$\Delta_1 = a_{11}, \quad \Delta_2 = \det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \ \ldots, \quad \Delta_n = \det[A].$$

Доказательство. 1°. (Необходимость)

Пусть разложение $A = LU$ существует. Тогда по теореме 1.1 оно единственно. Представим матрицы A, L и U в блочном виде

$$A = \begin{bmatrix} A_m & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} L_m & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} U_m & U_{12} \\ 0 & U_{22} \end{bmatrix},$$

где A_m, L_m, U_m и A_{22}, L_{22}, U_{22} — квадратные матрицы размерностей $m \times m$ и $(n-m) \times (n-m)$ соответственно, а m — произвольное число. Разложение $A = LU$ в блочном представлении имеет вид

$$\begin{bmatrix} A_m & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_m & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_m & U_{12} \\ 0 & U_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_mU_m & L_mU_{12} \\ L_{21}U_m & L_{21}U_{12} + L_{22}U_{22} \end{bmatrix}. \quad (1.26)$$

Отсюда следует, что

$$A_m = L_mU_m. \quad (1.27)$$

Поскольку матрица U треугольная и невырожденная, то все ее диагональные элементы отличны от нуля. Поэтому невырождена и треугольная матрица U_m. Тем самым

$$\Delta_m = \det[A_m] = \det[L_m]\det[U_m] = u_{11}\dots u_{mm} \neq 0$$

при $m = 1, \dots, n$.

2°. (Достаточность) Пусть теперь $\Delta_1\Delta_2\dots\Delta_n \neq 0$. Для доказательства существования треугольного разложения воспользуемся методом полной математической индукции по порядку системы n. При $n = 1$ матрица $A = a_{11} = \Delta_1 \neq 0$, матрица $L = 1$ и поэтому $U = u_{11} = a_{11} = \det U \neq 0$. Существование искомого разложения при $n = 1$ доказано.

Пусть A_k — матрица порядка k и разложение $A_k = L_kU_k$ существует с $\det U_k \neq 0$ при $k = 1, \dots, m-1$. Докажем, что существует и $A_m = L_mU_m$, причем $\det U_m \neq 0$. Пусть $a_{\cdot m} = [a_{1m}\dots a_{m-1\,m}]^T$ — столбец, $a_{m\cdot} = [a_{m1}\dots a_{m\,m-1}]$ — строка и разложение A_m будем искать в виде

$$A_m = \begin{bmatrix} A_{m-1} & a_{\cdot m} \\ a_{m\cdot} & a_{mm} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{m-1} & 0 \\ l_{m\cdot} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{m-1} & u_{\cdot m} \\ 0 & u_{mm} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{m-1}U_{m-1} & L_{m-1}u_{\cdot m} \\ l_{m\cdot}U_{m-1} & l_{m\cdot}u_{\cdot m} + u_{mm} \end{bmatrix}.$$

Отсюда следует, что неизвестный столбец $u_{\cdot m}$, неизвестная строка $l_{m\cdot}$ и неизвестный элемент u_{mm} определяются следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} &L_{m-1}u_{\cdot m} = a_{\cdot m} \\ &l_{m\cdot}U_{m-1} = a_{m\cdot} \quad \Rightarrow \quad U_{m-1}^T l_{m\cdot}^T = a_{m\cdot}^T, \\ &u_{mm} = a_{mm} - l_{m\cdot}u_{\cdot m}\,. \end{aligned} \tag{1.28}$$

Поскольку L_{m-1} и U_{m-1} невырожденные, из первого и второго соотношений (1.28) можно найти $u_{\cdot m}$ и $l_{m\cdot}$, соответственно, после чего третье соотношение дает u_{mm}. Существование разложения (1.26) для m доказано. Осталось доказать, что $\det U_m \neq 0$. Но с учетом (1.27)

$$0 \neq \Delta_m = \det A_m = \det U_m,$$

что и требовалось доказать. Теорема полностью доказана.

Замечание 1.7. Если A — вырожденная квадратная матрица порядка n имеет ранг $r < n$, и все ее угловые миноры до порядка r ненулевые, то аналогом треугольного разложения является разложение

$$A = LU,$$

где L — нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю, а U — так называемая трапециеводная матрица с нулевыми последними $n-r$ строками и верхней треугольной матрицей в первых r строках и столбцах.

Если A — прямоугольная матрица из $R^{m\times n}$ ранга $r \leqslant \min\{m,n\}$ и ненулевыми главными минорами до порядка r, то

$$A = LU,$$

где L — квадратная матрица $\in R^{m\times m}$ с единичной главной диагональю и $U \in R^{m\times n}$.

1.3 Метод Холецкого (квадратных корней)

Вновь обратимся к системе

$$Ax = b. \tag{1.29}$$

На этот раз будем предполагать, что матрица A симметрична и положительно определена, т.е.

$$A = A^T \quad \text{и} \quad A > 0. \tag{1.30}$$

Последнее означает, что квадратичная форма $x^TAx > 0$ для любого ненулевого вектора x. Напомним, что симметричная матрица имеет только действительные собственные значениия, а положительно определенная — только положительные. В силу критерия Сильвестра необходимым и достаточным условием положительной определенности матрицы A является положительность всех ее угловых миноров $\Delta_i > 0$, $i = 1,\dots,n$.

Построим алгоритм решения системы (1.29), который использует свойства (1.30) матрицы A. Это будет *метод Холецкого.* Основой метода Холецкого является

Теорема 1.3. *Если $A = A^T > 0$, то существует единственное разложение*

$$A = LL^T, \tag{1.31}$$

где L — нижняя треугольная матрица с положительными диагональными элементами.

Определение 1.1. Разложение (1.31) называется *разложением Холецкого,* а матрица L — *множителем Холецкого.*

Доказательство теоремы. Сначала докажем единственность. Пусть существуют два разложения

$$A = L_1 L_1^T = L_2 L_2^T.$$

Обращая матрицы L_1^T и L_2, будем иметь

$$L_2^{-1} L_1 = L_2^T \left(L_1^T\right)^{-1}.$$

Примем во внимание, что $(AB)^T = B^T A^T$, а для невырожденных матриц $(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$. Тогда

$$\left(L_1^{-1} L_2\right)^{-1} = L_2^{-1} L_1 = L_2^T \left(L_1^T\right)^{-1} = \left(L_1^{-1} L_2\right)^T. \tag{1.32}$$

В силу леммы 1.1 обратная к нижней треугольной матрице есть нижняя треугольная матрица и произведение таких матриц есть снова нижняя треугольная матрица. Из сказанного следует, что в левой части (1.32) стоит нижняя треугольная матрица, а справа — верхняя. Равенство (1.32) возможно только тогда, когда обе матрицы диагональные. Но диагональная матрица совпадает со своей транспонированной. Поэтому из (1.32) следует, что

$$\left(L_1^{-1} L_2\right)^{-1} = L_1^{-1} L_2 = D.$$

Это соотношение утверждает, что диагональная матрица D совпадает со своей обратной, что возможно только в том случае, если у этой матрицы диагональными элементами являются числа ± 1. Поскольку $L_2 = L_1 D$, а диагональные элементы L_1 и L_2 положительны, то диагональные элементы D тоже должны быть положительны, т.е. $D \equiv I$ и, следовательно, $L_2 = L_1$. Единственность доказана.

Построим теперь формулы для вычисления элементов L, откуда и будет следовать существование. Так как $a_{ij} = a_{ji}$, а $l_{ij} = 0$ при $i < j$, то будем считать, что

$$i \geqslant j.$$

Тогда

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} l_{kj}^T = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} + l_{ij} l_{jj} + \sum_{k=j+1}^{n} l_{ik} \overset{0}{\overset{\|}{l_{jk}}} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} + l_{ij} l_{jj}.$$

При $i = j$ находим, что

$$l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}, \quad j = 1, \ldots, n. \tag{1.33}$$

Далее,

$$l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right], \quad i = j+1, \ldots, n, \quad j = 1, \ldots, n-1. \tag{1.34}$$

Вычисления можно вести по столбцам $j = 1, \ldots, n$ для $i = j+1, \ldots, n$.

$$j = 1: \quad l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad l_{i1} = \frac{a_{i1}}{l_{11}}, \quad i = 2, \ldots, n$$

$$j = 2: \quad l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2}, \quad l_{i2} = \frac{1}{l_{22}} \left[a_{i2} - l_{i1} l_{21} \right], \quad i = 3, \ldots, n$$

и т.д.

Осталось доказать, что все l_{jj} положительны, т.е. положительны подкоренные выражения. Докажем, что

$$l_{jj} = \sqrt{\Delta_j / \Delta_{j-1}}, \quad \text{где} \quad \Delta_0 = 1.$$

Пусть, как раньше,

$$A = \begin{bmatrix} A_j & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} L_j & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix}.$$

Тогда

$$A_j = L_j L_j^T.$$

Отсюда

$$\Delta_j = \det A_j = (\det L_j)^2 = \left(\prod_{k=1}^{j} l_{kk} \right)^2.$$

Аналогично

$$\Delta_{j-1} = \left(\prod_{k=1}^{j-1} l_{kk} \right)^2$$

и, следовательно,

$$l_{jj}^2 = \Delta_j / \Delta_{j-1} > 0, \quad j = 1, \ldots, n.$$

Теорема доказана.

Упражнение 1.3. Показать, что для реализации формул (1.33), (1.34) при всех i и j требуется

$$Q = \frac{n(n+1)(n+2)}{6} \approx \frac{n^3}{6} \tag{1.35}$$

операций умножения, деления и извлечения корня.

Замечание 1.8. Из (1.35) следует, что разложение Холецкого в два раза более экономично, чем треугольное разложение.

Обратимся теперь к решению системы (1.29). Поскольку $Ax = LL^T x = b$, то, полагая $L^T x = y$, получим $Ly = b$. При этом

$$\begin{aligned} y_i &= \frac{1}{l_{ii}} \left[b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \right], \quad i = 1, \ldots, n, \\ x_i &= \frac{1}{l_{ii}} \left[y_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k \right], \quad i = n, \ldots, 1. \end{aligned} \tag{1.36}$$

(Ср. с (1.21), (1.22)).

Замечание 1.9. В вычислительной практике используется модификация разложения Холецкого, называемая LDL^T*-разложением.* Суть ее в том, что вместо разложения (1.31) строится разложение матрицы A вида

$$A = LDL^T,$$

где L — попрежнему нижняя треугольная матрица, но в отличие от (1.31) ее диагональные элементы равны 1, а D — диагональная матрица. Достоинство LDL^T-разложения состоит в том, что при его вычислении не требуется находить квадратные корни, а потому оно существует не только для положительно определенных матриц. Условием существования такого разложения для симметричной матрицы является отличие от нуля всех ее угловых миноров.

Упражнение 1.4. Показать, что для элементов матриц L и D из LDL^T-разложения имеют место соотношения

$$\begin{aligned} & d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 d_k, \quad j = 1, 2, \ldots, n, \\ & l_{ij} = \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} \right] / d_j = \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} m_{jk} \right] / d_j, \quad \begin{array}{l} i = j+1, \ldots, n, \\ j = 1, \ldots, n-1, \end{array} \\ & m_{jk} = l_{jk} d_k, \quad k = 1, \ldots, j-1. \end{aligned} \tag{1.37}$$

1.4 Обращение матрицы

Опишем одну из возможных процедур вычисления A^{-1}, основанную на использовании LU-разложения. Пусть $A = LU$. Тогда $A^{-1} = U^{-1}L^{-1}$ или

$$UA^{-1} = L^{-1}.$$

Воспользуемся этим соотношением для вычисления A^{-1}. Допустим сначала, что L^{-1} — известна. Обозначим $A^{-1} = X$, $L^{-1} = Y$. Пусть $x_{\cdot j}$ и $y_{\cdot j}$ — j-е столбцы матриц X и Y, соответственно, т.е. $X = [x_{\cdot 1} x_{\cdot 2} \dots x_{\cdot n}]$, $x_{\cdot j} = [x_{1j} x_{2j} \dots x_{nj}]^T$. Тогда получим n систем вида

$$Ux_{\cdot j} = y_{\cdot j}, \quad j = 1, \dots, n \tag{1.38}$$

с треугольной матрицей, решения которых могут быть найдены по формулам (1.22), и, следовательно,

$$x_{kj} = \frac{1}{u_{kk}} \left[y_{kj} - \sum_{m=k+1}^{n} u_{km} x_{mj} \right], \quad k = n, n-1, \dots 1.$$

Найдем теперь $L^{-1} = Y$. Поскольку $LY = I$, то имеем n систем

$$Ly_{\cdot j} = e_j, \quad j = 1, \dots, n. \tag{1.39}$$

Заметим, что матрица L^{-1} — нижняя треугольная, и поэтому у столбца $y_{\cdot j}$ первые j элемента известны и равны нулю для $i = 1, \dots, j-1$ и единице для $i = j$, т.е. ${y_{\cdot j}}^T = [0 \dots 0\, 1\, y_{j+1\, j} \dots y_{nj}] = [0^T\, 1\, \overline{y}_{\cdot j}{}^T]$. Отсюда следует, что для отыскания истинных неизвестных вектора $y_{\cdot j}$ нужно решить систему с треугольной матрицей размеров $(n-j) \times (n-j)$ относительно $\overline{y}_{\cdot j}$. Для этого можно воспользоваться формулами типа (1.22).

Оценим объем работы по вычислению A^{-1}. В силу (1.23) факторизация $A = LU$ требует $\approx n^3/3$ умножений, решение одной системы (1.38) (см. (1.25)) — $\approx n^2/2$, а всех $\approx n^3/2$, решение всех систем (1.39)

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{(n-j+1)^2}{2} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{12} \approx n^3/6.$$

Складывая, находим, что для вычисления матрицы A^{-1} при помощи описанного алгоритма требуется $\approx n^3$ умножений. Это всего лишь в три раза больше, чем для решения системы (1.29).

2

Методы QR-факторизации

Основная идея *QR-факторизации* снова состоит в сведении линейной системы к треугольной. Однако на этот раз матрица раскладывается в произведение не верхней и нижней треугольных матриц, как это было при LU-разложении или разложении Холецкого, а в произведение верхней треугольной матрицы R и ортогональной матрицы Q, которая тоже легко обращается, ибо $Q^{-1} = Q^T$.

Для того, чтобы решить линейную систему

$$Ax = b, \tag{2.1}$$

мы должны сделать три шага:

1° выполнить факторизацию A, т.е. найти такую ортогональную матрицу Q, для которой $Q^T A = R$ есть верхняя треугольная

2° вычислить $Q^T b$

3° выполнить обратную подстановку, т.е. решить треугольную систему $Rx = Q^T b$.

Имеет место

Теорема 2.1 (О QR-факторизации). *Пусть A есть действительная невырожденная матрица. Тогда существует единственная пара (Q, R), где Q — ортогональная матрица, а R — верхняя треугольная с положительными элементами на главной диагонали, такая, что*

$$A = QR.$$

Доказательство.

1° (Существование). Поскольку A невырождена, то $A^T A$ является положительно определенной, и, следовательно, для нее имеет место разложение Холецкого

$$A^T A = LL^T = R^T R,$$

где $R = L^T$ — верхняя треугольная матрица. Пусть $AR^{-1} = Q$. Покажем, что Q есть ортогональная матрица. В самом деле

$$Q^TQ = \left(AR^{-1}\right)^T\left(AR^{-1}\right) = \left(R^{-1}\right)^T A^TAR^{-1} = \left(R^{-1}\right)^T R^TRR^{-1} =$$
$$= \left(RR^{-1}\right)^T\left(RR^{-1}\right) = I.$$

Таким образом,

$$A = QR$$

есть искомое разложение.

2° (Единственность)

Для доказательства единственности этой факторизации мы предположим, что существуют две факторизации

$$A = Q_1R_1 = Q_2R_2.$$

Тогда $Q_2^TQ_1 = R_2R_1^{-1}$ есть верхняя треугольная матрица с положительными диагональными элементами (см. лемму 1.1).Пусть $R = R_2R_1^{-1}$. Тогда

$$R^TR = \left(Q_2^TQ_1\right)^T\left(Q_2^TQ_1\right)^T = I,$$

т.е. R есть множитель Холецкого при факторизации единичной матрицы, который определяется однозначно, и, следовательно, $R = I$. Поэтому $R_1 = R_2$ и $Q_1 = Q_2$. Единственность факторизации доказана.

Замечание 2.1. В приведенном выше доказательстве единственности QR-факторизации принципиальным было предположение о положительности диагональных элементов R. Исследуем множественность разложений при отказе от указанного предположения. Рассмотрим две QR-факторизации некоторой невырожденной матрицы

$$A = Q_1R_1 = Q_2R_2.$$

И в этом случае для $R = R_2R_1^{-1}$ справедливо равенство $RR^T = I$, откуда следует, что $R^{-1} = R^T$, т.е. $R = D = R^T$, где D — диагональная матрица. Но тогда $R^2 = D^2 = I$ и $d_{ii} = \pm 1$. Поскольку $Q_2^TQ_1 = R_2R_1^{-1} = R = D$, то

$$R_2 = DR_1, \qquad Q_1 = Q_2D, \qquad (Q_2 = Q_1D).$$

Другими словами, QR-факторизация действительной невырожденной матрицы единственна с точностью до умножения каждого k-го столбца Q и каждой k-ой строки R на множитель $d_k = \pm 1$. В комплексном случае таким множителем является комплексное число e^{il}, где l — действительное число.

2.1 Метод вращений Гивенса

Построим метод вращений решения системы (2.1), который позволяет получить представление матрицы A в виде произведения ортогональной матрицы Q и верхней треугольной матрицы R.

Как и в методе Гаусса, в методе вращений на первом шаге неизвестное x_1 исключается из всех уравнений кроме первого. Для того, чтобы исключить x_1 из второго уравнения, умножим первое уравнение на некоторое число c, а второе — на s и заменим первое уравнение суммой вновь полученных уравнений. Затем умножим первое уравнение на s, второе — на c и вычтем первое из второго:

$$\begin{array}{lllllll} (c\,a_{11}+s\,a_{21})x_1 & + & (c\,a_{12}+s\,a_{22})x_2 & + & \dots & = & c\,b_1+s\,b_2, \\ (-s\,a_{11}+c\,a_{21})x_1 & + & (-s\,a_{12}+c\,a_{22})x_2 & + & \dots & = & -s\,b_1+c\,b_2. \end{array}$$

Числа c и s выберем из условий

$$-s\,a_{11}+c\,a_{21}=0, \quad c^2+s^2=1. \tag{2.2}$$

Решение нелинейной системы (2.2) при $a_{11}^2+a_{21}^2 \neq 0$ дают, например, формулы

$$c=\frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2+a_{21}^2}}, \quad s=\frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2+a_{21}^2}}\ . \tag{2.3}$$

Если же $a_{11}^2+a_{21}^2=0$, то решение (2.2) разумно взять в виде $c=1$, $s=0$, что означает сохранение первых двух уравнений системы (2.1) без изменения. Первое из уравнений (2.2) как раз и означает, что в новом втором уравнении системы (2.1) неизвестного x_1 не будет.

В результате система (2.1) преобразуется к виду

$$\begin{array}{lllllllllll} a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & a_{13}^{(1)}x_2 & + & \dots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)}, \\ & & a_{22}^{(1)}x_2 & + & a_{23}^{(1)}x_3 & + & \dots & + & a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)}, \\ a_{31}x_1 & + & a_{32}x_2 & + & a_{33}x_3 & + & \dots & + & a_{3n}x_n & = & b_3, \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & a_{n3}x_3 & + & \dots & + & a_{nn}x_n & = & b_n, \end{array} \tag{2.4}$$

в котором

$$\begin{array}{llllll} a_{1j}^{(1)} & = & c\,a_{1j}+s\,a_{2j}, & a_{2j}^{(1)} & = & -s\,a_{1j}+c\,a_{2j}, \quad j=1,2,\dots,n, \\ b_1^{(1)} & = & c\,b_1+s\,b_2, & b_2^{(1)} & = & -s\,b_1+c\,b_2. \end{array} \tag{2.5}$$

Как легко видеть, преобразование исходной системы (2.1) к виду (2.4) эквивалентно умножению матрицы системы A и вектора правой части b слева на матрицу T_{12} — *матрицу вращения*, имеющую вид

$$T_{12} = \begin{bmatrix} c & s & & & \\ -s & c & & 0 & \\ & & 1 & & \\ & 0 & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Для исключения неизвестного x_1 из третьего уравнения системы (2.4) новое первое уравнение и третье уравнение, которое пока не было затронуто преобразованиями, заменяются их линейными комбинациями с новыми коэффициентами c, s и $-s$, c, соответственно. Будем их теперь обозначать через c_{13} и s_{13}, а решению (2.3) системы (2.2) присвоим обозначения c_{12} и s_{12}. При этом коэффициенты c_{13} и s_{13} находятся из системы

$$-s_{13}a_{11}^{(1)} + c_{13}a_{31} = 0, \quad c_{13}^2 + s_{13}^2 = 1 \tag{2.6}$$

и суть

$$c_{13} = \frac{a_{11}^{(1)}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(1)}\right)^2 + a_{31}^2}}, \qquad s_{13} = \frac{a_{31}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(1)}\right)^2 + a_{31}^2}},$$

а коэффициенты преобразованных первого и третьего уравнений находятся по формулам

$$\begin{aligned} a_{1j}^{(2)} &= c_{13}a_{1j}^{(1)} + s_{13}a_{3j}, & a_{3j}^{(1)} &= -s_{13}a_{1j}^{(1)} + c_{13}a_{3j}, \quad j = 1, 2, \ldots, n, \\ b_1^{(2)} &= c_{13}b_1^{(1)} + s_{13}b_3, & b_3^{(1)} &= -s_{13}b_1^{(1)} + c_{13}b_3. \end{aligned}$$

Это преобразование эквивалентно умножению слева матрицы системы (2.4) и ее вектора правой части на матрицу

$$T_{13} = \begin{bmatrix} c_{13} & 0 & s_{13} & & & \\ 0 & 1 & 0 & & 0 & \\ -s_{13} & 0 & c_{13} & & & \\ & & & 1 & & \\ & 0 & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

и приводит к тому, что коэффициент при x_1 в преобразованном третьем уравнении обращается в нуль.

Продолжая подобным образом, мы исключим x_1 из всех остальных уравнений. Первое уравнение изменяется на каждом таком "малом" шаге, которых будет $n-1$. Поэтому, по завершении первого шага система (2.1) примет вид

$$\begin{array}{ccccccccccc} a_{11}^{(n-1)}x_1 & + & a_{12}^{(n-1)}x_2 & + & a_{13}^{(n-1)}x_3 & + & \dots & + & a_{1n}^{(n-1)}x_n & = & b_1^{(n-1)}, \\ & & a_{22}^{(1)}x_2 & + & a_{23}^{(1)}x_3 & + & \dots & + & a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)}, \\ & & \dots\dots & & \dots\dots & & \dots\dots & & \dots\dots & & \dots\dots \\ & & a_{n2}^{(1)}x_2 & + & a_{n3}^{(1)}x_3 & + & \dots & + & a_{nn}^{(1)}x_n & = & b_n^{(1)}. \end{array}$$

Упражнение 2.1. Доказать, что для коэффициентов этой и предыдущих систем, а также для преобразующих коэффициентов c_{1l} и s_{1l} справедливы соотношения

$$\begin{array}{lcl} a_{1j}^{(l-1)} = c_{1l}a_{1j}^{(l-2)} + s_{1l}a_{lj}, & & a_{lj}^{(1)} = -s_{1l}a_{1j}^{(l-2)} + c_{1l}a_{lj}, \quad a_{1j}^{(0)} = a_{1j}, \\ & & j = 1, 2, \dots, n, \\ b_1^{(l-1)} = c_{1l}b_1^{(l-2)} + s_{1l}b_l, & & b_l^{(1)} = -s_{1l}b_1^{(l-2)} + c_{1l}b_l, \\ & & l = 2, 3, \dots, n, \\ c_{1l} = \dfrac{a_{11}^{(l-2)}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(l-2)}\right)^2 + a_{l1}^2}}, & & s_{1l} = \dfrac{a_{l1}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(l-2)}\right)^2 + a_{l1}^2}}, \\ & & l = 2, 3, \dots, n. \end{array}$$

Замечание 2.2. Поскольку в силу невырожденности матрицы A по крайней мере один из коэффициентов $a_{i1} \neq 0$, то $a_{11}^{(n-1)} = c_{1n}a_{11}^{n-2} + s_{1n}a_{n1} = \sqrt{\left(a_{11}^{(n-2)}\right)^2 + a_{n1}^2} > 0$.

В матричной записи эта система имеет вид

$$A^{(1)}x = b^{(1)},$$

где

$$A^{(1)} = T_1 A, \quad b^{(1)} = T_1 b, \quad T_1 = T_{1n}T_{1\,n-1}\dots T_{13}T_{12}.$$

На втором шаге метода вращений из третьего, четвертого и т.д. уравнений полученной системы исключается неизвестное x_2. Шаг состоит из

$(n-2)$ "малых" шагов, и в каждом из них второе уравнение комбинируется с одним из нижележащих. После выполнения второго шага система преобразуется к виду

$$\begin{array}{ccccccccccc}
a_{11}^{(n-1)}x_1 & + & a_{12}^{(n-1)}x_2 & + & a_{13}^{(n-1)}x_3 & + & \dots & + & a_{1n}^{(n-1)}x_n & = & b_1^{(n-1)}, \\
 & & a_{22}^{(n-1)}x_2 & + & a_{23}^{(n-1)}x_3 & + & \dots & + & a_{2n}^{(n-1)}x_n & = & b_2^{(n-1)}, \\
 & & & & a_{33}^{(2)}x_3 & + & \dots & + & a_{3n}^{(2)}x_n & = & b_3^{(2)}, \\
 & & & & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 & & & & a_{n3}^{(2)}x_3 & + & \dots & + & a_{nn}^{(2)}x_n & = & b_n^{(2)}.
\end{array}$$

Упражнение 2.2. Доказать справедливость следующих соотношений

$$\begin{array}{rcl}
a_{2j}^{(l-1)} & = & c_{2l}a_{2j}^{(l-2)} + s_{2l}a_{lj}^{(1)}, \\
b_2^{(l-1)} & = & c_{2l}b_2^{(l-2)} + s_{2l}b_l^{(1)}, \\
c_{2l} & = & \dfrac{a_{22}^{(l-2)}}{\sqrt{\left(a_{22}^{(l-2)}\right)^2 + \left(a_{l2}^{(1)}\right)^2}},
\end{array}
\qquad
\begin{array}{rcl}
a_{lj}^{(2)} & = & -s_{2l}a_{2j}^{(l-2)} + c_{2l}a_{lj}^{(1)}, \\
 & & j = 2, 3, \dots, n, \\
b_l^{(2)} & = & -s_{2l}b_2^{(l-2)} + c_{2l}b_l^{(1)}, \\
 & & l = 3, 4, \dots, n, \\
s_{2l} & = & \dfrac{a_{l2}^{(1)}}{\sqrt{\left(a_{22}^{(l-2)}\right)^2 + \left(a_{l2}^{(1)}\right)^2}}.
\end{array}$$

В матричной форме эта система имеет вид

$$A^{(2)}x = b^{(2)},$$

где

$$A^{(2)} = T_2A^{(1)}, \quad b^{(2)} = T_2b^{(1)}, \quad T_2 = T_{2n}T_{2\,(n-1)}\dots T_{24}T_{23}.$$

После $(n-1)$ шагов получим систему

$$\begin{array}{ccccccccccc}
a_{11}^{(n-1)}x_1 & + & a_{12}^{(n-1)}x_2 & + & a_{13}^{(n-1)}x_3 & + & \dots & + & a_{1n}^{(n-1)}x_n & = & b_1^{(n-1)}, \\
 & & a_{22}^{(n-1)}x_2 & + & a_{23}^{(n-1)}x_3 & + & \dots & + & a_{2n}^{(n-1)}x_n & = & b_2^{(n-1)}, \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 & & & & & & & & a_{nn}^{(n-1)}x_n & = & b_n^{(n-1)},
\end{array} \tag{2.7}$$

где

$$\begin{aligned} a_{kj}^{(l-1)} &= c_{kl}a_{kj}^{(l-2)} + s_{kl}a_{lj}^{(k-1)}, & a_{lj}^{(k)} &= -s_{kl}a_{kj}^{(l-2)} + c_{kl}a_{lj}^{(k-1)}, \\ & & & j = k, k+1, \ldots, n, \\ b_k^{(l-1)} &= c_{kl}b_k^{(l-2)} + s_{kl}b_l^{(k-1)}, & b_l^{(k)} &= -s_{kl}b_k^{(l-2)} + c_{kl}b_l^{(k-1)}, \\ & k = 1, \ldots, n, & & l = k+1, \ldots, n, \end{aligned} \tag{2.8}$$

а

$$c_{kl} = \frac{a_{kk}^{(l-2)}}{\sqrt{\left(a_{kk}^{(l-2)}\right)^2 + \left(a_{lk}^{(k-1)}\right)^2}}, \qquad s_{kl} = \frac{a_{lk}^{(k-1)}}{\sqrt{\left(a_{kk}^{(l-2)}\right)^2 + \left(a_{lk}^{(k-1)}\right)^2}}. \tag{2.9}$$

В матричной записи полученная система имеет вид

$$A^{(n-1)}x = b^{(n-1)},$$

где

$$A^{(n-1)} = T_{n-1}A^{(n-2)}, \quad b^{(n-1)} = T_{n-1}b^{(n-2)}, \quad T_{n-1} = T_{n-1n}.$$

Обозначим через R полученную верхнюю треугольную матрицу $A^{(n-1)}$. Она связана с исходной матрицей A равенством

$$R = TA, \tag{2.10}$$

где $T = T_{n-1}\,T_{n-2}\,\ldots\,T_1$.

Замечание 2.3. В силу соображений, аналогичных изложенным в замечании 2.2, все элементы $a_{kk}^{(n-1)}$, $k = 1, 2, \ldots, n$ главной диагонали матрицы R положительны.

Замечание 2.4. Действие матрицы T_{kl}^T на вектор x эквивалентно его повороту по ходу часовой стрелки в координатной плоскости Ox_kx_l на угол φ_{kl} такой, что

$$\cos\varphi_{kl} = c_{kl}, \quad \sin\varphi_{kl} = s_{kl}.$$

Существование такого угла гарантируется соотношениями (2.9). Эта геометрическая интерпретация и дала название методу.

С учетом (2.2), (2.6) и т.д. легко видеть, что

$$T_{kl}T_{kl}^T = I,$$

т.е. матрицы T_{kl} ортогональные. Произведение ортогональных матриц есть матрица ортогональная, и поэтому T есть ортогональная матрица, равно как и $T^T = T^{-1} = Q$. Отсюда и из (2.10) находим, что

$$A = QR, \tag{2.11}$$

где Q — ортогональная матрица, а R — верхняя треугольная с положительными элементами на главной диагонали.

Упражнение 2.3. Показать, что для построения разложения (2.11) с использованием формул (2.8), (2.9), требуется $\approx 4n^3/3$ действий умножения.

Замечание 2.5. Принимая во внимание результаты вычислений из упражнения 2.3, заключаем, что метод вращений примерно в четыре раза более трудоемок, чем метод Гаусса.

2.2 Метод отражений Хаусхолдера

Рассмотрим еще один метод, который дает разложение матрицы A в произведение ортогональной и верхней треугольной матриц. Это будет *метод отражений.*

Пусть w — некоторый вектор (столбец) единичной длины

$$\|w\|_2^2 = (w, w) = w^T w = 1. \tag{2.12}$$

Введем в рассмотрение матрицу

$$U = I - 2ww^T, \tag{2.13}$$

которую назовем *матрицей отражения* или *матрицей Хаусхолдера*, и изучим ее свойства.

1°. Матрица U симметрична, т.е.

$$U = U^T. \tag{2.14}$$

В самом деле, так как

$$(ww^T)^T = (w^T)^T w^T = ww^T,$$

то ww^T есть симметричная матрица, а в силу (2.13) вместе с ней симметричной является и матрица U.

2°. Матрица U есть ортогональная матрица, т.е.

$$U^{-1} = U^T. \tag{2.15}$$

Принимая во внимание (2.14), (2.13) и (2.12), имеем

$$UU^T = UU = (I - 2ww^T)(I - 2ww^T) = I - 4ww^T + 4w\underbrace{w^Tw}_{\substack{\parallel \\ 1}}w^T = I,$$

что и означает справедливость (2.15).

3°. Число $\lambda = -1$ является однократным собственным значением матрицы U, которому отвечает собственный вектор w из (2.13). Число $\lambda = 1$ является $(n-1)$-кратным собственным значением матрицы U, которому отвечает $(n-1)$-мерное собственное подпространство, состоящее из всех векторов v, ортогональных w.

В силу (2.14), (2.15) имеем $U^2 = UU^T = I$. Так как все собственные значения матрицы I равны 1, то собственные значения матрицы U удовлетворяют соотношению $\lambda_U^2 = 1$, и, следовательно, равны либо $+1$, либо -1.

Далее, принимая во внимание (2.13), (2.12), находим, что

$$Uw = (I - 2ww^T)w = w - 2w\underbrace{w^Tw}_{\substack{\parallel \\ 1}} = -w. \tag{2.16}$$

Наконец, пусть

$$(v, w) = w^Tv = 0.$$

Тогда

$$Uv = (I - 2ww^T)v = v - 2w\underbrace{w^Tv}_{\substack{\parallel \\ 0}} = v, \tag{2.17}$$

что и требовалось доказать.

4°. Вектор Uy есть зеркальное отражение вектора y относительно плоскости, ортогональной вектору w.

Пусть y — произвольный вектор. Представим его в виде

$$y = z + v, \tag{2.18}$$

где z — проекция y на w, т.е. $z = (w, y)w$, а вектор v ортогонален w: $(w, v) = 0$. Принимая во внимание (2.16), (2.17), находим, что

$$Uy = U(z + v) = -z + v \tag{2.19}$$

(см. рис.1)

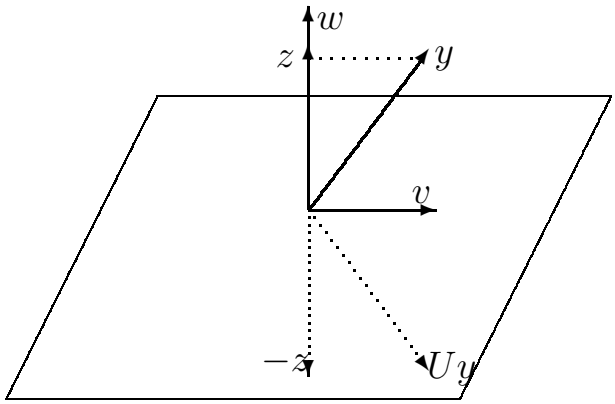


Рис. 1

5°. Векторы $y - Uy$ и $y + Uy$ ортогональны друг другу. При этом, если $y = z + v$, как в (2.18), то

$$y - Uy = 2z, \qquad z \| w, \tag{2.20}$$

$$y + Uy = 2v, \qquad v \perp w. \tag{2.21}$$

Утверждения следуют из (2.18), (2.19).

6°. Пусть x и y — произвольные векторы одинаковой длины. Тогда, если

$$w = \frac{y \pm x}{\|y \pm x\|_2}, \tag{2.22}$$

то матрица отражения U, построенная по вектору w, переводит вектор y в вектор, коллинеарный вектору x.

В самом деле, пусть матрица отражения U обладает указанным свойством, т.е. $Uy = -\sigma x$. Найдем вектор w, образующий эту матрицу. Согласно свойству 5° (см. (2.20)) вектор $y - Uy$ коллинеарен вектору w, а поскольку $\|w\|_2 = 1$, то

$$w = \frac{y - Uy}{\|y - Uy\|_2} = \frac{y + \sigma x}{\|y + \sigma x\|_2}.$$

В силу 2° матрица U ортогональна и поэтому

$$\|Uy\|_2 = \|y\|_2 := \|x\|_2 = |\sigma| \, \|x\|_2,$$

т.е. $\sigma = \pm 1$, что и приводит к (2.22)

Замечание 2.6. Если $y = x$, то при использовании в (2.22) нижнего знака $(-)$ знаменатель обратится в нуль. Это же произойдет при выборе верхнего знака $(+)$, если $y = -x$. Чтобы избежать этих неприятностей,

целесообразно знак в (2.22) выбирать совпадающим со знаком $\operatorname{sign}(x, y)$, т.е. полагать

$$w = \frac{y + \operatorname{sign}(x, y)\, x}{\|y + \operatorname{sign}(x, y)\, x\|_2}\,. \tag{2.23}$$

Если вектор y не равен $\pm x$, а лишь близок к одному из них, то и в этом случае при выборе (2.23) мы будем избавлены от неприятностей, связанных с делением на малое число.

Воспользуемся матрицей отражения для приведения квадратной матрицы к треугольному виду. На первом шаге приведения рассмотрим в качестве вектора y из свойства 6° первый столбец матрицы A

$$y_1 = [a_{11}\, a_{21}\, \ldots\, a_{n1}]^T, \tag{2.24}$$

а в качестве x — вектор, коллинеарный $e_1 = [1\ 0\ \ldots\ 0]^T$. Если $a_{21} = a_{31} = \cdots = a_{n1} = 0$, то переходим к следующему шагу, положив $A^{(1)} = A$, $U_1 = I$ и введя обозначения $a_{ij}^{(1)} = a_{ij}$. В противном случае умножим матрицу A слева на матрицу отражения

$$U_1 = I - 2w_1\, w_1^T = I_n - 2w_1\, w_1^T, \tag{2.25}$$

где вектор w_1 вычисляется согласно формуле (2.23)

$$w_1 = \frac{y_1 + \operatorname{sign} a_{11} \|y_1\|_2 e_1}{\|y_1 + \operatorname{sign} a_{11} \|y_1\|_2 e_1\|_2}. \tag{2.26}$$

В результате получим матрицу

$$A^{(1)} = U_1 A,$$

в первом столбце которой стоят нули во всех позициях, кроме, быть может, первой. Этим заканчивается первый этап.

Пусть мы уже осуществили $l \geqslant 1$ шагов и пришли к матрице $A^{(l)}$ с элементами $a_{ij}^{(l)}$ такими, что $a_{ij}^{(l)} = 0$ при $i > j$, $j = 1, \ldots, l$. В пространстве $\mathbb{R}_{n-l}$ векторов размерности $n - l$ рассмотрим вектор

$$y_{l+1} = [a_{l+1\ l+1}^{(l)}\, \ldots\, a_{n\ l+1}^{(l)}]^T.$$

Если $a_{l+2\ l+1}^{(l)} = \cdots = a_{n\ l+1}^{(l)} = 0$, то переходим к следующему шагу, положив

$$A^{(l+1)} = A^{(l)}, \quad U_{l+1} = I.$$

В противном случае строим матрицу отражения

$$V_{l+1} = I_{n-l} - 2w_{l+1}\, w_{l+1}^T$$

(размеры матрицы V_{l+1} и вектора w_{l+1} равны $(n-l)$), переводящую вектор y_{l+1} в вектор, коллинеарный $e_{l+1} = [1\,0\,\ldots\,0]^T \in \mathbb{R}_{n-l}$, и переходим к матрице

$$A^{(l+1)} = U_{l+1}A^{(l)},$$

где

$$U_{l+1} = \begin{bmatrix} I_l & 0 \\ 0 & V_{l+1} \end{bmatrix}. \tag{2.27}$$

Если матрицу $A^{(l)}$ записать в блочно-треугольном виде

$$A^{(l)} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(l)} & A_{12}^{(l)} \\ 0 & A_{22}^{(l)} \end{bmatrix},$$

где $A_{11}^{(l)}$ — верхняя треугольная матрица размера $l \times l$, то будем иметь

$$A^{(l+1)} = \begin{bmatrix} I_l & 0 \\ 0 & V_{l+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11}^{(l)} & A_{12}^{(l)} \\ 0 & A_{22}^{(l)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(l)} & A_{12}^{(l)} \\ 0 & V_{l+1}A_{22}^{(l)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(l+1)} & A_{12}^{(l+1)} \\ 0 & A_{22}^{(l+1)} \end{bmatrix}, \tag{2.28}$$

где $A_{11}^{(l+1)}$ — верхняя треугольная матрица размера $(l+1) \times (l+1)$. После $(n-1)$ шагов мы приходим к матрице

$$A^{(n-1)} = U_{n-1}U_{n-2}\ldots U_1 A,$$

имеющей верхнюю треугольную форму. Обозначим

$$U_{n-1}\ldots U_1 = U.$$

Тогда

$$A^{(n-1)} = UA, \quad A = U^T\, A^{(n-1)}.$$

Если нужно решить систему (2.1), то после описанных преобразований приходим к эквивалентной системе

$$A^{(n-1)}x = Ub \tag{2.29}$$

с треугольной матрицей.

Оценим трудоемкость QR-факторизации матрицы A методом отражений. Заметим сначала, что при построении метода отражений не использовались никакие предположения о невырожденности A. Поэтому

метод будет работать и в том случае, когда матрицей A является прямоугольная матрица, образованная $p \leqslant n$ столбцами высоты n. (Эта матрица становится квадратной, если к ней добавить недостающие $(n-p)$ (нулевых) столбцов). Принимая это во внимание, оценим трудоемкость QR-факторизации прямоугольной матрицы, образованной p столбцами a_j и имеющей вид

$$A = [a_1\, a_2\, \ldots\, a_p]$$

Первый шаг метода отражений состоит в умножении матрицы отражений U_1 на матрицу A. В общем случае такое перемножение требует n^2p умножений. Однако в нашем случае одна из матриц (матрица U_1) имеет специальную структуру (2.13), и умножение на такую матрицу можно выполнить более эффективно. Именно,

$$U_1A = \left(I_n - 2w_1w_1^T\right) A = A - 2w_1\left(w_1^T A\right) = A - 2w_1[w_1^T a_1\, \ldots\, w_1^T a_p].$$

Скалярное произведение вектора w_1 с одним из столбцов a_j требует n умножений, а общее число умножений для нахождения $(w_1^T\, A)$ равно np. Построение матрицы

$$(2w_1)(w_1^T\, A)$$

требует еще np умножений. Само построение по формуле (2.26) вектора w_1 и умножение его на 2 требует еще $O(n)$ умножений, но при больших n и p этими трудозатратами можно пренебречь. Итак, на первом шаге метода отражений требуется приблизительно $2np$ умножений. Принимая во внимание соотношения (2.28), находим, что при построении матрицы $A^{(l+1)}$ реально требуется перемножение только матрицы отражений V_{l+1} размера $(n-l)\times(n-l)$ с прямоугольной матрицей $A_{22}^{(l)}$ размера $(n-l)\times(p-l)$. Тем самым, для построения матрицы $A^{(l+1)}$ требуется приблизительно

$$2(n-l)(p-l)$$

умножений. Суммируя теперь все трудозатраты, находим, что трудоемкость построения QR-факторизации методом отражений приблизительно есть

$$2\sum_{l=0}^{p-1}(n-l)(p-l) \approx np^2 - \frac{1}{3}p^3. \tag{2.30}$$

Тем самым, трудоемкость QR-факторизации квадратной матрицы методом отражений приблизительно равна

$$2n^3/3,$$

что в два раза меньше трудоемкости метода вращений и в два раза больше трудоемкости LU-факторизации.

3

Ленточные методы

3.1 Метод прогонки

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b, \tag{3.1}$$

матрица которой является трехдиагональной. Запишем эту систему в развернутом виде. Пусть

$$\begin{array}{lllllllll}
b_1x_1 & + & c_1x_2 & & & & & = & d_1, \\
a_2x_1 & + & b_2x_2 & + & c_2x_3 & & & = & d_2, \\
\multicolumn{9}{c}{\dotfill} \\
 & & a_ix_{i-1} & + & b_ix_i & + & c_ix_{i+1} & = & d_i, \\
\multicolumn{9}{c}{\dotfill} \\
 & & & & & & a_nx_{n-1} + b_nx_n & = & d_n.
\end{array} \tag{3.2}$$

Алгоритм *метода прогонки* — метода решения системы (3.2) — состоит в следующем (см. курс "Введение в численные методы", но, может быть, с другими обозначениями!)

а) Нахождение прогоночных коэффициентов (прямая прогонка) по формулам

$$\begin{aligned}
&\alpha_i = -c_i/\gamma_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1, \\
&\gamma_i = b_i + a_i\alpha_{i-1}, \quad i = 2, \ldots, n, \quad \gamma_1 = b_1, \\
&\beta_i = (d_i - a_i\beta_{i-1})/\gamma_i, \quad i = 2, \ldots, n, \quad \beta_1 = d_1/b_1.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

б) Нахождение самого решения (обратная прогонка)

$$x_i = \alpha_i x_{i+1} + \beta_i, \quad i = n-1, \ldots, 1, \quad x_n = \beta_n. \tag{3.4}$$

Упражнение 3.1. Вывести эти формулы.

Из (3.3),(3.4) следует, что общее число умножений и делений при вычислении коэффициентов α_i и γ_i

$$Q = 2(n-1), \tag{3.5}$$

а при вычислении коэффициентов β_i и решения x_i

$$q = 3n - 2. \tag{3.6}$$

Сравнение (3.5),(3.6) с (1.23), (1.25) свидетельствуют о том, что прогонка существенно менее трудоемка по сравнению с общим методом Гаусса. Связано это с тем, что мы явным образом воспользовались тем, что значительная часть элементов матрицы A равна нулю.

3.2 Ленточные матрицы

Определение 3.1. *Квадратная матрица* A называется *ленточной с полушириной ленты* p, если ее элементы $a_{ij} = 0$ при $|i-j| > p$, но существует по крайней мере один элемент $a_{ij} \neq 0$ при $|i-j| = p$

Пример 3.1. Для диагональной матрицы $a_{ij} = 0$ при $|i-j| > 0$ и, следовательно, ее полуширина равна нулю. Ее лента состоит из одной диагонали и ширина равна 1. Условно диагональную матрицу можно изобразить как на рис. 1.

$$\begin{bmatrix} * & & & & & \\ & * & & & & \\ & & * & & & \\ & & & * & & \\ & & & & * & \\ & & & & & * \end{bmatrix}$$

Рис. 1.

Пример 3.2. Полная матрица имеет $2n-1$ диагоналей. Это и есть ширина ее ленты, а полуширина будет $p = n-1$.

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \end{bmatrix}$$

Рис. 2.

Пример 3.3. На рис. 3 изображена матрица с полушириной $p = 1$.

$$\begin{bmatrix} * & * & & & & \\ * & * & * & & & \\ & * & * & * & & \\ & & * & * & * & \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}$$

Рис. 3.

Матрицы такой структуры называются *трехдиагональными*. Ширина ленты 3.

Пример 3.4. Матрица, изображенная на рис. 4, имеет полуширину $p = 1$ и ширину ленты 2. Матрицы такой структуры называются трапециевидными. Изображенная матрица также называется правой ленточной.

$$\begin{bmatrix} * & * & & & & \\ & * & * & & & \\ & & * & * & & \\ & & & * & * & \\ & & & & * & * \\ & & & & & * \end{bmatrix}$$

Рис. 4.

Пример 3.5. У матрицы на рис. 5

$$\begin{bmatrix} * & 0 & * & & & \\ 0 & * & 0 & * & & \\ * & 0 & * & 0 & * & \\ & * & 0 & * & 0 & * \\ & & * & 0 & * & 0 \\ & & & * & 0 & * \end{bmatrix}$$

Рис. 5.

полуширина $p = 2$, ширина 5 и всего три ненулевых диагонали.

Определение 3.2. Рисунок, на котором (звездочками) отмечены позиции, где только и могут располагаться ненулевые элементы матрицы A, будем называть ее портретом.

3.3 Ленточный вариант треугольного разложения

Модифицируем алгоритм исключения Гаусса на случай ленточных матриц, т.е. заранее отбросим те вычисления, которые заведомо приводят к нулевым элементам. Это позволит нам сэкономить в трудозатратах на решение системы. Обратимся сразу к варианту, основанному на треугольном разложении матрицы A.

Нам потребуется

Лемма 3.1. *Если полуширина матрицы A равна p, то и в треугольном разложении $A = LU$ полуширина L (U) равна p.*

Доказательство. По условию леммы

$$a_{ij} = 0 \quad \text{при} \quad |i - j| > p. \tag{3.7}$$

Докажем, что

$$l_{ij} = 0 \quad \text{при} \quad i - j > p. \tag{3.8}$$

Для доказательства применим метод полной математической индукции по номерам столбцов матрицы L. При $j = 1$ из (1.19) находим, что

$$l_{i1} = a_{i1}/u_{11}, \quad i = 2, \ldots, n,$$

а если принять во внимание (3.7), то это соотношение примет вид

$$l_{i1} = \begin{cases} a_{i1}/u_{11}, & i = 2, \ldots, p+1, \\ 0, & i = p+2, \ldots, n. \end{cases}$$

Отсюда и следует (3.8) для $j = 1$.

Пусть теперь утверждение (3.8) верно для столбцов матрицы L с номерами $k = 1, 2, \ldots, j-1$, т.е.

$$l_{ik} = 0 \quad \text{при} \quad i - k > p, \quad k = 1, 2, \ldots, j-1. \tag{3.9}$$

Докажем справедливость (3.8) для j-ого столбца. В силу (3.7) из (1.19) следует, что при $i - j > p$

$$l_{ij} = -\frac{1}{u_{jj}} \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, \qquad i - j > p. \tag{3.10}$$

Оценим разность индексов $i - k$ у первых сомножителей произведений, стоящих под знаком суммы в (3.10). Принимая во внимание ограничения на i и k, диктуемые (3.10), будем иметь

$$i - k > p + j - k \geqslant p + 1.$$

Но тогда в силу (3.9) первые сомножители в сумме (3.10) обращаются в нуль и соотношение (3.8) установлено.

В силу (3.8) из (1.19) находим, что

$$l_{j+p,j} = a_{j+p,j}/u_{jj}.$$

и, следовательно, полуширина L совпадает с полушириной A. Для матрицы U доказательство аналогичное. Лемма доказана.

Преобразуем формулы (1.19)-(1.22) на случай ленточной матрицы A. Сначала выясним, для каких значений индексов i и j нужно проводить вычисления по формулам (1.19). Так как в силу леммы 3.1

$$u_{ij} = 0 \quad \text{при} \quad j - i > p, \tag{3.11}$$

то элементы u_{ij}, которые только и нужно вычислять, имеют индексы, подчиненные условию $j - i \leqslant p$, т.е.

$$j = i, i+1, \ldots, \min[n, p+i].$$

Аналогично

$$l_{ij} = 0 \quad \text{при} \quad i - j > p \tag{3.12}$$

и l_{ij} нужно вычислять только для

$$i = j+1, j+2, \ldots, \min[n, p+j].$$

Теперь преобразуем суммы в (1.19). В силу (3.11) ненулевые слагаемые в суммах (1.19) могут быть только при $j - k \leqslant p$, т.е. при

$$k \geqslant j - p,$$

а в силу (3.12) — только при $i - k \leqslant p$, т.е. при

$$k \geqslant i - p.$$

Объединяя эти неравенства и принимая во внимание, что k — натуральное, будем иметь

$$k \geqslant \max[1, i - p, j - p].$$

Поскольку в формулах для u_{ij} индексы i, j подчинены ограничению $j \geqslant i$, то в этих формулах

$$k \geqslant \max[1, j - p].$$

В формулах же для l_{ij} наоборот $i > j$ и поэтому в них

$$k \geqslant \max[1, i - p].$$

С учетом сказанного, для ленточной матрицы A с полушириной p формулы (1.19) принимают вид

$$\begin{aligned} u_{ij} &= \Big[a_{ij} - \sum_{k=\max[1,j-p]}^{i-1} l_{ik}u_{kj}\Big] \qquad & i = 1, \ldots, n, \\ & & j = i, \ldots, \min[n, p+i], \\ l_{ij} &= \frac{1}{u_{jj}}\Big[a_{ij} - \sum_{k=\max[1,i-p]}^{j-1} l_{ik}u_{kj}\Big] \qquad & j = 1, \ldots, n, \\ & & i = j+1, \ldots, \min[n, p+j]. \end{aligned} \tag{3.13}$$

Преобразуем формулы (1.21) и (1.22). В формулах (1.21) в силу (3.12) $i - k \leqslant p$, а в формулах (1.22) в силу (3.11) $j - k \leqslant p$. Поэтому

$$\begin{aligned} y_i &= b_i - \sum_{k=\max[1,i-p]}^{i-1} l_{ik}y_k, \qquad i = 1, \ldots, n, \\ x_k &= \frac{1}{u_{kk}}\Big[y_k - \sum_{j=k+1}^{\min[n,k+p]} u_{kj}x_j\Big], \quad k = n, \ldots, 1. \end{aligned} \tag{3.14}$$

3.4 Оценка трудоемкости

Оценим трудоемкость LU - разложения ленточной матрицы A, имеющей полуширину p, и трудоемкость решения системы (3.1) с такой матрицей. Для этого подсчитаем число умножений и делений, необходимых для реализации формул (3.13) и (3.14).

Как и в случае полной матрицы из раздела 1.2, трудоемкость подсчитаем для последовательного исключения неизвестных. На рис. 6 изображен портрет ленточной матрицы порядка $n = 9$ с полушириной $p = 3$.

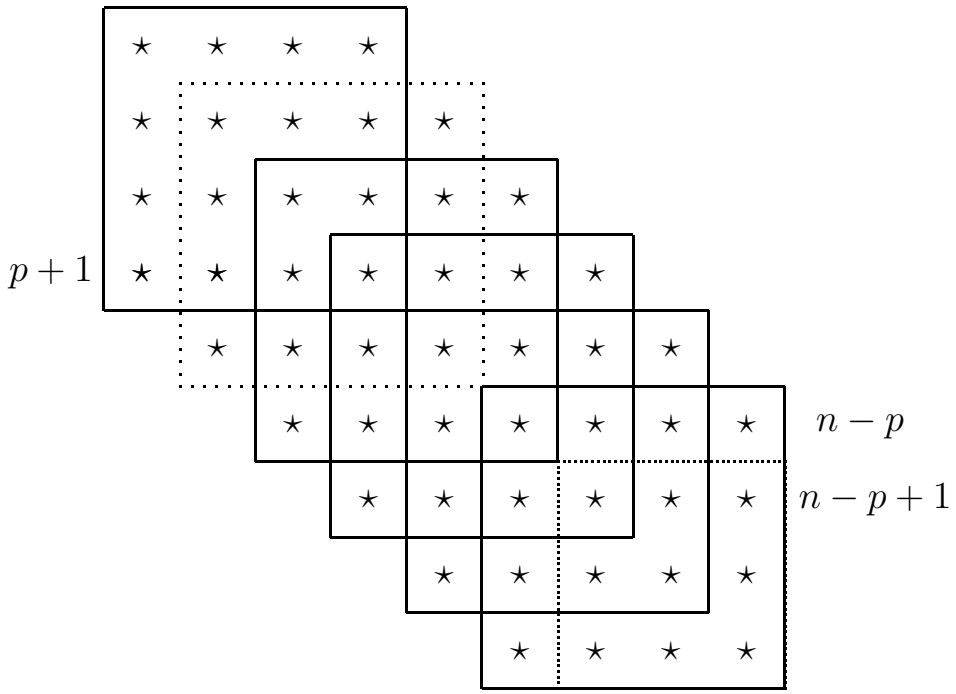


Рис. 6

В левом верхнем углу расположена плотно заполненная квадратная матрица порядка $p + 1$ (выделена сплошной линией), и первый шаг исключения из всей матрицы порядка n затрагивает только эту подматрицу. Число действий умножения и деления, требуемых для обнуления элементов первого столбца (кроме первого) этой подматрицы есть

$$p(p + 1).$$

Второй шаг исключения идентичен первому с тем же числом действий. И таких идентичных шагов будет $(n - p)$, после чего не преобразованной останется плотно заполненная матрица порядка p (на рисунке выделена

пунктирной линией). Оставшиеся $(p-1)$ шагов приведения к треугольному виду преобразуют эту матрицу, для чего, согласно (1.23) требуется

$$\frac{p(p^2-1)}{3}$$

действий умножения и деления. Тем самым, общая трудоемкость треугольного разложения ленточной матрицы с полушириной p есть

$$\begin{aligned} Q &= p(p+1)(n-p) + \frac{p(p^2-1)}{3} = \frac{p(p+1)(3n-2p-1)}{3} = \\ &= np(p+1) - \frac{2}{3}p^3 + O(p^2). \end{aligned} \tag{3.15}$$

Замечание 3.1. Полуширина полной матрицы $p = n-1$. Подставляя это значение p в найденное выражение, получим выражение для трудоемкости треугольного разложения, совпадающее с (1.23). Полагая же здесь $p = 1$, получим (3.5).

Обращаясь к формулам (3.14), находим, что

$$q = p(2n-p-1) + n = (2p+1)n - p(p+1) \tag{3.16}$$

(ср. с (1.25) при $p = n-1$ и (3.6) при $p = 1$).

Проанализируем формулы (3.15), (3.16). Рассмотрим три случая.

1°. $p = O(n)$, например, $p = \alpha n$, $\alpha < 1$. Тогда

$$Q \approx \alpha^2 n^3 - \frac{2}{3}\alpha^3 n^3 = \alpha^2 \left(1 - \frac{2\alpha}{3}\right) n^3.$$

Легко проверить, что при $0 < \alpha < 1$ коэффициент при n^3 меньше $1/3$.

2°. $p = o(n)$, но $p \to \infty$ при $n \to \infty$. В этом случае

$$Q \approx p^2 n, \qquad q \approx 2pn.$$

В частности, при $p = \sqrt{n}$

$$Q \approx n^2, \qquad q \approx 2n^{3/2}.$$

3°. $p = \mathrm{const}$ $(p = 1, 2, \dots)$.

$$Q \approx p(p+1)n, \qquad q \approx (2p+1)n.$$

При $p = 1$ $Q < q$, при $p \geqslant 2$ $Q > q$.

Упражнение 3.2. Показать, что в обозначениях (3.2) соотношения (3.3), (3.4) совпадают с (3.13), (3.14).

Приведем пример важной системы, полуширина ленты матрицы которой есть $O(\sqrt{n})$.

Пример 3.6. Среди уравнений математической физики одним из важнейших является уравнение Пуассона, которое в декартовых координатах на плоскости Oxy имеет вид

$$\Delta u := \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -f(x,y), \quad (x,y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2.$$

Одной из основных задач для этого уравнения является задача Дирихле, когда на границе $\partial\Omega$ области Ω задается значение искомой функции

$$u(x,y)\,\big|_{\partial\Omega} = g(x,y).$$

Пусть областью Ω является единичный квадрат $\Omega = (0,1)^2$, а граничная функция $g(x,y) = 0$. Приближенное решение этой задачи будем искать методом конечных разностей. Для этого в области Ω введем квадратную сетку с шагом $h = 1/N$, образованную точками пересечения двух семейств прямых: $x = ih, \quad i = 1,\dots,N-1$ и $y = jh, \quad j = 1,\dots,N-1$ (см. рис. 7). Координаты этих точек (узлов сетки) будем

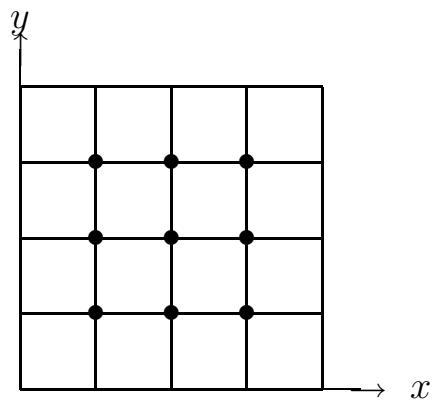


Рис. 7

обозначать x_i, y_j. Входящие в уравнение Пуассона производные аппроксимируем на построенной сетке вторыми разностными отношениями, т.е. пусть

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \sim \frac{u(x_i+h,y_j) - 2u(x_i,y_j) + u(x_i-h,y_j)}{h^2},$$
$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \sim \frac{u(x_i,y_j+h) - 2u(x_i,y_j) + u(x_i,y_j-h)}{h^2}.$$

В результате получим систему линейных алгебраических уравнений относительно $n = (N-1)^2$ неизвестных u_{ij}^h, которые и будут приближениями к $u(x_i, y_j)$. Очевидно, что любое из уравнений этой системы содержит не более пяти неизвестных. Если все неизвестные перенумеровать, двигаясь по сетке, например, слева направо и снизу вверх, то матрица этой системы будет иметь портрет, изображенный на рис. 8. Эта матрица имеет пять ненулевых диагоналей и полуширину $p = N$. Тем самым, при использовании для решения построенной системы ленточного варианта треугольного разложения потребуется $O(n^2) = O(N^4)$ арифметических действий.

$$\begin{bmatrix}
* & * & & * & & & & & \\
* & * & * & & * & & & & \\
 & * & * & & & * & & & \\
* & & & * & * & & * & & \\
 & * & & * & * & * & & * & \\
 & & * & & * & * & & & * \\
 & & & * & & & * & * & \\
 & & & & * & & * & * & * \\
 & & & & & * & & * & *
\end{bmatrix}$$

Рис. 8

Упражнение 3.3. Показать, что в трехмерном случае полуширина ленты $p = O(n^{2/3})$ и трудоемкость $Q = O(n^{7/3})$.

3.5 Несимметричная ленточность

Определение 3.3. Говорят, что матрица A ленточная с лентой нижней полуширины p_1 и верхней полуширины p_2, если $a_{ij} = 0$ при $i - j > p_1$ и $j - i > p_2$.

Лемма 3.2. *Пусть матрица A имеет нижнюю полуширину p_1 и верхнюю полуширину p_2. Тогда в треугольном разложении $A = LU$ полуширина L равна p_1, а полуширина U — p_2.*

Доказательство этой леммы почти полностью повторяет доказательство леммы 3.1.

Упражнение 3.4. Показать, что при несимметричной ленточности в

разложении $A = LU$ элементы матриц L и U вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} u_{ij} &= \left[a_{ij} - \sum_{k=\varkappa_{ij}}^{i-1} l_{ik}u_{kj}\right] & & i = 1, \ldots, n, \\ & & & j = i, \ldots, \min[n, p_2 + i], \\ l_{ij} &= \frac{1}{u_{jj}}\left[a_{ij} - \sum_{k=\varkappa_{ij}}^{j-1} l_{ik}u_{kj}\right] & & j = 1, \ldots, n, \\ & & & i = j+1, \ldots, \min[n, p_1 + j], \end{aligned} \tag{3.17}$$

где

$$\varkappa_{ij} = \max[1,\, i - p_1,\, j - p_2].$$

Упражнение 3.5. Показать, что число умножений и делений, необходимых для реализации формул (3.17), задается величиной

$$Q = \begin{cases} p_1\left[(p_2+1)n - \dfrac{p_1^2 + 3p_2^2 + 3p_1 + 3p_2 + 2}{6}\right], & p_1 \leqslant p_2, \\ (p_2+1)\left[p_1 n - \dfrac{3p_1^2 + p_2^2 + 3p_1 - p_2}{6}\right], & p_1 \geqslant p_2, \end{cases} \tag{3.18}$$

которая при $p_1 = p_2 = p$, естественно, совпадает с (3.15). Особый интерес с точки зрения дальнейших приложений представляет случай $p_2 = n - 1$. В этом случае

$$Q(p_1, n-1) = p_1\left[\frac{n(n+1)}{2} - \frac{(p_1+1)(p_1+2)}{6}\right].$$

Несмотря на то, что при конечном p_1 матрица A содержит $O(n^2)$ ненулевых элементов, трудоемкость LU-разложения оценивается величиной $O(n^2)$, а не $O(n^3)$, как в общем случае.

Определение 3.4. Квадратная ленточная матрица с нижней полушириной $p_1 = 1$ и верхней полушириной $p_2 = n - 1$ называется верхней матрицей Хессенберга.

Матрицы Хессенберга играют важную роль в методах решения задачи на собственные значения. Трудоемкость факторизации матрицы Хессенберга есть

$$Q(1, n-1) = \frac{n(n+1)}{2} - 1.$$

3.6 Ленточный вариант метода Холецкого

Как и в случае треугольного разложения можно построить разложение Холецкого в ленточном варианте. Пусть A — симметричная положительно определенная ленточная матрица с полушириной p. Справедлива

Лемма 3.3. *Если полуширина матрицы $A = A^T > 0$ равна p, то и полуширина множителя Холецкого L равна p.*

На доказательстве этой леммы мы не останавливаемся, ибо оно почти дословно повторяет доказательство аналогичной леммы 3.1.

В силу леммы 3.3 ненулевыми элементами l_{ik} матрицы L могут быть только те, у которых индексы подчинены условиям

$$j - p \leqslant k \leqslant j \qquad (l_{jk} \neq 0). \tag{3.19}$$

Поэтому формула (1.33) принимает вид

$$l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=\max[1,j-p]}^{j-1} l_{jk}^2}, \qquad j = 1, \ldots, n. \tag{3.20}$$

В силу (3.19) в формулах (1.34) $i - p \leqslant k \leqslant i$ и $i - p \leqslant j \leqslant i$. Поэтому формулы (1.34) принимают вид

$$l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left[a_{ij} - \sum_{k=\max[1,i-p]}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right], \quad \begin{array}{l} i = j+1, \ldots, \min[n, p+j], \\ j = 1, \ldots, n-1. \end{array} \tag{3.21}$$

Ленточный вариант разложения Холецкого построен.

Для отыскания решения системы (1.29) нужно еще преобразовать формулы (1.36). Они принимают вид

$$\begin{aligned} y_i &= \frac{1}{l_{ii}} \left[b_i - \sum_{k=\max[1,i-p]}^{i-1} l_{ik} y_k \right], \quad i = 1, \ldots, n, \\ x_i &= \frac{1}{l_{ii}} \left[y_i - \sum_{k=i+1}^{\min[n,i+p]} l_{ki} x_k \right], \quad i = n, \ldots, 1. \end{aligned} \tag{3.22}$$

Эти формулы полностью аналогичны формулам (3.14).

Упражнение 3.6. Показать, что число действий умножения, деления и извлечения корня, необходимых для реализации формул (3.20)-(3.21), есть

$$Q = \frac{(p+1)(p+2)(3n-2p)}{6}.$$

3.7 Метод блочного исключения (метод частичного исключения неизвестных)

В методе исключения Гаусса из системы (1.29) последовательно исключаются неизвестные — компоненты вектора $x^T = [x_1, x_2, \ldots, x_n]$. В ряде случаев бывает полезным процедуру исключения неизвестных произвести блочно. Пусть

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \tag{3.23}$$

где A_{11} — квадратная невырожденная матрица размеров $m \times m$, а b_1 и x_1 — m-мерные векторы. С учетом (3.23) система (1.29) принимает вид

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

или после блочного перемножения

$$\begin{aligned} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 &= b_1, \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 &= b_2. \end{aligned} \tag{3.24}$$

Из первого уравнения (3.24) находим, что

$$x_1 = A_{11}^{-1}(b_1 - A_{12}x_2). \tag{3.25}$$

Подставляя это представление x_1 во второе уравнение (3.24), получим

$$A_{21}A_{11}^{-1}(b_1 - A_{12}x_2) + A_{22}x_2 = b_2$$

или после преобразования

$$(A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})x_2 = b_2 - A_{21}A_{11}^{-1}b_1.$$

В результате система (3.24) преобразовалась к системе

$$\begin{aligned} &A_{11}x_1 + A_{12}x_2 = b_1, \\ &(A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})x_2 = b_2 - A_{21}A_{11}^{-1}b_1. \end{aligned} \tag{3.26}$$

(Неизвестные x_1 исключены из второй группы уравнений).

Из (3.26) вроде бы следует, что для реализации блочного исключения нужно вычислять A_{11}^{-1}. На самом деле явно это делать вовсе не обязательно. Принимая во внимание (3.25), введем следующие обозначения:

$$A_{11}^{-1}b_1 = \overset{\circ}{x}_1, \quad A_{11}^{-1}A_{12} = Z_{12}. \tag{3.27}$$

Тогда вторая группа уравнений (3.26) примет вид

$$(A_{22} - A_{21}Z_{12})x_2 = (b_2 - A_{21}\overset{\circ}{x}_1). \tag{3.28}$$

Соотношения (3.27) можно переписать в виде систем уравнений

$$A_{11}\overset{\circ}{x}_1 = b_1, \quad A_{11}Z_{12} = A_{12}, \tag{3.29}$$

а из (3.25) и (3.27) находим, что

$$x_1 = \overset{\circ}{x}_1 - Z_{12}x_2. \tag{3.30}$$

Итак, чтобы найти решение системы (3.24) нужно:

1° решить $(n - m + 1)$ систем (3.29) с матрицей A_{11} для отыскания вектора $\overset{\circ}{x}_1$ и столбцов матрицы Z_{12},

2° по найденным $\overset{\circ}{x}_1$ и Z_{12} сформировать матрицу и правую часть системы (3.28) и решить полученную систему — найти вектор x_2,

3° найти вектор x_1 по формулам (3.30).

Замечание 3.2. В трактовке (3.28),(3.29) метода блочного исключения фактически исключенными оказываются не неизвестные x_1, а неизвестные x_2. Из системы (3.24) как бы исключается часть неизвестных (именно x_2), затем она решается относительно оставшихся неизвестных (3.29) (но не полностью — нужен еще шаг (3.30)) и лишь потом находится x_2 из (3.28). Отсюда второе название метода — метод частичного исключения неизвестных (исключение x_2).

Пример 3.7. Пусть матрица A имеет портрет, изображенный на рис. 9. Матрица A не является ленточной, хотя ее подматрица A_{11}, расположенная в первых $(n - 1)$ строках и $(n - 1)$ столбцах является ленточной с полушириной $p = 2$. Для решения системы (1.29) с такой матрицей не годится ленточный вариант исключения Гаусса, а применение общего

метода требует $O(n^3)$ умножений и делений. Но если можно применить алгоритм блочного исключения,

$$\begin{bmatrix} * & * & * & & & & & & & * \\ * & * & * & * & & & & & & * \\ * & * & * & * & * & & & & & * \\ & * & * & * & * & * & & & & * \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & & & & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & \cdots & * & * & * & * \end{bmatrix}$$

Рис. 9

то для решения двух систем (3.29) с пятидиагональными матрицами с использованием ленточного варианта исключения потребуется $O(n)$ действий. Столько же действий потребуется для вычислений по формулам (3.28) и (3.30). В результате система будет решена за $O(n)$ действий.

Пример 3.8. Матрица имеет портрет, изображенный на рис. 10.

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * & \cdots & * & * & * \\ * & * & * & & & & & & & * \\ * & * & * & * & & & & & & * \\ * & & * & * & * & & & & & * \\ * & & & * & * & * & & & & * \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ * & & & & & & & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & \cdots & * & * & * \end{bmatrix}$$

Рис. 10

Переставляя первую строку на последнее место и то же делая с первым

столбцом, получим матрицу с портретом, изображенным на рис. 11.

$$\begin{bmatrix}
* & * & & & & & & & * & * \\
* & * & * & & & & & & * & * \\
 & * & * & * & & & & & * & * \\
 & & * & * & * & & & & * & * \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
 & & & & & & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & \cdots & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & \cdots & * & * & * & *
\end{bmatrix}$$

Рис. 11

Теперь в качестве A_{11} следует выбрать трехдиагональную матрицу размеров $(n-2)\times(n-2)$, стоящую в левом верхнем углу.

3.8 Формула Шермана-Моррисона-Вудбери

Пусть мы умеем обращать матрицу A, т.е. умеем решать систему $Ax = b$, а нужно решить систему $Cx = b$, где $C = A + \delta A$. Если δA не слишком сильно возмущает A, то можно воспользоваться следующей формулой, найденной в работах Шермана, Моррисона и Вудбери. Пусть

$$A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad U \in \mathbb{R}^{n\times k}, \quad V \in \mathbb{R}^{n\times k}, \qquad k \leqslant n.$$

Тогда

$$\left[A + UV^T\right]^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U\left[I_k + V^TA^{-1}U\right]^{-1}V^TA^{-1},$$

где I_k — единичная матрица в $\mathbb{R}^{k\times k}$.

Упражнение 3.7. Доказать справедливость этой формулы.

Упражнение 3.8. Выписать соотношения для отыскания решения системы

$$\left[A + UV^T\right]y = b$$

в терминах решения систем $Az = d$ и других вычислений.

Задача 3.1. Исследовать вопрос о наличии связи метода блочного исключения с формулой Шермана-Моррисона-Вудбери (для матриц с пор-

третом

$$\begin{bmatrix} * & * & & & * \\ * & * & * & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ * & & & * & * \end{bmatrix},$$

по крайней мере).

Указание. Возможно, следует использовать другой вариант метода блочного исключения для этой задачи, получившего название циклической прогонки (см. статью А.А. Абрамова и В.Б. Андреева в Журнале вычислительной математики и математической физики за 1963 г., т. 3, № 2, стр. 377–381. Электронную версию этой статьи можно найти на сайте Math-Net.Ru).

3.9 Быстрое преобразование Фурье

Пусть $f(x)$ — функция, заданная на $(0,\pi)$. Продолжая ее нечетно на $(-\pi,0)$, а затем и периодически на $(-\infty,\infty)$, получим нечетную 2π-периодическую функцию, которую можно разложить по системе синусов $\{\sin kx\}_1^\infty$. Если $f(x)$ продолжить с $(0,\pi)$ на $(-\pi,0)$ четно и снова периодически на $(-\infty,\infty)$, то полученную функцию можно разложить по косинусам $\{\cos kx\}_0^\infty$. Если же $f(x)$ задана на $(-\pi,\pi)$ и периодически продолжена на $(-\infty,\infty)$, то она раскладывается по синусам и косинусам или по комплексным экспонентам $\{e^{ikx}\}_{-\infty}^\infty$

$$f(x)=\sum_{k\in\mathbb{Z}} f_k e^{ikx},$$

где

$$f_k=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi} f(x)e^{-ikx}dx=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{0}^{2\pi} f(x)e^{-ikx}dx$$

— ее коэффициенты Фурье. После замены $x/l=y$ находим, что

$$f(x)=f(ly)=:g(y)=\sum_{k\in\mathbb{Z}} g_k e^{ikly},$$

а

$$g_k = \frac{l}{2\pi} \int\limits_0^{2\pi/l} g(y) e^{-ikly} dy.$$

При $l = 2\pi$ имеем 1-периодическую функцию. Возвращаясь к обозначению функции через $f(x)$, имеем

$$f(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} f_k e^{2\pi ikx},$$

$$f_k = \int\limits_0^1 f(x) e^{-2\pi ikx} dx.$$

Пусть теперь $f[n]$ — функция дискретного аргумента n, принимающего значения $0, 1, \ldots, N-1$. Значения $f[n]$, вообще говоря, комплексные, можно рассматривать как компоненты вектора $\boldsymbol{f}$ из C^N. Векторы $\boldsymbol{e}_k$ с компонентами

$$e^{2\pi ikn/N}, \qquad n = 0, 1, \ldots, N-1$$

образуют ортогональный (но не нормированный) базис в C^N и, следовательно, вектор $\boldsymbol{f}$ может быть разложен по базису $\boldsymbol{e}_k$, $k = 0, 1, \ldots, N-1$ в виде

$$\boldsymbol{f} = \sum_{k=0}^{N-1} F[k] \boldsymbol{e}_k, \tag{3.31}$$

где

$$F[k] = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f[n] e^{-2\pi ikn/N}, \qquad k = 0, 1, \ldots, N-1, \tag{3.32}$$

суть коэффициенты разложения, называемые коэффициентами Фурье. Соотношение (3.32) называется дискретным преобразованием Фурье. Это соотношение можно записать в матричном виде. Пусть

$$e^{-2\pi i/N} = \omega,$$

а

$$\mathcal{F} = \frac{1}{N} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \cdots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \cdots & \omega^{2N-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \omega^{N-1} & \omega^{2N-2} & \cdots & \omega^{(N-1)(N-1)} \end{bmatrix}. \tag{3.33}$$

Очевидно, что соотношение (3.32) эквивалентно

$$\boldsymbol{F} = \mathcal{F}\boldsymbol{f}. \tag{3.34}$$

Матрица (3.33) называется матрицей дискретного преобразования Фурье.

Как известно (легко проверить), умножение квадратной матрицы порядка N на вектор требует N^2 операций умножения. В данном случае эти операции комплексные. Одна такая операция эквивалентна четырем действительным, так что вычисления дискретного преобразования Фурье N-мерного комплексного вектора требует $4N^2$ операций умножения действительных чисел.

Однако, если $N = 2^n$, то дискретное преобразование Фурье можно осуществить с затратой всего лишь $O(N \ln N)$ действий. Это делает алгоритм быстрого преобразования Фурье БПФ (FFT — Fast Fourier Transform). Мы здесь изложим этот алгоритм на матричном языке.

Но сначала несколько утверждений.

Определение 3.5. Матрицей перестановок P назывется матрица, полученная из единичной матрицы произвольной перестановкой строк (или столбцов).

Утверждение 3.1. Пусть P-матрица перестановок, k-й столбец которой совпадает с l-м столбцом единичной матрицы. Тогда при умножении матрицы A справа на матрицу P ее l-й столбец перемещается на место k-го.

Упражнение 3.9. Доказать это утверждение.

Упражнение 3.10. Сформулировать и доказать утверждение о преобразовании матрицы при умножении ее на матрицу перестановок слева.

Утверждение 3.2. При умножении матрицы A на диагональную матрицу D слева ее строки умножаются на соответствующие диагональные элементы D.

Для простоты письма и рассуждений обратимся сначала к случаю $N = 8 = 2^3$.

Используя утверждение 3.1, находим, что

$$\frac{1}{8}\left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 & \omega & \omega^3 & \omega^5 & \omega^7 \\ 1 & \omega^4 & \omega^8 & \omega^{12} & \omega^2 & \omega^6 & \omega^{10} & \omega^{14} \\ 1 & \omega^6 & \omega^{12} & \omega^{18} & \omega^3 & \omega^9 & \omega^{15} & \omega^{21} \\ \hline 1 & \omega^8 & \omega^{16} & \omega^{24} & \omega^4 & \omega^{12} & \omega^{20} & \omega^{28} \\ 1 & \omega^{10} & \omega^{20} & \omega^{30} & \omega^5 & \omega^{15} & \omega^{25} & \omega^{35} \\ 1 & \omega^{12} & \omega^{24} & \omega^{36} & \omega^6 & \omega^{18} & \omega^{30} & \omega^{42} \\ 1 & \omega^{14} & \omega^{28} & \omega^{42} & \omega^7 & \omega^{21} & \omega^{35} & \omega^{49} \end{array}\right] \left[\begin{array}{cccccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right] =$$

$$=\frac{1}{8}\left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \omega^3 & \omega^4 & \omega^5 & \omega^6 & \omega^7 \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 & \omega^8 & \omega^{10} & \omega^{12} & \omega^{14} \\ 1 & \omega^3 & \omega^6 & \omega^9 & \omega^{12} & \omega^{15} & \omega^{18} & \omega^{21} \\ \hline 1 & \omega^4 & \omega^8 & \omega^{12} & \omega^{16} & \omega^{20} & \omega^{24} & \omega^{28} \\ 1 & \omega^5 & \omega^{10} & \omega^{15} & \omega^{20} & \omega^{25} & \omega^{30} & \omega^{35} \\ 1 & \omega^6 & \omega^{12} & \omega^{18} & \omega^{24} & \omega^{30} & \omega^{36} & \omega^{42} \\ 1 & \omega^7 & \omega^{14} & \omega^{21} & \omega^{28} & \omega^{35} & \omega^{42} & \omega^{49} \end{array}\right] = \mathcal{F}_8.$$

Примем во внимание, что при $N = 8$

$$\omega^2 = e^{-2\pi i/4}, \quad \omega^4 = -1, \quad \omega^8 = 1. \tag{3.35}$$

Воспользуемся этими соотношениями для преобразования 4×4 блоков левой матрицы из произведения. Для левого верхнего блока имеем

$$\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 \\ 1 & \omega^4 & \omega^8 & \omega^{12} \\ 1 & \omega^6 & \omega^{12} & \omega^{18} \end{bmatrix} =: \mathcal{F}_4.$$

Для правого верхнего блока с учетом утверждения 3.2 находим, что

$$\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \omega & \omega^3 & \omega^5 & \omega^7 \\ \omega^2 & \omega^6 & \omega^{10} & \omega^{14} \\ \omega^3 & \omega^9 & \omega^{15} & \omega^{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \omega & & \\ & & \omega^2 & \\ & & & \omega^3 \end{bmatrix} \mathcal{F}_4.$$

Для левого и правого нижних блоков с учетом (3.35) будем иметь

$$\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & \omega^{8} & \omega^{16} & \omega^{24} \\ 1 & \omega^{10} & \omega^{20} & \omega^{30} \\ 1 & \omega^{12} & \omega^{24} & \omega^{36} \\ 1 & \omega^{14} & \omega^{28} & \omega^{42} \end{bmatrix} = \mathcal{F}_4.$$

$$\frac{1}{4}\begin{bmatrix} \omega^{4} & \omega^{12} & \omega^{20} & \omega^{28} \\ \omega^{5} & \omega^{15} & \omega^{25} & \omega^{35} \\ \omega^{6} & \omega^{18} & \omega^{30} & \omega^{42} \\ \omega^{7} & \omega^{21} & \omega^{35} & \omega^{49} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & & & \\ & -\omega & & \\ & & -\omega^2 & \\ & & & -\omega^3 \end{bmatrix} \mathcal{F}_4.$$

Тем самым мы пришли к соотношению

$$\mathcal{F}_8 =$$

$$= \frac{1}{2}\left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & & & & 1 & & & \\ & 1 & & & & \omega & & \\ & & 1 & & & & \omega^2 & \\ & & & 1 & & & & \omega^3 \\ \hline 1 & & & & -1 & & & \\ & 1 & & & & -\omega & & \\ & & 1 & & & & -\omega^2 & \\ & & & 1 & & & & -\omega^3 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c|c} \mathcal{F}_4 & 0_4 \\ \hline 0_4 & \mathcal{F}_4 \end{array}\right] \left[\begin{array}{cccccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right].$$

Те же самые аргументы приводят к тождеству

$$\mathcal{F}_{2M} = \frac{1}{2}\, Q_{2M} \left[\begin{array}{c|c} \mathcal{F}_M & 0_M \\ \hline 0_M & \mathcal{F}_M \end{array}\right] P_{2M}, \quad M = 1, 2, \ldots, \tag{3.36}$$

где

$$Q_{2M} = \left[\begin{array}{cccccc|cccccc} 1 & & & & & & 1 & & & & & \\ & 1 & & & & & & \omega & & & & \\ & & 1 & & & & & & \omega^2 & & & \\ & & & \ddots & & & & & & \ddots & & \\ & & & & & 1 & & & & & & \omega^{M-1} \\ \hline 1 & & & & & & -1 & & & & & \\ & 1 & & & & & & -\omega & & & & \\ & & 1 & & & & & & -\omega^2 & & & \\ & & & \ddots & & & & & & \ddots & & \\ & & & & & 1 & & & & & & -\omega^{M-1} \end{array}\right] \quad \text{с} \quad \omega := e^{-2\pi i/(2M)} \tag{3.37}$$

и где тасующая перестановка

$$P_{2M} := [\boldsymbol{\delta}_0, \boldsymbol{\delta}_M, \boldsymbol{\delta}_1, \boldsymbol{\delta}_{M+1}, \boldsymbol{\delta}_2, \boldsymbol{\delta}_{M+2}, \ldots, \boldsymbol{\delta}_{M-1}, \boldsymbol{\delta}_{2M-1}], \tag{3.38}$$

а

$$[\boldsymbol{\delta}_0 \boldsymbol{\delta}_1 \boldsymbol{\delta}_2 \ldots \boldsymbol{\delta}_{M-1} | \boldsymbol{\delta}_M \boldsymbol{\delta}_{M+1} \ldots \boldsymbol{\delta}_{2M-1}] := I_{2M}. \tag{3.39}$$

Итак, соотношение (3.36) представляет матрицу преобразования Фурье в пространстве C^{2M} в виде произведения трех матриц, первая из которых имеет лишь три ненулевых диагонали, вторая — блочно-диагональная матрица с диагональными блоками, являющимися матрицами преобразования Фурье в C^M и третья матрица перестановок.

Для дальнейшей факторизации $\mathcal{F}_{2M}$ нам потребуются некоторые обозначения. Пусть A — матрица размеров $M \times M$, а 0 — нулевая матрица тех же размеров. Определим

$$A^{(1)} := A, \quad A^{(2)} := \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{bmatrix}, \quad A^{(3)} := \begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 \\ 0 & 0 & A \end{bmatrix}, \quad \ldots. \tag{3.40}$$

Для введенных матриц легко проверяется степенное правило

$$\left[A^{(p)}\right]^{(q)} = A^{(pq)}, \qquad p, q = 1, 2, \ldots \tag{3.41}$$

и правило произведения

$$[AB]^{(p)} = A^{(p)} B^{(p)}, \qquad p = 1, 2, \ldots. \tag{3.42}$$

Кроме того,

$$[\alpha A]^{(p)} = \alpha A^{(p)}, \qquad p = 1, 2, \ldots, \tag{3.43}$$

где α — любое комплексное число,

$$\left[A^T\right]^{(p)} = \left[A^{(p)}\right]^T, \qquad p = 1, 2, \ldots, \tag{3.44}$$

и

$$\left[A^{-1}\right]^{(p)} = \left[A^{(p)}\right]^{-1}, \qquad p = 1, 2, \ldots, \tag{3.45}$$

когда A невырождена.

Используя (3.40) соотношение (3.36) можно переписать в компактном виде

$$\mathcal{F}_{2M} = \frac{1}{2} Q_{2M} \mathcal{F}_M^{(2)} P_{2M}, \qquad M = 1, 2, \ldots. \tag{3.46}$$

Это тождество позволяет нам факторизовать $\mathcal{F}_N$ при $N = 2^m$. Например, для $\mathcal{F}_{16}$, используя (3.46) и (3.41)–(3.45), найдем, что

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_{16} &= \frac{1}{2}\, Q_{16}\mathcal{F}_8^{(2)} P_{16} = \\
&= \frac{1}{2}\, Q_{16} \left[\frac{1}{2} Q_8 \mathcal{F}_4^{(2)} P_8\right]^{(2)} P_{16} = \\
&= \frac{1}{4}\, Q_{16} Q_8^{(2)} \mathcal{F}_4^{(4)} P_8^{(2)} P_{16} = \\
&= \frac{1}{4}\, Q_{16} Q_8^{(2)} \left[\frac{1}{2}\, Q_4 \mathcal{F}_2^{(2)} P_4\right]^{(4)} P_8^{(2)} P_{16} = \\
&= \frac{1}{8}\, Q_{16} Q_8^{(2)} Q_4^{(4)} \mathcal{F}_2^{(8)} P_4^{(4)} P_8^{(2)} P_{16} = \\
&= \frac{1}{8}\, Q_{16} Q_8^{(2)} Q_4^{(4)} \left[\frac{1}{2}\, Q_2 \mathcal{F}_1^{(2)} P_2\right]^{(8)} P_4^{(4)} P_8^{(2)} P_{16} = \\
&= \frac{1}{16}\, Q_{16} Q_8^{(2)} Q_4^{(4)} Q_2^{(8)} \mathcal{F}_1^{(16)} P_2^{(8)} P_4^{(4)} P_8^{(2)} P_{16} = \\
&= \frac{1}{16}\, Q_{16} Q_8^{(2)} Q_4^{(4)} Q_2^{(8)} B_{16},
\end{aligned}$$

где

$$B_{16} = P_2^{(8)} P_4^{(4)} P_8^{(2)} P_{16},$$

и мы воспользовались тем фактом, что

$$\mathcal{F}_1^{(16)} = [1]^{(16)} = I_{16}.$$

Аналогично

$$\mathcal{F}_{2^m} = \frac{1}{2^m}\, Q_{2^m} {Q^{(2)}}_{2^{m-1}} {Q^{(4)}}_{2^{m-2}} \ldots {Q_2}^{(2^{m-1})} B_{2^m}, \quad m = 1, 2, \ldots, \tag{3.47}$$

где

$$B_{2^m} := P_2^{(2^{m-1})} P_4^{(2^{m-2})} \ldots P_{2^{m-1}}^{(2)} P_{2^m}. \tag{3.48}$$

Выясним, как действует матрица B_{2^m}. Тасующая перестановка P_8 переводит вектор $f = [f_0 f_1 \ldots f_7]^T$ в

$$\begin{aligned}
P_8 \boldsymbol{f} &= [\boldsymbol{\delta}_0 \boldsymbol{\delta}_4 \boldsymbol{\delta}_1 \boldsymbol{\delta}_5 \boldsymbol{\delta}_2 \boldsymbol{\delta}_6 \boldsymbol{\delta}_3 \boldsymbol{\delta}_7] \boldsymbol{f} = \\
&= f_0 \boldsymbol{\delta}_0 + f_1 \boldsymbol{\delta}_4 + f_2 \boldsymbol{\delta}_1 + f_3 \boldsymbol{\delta}_5 + f_4 \boldsymbol{\delta}_2 + f_5 \boldsymbol{\delta}_6 + f_6 \boldsymbol{\delta}_3 + f_7 \boldsymbol{\delta}_7 = \\
&= [f_0 f_2 f_4 f_6 f_1 f_3 f_5 f_7]^T,
\end{aligned}$$

а тасующая перестановка P_4 переводит половинные векторы $[f_0 f_2 f_4 f_6]^T$ и $[f_1 f_3 f_5 f_7]^T$ из $P_8 \boldsymbol{f}$ в $[f_0 f_4 f_2 f_6]^T$ и $[f_1 f_5 f_3 f_7]^T$, соответственно. Так как

$P_2 = I_2$, то мы имеем

$$B_8\boldsymbol{f} := P_2^{(4)} P_4^{(2)} P_8 \boldsymbol{f} = [f_0 f_4 f_2 f_6 f_1 f_5 f_3 f_7]^T,$$

т.е. B_8 есть реверсная перестановка битов для 8-компонентных векторов. Именно, двоичное представление целых чисел от 0 до 7 есть

$$\begin{aligned} 0 &= 000 \\ 1 &= 001 \\ 2 &= 010 \\ 3 &= 011 \\ 4 &= 100 \\ 5 &= 101 \\ 6 &= 110 \\ 7 &= 111 \end{aligned}$$

Если эти двоичные представления прочитать в обратном(реверсном) порядке, то будем иметь

$$\begin{aligned} 000 &= 0 \\ 100 &= 4 \\ 010 &= 2 \\ 110 &= 6 \\ 001 &= 1 \\ 101 &= 5 \\ 011 &= 3 \\ 111 &= 7, \end{aligned}$$

что полностью совпадает с нумерацией компонент вектора $B_8\boldsymbol{f}$.

На этом можно закончить описание алгоритма БПФ с использованием факторизации (3.47).

Оценим теперь трудоемкость выполнения дискретного преобразования Фурье при помощи этого алгоритма. Будем считать только операции умножения. Введем обозначение

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \omega & & & \\ & & \omega^2 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \omega^{M-1} \end{bmatrix} = \Omega_M$$

и перепишем соотношение (3.36) с учетом (3.37) и нового обозначения

$$\mathcal{F}_{2M} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} I & \Omega_M \\ I & -\Omega_M \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathcal{F}_M & 0 \\ 0 & \mathcal{F}_M \end{bmatrix} P_{2M} =$$
$$= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \mathcal{F}_M & \Omega_M\mathcal{F}_M \\ \mathcal{F}_M & -\Omega_M\mathcal{F}_M \end{bmatrix} P_{2M}.$$

Применим матрицу $\mathcal{F}_{2M}$ к вектору $\boldsymbol{f}$. Поскольку P_{2M} — матрица перестановок, то для построения вектора $\boldsymbol{g} = P\boldsymbol{f}$ не требуется никаких арифметических операций. Представляя $\boldsymbol{g}$ в "блочном"виде $\boldsymbol{g} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \end{bmatrix}$, будем иметь

$$\mathcal{F}_{2M}\boldsymbol{f} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \mathcal{F}_M & \Omega_M\mathcal{F}_M \\ \mathcal{F}_M & -\Omega_M\mathcal{F}_M \end{bmatrix}\begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \mathcal{F}_M g_1 + \Omega_M\mathcal{F}_M g_2 \\ \mathcal{F}_M g_1 - \Omega_M\mathcal{F}_M g_2 \end{bmatrix}. \tag{3.49}$$

Пусть $2M = N = 2^n$, q_n — трудоемкость вычисления дискретного преобразования Фурье для N-мерного вектора. Из (3.49) следует, что

$$q_n = 2q_{n-1} + 2^{n-1}, \tag{3.50}$$

где 2^{n-1} — трудозатраты на умножение диагональной матрицы $\Omega_{2^{n-1}}$ на вектор. Соотношение (3.50) представляет собой рекуррентное соотношение или разностное уравнение с постоянными коэффициентами. Его частным решением является $\bar{q}_n = n2^{n-1}$, а общим

$$q_n = c\,2^n + n2^{n-1},$$

где c — постоянная, определяемая начальным условием q_1. Для нас она не существенна, ибо главным членом q_n является второе слагаемое. Итак, алгоритм быстрого дискретного преобразования Фурье требует примерно

$$\frac{1}{2}N\,\log_2 N$$

комплексных умножений.

Положим, для примера, $N = 2^{10} = 1024$. Тогда

$$N^2 \approx 1\,000\,000, \quad \log_2 N = 10 \quad \text{и}$$
$$N\,\log_2 N \approx 10\,000,$$

т.е. примерно в 100 раз меньше, чем N^2.

4

Устойчивость вычислительных алгоритмов линейной алгебры

4.1 Введение

Та или иная задача называется устойчивой по отношению к каким-то данным, если малые возмущения этих данных приводят к малым возмущениям решения.

Если же некоторые малые возмущения этих данных приводят к большим возмущениям решения, то задача называется неустойчивой.

В вычислительной линейной алгебре устойчивость часто называют обусловленностью, соответственно, хорошей или плохой, а под устойчивостью понимают то же самое, но применительно не к задаче, а к алгоритму, используемому для ее решения. Если, например, система $Ax = b$ хорошо обусловлена, т.е. малым возмущениям вектора b и матрицы A отвечает малое изменение решения x, то естественно ожидать, что, используя тот или иной алгоритм решения этой системы, мы получим решение (вообще говоря, приближенное), которое мало отличается от точного. Однако, это будет так , только если используемый алгоритм устойчив. В противном случае решение хорошей задачи будет испорчено плохим алгоритмом, использованным для ее решения.

Исследуем вопрос об устойчивости решения линейной системы по отношению к возмущению правой части. Пусть рассматривается система

$$Ax = b \tag{4.1}$$

с квадратной невырожденной матрицей и система с возмущенной правой

частью

$$A\tilde{x} = \tilde{b}. \tag{4.2}$$

Обозначим $\tilde{b} - b = \delta b$, $\tilde{x} - x = \delta x$ и оценим δx через δb. Вычитая (4.1) из (4.2), будем иметь

$$A\delta x = \delta b \quad \Rightarrow \quad \delta x = A^{-1}\delta b. \tag{4.3}$$

Пусть $\|\cdot\|$ — некоторая норма вектора. В линейной алгебре наиболее часто используются следующие *нормы*

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|, \quad \|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}, \quad \|x\|_\infty = \max_i |x_i|.$$

Как известно, *норма* матрицы, *подчиненная* векторной норме $\|\cdot\|$ (операторная норма), определяется соотношением

$$\|A\| = \sup_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|. \tag{4.4}$$

Указанным векторным нормам починены следующие матричные нормы:

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|, \ \|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(AA^T)}, \ \|A\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|.$$

Очевидно, что для симметричных матриц

$$A = A^T, \quad \|\cdot\|_\infty = \|\cdot\|_1, \text{ а } \|A\|_2 = |\lambda_{\max}|,$$

ибо $Ax = \lambda x$, $A^2x = \lambda Ax = \lambda^2 x$.

Упражнение 4.1. Доказать, что подчиненные нормы задаются именно этими соотношениями.

Замечание 4.1. Векторы x и Ax в определении нормы матрицы не обязательно измерять при помощи одной и той же нормы. (Если A не является квадратной матрицей, то указанные векторы имеют разную размерность). Более общим определением нормы матрицы A будет следующее

$$\|A\|_{(1)\to(2)} = \sup_{x\neq 0} \frac{\|A\|_{(2)}}{\|x\|_{(1)}}.$$

Упражнение 4.2. Найти представление для $\|A\|_{(1)\to(2)}$, если $\|\cdot\|_{(2)} = \|\cdot\|_\infty, \quad \|\cdot\|_{(1)} = \|\cdot\|_1$.

Из определения (4.4) матричной нормы, в частности, следует, что

$$\frac{\|Ax\|}{\|x\|} \leqslant \|A\| \quad \Rightarrow \quad \|Ax\| \leqslant \|A\|\,\|x\|. \tag{4.5}$$

Применяя это неравенство ко второму соотношению (4.3), будем иметь

$$\|\delta x\| \leqslant \|A^{-1}\|\,\|\delta b\|. \tag{4.6}$$

Соотношение (4.6) дает оценку абсолютной погрешности решения через абсолютную погрешность правой части. При этом множителем (коэффициентом усиления) выступает норма обратной матрицы. Чем больше эта норма, тем на меньшую точность мы можем рассчитывать.

Получим теперь оценку относительной погрешности. Из (4.1) в силу (4.5)

$$\|b\| \leqslant \|A\|\,\|x\|. \tag{4.7}$$

Деля (4.6) на (4.7), получим

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leqslant \|A\|\,\|A^{-1}\|\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}. \tag{4.8}$$

Это и есть оценка относительной погрешности. Здесь коэффициентом усиления выступает число

$$\|A\|\,\|A^{-1}\| =: \operatorname{cond} A = \varkappa(A) = \varkappa, \tag{4.9}$$

называемое *числом обусловленности* матрицы A.

Замечание 4.2. Если вместо (4.1) решается задача $A^{-1}x = b$, то оценка относительной погрешности будет даваться тем же неравенством (4.8).

Если число обусловленности матрицы A большое, то про матрицу A говорят, что она *плохо обусловлена*. В противном случае говорят о хорошо обусловленной матрице. Поскольку $AA^{-1} = I$, то $\|A\|\,\|A^{-1}\| \geqslant 1$, т.е. число обусловленности не может быть меньше единицы. Имея систему с хорошо обусловленной матрицей (хорошо обусловленную систему), мы вправе рассчитывать на то, что при небольших возмущениях правой части возмущение решения не будет слишком велико.

4.2 Примеры плохо обусловленных систем

Пример 4.1.

$$\begin{aligned} x_1 \qquad\quad &= 1, \\ x_1 + 0.01x_2 &= 1. \end{aligned} \tag{4.10}$$

Очевидно, что эта система невырождена и ее единственным решением является вектор $[1,0]^T$. Возмутим правую часть системы (4.10) и найдем решение возмущенной задачи

$$\begin{cases} \tilde{x}_1 & = 1, \\ \tilde{x}_1 + 0.01\tilde{x}_2 & = 1.01, \end{cases} \qquad \delta b_2 = 0.01. \tag{4.11}$$

Очевидно, что решением этой системы является вектор $\tilde{x} = [1,1]^T$, который мало похож на невозмущенный вектор x, ибо

$$\delta x_2 = 1, \quad \delta x_1 = 0, \quad \|\delta x\|_1 = 1.$$

Это значение абсолютной погрешности решения полностью согласуется с оценками (4.6), (4.8), ибо

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^{2} |a_{ij}| = 2, \quad A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -100 & 100 \end{bmatrix}, \quad \|A^{-1}\|_1 = 101,$$
$$\|x\|_1 = 1, \quad \|b\|_1 = 2, \quad \|\delta b\|_1 = 0.01$$

и, следовательно, в силу (4.6)

$$\|\delta x\|_1 \leqslant 101 \cdot 0.01 = 1.01,$$

а в силу (4.8)

$$\frac{\|\delta x\|_1}{\|x\|_1} \leqslant 2 \cdot 101 \cdot \frac{0.01}{2} = 1.01.$$

При заданном (4.11) уровне погрешности правой части обусловленность матрицы этой системы ($\varkappa = 202$) следует признать плохой.

Упражнение 4.3. Пусть искомая и возмущенная системы суть

$$\begin{array}{rll} & x_1 & = 1, \\ -100 & x_1 + 100x_2 & = 0, \end{array} \qquad \begin{array}{rll} & \widetilde{x}_1 & = 1, \\ -100 & \widetilde{x}_1 + 100\widetilde{x}_2 & = 0.01. \end{array}$$

Исследовать ошибку, вызванную этим возмущением, и сравнить полученный результат с (4.6) и (4.8).

Пример 4.2.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & \dots & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & \dots & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & -1 & -1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ . \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

В развернутом виде система запишется так

$$\begin{array}{rrrrrcr} x_1 & -x_2 & -x_3 & -\dots & -x_n & = & -1, \\ & x_2 & -x_3 & -\dots & -x_n & = & -1, \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & x_{n-1} & -x_n & = & -1, \\ & & & & x_n & = & 1. \end{array} \tag{4.12}$$

Очевидно, что решением системы (4.12) является вектор

$$x = [0, 0, \dots, 0, 1]^T.$$

Легко видеть, что $\det A = 1$.

Возмутим последнюю компоненту вектора b

$$\tilde{b} = [-1, -1, \dots, -1, 1 + \varepsilon]^T$$

и оценим погрешность решения.

Вычитая из возмущенной системы систему (4.12), для погрешности решения получим

$$\begin{array}{rrrrcr} \delta x_1 & -\delta x_2 & -\dots & -\delta x_n & = & 0, \\ & \delta x_2 & -\dots & -\delta x_n & = & 0, \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & \delta x_{n-1} & -\delta x_n & = & 0, \\ & & & \delta x_n & = & \varepsilon. \end{array}$$

Отсюда находим, что

$$\delta x_n = \varepsilon, \quad \delta x_{n-1} = \varepsilon, \quad \delta x_{n-2} = \delta x_n + \delta x_{n-1} = 2\varepsilon,$$
$$\delta x_{n-3} = \delta x_n + \delta x_{n-1} + \delta x_{n-2} = 4\varepsilon = 2^2\varepsilon.$$

Погрешность в каждой из последующих компонент, начиная с δx_{n-2}, удваивается, так что

$$\delta x_{n-k} = \delta x_n + \delta x_{n-1} + \dots + \delta x_{n-(k-1)} = 2^{k-1}\varepsilon,$$

а

$$\delta x_1 = 2^{n-2}\varepsilon.$$

Таким образом,

$$\|\delta x\|_\infty = 2^{n-2}|\varepsilon|, \quad \|x\|_\infty = 1, \quad \|\delta b\|_\infty = |\varepsilon|, \quad \|b\|_\infty = 1, \quad \|A\|_\infty = n.$$

Поскольку в силу (4.8)

$$\frac{\|\delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty} \leqslant \varkappa \frac{\|\delta b\|_\infty}{\|b\|_\infty},$$

а в рассматриваемом случае

$$\frac{\|\delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty} = 2^{n-2}|\varepsilon|,$$

то

$$\varkappa = \|A^{-1}\|_\infty \|A\|_\infty \geqslant 2^{n-2}$$

и, следовательно,

$$\|A^{-1}\|_\infty \geqslant n^{-1}2^{n-2}.$$

При $n = 102$, $\|A\|_\infty = 102$, $\varkappa \geqslant 2^{100} > 10^{30}$, $\|A^{-1}\|_\infty > 10^{27}$. Если $\varepsilon = 10^{-15}$, то $\|\delta x\|_\infty > 10^{15}$. Матрица рассматриваемой системы очень плохо обусловлена.

Упражнение 4.4. Найти матрицу, обратную к матрице системы (4.12)

Понятие числа обусловленности введено нами только для невырожденных матриц. Условие $\det A = 0$ означает вырожденность матрицы A, и может сложиться впечатление, что, если $\det A \approx 0$, то матрица плохо обусловлена. Однако, прямой связи между величиной определителя матрицы A и ее обусловленностью нет. Так, определитель матрицы из примера (4.2) равен единице, а

$$\varkappa \geqslant 2^{n-2}.$$

С другой стороны, хорошо обусловленная матрица может иметь очень маленький определитель. Например, у матрицы

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-1} & & \\ & 10^{-1} & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 10^{-1} \end{bmatrix}$$

$\varkappa = 1$, хотя $\det A = 10^{-n}$.

4.3 Возмущение матрицы коэффициентов

Исследуем теперь вопрос о том, как влияет возмущение коэффициентов матрицы A на погрешность, приобретаемую решением.

Теорема 4.1. *Если A невырождена и*

$$\|\delta A\|/\|A\| < \varkappa^{-1}(A), \tag{4.13}$$

то и $A + \delta A$ невырождена.

Доказательство. Условие (4.13) в силу определения (4.9) можно переписать в виде

$$\|\delta A\| < 1/\|A^{-1}\| \quad \text{или} \quad \|\delta A\|\,\|A^{-1}\| < 1. \tag{4.14}$$

Для доказательства теоремы достаточно показать, что, если $A + \delta A$ вырождена, то

$$\|\delta A\|\,\|A^{-1}\| \geqslant 1. \tag{4.15}$$

Пусть $A+\delta A$ вырождена. Тогда нуль является ее собственным значением, и существует ненулевой вектор (собственный вектор) y такой, что

$$(A + \delta A)y = 0.$$

Обращая в этом соотношении матрицу A, которая по предположению теоремы является невырожденной, найдем, что

$$y = -A^{-1}\delta A y.$$

Отсюда

$$\|y\| = \|A^{-1}\delta A y\| \leqslant \|A^{-1}\|\,\|\delta A\|\,\|y\|.$$

Поскольку $\|y\| > 0$, то, сокращая полученное неравенство на $\|y\|$, будем иметь

$$1 \leqslant \|A^{-1}\|\,\|\delta A\|,$$

что совпадает с (4.15) и противоречит (4.14). Теорема доказана.

Предположим теперь, что у системы (4.1) возмущен не только вектор правой части b, но и сама матрица A, т.е. пусть

$$(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b. \tag{4.16}$$

Оценим возмущение δx.

Теорема 4.2. *Пусть матрица A системы* (4.1) *невырождена и для ее возмущения δA справедлива оценка* (4.13). *Тогда для относительной погрешности решения справедлива оценка*

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leqslant \frac{\varkappa}{1 - \varkappa\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right). \tag{4.17}$$

Доказательство. Из (4.16)

$$Ax + (\delta A)x + A(\delta x) + (\delta A)(\delta x) = b + \delta b.$$

Вычитая отсюда (4.1), получим

$$A\delta x = \delta b - (\delta A)x - (\delta A)(\delta x),$$

или

$$\delta x = A^{-1}[\delta b - (\delta A)x - (\delta A)(\delta x)].$$

Отсюда

$$\|\delta x\| \leqslant \|A^{-1}\|(\|\delta b\| + \|\delta A\|\,\|x\| + \|\delta A\|\,\|\delta x\|).$$

Разрешим это неравенство относительно $\|\delta x\|$

$$(1 - \|A^{-1}\|\,\|\delta A\|)\|\delta x\| \leqslant \|A^{-1}\|(\|\delta b\| + \|\delta A\|\,\|x\|).$$

В силу (4.13) (см. также (4.14)) коэффициент при $\|\delta x\|$ положителен и, следовательно,

$$\|\delta x\| \leqslant \frac{\|A^{-1}\|(\|\delta b\| + \|\delta A\|\,\|x\|)}{1 - \|A^{-1}\|\,\|\delta A\|}. \tag{4.18}$$

Но

$$1 - \|A^{-1}\|\,\|\delta A\| = 1 - \varkappa\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}.$$

Учитывая это и деля (4.18) на $\|x\|$, будем иметь

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leqslant \frac{\|A^{-1}\|\,\|A\|\left(\dfrac{\|\delta b\|}{\|A\|\,\|x\|} + \dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}\right)}{1 - \varkappa\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|}}. \tag{4.19}$$

Поскольку $\|A\|\,\|x\| \geqslant \|b\|$, то из (4.19) вытекает (4.17). Теорема доказана.

4.4 Арифметика с плавающей точкой

Поскольку цифровые компьютеры для представления действительных чисел используют конечное число битов, они могут представить только конечное множество действительных чисел, которое будем обозначать через F. Это ограничение порождает две трудности. Во-первых, представляемые числа не могут быть произвольно большими или маленькими.

Во-вторых, должны быть промежутки между ними. Современные компьютеры представляют и достаточно большие и достаточно малые числа, так что первое ограничение редко создает трудности. Например, широко используемая IEEE арифметика двойной точности допускает числа столь большие, как 1.79×10^{308}, и столь малые, как 2.23×10^{-308}, т.е. диапазон достаточно велик. Другими словами, и переполнение и исчезновение, как правило, не являются серьезными ограничениями. С другой стороны, проблема зазоров между представляемыми числами вызывает беспокойство во всех научных вычислениях. Например, в IEEE арифметике двойной точности отрезок [1, 2] представлен дискретным множеством

$$1,\ 1+2^{-52},\ 1+2\times 2^{-52},\ 1+3\times 2^{-52},\ \ldots\ 2. \tag{4.20}$$

Отрезок [2, 4] представлен теми же числами, умноженными на 2

$$2,\ 1+2^{-51},\ 2+2\times 2^{-51},\ 2+3\times 2^{-51},\ \ldots\ 4,$$

и, вообще, отрезок $[2^j,\ 2^{j+1}]$ представлен (4.20), умноженными на 2^j. Таким образом, в IEEE арифметике двойной точности зазоры между соседними числами в относительном смысле нигде не больше $2^{-52} \approx 2.22 \times 10^{-16}$. Это может казаться незначительным, и так оно и есть в большинстве случаев, если используются устойчивые алгоритмы.

Машинный эпсилон.

Машинным эпсилоном в IEEE арифметике двойной точности называется число

$$\varepsilon_{mach} = 2^{-53} \approx 1.11 \times 10^{-16}.$$

Это число есть половина расстояния между 1 и ближайшим бóльшим числом с плавающей точкой. ε_{mach} обладает следующим свойством:

$\forall x \in \mathbb{R}$, допускающего представление IEEE, $\exists x' \in F \ \rightarrow\ |x-x'| \leqslant \varepsilon_{mach}|x|$.

Отметим, что в IEEE арифметике одинарной точности $\varepsilon_{mach} = 2^{-24} \approx 5.96 \times 10^{-8}$.

Пусть $fl : \mathbb{R} \rightarrow F$ функция, дающая аппроксимацию действительных чисел ближайшим числом с плавающей точкой, т.е. его округленным эквивалентом в системе с плавающей точкой. Тогда при $fl(x) \neq 0$

$$fl(x) = x(1+\varepsilon), \qquad |\varepsilon| \leqslant \varepsilon_{mach}. \tag{4.21}$$

Замечание 4.3. Если действительное число x расположено точно посередине между двумя соседними числами с плавающей точкой, то его

представителем в множестве F чисел с плавающей точкой является то число, у которого мантисса оканчивается нулем. Эта операция называется округлением до ближайшего четного.

Одного представления действительных чисел, конечно, недостаточно, нужно еще проводить вычисления с ними. На компьютере все математические вычисления сводятся к определенным элементарным арифметическим операциям, классические из которых $+$, $-$, $\times$ и $\div$. Математически эти символы представляют операции на $\mathbb{R}$. На компьютере у них есть аналоги, которые являются операциями на F. Обычно эти операции в арифметике с плавающей точкой обозначают $\oplus$, $\ominus$, $\otimes$ и $\oslash$.

Компьютер может быть построен по следующему принципу. Пусть x и y — произвольные числа с плавающей точкой, т.е. x, $y \in F$. Пусть $*$ — один из операторов $+$, $-$, $\times$ или $\div$, и пусть $\circledast$ — его аналог с плавающей точкой. Тогда

$$x \circledast y = fl(x * y). \tag{4.22}$$

Если это свойство имеет место, то из (4.21) и (4.22) можно заключить, что компьютер имеет простое и мощное свойство.

Фундаментальная аксиома арифметики с плавающей точкой.

Для всех $x, y \in F$ существует ε, удовлетворяющее условию $|\varepsilon| \leqslant \varepsilon_{mach}$ и такое, что

$$x \circledast y = (x * y)(1 + \varepsilon). \tag{4.23}$$

Другими словами, каждая операция в арифметике с плавающей точкой точна с относительной ошибкой не более ε_{mach}.

В IEEE арифметике это так, а практически во всех компьютерах, которыми мы пользуемся, использована арифметика IEEE.

4.5 Пример хорошо обусловленной системы

Рассмотрим систему (4.1) с матрицей

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}. \tag{4.24}$$

Легко проверить, что

$$A^{-1} = (1 - 10^{-4})^{-1} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -10^{-4} \end{bmatrix}$$

и, следовательно,

$$\varkappa(A) = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty = 4(1-10^{-4})^{-1} \approx 4.$$

Таким образом, матрица (4.24) хорошо обусловлена, и мы вправе надеяться, что система (4.1) с матрицей (4.24) может быть решена численно с хорошей точностью. Пусть

$$b = [1 \quad 2]^T. \tag{4.25}$$

Тогда решение системы (4.1), (4.24), (4.25) есть

$$x = \frac{1}{1-10^{-4}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 - 2\cdot 10^{-4} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{4.26}$$

Будем решать эту систему при помощи LU разложения матрицы A с использованием трехразрядной десятичной арифметики с плавающей точкой. В силу (1.19)

$$\begin{aligned} &u_{11} = a_{11}, \quad u_{12} = a_{12}, \\ &l_{21} = a_{21}/u_{11}, \quad u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}. \end{aligned}$$

Поэтому приближенные вычисления будут использоваться только три раза: при делении, при умножении и при вычитании

$$\widetilde{l_{21}} = \mathrm{fl}\,(1/10^{-4}) = 10^4 = l_{21},$$
$$\widetilde{l_{21}u_{12}} = \mathrm{fl}\,(10^4 \cdot 1) = 10^4 = l_{21}u_{12}, \qquad \widetilde{u_{22}} = \mathrm{fl}\,(1-10^4) = \mathrm{fl}\,(-9999) = -10^4.$$

Итак,

$$\tilde{L} = L + \delta L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^4 & 1 \end{bmatrix} = L, \qquad \tilde{U} = U + \delta U = \begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 0 & -10^4 \end{bmatrix},$$
$$L^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -10^4 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \tilde{U}^{-1} = \begin{bmatrix} 10^4 & 1 \\ 0 & 10^{-4} \end{bmatrix}.$$

При этом

$$\tilde{A} = A + \delta A = \tilde{L}\tilde{U} = \begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

в то время как

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix},$$

и, следовательно,

$$\delta A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

т.е. $\|\delta A\| \sim \|A\|$, а это означает, что мы фактически решаем систему с совсем другой матрицей. В самом деле, решая систему $\tilde{L}\tilde{y} = b$ при помощи формул (1.21), находим, что

$$\tilde{y}_1 = b_1 = 1, \quad \tilde{y}_2 = b_2 - l_{21}\tilde{y}_1 = \mathrm{fl}(2 - 10^4 \cdot 1) = \mathrm{fl}(-9998) = -10^4.$$

Решение системы $\tilde{U}\tilde{x} = \tilde{y}$ по формулам (1.22) дает

$$\begin{aligned} \tilde{x}_2 &= \tilde{y}_2/\tilde{u}_{22} = \mathrm{fl}(-10^4/(-10^4)) = 1, \\ \tilde{x}_1 &= [\tilde{y}_1 - \tilde{u}_{12}\tilde{x}_2]/\tilde{u}_{11} = \mathrm{fl}((1-1)/10^{-4}) = 0. \end{aligned}$$

Тем самым,

$$\tilde{x} = x + \delta x = [0 \quad 1]^T,$$

что, как и ожидалось, мало похоже на точное решение (4.26).

Отметим, что индикатором неблагополучия являются и оценки

$$\varkappa(\tilde{L}) \approx 10^8, \quad \varkappa(\tilde{U}) \approx 10^8$$

при $\varkappa(A) \approx 4$.

В чем же причина появления столь значительной погрешности? Говорить о накоплении ошибок округления не приходится, равно как и о плохой обусловленности системы. Действительная причина состоит в том, что метод исключения Гаусса в том виде, в каком он был описан, является неустойчивым методом. Чтобы определить, в чем именно его слабость, рассмотрим более внимательно процедуру вычисления $\tilde{u}_{22}$, где и появились первые округления. При вычитании из a_{22} большого числа $l_{21}u_{12}$ и последующего округления элемент a_{22} был полностью утерян, что и привело к большой погрешности, а большое вычитаемое образовалось из-за большого элемента l_{21}, чему способствовала малость главного элемента $u_{11} = a_{11}$.

4.6 Метод Гаусса с выбором главного элемента

Из-за отмеченной неустойчивости метод Гаусса в вычислительной практике обычно применяется в сочетании с некоторой схемой выбора главного элемента. Например, схема выбора главного элемента по столбцу состоит в следующем. Перед началом первого шага среди коэффициентов $a_{11}, a_{21}, \ldots, a_{n1}$, образующих первый столбец матрицы A, выбирается коэффициент с наибольшим модулем; пусть это будет $a_{k,1}$. Если $k > 1$, то в

системе (4.1) переставляются 1-е и k-е уравнения, при $k = 1$ перестановка не нужна. После этой предварительной работы обычным образом проводится 1-й шаг прямого хода. До начала 2-го шага среди коэффициентов $a_{22}^{(1)}, a_{31}^{(1)}, \ldots, a_{n,2}^{(1)}$ (т.е. во втором столбце текущей матрицы) выбирается коэффициент $a_{l2}^{(1)}$ с наибольшим модулем. В случае $l > 2$ переставляются 2-е и l-е уравнения, затем выполняется 2-й шаг. И т.д.

Опишем этот алгоритм формально в терминах треугольного разложения. Для этого нам потребуется определить матрицы перестановок.

Теорема 4.3. *Для невырожденной матрицы A существуют перестановки, задаваемые матрицей P, нижняя треугольная матрица L с единичной главной диагональю и невырожденная верхняя треугольная матрица U, такие, что $PA = LU$.*

Доказательство. Проведем доказательство при помощи метода полной математической индукции по порядку n. Утверждение очевидно для 1×1 матриц: $P = L = 1$ и $U = A$.

Предположим, что утверждение верно для матриц порядка $n - 1$. Поскольку невырожденная матрица A в каждом столбце должна иметь ненулевые элементы, выберем матрицу перестановок P_1 так, чтобы элемент первой строки и первого столбца матрицы $P_1 A$, который обозначим через a_{11}, был отличен от нуля. Затем представим $P_1 A$ в блочном виде

$$P_1 A = \begin{bmatrix} a_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix},$$

где A_{22} — матрица порядка $n-1$, а A_{21} и A_{12}^T — матрицы-столбцы высоты $n - 1$. И, наконец, выполним блочное треугольное разложение

$$\begin{bmatrix} a_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ L_{21} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & U_{12} \\ 0 & A_{22}^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{11} & U_{12} \\ L_{21} u_{11} & L_{21} U_{12} + A_{22}^{(1)} \end{bmatrix}.$$

Сравнивая первую и последнюю матрицы в этом соотношении, найдем, что

$$\begin{gathered} u_{11} = a_{11} \neq 0, \quad U_{12} = A_{12}, \quad L_{21} u_{11} = A_{21} \quad \Rightarrow \quad L_{21} = A_{21}/u_{11}, \\ A_{22}^{(1)} = A_{22} - L_{21} U_{12}. \end{gathered} \tag{4.27}$$

Теперь, для того чтобы к $A_{22}^{(1)}$ можно было применить предположение индукции, нужно убедиться, что $\det A_{22}^{(1)} \neq 0$. В самом деле, поскольку

$\det[P_1 A] = \pm \det A \neq 0$, а

$$\det[P_1 A] = \det \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ L_{21} & I \end{bmatrix} \cdot \det \begin{bmatrix} u_{11} & U_{12} \\ 0 & A_{22}^{(1)} \end{bmatrix} = 1 \cdot (u_{11} \cdot \det A_{22}^{(1)}),$$

то $\det A_{22}^{(1)} \neq 0$.

Итак, по предположению индукции, найдется $(n-1)\times(n-1)$ матрица перестановок $\widetilde{P}$, такая что

$$\widetilde{P} A_{22}^{(1)} = L^{(1)} U^{(1)},$$

где $L^{(1)}$ — нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю, а $U^{(1)}$ — невырожденная верхняя треугольная матрица. Преобразовывая это равенство с использованием леммы **??** и подставляя результат в написанное выше блочное 2×2-разложение, получим

$$\begin{aligned} P_1 A &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ L_{21} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & U_{12} \\ 0 & \widetilde{P}^T L^{(1)} U^{(1)} \end{bmatrix} = \\ \text{(проверьте!)} \quad &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ L_{21} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widetilde{P}^T L^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & U_{12} \\ 0 & U^{(1)} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ L_{21} & \widetilde{P}^T L^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & U_{12} \\ 0 & U^{(1)} \end{bmatrix} = \\ \text{(проверьте!)} \quad &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widetilde{P}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \widetilde{P} L_{21} & L^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & U_{12} \\ 0 & U^{(1)} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

что и дает требуемое разложение A:

$$\left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widetilde{P}^T \end{bmatrix}^T P_1 \right) A = P_2 P_1 A = PA = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \widetilde{P} L_{21} & L^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & U_{12} \\ 0 & U^{(1)} \end{bmatrix}.$$

Теорема доказана.

Замечание 4.4. Теорема остается в силе, если вместо перестановок строк матрицы A использовать перестановки столбцов: $A \Rightarrow AP$. Более того, перестановки строк и столбцов можно использовать одновременно: $A \Rightarrow P_1 A P_2$.

Упражнение 4.5. Пусть матрица перестановок n-го порядка P_2 имеет вид $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widetilde{P}_2 \end{bmatrix}$, где $\widetilde{P}_2$ — матрица перестановок порядка $n-1$. Доказать, что

$$P_2 P_1 A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \widetilde{P}_2 L_{21} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & U_{12} \\ 0 & \widetilde{P}_2 A_{22}^{(1)} \end{bmatrix}.$$

Что достигается выбором ведущего элемента по столбцу? Согласно (1.9) $l_{ik} = \dfrac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$, и мы можем теперь гарантировать, что множители l_{ij} всех шагов (элементы матрицы L) по абсолютной величине ограничены единицей. Формулы (1.7) показывают, что, во-первых, добавки $l_{ik}a_{kj}^{(k-1)}$ к текущим значениям коэффициентов имеют тот же порядок величины, что и сами коэффициенты, во-вторых, за один шаг уровень коэффициентов матрицы может вырасти не более, чем в два раза. Действительно, согласно (1.7)

$$\begin{gathered}\left|a_{ij}^{(k)}\right| = \left|a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik}a_{kj}^{(k-1)}\right| \leqslant \left|a_{ij}^{(k-1)}\right| + \left|a_{kj}^{(k-1)}\right| \leqslant 2 \max_{ij}\left|a_{ij}^{(k-1)}\right|, \\ \rho = \frac{\max|u_{kj}|}{\max|a_{kj}|} \leqslant 2^{n-1}.\end{gathered} \tag{4.28}$$

Упражнение 4.6. Решить систему (4.1), (4.24), (4.25) методом Гаусса с выбором главного элемента по столбцу на 3-разрядном десятичном калькуляторе.

Иногда используется и другая схема выбора главного элемента, а именно, схема выбора по строке. Здесь до начала 1-го шага определяется наибольший по модулю среди коэффициентов $a_{11}, a_{12}, \ldots, a_{1n}$. Пусть им будет коэффициент a_{1k}. Если $k > 1$, то производится перенумерация неизвестных: 1-е и k-е неизвестные меняются номерами. Это соответствует перестановке столбцов матрицы системы. При $k = 1$ перестановка не нужна. Теперь обычным образом проводится 1-й шаг прямого хода. И т.д.

Переходя к выбору главного элемента по столбцу, мы получили для системы (4.1) приближенное решение хорошего качества. Но это не значит, что описанные схемы с выбором главного элемента придают методу Гаусса гарантированную устойчивость. Хотя обычно схемы с выбором главного элемента по столбцу или по строке действительно обеспечивают устойчивое вычисление.

В каких же случаях утрачивается устойчивость? Чтобы понять это, заметим, что во многих численных методах ошибки промежуточных вычислений в совокупности равносильны тому, как если бы тем же методом точно решали исходную задачу, предварительно изменив ее входные данные. Это относится и к методу Гаусса. Можно показать, что решение линейной системы (4.1), вычисленное методом Гаусса (с той или иной

схемой выбора главного элемента или вообще без выбора) при наличии ошибок округления точно удовлетворяет измененному уравнению

$$(A + \delta A)\tilde{x} = b. \tag{4.29}$$

В пояснение сказанного рассмотрим умножение двух треугольных матриц с учетом ошибок округления

$$\widetilde{AB} = \widetilde{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ 0 & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ 0 & b_{22} \end{bmatrix}} =$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11}b_{11}(1+\varepsilon_1) & (a_{11}b_{12}(1+\varepsilon_2) + a_{12}b_{22}(1+\varepsilon_3))(1+\varepsilon_4) \\ 0 & a_{22}b_{22}(1+\varepsilon_5) \end{bmatrix}$$

Если положить

$$\widetilde{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}(1+\varepsilon_3)(1+\varepsilon_4) \\ 0 & a_{22}(1+\varepsilon_5) \end{bmatrix}, \quad \widetilde{B} = \begin{bmatrix} b_{11}(1+\varepsilon_1) & b_{12}(1+\varepsilon_2)(1+\varepsilon_4) \\ 0 & b_{22} \end{bmatrix},$$

то легко проверить, что

$$\widetilde{AB} = \widetilde{A}\widetilde{B}.$$

Приведем примеры матриц, преобразование которых при помощи метода Гаусса с выбором главного элемента приводит к максимально возможному увеличению коэффициентов промежуточных матриц прямого хода.

Пример 4.3. Выбор по столбцу

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \\ 0 & -1 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad A^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix},$$

$$A^{(3)} = U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Упражнение 4.7. Показать, что выбор главного элемента по строке для матрицы

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

приводит к максимальному росту элементов промежуточных матриц.

Замечание 4.5. Возможна еще одна схема выбора главного элемента: выбор по всей матрице. В этом случае гарантируется полная устойчивость метода Гаусса, однако сама процедура выбора такого главного элемента очень трудоемка — для ее реализации требуется $O(n^3)$ действий, что сравнимо с трудоемкостью самого метода и, следовательно, существенно удорожает решение. Отметим, что при выборе главного элемента по столбцу или по строке требуется лишь $O(n^2)$ дополнительных операций.

Теорема 4.4. *Пусть A есть $n \times n$ матрица, составленная из чисел с плавающей точкой, для которой имеет место LU - разложение, и пусть $\hat{L}$ и $\hat{U}$ вычислены с использованием арифметики с плавающей точкой. Тогда (при условии, что в элементарных операциях не возникал машинный нуль)*

$$\hat{L}\hat{U} = A + \delta A,$$

где

$$|\delta A| \leqslant 2(n-1)(|A| + |\hat{L}||\hat{U}|)\varepsilon + O(\varepsilon^2),$$

а $\varepsilon = \varepsilon_{mach}$.

Доказательство. Проведем индукцию по n. При $n = 1$

$$A = a_{11},\ L = 1,\ U = u_{11} = a_{11},\ \hat{L} = L,\ \hat{U} = U,\ (\delta A)_{11} = 0,$$

и утверждаемая оценка справедлива.

Пусть она справедлива для $n-1$. Докажем ее справедливость для n.

Представим A в виде

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & u^T \\ v & B \end{bmatrix},$$

где $u,\ v \in \mathbb{R}^{n-1}$, $B \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$. В точной арифметике LU - разложение (исключение Гаусса) приводит к $A = LU$ с

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \ell & L_1 \end{bmatrix}, \qquad U = \begin{bmatrix} a_{11} & u^T \\ 0 & U_1 \end{bmatrix}.$$

Здесь $\ell \in \mathbb{R}^{n-1}$ задается соотношением

$$\ell = v/a_{11},$$

а L_1 и U_1 суть треугольные матрицы размера $(n-1)\times(n-1)$, полученные LU - факторизацией матрицы $A^{(1)} = B - \ell v^T$, ибо

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \ell & L_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & u^T \\ 0 & U_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & u^T \\ a_{11}\ell & \ell u^T + L_1 U_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & u^T \\ v & B \end{bmatrix}.$$

При использовании арифметики с плавающей точкой получим

$$\hat{L}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \hat{\ell} & \hat{L}_1 \end{bmatrix}, \qquad \hat{U} = \begin{bmatrix} a_{11} & u^T \\ 0 & \hat{U}_1 \end{bmatrix},$$

где

$$\hat{\ell} = fl(v/a_{11}),$$

а $\hat{L}_1$ и $\hat{U}_1$ получены исключением Гаусса в арифметике с плавающей точкой из

$$\hat{A}^{(1)} = fl[B - fl(\hat{\ell}u^T)]. \tag{4.30}$$

Таким образом,

$$\hat{L}\hat{U}^T = \begin{bmatrix} a_{11} & u^T \\ a_{11}\hat{\ell} & \hat{L}_1\hat{U}_1 + \hat{\ell}u^T \end{bmatrix} =: A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ f & F \end{bmatrix}, \tag{4.31}$$

где

$$f = a_{11}\hat{\ell} - v, \qquad F = \hat{L}_1\hat{U}_1 - B + \hat{\ell}u^T. \tag{4.32}$$

Для доказательства теоремы нужно показать, что

$$\begin{aligned} &|f| \leqslant 2(n-1)\left(|v| + |a_{11}||\hat{\ell}|\right)\varepsilon + O(\varepsilon^2), \\ &|F| \leqslant 2(n-1)\left(|B| + |\hat{L}_1||\hat{U}_1| + |\hat{\ell}||u^T|\right)\varepsilon + O(\varepsilon^2). \end{aligned} \tag{4.33}$$

Имеем

$$|f| = |a_{11}\hat{\ell} - a_{11}\ell| = |a_{11}||\hat{\ell} - \ell| \leqslant |a_{11}||\ell|\varepsilon = |v|\varepsilon,$$

и, следовательно, первое из соотношений (4.33) тривиально выполняется.

Далее, в силу (4.32)

$$F = \left(\hat{A}^{(1)} + \hat{\ell}u^T - B\right) + \left(\hat{L}_1\hat{U}_1 - \hat{A}^{(1)}\right). \tag{4.34}$$

Имея в виду (4.30), находим, что

$$fl(\hat{\ell}u^T) = \hat{\ell}u^T(1+\varepsilon_1), \quad |\varepsilon_1| \leqslant \varepsilon,$$

и поэтому

$$\begin{aligned} \hat{A}^{(1)} &= fl\left(B - fl(\hat{\ell}u^T)\right) = \left(B - \hat{\ell}u^T(1+\varepsilon_2)\right)(1+\varepsilon_2) = \\ &= B - \hat{\ell}u^T + \left[B\varepsilon_2 - \hat{\ell}u^T(\varepsilon_1+\varepsilon_2)\right] - \hat{\ell}u^T\varepsilon_1\varepsilon_2, \quad |\varepsilon_2| \leqslant \varepsilon. \end{aligned}$$

Тем самым,

$$\begin{aligned} &\mid \hat{A}^{(1)} - \hat{\ell}u^T - B \mid \leqslant \left(|B| + 2|\hat{\ell}||u^T|\right)\varepsilon + O(\varepsilon^2) \leqslant \\ &\leqslant 2\left(|B| + |\hat{\ell}||u^T|\right)\varepsilon + O(\varepsilon^2). \end{aligned} \tag{4.35}$$

Из этой оценки, в частности, следует, что

$$\mid \hat{A}^{(1)} \mid \leqslant |\hat{\ell}||u^T| + |B| + 2\left(|B| + |\hat{\ell}||u^T|\right)\varepsilon + O(\varepsilon^2).$$

При оценке второго слагаемого в (4.34) воспользуемся предположением индукции и вышеприведенной оценкой. Имеем

$$\begin{aligned} &\mid \hat{L}_1\hat{U}_1 - \hat{A}^{(1)} \mid \leqslant 2\,(n-2)\left(|\hat{A}^{(1)}| + |\hat{L}_1||\hat{U}_1|\right)\varepsilon + O(\varepsilon^2) \leqslant \\ &\leqslant 2(n-2)\left(|B| + |\hat{\ell}||u^T| + |\hat{L}_1||\hat{U}_1|\right)\varepsilon + O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

Используя теперь эту оценку и оценку (4.35) для F из (4.34), получим оценку, которая не противоречит (4.33). Теорема доказана.

II

Итерационные методы решения линейных систем

5

Простая итерация и чебышевский итерационный метод

В предыдущих лекциях для системы линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b \tag{5.1}$$

с квадратной невырожденной матрицей были рассмотрены четыре прямых метода отыскания решения:

а) метод Гаусса (LU-разложение, треугольное разложение) и его модификация с выбором ведущего элемента,

б) метод Холецкого, применяемый в случае симметричной положительно определенной матрицы,

в) метод вращений,

г) метод отражений.

Все эти методы позволяют в принципе (при отсутствии ошибок округления) найти точное решение системы (5.1) за конечное число действий. Это число было оценено нами величиной $O(n^3)$, где n — порядок системы. Если матрица A системы имеет ленточную структуру с полушириной ленты p много меньшей n, то ленточные варианты первых двух методов позволяют найти точное решение с затратой $O(p^2n)$ действий.

В этом параграфе мы рассмотрим другой класс методов решения системы (5.1) — итерационных. Эти методы, как правило, если и позволяют найти точное решение системы (5.1), то только как предел при стремлении числа итераций (а, следовательно, и действий) к бесконечности. Однако для широкого класса задач, встречающихся в приложениях, те или иные

итерационные методы могут оказаться предпочтительнее с точки зрения используемых ресурсов, чем описанные прямые.

5.1 Одношаговые итерационные методы

Из курса "Введение в численные методы" известно, что многие одношаговые итерационные методы могут быть записаны в так называемой канонической форме

$$B\frac{x^{k+1}-x^k}{\tau}+Ax^k=b, \quad k=0,1,\ldots, \tag{5.2}$$

где B — некоторая матрица, определяющая итерационный метод, а τ — итерационный параметр. В частности, в виде (5.2) могут быть записаны метод Якоби, метод Гаусса-Зейделя, метод последовательной верхней релаксации, метод простых итераций. Предположим, что

$$A=A^T>0, \quad B=B^T>0. \tag{5.3}$$

При этих предположениях в указанном курсе доказано, что если

$$B>\frac{\tau}{2}A, \tag{5.4}$$

т.е. если для любого ненулевого вектора x справедливо неравенство

$$(\,Bx\,,\,x\,)>\frac{\tau}{2}(\,Ax\,,\,x\,),$$

то итерационный метод (5.2) является сходящимся.

Для метода простых итераций, который имеет вид (5.2) с $B=I$, кроме того, дана и оценка скорости сходимости. Именно, если

$$\tau=2/(\lambda_1+\lambda_n), \tag{5.5}$$

где λ_1 и λ_n, соответственно, наименьшее и наибольшее собственные значения матрицы A, то для погрешности итераций справедлива оценка

$$\|\,x-x^k\,\|\leqslant\rho\,\|\,x-x^{k-1}\,\|, \quad \rho=\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}=\frac{1-\lambda_1/\lambda_n}{1+\lambda_1/\lambda_n}<1, \tag{5.6}$$

где $\|\cdot\|$ — евклидова длина.

Из (5.6) следует, что если $\lambda_n\gg\lambda_1$, то число ρ очень близко к единице, а скорость сходимости итераций очень низкая. Но при указанном выборе нормы вектора

$$\|A\|=\max_i\,\lambda_i(A)=\lambda_n, \quad \|A^{-1}\|=\max_i\,\lambda_i(A^{-1})=\lambda_1^{-1}$$

и

$$\lambda_n/\lambda_1 = \|A\|\,\|A^{-1}\| = \operatorname{cond} A = \varkappa(A) = \varkappa.$$

Таким образом, если матрица A плохо обусловлена, а это типичная ситуация, то метод простых итераций сходится очень медленно.

5.2 Неявные методы

Какие есть пути увеличения скорости сходимости итерационных методов? Изучим влияние матрицы B из (5.2) на скорость сходимости. В силу (5.3) существует матрица $B^{1/2}$ такая, что

$$B^{1/2} = \left(B^{1/2}\right)^T > 0 \quad \text{и} \quad B^{1/2}\,B^{1/2} = B.$$

Эта матрица называется квадратным корнем из матрицы B.

Напомним построение матрицы $B^{1/2}$. Пусть λ — собственное значение матрицы B, а ξ — отвечающий ему собственный вектор, т.е. $B\xi = \lambda\xi$. Перенумеруем все собственные значения матрицы B и введем в рассмотрение диагональную матрицу $\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$, образованную этими собственными значениями, и ортогональную матрицу $\Xi = [\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n]$, образованную ортонормированными собственными векторами ξ_i матрицы B, упорядоченными в соответствии с нумерацией собственных значений. Поскольку $\Xi\Lambda = [\lambda_1\xi_1\lambda_2\xi_2\ldots\lambda_n\xi_n]$, то $B\Xi = \Xi\Lambda$. Отсюда следует, что $B = \Xi\Lambda\Xi^T$.
Очевидно, что матрица $\Lambda^{1/2} = \operatorname{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \ldots, \sqrt{\lambda_n})$. Поэтому $B^{1/2} = \Xi\Lambda^{1/2}\Xi^T$.

Введем обозначение

$$B^{1/2}x^k = y^k, \quad x^k = \left(B^{1/2}\right)^{-1}y^k = B^{-1/2}y^k. \tag{5.7}$$

В новых обозначениях (5.2) можно переписать так

$$B^{1/2}\frac{y^{k+1} - y^k}{\tau} + AB^{-1/2}y^k = b,$$

а после применения к этому соотношению матрицы $B^{-1/2}$, получим

$$\frac{y^{k+1} - y^k}{\tau} + B^{-1/2}AB^{-1/2}y^k = B^{-1/2}b =: f. \tag{5.8}$$

Обозначая

$$B^{-1/2}AB^{-1/2} = C, \tag{5.9}$$

будем иметь соотношения

$$\frac{y^{k+1}-y^k}{\tau}+Cy^k=f, \quad k=0,1,\ldots, \tag{5.10}$$

которые по форме полностью совпадают с (5.2). Очевидно, что $C=C^T>0$, и поэтому для итерационного метода (5.10) (а это есть метод простых итераций) при

$$\tau=\frac{2}{\lambda_1(C)+\lambda_n(C)} \tag{5.11}$$

справедлива оценка

$$\| y^{k+1}-y \| \leqslant \rho(C) \| y^k-y \|, \quad \rho(C)=\frac{\lambda_n(C)-\lambda_1(C)}{\lambda_n(C)+\lambda_1(C)}=\frac{1-\varkappa^{-1}(C)}{1+\varkappa^{-1}(C)}<1, \tag{5.12}$$

где $\lambda_1(C)$ и $\lambda_n(C)$ — соответственно минимальное и максимальное собственные значения матрицы C:

$$C\xi=\lambda(C)\xi. \tag{5.13}$$

Здесь ξ — собственные векторы матрицы C. Подставляя в (5.13) представление C из (5.9), получим

$$B^{-1/2}AB^{-1/2}\xi=\lambda(C)\xi,$$

а, обозначая

$$B^{-1/2}\xi=\eta, \quad \xi=B^{1/2}\eta$$

и применяя к последней задаче матрицу $B^{1/2}$, будем иметь

$$A\eta=\lambda(C)B\eta. \tag{5.14}$$

Таким образом, $\lambda_1(C)$ и $\lambda_n(C)$ суть минимальное и максимальное собственные значения обобщенной задачи на собственные значения (5.14).

Подставляя в (5.12) y^k из (5.7) и обозначая $(Bx, x)=\|x\|_B^2$, получим

$$\| x^{k+1}-x \|_B \leqslant \rho(C) \| x^k-x \|_B .$$

Итак, если $B=B^T>0$ такова, что

$$\lambda_n/\lambda_1>\lambda_n(C)/\lambda_1(C),$$

то итерационный метод (5.2), (5.11) с этой матрицей B будет сходиться быстрее (в смысле B-нормы), чем метод простых итераций. Наибольшую скорость сходимости мы получим, выбирая $B=A$. Тогда

$$C=I, \quad \lambda_1(C)=\lambda_n(C)=1, \quad \tau=1$$

и (5.2) принимает вид

$$Ax^{k+1} = b,$$

что с точностью до обозначений совпадает с (5.1). Метод сходится за одну итерацию. Лучшего быть не может. Но мы пришли к тому, от чего хотели уйти: нам снова нужно решать систему (5.1). Отсюда следует, что на выбор матрицы B нужно наложить весьма серьезные ограничения — матрица B должна быть относительно легко обратима. Таковыми, например, являются диагональные и треугольные матрицы. Хотя последние и не являются симметричными, это неудобство легко устранить, выбирая в качестве B подходящее произведение треугольных матриц. Однако скорость сходимости метода (5.2) при таком выборе B из очевидных соображений остается сравнительно низкой.

В настоящее время неизвестно регулярных способов хорошего выбора матрицы B для произвольной A. Все удачные находки так или иначе связаны со спецификой матрицы A.

5.3 Чебышевский итерационный метод

Другой путь увеличения скорости сходимости итерационного метода (5.2) состоит в том, чтобы вместо одного итерационного параметра τ использовать несколько — свой на каждой итерации. Итерационные методы такого типа называются нестационарными и имеют вид

$$B\,\frac{x^{k+1} - x^k}{\tau_{k+1}} + Ax^k = b, \quad k = 0, 1, \ldots \tag{5.15}$$

или с учетом (5.7), (5.9)

$$\frac{y^{k+1} - y^k}{\tau_{k+1}} + Cy^k = f, \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{5.16}$$

Укажем один из возможных способов выбора итерационных параметров τ_k. Пусть

$$z^k = y^k - y$$

— погрешность решения после k итераций, а

$$Cy = f. \tag{5.17}$$

Вычитая (5.17) из (5.16), получим задачу для z^k:

$$\frac{z^{k+1} - z^k}{\tau_{k+1}} + Cz^k = 0, \quad k = 0, 1, \ldots, \quad z^0 = y^0 - y. \tag{5.18}$$

Разрешим это соотношение относительно z^{k+1}. Получим

$$z^{k+1} = (I - \tau_{k+1}C)z^k,$$

и, следовательно,

$$z^k = \prod_{j=1}^{k}(I - \tau_j C)z^0, \tag{5.19}$$

т.е.

$$z^k = P_k(C)z^0,$$

где

$$P_k(t) = \prod_{j=1}^{k}(1 - \tau_j t) = 1 + a_1^{(k)}t + \cdots + a_k^{(k)}t^k. \tag{5.20}$$

Из (5.19) находим, что

$$\|z^k\| = \|y^k - y\| = \left\|\prod_{j=1}^{k}(I - \tau_j C)z^0\right\| \leqslant \left\|\prod_{j=1}^{k}(I - \tau_j C)\right\| \|z^0\|. \tag{5.21}$$

Но

$$\left\|\prod_{j=1}^{k}(I - \tau_j C)\right\| = \max_l \left|\lambda_l\big(P_k(C)\big)\right| = \max_l \left|P_k\big(\lambda_l(C)\big)\right|. \tag{5.22}$$

Поскольку мы хотим, чтобы итерации сходились как можно быстрее при любом начальном приближении, то можно поставить задачу о минимизации $\|P_k(C)\|$ в зависимости от итерационных параметров τ_j, $j = \overline{1,k}$. В силу (5.20), (5.22) эта задача эквивалентна задаче построения многочлена $P_k(t)$ степени k с единичным свободным членом, который в точках спектра матрицы C наиболее близок к нулю. Однако поставленная задача практически не разрешима. Тем не менее, вместо нее можно поставить близкую задачу о построении $P_k(t)$, наименее отклоняющегося от нуля не на спектре, а на отрезке $[\lambda_1, \lambda_n]$, где этот спектр расположен. Эта задача много проще. Найдем это решение.

Среди многочленов степени k таких, что $Q_k(0) = 1$ (см. (5.20)), требуется найти многочлен $P_k(t)$, максимум модуля которого на $[\lambda_1, \lambda_n]$ минимален.

Линейной заменой переменной $t = ax + b$ переведем отрезок $[\lambda_1, \lambda_n]$ в отрезок $[1, -1]$. Имеем

$$\left.\begin{array}{rcrcl} \lambda_1 & = & a & + & b \\ \lambda_n & = & -a & + & b \end{array}\right\}, \qquad b = \frac{\lambda_n + \lambda_1}{2}, \qquad a = -\frac{\lambda_n - \lambda_1}{2},$$

т.е.

$$t = \frac{\lambda_n + \lambda_1}{2} - \frac{\lambda_n - \lambda_1}{2}\,x = \frac{\lambda_1 + \lambda_n}{2}\left[1 - \frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\,x\right] = \frac{1}{\tau_0}[1 - \rho_0 x], \quad (5.23)$$

где

$$\tau_0 = \frac{2}{\lambda_n + \lambda_1}, \quad \rho_0 = \frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1} = \frac{1 - \varkappa^{-1}}{1 + \varkappa^{-1}} < 1. \quad (5.24)$$

Заметим, что τ_0 совпадает с τ из (5.5), (5.11) для стационарного итерационного процесса, а ρ_0 совпадает с ρ из (5.6), (5.12) и характеризует скорость сходимости этого процесса.

Пусть

$$P_k(t) = \widehat{P}_k(x). \quad (5.25)$$

Поскольку $t = 0$ отвечает точка $x = \rho_0^{-1}$ (см. (5.23)), то должно быть

$$P_k(0) = \widehat{P}_k\left(\rho_0^{-1}\right) = 1. \quad (5.26)$$

Наша задача свелась к отысканию многочлена $\widehat{P}_k(x)$, который наименее отклоняется от нуля на $[-1, 1]$ и удовлетворяет условию (5.26). Похожая задача решена в гл. 11. Оттуда мы знаем, что среди многочленов степени k вида $x^k + \ldots$ наименее отклоняется от нуля на $[-1, 1]$ многочлен

$$\overline{T}_k(x) = \frac{1}{2^{k-1}} T_k(x),$$

где $T_k(x)$ — *многочлен Чебышева* первого рода. Разумеется, сам многочлен Чебышева $T_k(x)$ является наименее отклоняющимся от нуля на $[-1, 1]$ среди многочленов вида $P_k(x) = 2^{k-1}x^k + \ldots$.

Пусть

$$T_k\left(\rho_0^{-1}\right) = q_k^{-1}. \quad (5.27)$$

Построим многочлен $\widetilde{T}_k(x) = q_k T_k(x)$. Очевидно, что этот многочлен является наименее отклоняющимся от нуля на $[-1, 1]$ среди многочленов вида

$$P_k(x) = 2^{k-1} q_k x^k + \ldots \quad (5.28)$$

и, кроме того многочлен $\widetilde{T}_k(x)$ удовлетворяет условию (5.26). Покажем, что $\widetilde{T}_k(x)$ и есть интересующий нас многочлен. Поскольку $\widetilde{T}_k(x)$ дает решение задачи минимизации среди многочленов, удовлетворяющих двум условиям (5.28) и (5.26), а не одному (5.26), то, вообще говоря, может существовать другой многочлен, удовлетворяющий (5.26), максимум модуля которого на $[-1, 1]$ меньше, чем у $\widetilde{T}_k(x)$. Пусть этот многочлен есть

$P_k(x)$. Поскольку в силу свойств 4° многочленов Чебышева многочлен $\widetilde{T}_k(x)$ в $(k+1)$ точке (11.21) отрезка $[-1,1]$ принимает с чередующимися знаками максимальное значение модуля, то в этих же точках многочлен $\widetilde{T}_k(x) - P_k(x)$ также имеет различные знаки. Поэтому на $[-1,1]$ существует k точек, где многочлен k-ой степени $\widetilde{T}_k(x) - P_k(x)$ обращается в нуль. Но этот многочлен обращается в нуль и в $(k+1)$-ой точке $\rho_0^{-1} \notin [-1,1]$, что невозможно, если $P_k(x) \not\equiv \widetilde{T}_k(x)$. Тем самым,

$$\widehat{P}_k(x) = q_k T_k(x), \tag{5.29}$$

и нестационарный итерационный метод построен.

Найдем формулы для итерационных параметров τ_j. Из (5.25), (5.29) и (5.23) следует, что нули полиномов $P_k(t)$ и $T_k\left(\frac{1-\tau_0 t}{\rho_0}\right)$ совпадают. Так как полином $P_k(t)$ имеет нули в точках $t = 1/\tau_j$, $j = \overline{1,k}$, а нулями полинома Чебышева $T_k(x)$ являются числа (11.20)

$$x_j = \cos\frac{(2j-1)\pi}{2k}, \quad j = 1, 2, \ldots, k,$$

то с учетом (5.23) находим, что

$$\tau_j = \frac{\tau_0}{1 - \rho_0 \mu_j}, \quad j = 1, 2, \ldots, k, \tag{5.30}$$

где

$$\mu_j \in \mathfrak{M}_k = \left\{\cos\frac{2i-1}{2k}\pi, \quad i = 1, 2, \ldots, k\right\}. \tag{5.31}$$

Оценим скорость сходимости построенного итерационного процесса, который называется *чебышевским итерационным методом*.

В силу свойства 4° многочленов Чебышева $\max\limits_{[-1,1]} |T_k(x)| = 1$. Отсюда с учетом (5.25) и (5.29) находим, что

$$\max_{[\lambda_1,\lambda_n]} |P_k(t)| = \max_{[-1,1]} |\widehat{P}_k(x)| = q_k.$$

Поэтому следствием (5.21), (5.22) будет оценка

$$\|z^k\| \leqslant q_k \|z^0\|. \tag{5.32}$$

Проанализируем зависимость q_k от k и числа обусловленности $\varkappa$ матрицы C. Из свойства 6° многочленов Чебышева находим, что $T_k\left(\rho_0^{-1}\right) = \operatorname{ch} k \operatorname{Arch} \rho_0^{-1}$, и поэтому, с учетом (5.27),

$$\operatorname{ch} k \operatorname{Arch} \frac{1}{\rho_0} = \frac{1}{q_k}.$$

Отсюда

$$k \operatorname{Arch} \frac{1}{\rho_0} := k \ln \frac{1+\sqrt{1-\rho_0^2}}{\rho_0} = \ln \left[\frac{1+\sqrt{1-\rho_0^2}}{\rho_0}\right]^k =$$
$$= \operatorname{Arch} \frac{1}{q_k} = \ln \frac{1+\sqrt{1-q_k^2}}{q_k}$$

и, следовательно,

$$\frac{1+\sqrt{1-q_k^2}}{q_k} = \left[\frac{1+\sqrt{1-\rho_0^2}}{\rho_0}\right]^k =: \rho_1^{-k}. \tag{5.33}$$

Преобразовывая это соотношение к квадратному относительно q_k уравнению и решая его, находим, что

$$q_k = \frac{2\rho_1^{-k}}{1+\rho_1^{-2k}} = \frac{2\rho_1^k}{1+\rho_1^{2k}}, \tag{5.34}$$

где, согласно (5.33), (5.24)

$$\rho_1 = \frac{\rho_0}{1+\sqrt{1-\rho_0^2}} = \frac{\frac{1-\varkappa^{-1}}{1+\varkappa^{-1}}}{1+\sqrt{1-\left(\frac{1-\varkappa^{-1}}{1+\varkappa^{-1}}\right)^2}} = \frac{1-\varkappa^{-1}}{1+\varkappa^{-1}+2\varkappa^{-1/2}} = \frac{1-\varkappa^{-1/2}}{1+\varkappa^{-1/2}}. \tag{5.35}$$

Из формул (5.30), (5.31) для итерационных параметров τ_j видно, что для их вычисления требуется задать число итераций k. Обычно в качестве условия окончания итерационного процесса берется неравенство

$$\|z^k\| \leqslant \varepsilon \|z^0\|$$

и числом итераций назывется наименьшее из чисел k, для которого это неравенство выполняется. Из (5.32) следует, что для чебышевского итерационного метода число итераций находится из неравенства $q_k \leqslant \varepsilon$. Решим это неравенство. В силу представления (5.34), исследуемое неравенство преобразуется к виду

$$\frac{2\rho_1^k}{1+\rho_1^{2k}} \leqslant \varepsilon.$$

Это неравенство эквивалентно неравенству

$$\left(\rho_1^k - \frac{1+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}\right)\left(\rho_1^k - \frac{1-\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}\right) \geqslant 0.$$

Поскольку $\rho_1 < 1$, то первый сомножитель отрицателен, и должно выполняться условие

$$\rho_1^k \leqslant \frac{1-\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{1+\sqrt{1-\varepsilon^2}}\,.$$

Отсюда

$$k \geqslant \frac{\ln \dfrac{1+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}}{\ln 1/\rho_1}\,.$$

Поскольку ε обычно мало, то пользуются следующей формулой

$$k \geqslant \frac{\ln 2/\varepsilon}{\ln 1/\rho_1}\,. \tag{5.36}$$

Сравним скорости сходимости чебышевского итерационного метода с оптимальным методом простых итераций. Из (5.6) следует, что для оптимального метода простых итераций

$$\|x - x^k\| \leqslant q\|x - x^{k-1}\|,$$

где

$$q = \frac{1-\varkappa^{-1}}{1+\varkappa^{-1}} = \rho_0$$

и, следовательно,

$$\|x - x^k\| \leqslant q^k\|x - x^0\|.$$

Если мы и здесь потребуем, чтобы

$$\|x - x^k\| \leqslant \varepsilon\|x - x^0\|,$$

то для числа итераций k будем иметь

$$k \ln \frac{1}{\rho_0} \geqslant \ln \frac{1}{\varepsilon},$$

т.е.

$$k \geqslant \frac{\ln 1/\varepsilon}{\ln 1/\rho_0}\,. \tag{5.37}$$

Для плохо обусловленной матрицы $\varkappa^{-1} \ll 1$ и поэтому

$$\frac{1}{\rho_0} = 1 + 2\varkappa^{-1} + O(\varkappa^{-2}).$$

Отсюда и из (5.37)

$$k \approx \frac{1}{2}\varkappa \ln 1/\varepsilon. \tag{5.38}$$

Для чебышевского итерационного метода в силу (5.36), (5.35), будем иметь

$$\rho_1^{-1} = \frac{1+\varkappa^{-1/2}}{1-\varkappa^{-1/2}} = 1 + 2\varkappa^{-1/2} + O(\varkappa^{-1})$$

и

$$k \approx \frac{1}{2}\varkappa^{1/2} \ln 2/\varepsilon.\,,$$

что много лучше, чем (5.38).

5.4 Об устойчивости

К сожалению, вычисления по формулам (5.15) при произвольном использовании итерационных параметров не являются устойчивыми. Связано это с тем обстоятельством, что не все сомножители $(I - \tau_j C)$ разрешающего оператора из (5.19) имеют ограниченную единицей норму. При компьютерных вычислениях всегда присутствуют ошибки округления, и последовательное использование в вычислениях матриц $(I - \tau_j C)$ с превосходящими единицу нормами приводит к накоплению этих погрешностей и неустойчивости вычислительного процесса. Проиллюстрировать это можно на простом примере перемножения нескольких чисел, среди которых есть очень большие и очень маленькие. Пусть $M_0 = 10^{-p}$ — машинный нуль, а $M_\infty = 10^p$ — бесконечность. Пусть требуется перемножить следующие числа

$$10^{3p/4}, \quad 10^{p/2}, \quad 10^{p/4}, \quad 10^{-p/2}, \quad 10^{-3p/4}.$$

Очевидно, что искомое произведение равно $10^{p/4} \in [M_0, M_\infty]$. Однако, если эти числа перемножать в естественном порядке, то уже после первого умножения получится бесконечность

$$\underbrace{10^{3p/4} \cdot 10^{p/2}} \cdot 10^{p/4} \cdot \underbrace{10^{-p/2} \cdot 10^{-3p/4}} = M_\infty.$$

Перемножение в обратном порядке тоже не приводит к правильному результату — первое же умножение приводит к нулю. Правильный результат получится лишь в том случае, если порядок сомножителей мы будем контролировать, например, так $10^{-3p/4}\,10^{p/2}\,10^{3p/4}\,10^{-p/2}\,10^{p/4}$. Итерационные параметры (5.30) также можно упорядочить (см. [9]) так, чтобы итерации были устойчивыми.

6

Метод наискорейшего спуска

6.1 Метод наискорейшего спуска

Вновь обратимся к решению системы

$$Ax = b, \quad A = A^T > 0. \tag{6.1}$$

Будем для простоты использовать явный нестационарный метод

$$\frac{x^{k+1} - x^k}{\tau_{k+1}} + Ax^k = b, \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{6.2}$$

В предыдущей лекции был указан способ выбора итерационных параметров τ_k, использующий априорную информацию о расположении спектра матрицы A. Сейчас мы рассмотрим другой способ выбора этих параметров.

Пусть, как обычно, $z^k = x^k - x$. Тогда

$$z^{k+1} = z^k - \tau_{k+1} A z^k. \tag{6.3}$$

Вычислим A-норму погрешности z^{k+1} и выразим ее через z^k. Используя (6.3), находим, что

$$\begin{aligned} \|z^{k+1}\|_A^2 &= \left(Az^{k+1}, z^{k+1}\right) = \left(A(z^k - \tau_{k+1}Az^k), z^k - \tau_{k+1}Az^k\right) = \\ &= \|z^k\|_A^2 - 2\tau_{k+1}\left(Az^k, Az^k\right) + \tau_{k+1}^2\left(A^2z^k, Az^k\right). \end{aligned}$$

Выберем τ_{k+1} из условия минимума $\|z^{k+1}\|_A^2$. Дифференцируя по τ_{k+1} и приравнивая производную нулю, найдем, что

$$-2\left(Az^k, Az^k\right) + 2\tau_{k+1}\left(A^2z^k, Az^k\right) = 0,$$

т.е.

$$\tau_{k+1} = \frac{(Az^k, Az^k)}{(A^2z^k, Az^k)}. \tag{6.4}$$

Казалось бы, что это соотношение не позволяет найти интересующий нас параметр τ_{k+1}, поскольку $z^{k+1} = x^k - x$ не известна. Но нам она и не нужна. Нам нужна

$$Az^k = Ax^k - Ax = Ax^k - b = -r^k.$$

Величина r^k называется *невязкой*. Тем самым,

$$\tau_{k+1} = \frac{(r^k, r^k)}{(Ar^k, r^k)}, \quad r^k = b - Ax^k. \tag{6.5}$$

Метод (6.2), (6.5) назывется методом скорейшего спуска.

Дадим геометрическую интерпретацию этого метода, которая и объяснит его название. Пусть

$$J(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x) \tag{6.6}$$

— квадратичная функция n переменных $x_1, x_2, \ldots, x_n$. Поставим задачу об отыскании точки минимума этой функции. Для решения этой задачи нужно найти первые производные (6.6) по $x_1, x_2, \ldots, x_n$ и приравнять их нулю. Это и будут уравнения для нахождения точки минимума. Перепишем (6.6) в координатном виде

$$J(x) = \frac{1}{2}\sum_{k,j=1}^{n} a_{kj}x_kx_j - \sum_{k=1}^{n} b_kx_k$$

и продифференцируем по x_i

$$\frac{\partial J(x)}{\partial x_i} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} a_{ki}x_k - b_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - b_i, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Замечание 6.1. $\operatorname{grad} J = Ax - b$.

Из математического анализа известно, что функция наиболее быстро убывает в направлении анти-градиента.

Итак, задача отыскания точки минимума функции (6.6) эквивалентна решению системы (6.1) с симметричной матрицей. Если мы найдем способ

приближенного нахождения точки минимума функции (6.6), то мы будем иметь метод приближенного нахождения решения системы (6.1).

Построим метод минимизации (6.6). Применительно к (6.6)

$$\nabla J(x) = Ax - b,$$

и процесс минимизации принимает вид

$$x^{k+1} = x^k - \alpha \nabla J(x^k) = x^k - \alpha(Ax^k - b) = x^k + \alpha r^k \tag{6.7}$$

или

$$\frac{x^{k+1} - x^k}{\alpha} + Ax^k = b,$$

что совпадает с (6.2) с точностью до обозначения итерационного параметра. Для определения значения α рассмотрим

$$J(x^{k+1}) = J(x^k - \alpha \nabla J(x^k)) \tag{6.8}$$

как функцию α и найдем такое значение α, при котором J принимает наименьшее значение. В нашем случае

$$J(x^k - \alpha \nabla J(x^k)) = \frac{1}{2}\big(A(x^k - \alpha(Ax^k - b)), x^k - \alpha(Ax^k - b)\big) -$$
$$- (b, x^k - \alpha(Ax^k - b)) = \frac{1}{2}\big(A(x^k + \alpha r^k), x^k + \alpha r^k\big) - (b, x^k + \alpha r^k).$$

Дифференцируя по α и приравнивая производную нулю, находим, что

$$\big(A(x^k + \alpha r^k), r^k\big) - (b, r^k) = 0,$$

откуда

$$\alpha = \alpha_{k+1} = \frac{(r^k, r^k)}{(Ar^k, r^k)},$$

что совпадает с ранее полученным значением (6.5) итерационного параметра. Тем самым, оба метода совпадают, а второй метод дает им название.

Имеет место

Теорема 6.1. *Итерации по методу скорейшего спуска* (6.2), (6.5) *сходятся не медленнее, чем в оптимальном методе простых итераций. Именно*

$$\|x^k - x\|_A \leqslant \left(\frac{1 - \varkappa^{-1}}{1 + \varkappa^{-1}}\right)^k \|x^0 - x\|_A,$$

где $\varkappa$ — число обусловленности матрицы A.

Доказательство. Из (6.3)

$$\|z^{k+1}\|_A = \|(I - \tau_{k+1}A)z^k\|_A,$$

причем правая часть принимает минимальное значение именно при τ_{k+1} из (6.5). Тем самым, при любом другом значении τ_{k+1} правая часть будет только больше, и, следовательно,

$$\|z^{k+1}\|_A^2 \leqslant \|(I - \tau A)z^k\|_A^2$$

для любого τ и, в частности, для

$$\tau = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_n}$$

— итерационного параметра метода простых итераций.
Но

$$\begin{aligned}\|(I - \tau A)z^k\|_A^2 &= \big((I - \tau A)z^k, (I - \tau A)Az^k\big) = \\ &= \Big((I - \tau A)A^{1/2}z^k, (I - \tau A)A^{1/2}z^k\Big) = \\ &= \|(I - \tau A)A^{1/2}z^k\|^2 \leqslant \|I - \tau A\|\,\|z^k\|_A^2,\end{aligned}$$

а в силу (5.22), (5.27), (5.28), , при $k = 1$

$$\|I - \tau A\| \leqslant \max_{\lambda\in[\lambda_1,\lambda_n]} |1 - \tau\lambda| = q_1 = \rho_0 = \frac{1 - \varkappa^{-1}}{1 + \varkappa^{-1}}.$$

Собирая оценки для всех k, получим утверждение теоремы.

Из теоремы 6.1 следует, что нестационарный метод (6.2), (6.5) сравним по скорости сходимости с методом простых итераций, и, казалось бы, мы с этим методом не продвинулись вперед. Однако, у этих методов имеется существенное различие. Для использования метода простых итераций требуется информация о границах спектра матрицы A. В случае же метода (6.2), (6.5) такая информация не требуется.

6.2 Неулучшаемость оценки

Покажем на примере, что полученная оценка сходимости достигается, если начальное приближение задано специальным образом. Допустим, что x^0 таково, что

$$x^0 - x = z^0 = c\left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\xi_1 + \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}\xi_n\right),$$

где λ_1 и λ_n суть минимальное и максимальное собственные значения матрицы A из (6.1), а ξ_1 и ξ_n — отвечающие им ортонормированные собственные векторы. Тогда

$$\begin{aligned}
&Az^0 = c\sqrt{\lambda_1\lambda_n}(\xi_1+\xi_n),\\
&A^2z^0 = c\sqrt{\lambda_1\lambda_n}(\lambda_1\xi_1+\lambda_n\xi_n),\\
&(Az^0, Az^0) = c^2\,\lambda_1\lambda_n 2,\\
&(A^2z^0, Az^0) = c^2\,\lambda_1\lambda_n(\lambda_1+\lambda_n).
\end{aligned}$$

В силу (6.4)

$$\tau_1 = \frac{(Az^0, Az^0)}{(A^2z^0, A^2z^0)} = \frac{2}{\lambda_1+\lambda_n},$$

а в силу (6.3)

$$\begin{aligned}
z^1 &= c\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\xi_1 + c\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}\xi_n - \frac{2}{\lambda_1+\lambda_n}c\sqrt{\lambda_1\lambda_n}(\xi_1+\xi_n) =\\
&= c\left[\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\xi_1\left(1-\frac{2\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_n}\right) + \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}\xi_n\left(1-\frac{2\lambda_n}{\lambda_1+\lambda_n}\right)\right] =\\
&= c\,\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\left[\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\xi_1 - \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}\xi_n\right] =\\
&= c\,\rho\left[\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\xi_1 - \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}\xi_n\right].
\end{aligned}$$

Поскольку

$$\|z^0\|_A^2 = (Az^0, z^0) = c^2\sqrt{\lambda_1\lambda_n}\left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}} + \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}\right) = c^2\,(\lambda_1+\lambda_n),$$

а

$$\begin{aligned}
Az^1 &= c\,\rho\left(\sqrt{\lambda_1\lambda_n}\xi_1 - \sqrt{\lambda_1\lambda_n}\xi_n\right),\\
\|z^1\|_A^2 &= c^2\,\rho^2(\lambda_n+\lambda_1) = \rho^2\|z^0\|_A^2,
\end{aligned}$$

то

$$\|z^1\|_A = \rho\|z^0\|.$$

Делая следующую итерацию, найдем, что

$$z^2 = \rho^2 z^0$$

и т.д. Отсюда вытекает, что

$$\|z^k\|_A = \rho^k\|z^0\|_A,$$

т.е. полученная оценка точная.

Следует, однако, заметить, что такие плохие начальные приближения в реальных задачах практически не встречаются, и итерации, особенно на начальном этапе, сходятся много быстрее. По мере увеличения числа итераций скорость сходимости уменьшается и выходит на ту, которая гарантируется оценкой. Имея хорошее начальное приближение, можно получить приближенное решение с хорошей точностью при существенно меньших трудозатратах.

7

Метод сопряженных градиентов

Построим другой метод минимизации функции

$$J(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x), \tag{7.1}$$

точка минимума которой совпадает с решением системы

$$Ax = b, \qquad A = A^T > 0. \tag{7.2}$$

7.1 Построение метода

В методе скорейшего спуска на каждом шаге происходила одномерная минимизация вдоль направления, задаваемого антиградиентом, который совпадает с невязкой $r^k = b - Ax^k$. Рассмотрим теперь последовательную минимизацию $J(x)$ вдоль совокупности направлений $\{p^1, p^2, \dots\}$, которые не обязаны совпадать с направлениями невязок $\{r^0, r^1, \dots\}$.

Пусть направления $p^1, p^2, \dots$ заданы, и

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_{k+1} p^{k+1}, \qquad k = 0, 1, \dots. \tag{7.3}$$

Поскольку

$$\begin{aligned} J(x+y) &= \frac{1}{2}\left((x+y), A(x+y)\right) - (b, x+y) = \\ &= \frac{1}{2}\|x\|_A^2 + \frac{1}{2}\|y\|_A^2 + (Ax, y) - (b, x) - (b, y) = \\ &= J(x) + (Ax - b, y) + \frac{1}{2}\|y\|_A^2, \end{aligned} \tag{7.4}$$

то

$$J(x^{k+1}) = J(x^k + \alpha p^{k+1}) = J(x^k) - \alpha(r^k, p^{k+1}) + \frac{\alpha^2}{2}(Ap^{k+1}, p^{k+1}), \tag{7.5}$$

а, дифференцируя это выражение по α и приравнивая производную нулю, находим итерационный параметр (ср. с (6.5))

$$\alpha_{k+1} = \frac{(r^k, p^{k+1})}{(p^{k+1}, Ap^{k+1})}. \tag{7.6}$$

Подставляя (7.6) в (7.5), найдем, что

$$\begin{aligned} J(x^{k+1}) &= J(x^k) - \frac{(r^k, p^{k+1})}{(p^{k+1}, Ap^{k+1})}(r^k, p^{k+1}) + \frac{1}{2}\frac{(r^k, p^{k+1})^2}{(p^{k+1}, Ap^{k+1})^2}(Ap^{k+1}, p^{k+1}) = \\ &= J(x^k) - \frac{1}{2}\frac{(r^k, p^{k+1})^2}{(p^{k+1}, Ap^{k+1})}, \end{aligned} \tag{7.7}$$

т.е. на $(k+1)$ итерации действительно будет происходить уменьшение функции $J(x)$, если выполнено условие

$$(r^k, p^{k+1}) \neq 0. \tag{7.8}$$

Замечание 7.1. Без ограничения общности можно предполагать, что

$$x^0 = 0. \tag{7.9}$$

Если бы нам было известно хорошее приближение $\widetilde{x}$, то, делая замену $x = \widetilde{x} + z$, мы бы нашли, что $Az + A\widetilde{x} = b$ и $Az = b - A\widetilde{x}$. Тем самым, для z начальным приближением было бы $z^0 = 0$.

Из (7.3) следует, что при начальном приближении (7.9) векторы x^k являются линейными комбинациями векторов $p^1, p^2, \ldots, p^k$, т.е.

$$x^k \in \operatorname{span}\{p^1, p^2, \ldots, p^k\}. \tag{7.10}$$

При выборе направлений p^i наша задача состоит в том, чтобы гарантировать сходимость и добиться скорости сходимости бóльшей, чем у метода скорейшего спуска. Представляется, что наилучшим способом выбора p^i был бы такой, при котором x^{k+1} минимизировал бы функцию $J(x)$ не только по направлению p^{k+1}, но и по всему подпространству $\operatorname{span}\{p^1, p^2, \ldots, p^{k+1}\} \subset \mathbb{R}^n$, т.е.

$$J(x^{k+1}) = \min_{x \in \operatorname{span}\{p^1, p^2, \ldots, p^{k+1}\}} J(x). \tag{7.11}$$

Если бы такой выбор p^i удалось осуществить, то это не только гарантировало бы сходимость, но привело бы к конечности итерационного процесса,

ибо при $k+1=n$ и линейно независимых p^i задача (7.11) представляет собой исходную задачу глобальной минимизации, и, следовательно, $Ax^n=b$.

Попытаемся решить поставленную задачу. Пусть

$$P_k=\left[p^1p^2\dots p^k\right]$$

есть $(n\times k)$-матрица, столбцами которой являются искомые направления. Пусть $x=P_ky+\alpha p^{k+1}\in\operatorname{im}P_{k+1}$,[1] $y\in\mathbb{R}^k$, $\alpha\in\mathbb{R}$. Тогда (см. (7.5))

$$J(x)=J(P_ky)+\alpha(AP_ky,p^{k+1})-\alpha(b,p^{k+1})+\frac{\alpha^2}{2}(Ap^{k+1},p^{k+1}). \qquad (7.12)$$

Если бы в (7.12) отсутствовал "перекрестный"член

$$\alpha(P_ky,Ap^{k+1}),$$

то задача минимизации $J(x)$ на $\operatorname{span}\{p^1,p^2,\dots,p^{k+1}\}=\operatorname{im}P_{k+1}$, т.е. задача (7.11), распалась бы на минимизацию по $\operatorname{im}P_k$, где решение x^k предполагается известным, и простую минимизацию для определения скалярной величины α.

В самом деле, пусть выполнены условия

$$(p^i,Ap^j)=0,\qquad i\neq j. \qquad (7.13)$$

(Векторы, удовлетворяющие условию (7.13), называются A-сопряженными илиA-ортогональными.) Определим вектор $x^k\in\operatorname{im}P_k$ и $\alpha_{k+1}\in\mathbb{R}$ следующим образом

$$J(x^k)=\min_y\ J(P_ky),\qquad \alpha_{k+1}=\frac{(b,p^{k+1})}{(p^{k+1},Ap^{k+1})}. \qquad (7.14)$$

Тогда (см. (7.12))

$$\min_{y,\alpha}\ J(P_ky+\alpha p^{k+1})=\min_y\ J(P_ky)+\min_\alpha\left\{\frac{\alpha^2}{2}(Ap^{k+1},p^{k+1})-\alpha(b,p^{k+1})\right\}$$

находится при $P_ky=x^k$ и $\alpha=\alpha_{k+1}$ из (7.14). На самом деле α_{k+1} из (7.14) совпадает с (7.6), ибо в силу (7.10) и (7.13)

$$(Ap^{k+1},x^k)=0$$

[1]Напомним, что множество всех векторов x, представимых в виде $x=By$, называется образом матрицы B и обозначается $\operatorname{im}B$.

и, следовательно,

$$(p^{k+1}, b) = (p^{k+1}, b - Ax^k + Ax^k) = (p^{k+1}, r^k), \tag{7.15}$$

что вместе с (7.14) приводит к (7.6).

Итак, для реализации задуманного метода нужно последовательно находить A-сопряженные векторы $p^1, p^2, \ldots, p^{k+1}$, для которых выполнено условие (7.8), и проводить вычисления по формуле (7.3) с параметром α_{k+1} из (7.6).

Обратимся к наиболее целесообразному выбору векторов p^{k+1}. При выборе p^{k+1} наша цель состоит в быстрейшей минимизации функции $J(x)$, и в силу (7.7) мы должны максимизировать

$$\frac{(r^k, p^{k+1})^2}{(p^{k+1}, Ap^{k+1})}. \tag{7.16}$$

Замечание 7.2. Эта величина не зависит от длины вектора p^{k+1}, а зависит только от его направления. Поэтому при отыскании p^{k+1} достаточно ограничиться нахождением его направления.

Поскольку p^{k+1} должен еще удовлетворять условиям A-сопряженности (7.13), т.е. быть ортогональным к $\{Ap^1, Ap^2, \ldots, Ap^k\} = \operatorname{im} AP_k$, то искомый вектор p^{k+1} должен принадлежать ортогональному дополнению подпространства $\operatorname{im} AP_k$ — подпространству $(\operatorname{im} AP_k)^\perp$

$$p^{k+1} \in (\operatorname{im} AP_k)^\perp.$$

Пусть $r^k = r^k_\parallel + r^k_\perp$, где $r^k_\parallel \in \operatorname{im}(AP_k)$, а $r^k_\perp \in (\operatorname{im}(AP_k))^\perp$. Тогда

$$(r^k, p^{k+1}) = (r^k_\parallel + r^k_\perp, p^{k+1}) = (r^k_\perp, p^{k+1}) = \|r^k_\perp\| \, \|p^{k+1}\| \cos(r^k_\perp, p^{k+1}),$$

и искомый максимум выражения (7.16) будет достигаться при достижении максимума последним сомножителем, т.е. при $|\cos(r^k_\perp, p^{k+1})| = 1$. Это будет так, если, например,

$$p^{k+1} = r^k_\perp \in (\operatorname{im}(AP_k))^\perp \tag{7.17}$$

— ортогональной проекции r^k на $(\operatorname{im}(AP_k))^\perp$. Отметим, что отсюда следует соотношение

$$p^1 = r^0. \tag{7.18}$$

Построение процесса минимизации $J(x)$ в первом приближении будет закончено, если принять во внимание, что имеет место

Теорема 7.1. *Два последовательных направления спуска в методе сопряженных градиентов связаны соотношением*

$$p^{k+1} = r^k + \beta_{k+1} p^k. \tag{7.19}$$

Доказательство этой теоремы мы отложим на потом, а сейчас заметим, что поскольку векторы p^k и p^{k+1} должны быть A-сопряжены, то для параметра β_{k+1} из (7.19) имеет место представление

$$\beta_{k+1} = -\frac{(r^k, Ap^k)}{(p^k, Ap^k)}. \tag{7.20}$$

Итак, метод сопряженных градиентов состоит в вычислениях по следующим формулам

$$\begin{aligned}
&r^k = b - Ax^k, \qquad k = 0, 1, \ldots, \\
&p^{k+1} = r^k + \beta_{k+1} p^k, \qquad k = 1, 2, \ldots, \qquad p^1 = r^0, \\
&x^{k+1} = x^k + \alpha_{k+1} p^{k+1}, \qquad k = 0, 1, \ldots, \qquad x^0 = 0, \\
&\alpha_{k+1} = (r^k, p^{k+1})/(p^{k+1}, Ap^{k+1}), \qquad k = 0, 1, \ldots, \\
&\beta_{k+1} = -(Ap^k, r^k)/(Ap^k, p^k), \qquad k = 1, 2, \ldots,
\end{aligned} \tag{7.21}$$

7.2 Оценка скорости сходимости

Дадим оценку скорости сходимости метода сопряженных градиентов. Имеет место

Теорема 7.2. *Метод сопряженных градиентов* (7.21)*сходится не хуже, чем чебышевский итерационный метод, т.е.*

$$\|x^k - x\|_A \leqslant 2 \left(\frac{1 - \varkappa^{-1/2}}{1 + \varkappa^{-1/2}} \right)^k \|x\|_A,$$

где $\varkappa$ — число обусловленности матрицы A.

Доказательство. Отметим, что минимизация $J(x^k)$ ведет к минимизации $\|x^k - x\|_A$.

В самом деле, пусть

$$z^k = x^k - x.$$

Тогда, подставляя $x^k = x + z^k$ в $J(x^k)$ и принимая во внимание (7.4), будем иметь

$$J(x^k) = \frac{1}{2}\|z^k\|_A^2 + J(x). \tag{7.22}$$

Установим теперь связь между z^k на последовательных итерациях. Из третьего соотношения (7.21) находим, что

$$p^{k+1} = (x^{k+1} - x^k)/\alpha_{k+1}.$$

Подставим это представление p^{k+1} во второе соотношение (7.21)

$$\frac{x^{k+1} - x^k}{\alpha_{k+1}} - \beta_{k+1}\frac{x^k - x^{k-1}}{\alpha_k} = b - Ax^k.$$

Отсюда находим, что

$$\frac{z^{k+1} - z^k}{\alpha_{k+1}} - \beta_{k+1}\frac{z^k - z^{k-1}}{\alpha_k} + Az^k = 0.$$

Далее

$$z^1 = z^0 + \alpha_1 p^1 = z^0 + \alpha_1 r^0 = z^0 + \alpha_1 b = z^0 + \alpha_1 Ax = z^0 - \alpha_1 Az^0.$$

Тем самым (не путать P_k и $P_k(A)$),

$$z^k = P_k(A)z^0, \quad P_k(0) = 1$$

и

$$\|z^k\|_A = \|P_k(A)z^0\|_A.$$

Но по построению x^k и с учетом (7.22)

$$\|z^k\|_A = \min_{Q_k} \|Q_k(A)z^0\|_A, \quad Q_k(0) = 1$$

и, следовательно, для любого $Q_k(A)$

$$\begin{aligned}
&\|z^k\|_A \leqslant \|Q_k(A)z^0\|_A = \|Q_k(A)\, A^{1/2}z^0\|_2 \leqslant \|Q_k(A)\|\, \|z^0\|_A \leqslant \\
&\leqslant \max_{\lambda_1 \leqslant t \leqslant \lambda_n} |Q_k(t)| \|z^0\|_A = \max_{y\in[-1,1]} \left| Q_k\left(\frac{\lambda_n + \lambda_1}{2} - \frac{\lambda_n - \lambda_1}{2}y\right)\right| \|z^0\|_A = \\
&= \max_{y\in[-1,1]} \mid \hat{Q}_k(y) \mid \|z^0\|_A.
\end{aligned}$$

Если положить $\hat{Q}_k(y) = q_k T_k(y)$ (см. гл. 11), то

$$\|z^k\|_A \leqslant q_k \|z^0\|_A = \frac{2\rho_1^k}{1 + 2\rho_1^{2k}} \|z^0\|_A \leqslant 2\left(\frac{1 - \varkappa^{-1/2}}{1 + \varkappa^{-1/2}}\right)^k \|z^0\|_A.$$

Теорема доказана.

7.3 Вспомогательные утверждения

Чтобы описание метода сопряженных градиентов (7.21) было корректным, нужно доказать теорему 7.1 (о связи между двумя последовательными направлениями спуска). Для этого нам понадобится ряд вспомогательных утверждений.

Лемма 7.1. *Пусть $p^1, p^2, \ldots, p^k$ суть ненулевые A-сопряженные векторы. Тогда, либо существует ненулевой A-сопряженный к ним вектор p^{k+1}, удовлетворяющий условию* (7.8), *либо $r^k = 0$.*

Доказательство. Пусть не существует такого вектора p^{k+1}, A-сопряженного с $p^1, p^2, \ldots, p^k$, для которого выполнено условие (7.8), т.е. для любого вектора $p \perp \operatorname{im} AP_k$ (или $Ap \perp \operatorname{im} P_k$, или $Ap \in (\operatorname{im} P_k)^\perp$) справедлива цепочка равенств

$$0 = (\, r^k,\, p\,) = (b - Ax^k, p) = (b, p) = (Ax, p) = (Ap, x).$$

Тем самым, решение $x \in \operatorname{im} P_k$. Но x^k минимизирует $J(x)$ на $\operatorname{im} P_k$ и, следовательно, $x^k = x$, т.е. $r^k = 0$.

Отсюда же вытекает, что, если $r^k \neq 0$, то существует p^{k+1} из (7.19), для которого выполнено условие (7.8). Лемма доказана.

Замечание 7.3. Лемма 7.1 утверждает, что либо мы на k-ой итерации закончили вычисления, получив точное решение задачи (7.2), либо имеем возможность вычисления продолжить.

Теорема 7.3. *После k итераций метода сопряженных градиентов при каждом $j = 1, 2, \ldots, k$*

$$\begin{aligned} &\operatorname{span}\{p^1, p^2, \ldots, p^j\} = \operatorname{span}\{r^0, r^1, \ldots, r^{j-1}\} = \\ &= \mathcal{K}_j(A, b) := \operatorname{span}\{b, Ab, \ldots, A^{j-1}b\}. \end{aligned} \tag{7.23}$$

Доказательство проведем методом полной математической индукции по j. При $j = 1$ соотношения (7.23) имеют место, ибо в силу выбора (7.9) начального приближения $r^0 = b$, а из (7.18) $p^1 = r^0$. Предположим, что (7.23) справедливы при некотором j, удовлетворяющем неравенству $1 \leqslant j < k$. Докажем их справедливость при $j + 1$.

В качестве первого шага покажем, что

$$\operatorname{span}\{p^1, p^2, \ldots, p^{j+1}\} \subset \operatorname{span}\{r^0, r^1, \ldots, r^j\}. \tag{7.24}$$

В силу (7.17)

$$p^{j+1} = r^j_\perp = r^j - r^j_{\shortparallel}, \quad r^j_{\shortparallel} \in \operatorname{im}[AP_j]$$

и, следовательно,

$$p^{j+1} = r^j - AP_j y_j, \quad y_j \in \mathbb{R}^j. \tag{7.25}$$

Из третьего соотношения (7.21) вытекает, что

$$Ax^j = Ax^{j-1} + \alpha_j Ap^j.$$

Вычитая из обеих частей этого равенства по b, будем иметь

$$r^j = r^{j-1} - \alpha_j Ap^j \tag{7.26}$$

и, следовательно,

$$Ap^j = -(r^j - r^{j-1})/\alpha_j.$$

Подставляя это представление в (7.25), находим, что

$$p^{j+1} = r^j + \left[\frac{r^1 - r^0}{\alpha_1}\,\frac{r^2 - r^1}{\alpha_2}\dots\frac{r^j - r^{j-1}}{\alpha_j}\right] y_j = r^j + R_{j+1}\tilde{y}_j \in \operatorname{im} R_{j+1},$$

где $R_{j+1} = \left[r^0 r^1 \dots r^j\right]$, а $\tilde{y}_j \in \mathbb{R}^{j+1}$. Отсюда и из предположения индукции следует включение (7.24).

Теперь установим включение

$$\operatorname{span}\{r^0, r^1, \dots, r^j\} \subset \mathcal{K}_{j+1}(A, b). \tag{7.27}$$

По предположению индукции вектор $p^j \in \mathcal{K}_j(A, b)$. Поэтому

$$Ap^j \in \mathcal{K}_{j+1}(A, b).$$

Примем во внимание предположение индукции $r^{j-1} \in \mathcal{K}_j(A, b)$.Тогда из (7.26) найдем, что

$$r^j \in \mathcal{K}_{j+1}(A, b).$$

Вновь принимая во внимание предположение индукции, будем иметь желаемое включение (7.27).

Итак, вместо равенства (7.23) мы пока имеем только включения (7.24), (7.27) пространств, размерность каждого из которых не превышает $j+1$. Поскольку векторы $p^1, p^2, \dots, p^{j+1}$ ненулевые и A-сопряженные, то

$$\dim \operatorname{span}\{p^1, p^2, \dots, p^{j+1}\} = j + 1.$$

Отсюда и из включений (7.24), (7.27) следует искомое равенство (7.23).

Определение 7.1. Подпространства $\mathcal{K}_j(A, b)$ называются подпространствами Крылова.

Лемма 7.2. *После k итераций по методу сопряженных градиентов невязка r^j ортогональна всем векторам спуска $p^1, \ldots, p^j$, т.е.*

$$P_j^T r^j = 0, \quad j = 1, \ldots, k. \tag{7.28}$$

Доказательство. В силу (7.10) существует вектор $y_j \in \mathbb{R}^j$ такой, что $x^j = P_j y_j$. Поэтому

$$\begin{aligned} J(x^j) = J(P_j y_j) &= \frac{1}{2}(AP_j y_j, P_j y_j)_n - (b, P_j y_j)_n = \\ &= \frac{1}{2}[P_j y_j]^T [AP_j y_j] - [P_j y_j]^T b = \frac{1}{2} y_j^T P_j^T A P_j y_j - y_j^T P_j^T b = \\ &= \frac{1}{2}([P_j^T A P_j] y_j, y_j)_j - (P_j^T b, y_j)_j, \end{aligned}$$

т.е. y_j есть решение задачи минимизации с матрицей $P_j^T A P_j$ и вектором $P_j^T b$, и, следовательно, вектор y_j является решением следующей системы

$$[P_j^T A P_j] y_j = P_j^T b.$$

Отсюда

$$P_j^T r^j = P_j^T (b - Ax^j) = P_j^T (b - AP_j y_j) = 0.$$

Лемма доказана.

Теорема 7.4. *После k шагов метода сопряженных градиентов невязки $r^0, r^1, \ldots, r^k$ взаимно ортогональны.*

Доказательство. В силу теоремы 7.3

$$p^j \in \operatorname{span}\{r^0, r^1, \ldots, r^{j-1}\}.$$

Это означает, что p^1 выражается только через r^0, p^2 — только через r^0 и r^1 и т.д., т.е.

$$P_j = [p^1 p^2 \ldots p^j] = [r^0 r^1 \ldots r^{j-1}] U_j =: R_j U_j, \tag{7.29}$$

где U_j — верхняя треугольная $(j \times j)$-матрица.

Поскольку векторы $p^1, p^2, \ldots, p^j$ A-ортогональны, а в силу леммы 7.1 и ненулевые, то они линейно независимы. Тогда в силу теоремы 7.3 и

векторы $r^0, r^1, \ldots, r^{j-1}$ линейно независимы. Поэтому U_j — невырожденная матрица. Подставляя представление (7.29) матрицы P_j в (7.28), будем иметь

$$0 = U_j^T R_j^T r^j = U_j^T \left[(r^0, r^j)\,(r^1, r^j)\ldots(r^{j-1}, r^j)\right]^T.$$

Рассматривая это соотношение как систему линейных однородных уравнений относительно (r^i, r^j) с невырожденной матрицей, приходим к заключению, что $(r^i, r^j) = 0$ при $i \neq j$. Теорема доказана.

Мы теперь имеем все необходимое для того, чтобы доказать теорему 7.1, т.е.

$$p^{k+1} = r^k + \beta_{k+1} p^k. \tag{7.30}$$

Доказательство теоремы 7.1. В силу (7.17)

$$p^{k+1} = r_\perp^k = r^k - r_{\shortparallel}^k, \quad r_{\shortparallel}^k \in \operatorname{im} AP_k,$$

т.е.

$$p^{k+1} = r^k - \sum_{j=1}^{k} c_{k+1,j} A p^j.$$

Поскольку в силу теоремы 7.3 вектор $p^j \in \mathcal{K}_j(A, b)$, то

$$Ap^j \in \mathcal{K}_{j+1}(A, b), \tag{7.31}$$

а, снова используя теорему 7.3 находим, что $Ap^j \in \operatorname{span}\{p^1, p^2, \ldots, p^{j+1}\}$ и, следовательно,

$$p^{k+1} = r^k - \sum_{j=1}^{k+1} d_{k+1,j} p^j$$

или

$$(1 + d_{k+1,k+1}) p^{k+1} = r^k - \sum_{j=1}^{k} d_{k+1,j} p^j. \tag{7.32}$$

Коэффициент $(1 + d_{k+1,k+1})$ при p^{k+1} нулю не равен, ибо в противном случае

$$r^k = \sum_{j=1}^{k} d_{k+1,j} p^j = P_k [d_{k+1,1} d_{k+1,2} \ldots d_{k+1,k}]^T = P_k d_k$$

и с учетом леммы 7.2

$$\|r^k\|^2 = {r^k}^T r^k = {r^k}^T P_k d_k = ({r^k}^T P_k d_k)^T = {d_k}^T (P_k^T r^k) = 0,$$

т.е. $r^k = 0$, что в силу леммы 7.1 возможно лишь по завершении итераций.

Так как вектор p^{k+1} из (7.32) должен быть A-ортогонален векторам p^m, $m = 1, 2 \ldots, k$, то

$$(r^k, Ap^m) = \sum_{j=1}^{k} d_{k+1,j}(p^j, Ap^m) = d_{k+1,m}(p^m, Ap^m), \quad m = 1, \ldots, k,$$

и, следовательно

$$d_{k+1,m} = \frac{(r^k, Ap^m)}{(Ap^m, p^m)}, \quad m = 1, 2, \ldots, k. \tag{7.33}$$

Снова обращаясь к (7.31) и теореме 7.3, находим, что

$$Ap^m \in \operatorname{span}\{r^0, r^1, \ldots, r^m\},$$

т.е. $Ap^m = R_{m+1} l_{m+1}$, а по теореме 7.4

$$(r^k, Ap^m) = \sum_{i=0}^{m} l_{m+1,i}(r^k, r^i) = 0, \quad m = 1, 2, \ldots, k-1.$$

Следовательно,

$$d_{k+1,j} = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, k-1,$$

а (7.32) принимает вид

$$(1 + d_{k+1,k+1})p^{k+1} = r^k - d_{k+1,k}p^k,$$

где $d_{k+1,k}$ определяется соотношением (7.33) (ср. с (7.20)), что с точностью до длины вектора p^{k+1} (см. Замечание 7.2) совпадает с (7.19). Теорема доказана.

7.4 Окончательные соотношения

Преобразуем соотношения (7.21) метода сопряженных градиентов. В этих соотношениях наиболее трудоемкими являются две операции: вычисление векторов Ax^k и Ap^k. Однако операцию вычисления вектора Ax^k можно исключить. Поскольку этот вектор используется только при вычислении невязки r^k, то можно заменить первую из формул (7.21) на (7.26)

$$r^k = r^{k-1} - \alpha_k Ap^k, \quad k = 1, 2, \ldots, \quad r^0 = b. \tag{7.34}$$

Преобразуем еще формулы для вычисления параметров α_{k+1} и β_{k+1}. Подставляя второе из соотношений (7.21) в числитель четвертого и принимая во внимание лемму 7.2, найдем, что

$$\alpha_{k+1} = (r^k, r^k)/(p^{k+1}, Ap^{k+1}), \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{7.35}$$

Далее, заменяя здесь $k+1$ на k и подставляя полученное выражение для (p^k, Ap^k) в последнее из соотношений (7.21), будем иметь

$$\beta_{k+1} = -\alpha_k \frac{(Ap^k, r^k)}{(r^{k-1}, r^{k-1})}.$$

Теперь подставим сюда вместо Ap^k его выражение из (7.34). Принимая во внимание теорему 7.4 об ортогональности невязок, найдем, что

$$\beta_{k+1} = \frac{(r^k, r^k)}{(r^{k-1}, r^{k-1})}, \quad k = 1, 2, \ldots. \tag{7.36}$$

С учетом (7.34)-(7.36) формулы метода сопряженных градиентов (7.21) преобразуются к виду

$$\begin{aligned}
&r^k = r^{k-1} - \alpha_k A p^k, \quad k = 1, 2, \ldots, \quad r^0 = b - Ax_0,\\
&\beta_{k+1} = \|r^k\|^2 / \|r^{k-1}\|^2, \quad k = 1, 2, \ldots,\\
&p^{k+1} = r^k + \beta_{k+1} p^k, \quad k = 1, 2, \ldots, \quad p^1 = r^0,\\
&\alpha_{k+1} = \|r^k\|^2 / (p^{k+1}, Ap^{k+1}), \quad k = 0, 1, \ldots,\\
&x^{k+1} = x^k + \alpha_{k+1} p^{k+1}, \quad k = 0, 1, \ldots, \quad x^0 = 0.
\end{aligned} \tag{7.37}$$

Легко проверить, что вычисления можно проводить в следующем порядке

$$\begin{aligned}
&r^0 = b - Ax_0, \quad p^1 = r^0, \quad Ap^1, \quad \alpha_1, \quad x^1,\\
&r^1, \quad \beta_2, \quad p^2, \quad Ap^2, \quad \alpha_2, \quad x^2 \quad \ldots.
\end{aligned}$$

7.5 Метод сопряженных градиентов с предобуславливателем

Вновь обратимся к решению системы (7.2), но теперь для улучшения обусловленности матрицы системы домножим ее на B^{-1}, где $B = B^T > 0$. После этого система (7.2) примет вид

$$B^{-1}Ax = B^{-1}b.$$

Поскольку матрица этой системы, вообще говоря, не является симметричной, применять непосредственно к ней метод сопряженных градиентов нельзя. Нужно ее сначала преобразовать. Пусть $B = B^{1/2}B^{1/2}$, где $B^{1/2}$ — симметричная положительно определенная матрица — квадратный корень из B. Тогда

$$B^{-1/2}B^{-1/2}AB^{-1/2}B^{1/2}x = B^{-1/2}B^{-1/2}b.$$

Пусть

$$B^{1/2}x = y, \qquad B^{-1/2}b = f, \qquad B^{-1/2}AB^{-1/2} = C = C^T > 0. \tag{7.38}$$

Тогда для отыскания неизвестного вектора y получим систему

$$Cy = f,$$

к которой можно применить метод сопряженных градиентов (7.37), снабдив векторы невязки r^k и спуска p^k тильдами:

$$\begin{aligned}
\tilde{r}^k &= \tilde{r}^{k-1} - \alpha_k C\tilde{p}^k, \\
\tilde{p}^{k+1} &= \tilde{r}^k + \beta_{k+1}\tilde{p}^k, \\
y^{k+1} &= y^k + \alpha_{k+1}\tilde{p}^{k+1}, \\
\beta_{k+1} &= \frac{(\tilde{r}^k, \tilde{r}^k)}{(\tilde{r}^{k-1}, \tilde{r}^{k-1})}, \\
\alpha_{k+1} &= \frac{(\tilde{r}^k, \tilde{r}^k)}{(C\tilde{p}^{k+1}, \tilde{p}^{k+1})}.
\end{aligned} \tag{7.39}$$

Установим связь этих соотношений с (7.37). По определению и с учетом (7.38)

$$\tilde{r}^k = f - Cy^k = B^{-1/2}b - B^{-1/2}AB^{-1/2}B^{1/2}x^k = B^{-1/2}(b - Ax^k) = B^{-1/2}r^k. \tag{7.40}$$

Далее, векторы $\tilde{p}^m$ являются C-сопряженными, так что

$$\left(C\tilde{p}^k, \tilde{p}^j\right) = \left(B^{-1/2}AB^{-1/2}\tilde{p}^k, \tilde{p}^j\right) = \left(AB^{-1/2}\tilde{p}^k, B^{-1/2}\tilde{p}^j\right) = 0, \quad j \neq k,$$

и поэтому можно положить

$$B^{-1/2}\tilde{p}^k = p^k. \tag{7.41}$$

Из (7.40) и (7.41) вытекает, что соотношение для $\tilde{r}^k$ (7.39) эквивалентно соотношению для r^k в (7.37). Применяя матрицу $B^{-1/2}$ ко второму соотношению (7.39) и принимая во внимание (7.41), найдем, что

$$p^{k+1} = B^{-1}r^k + \beta_{k+1}p^k.$$

Положим

$$Bz^k = r^k. \tag{7.42}$$

Тогда соотношение для нахождения p^{k+1} примет вид

$$p^{k+1} = z^k + \beta_{k+1}p^k.$$

С учетом (7.38) и (7.41) находим, что третьи соотношения в (7.39) и (7.37) эквивалентны.

Осталось преобразовать формулы для β_k и α_k, выразив эти величины через r^k, p^k и z^k. С учетом (7.40) и (7.42)

$$\beta_{k+1} = \frac{(B^{-1/2}r^k, B^{-1/2}r^k)}{(B^{-1/2}r^{k-1}, B^{-1/2}r^{k-1})} = \frac{(B^{-1}r^k, r^k)}{(B^{-1}r^{k-1}, r^{k-1})} = \frac{(z^k, r^k)}{(z^{k-1}, r^{k-1})},$$

а

$$\alpha_{k+1} = \frac{(z^k, r^k)}{(Ap^{k+1}, p^{k+1})}.$$

В новых терминах соотношения (7.39) принимают вид

$$\begin{aligned}
&r^k = r^{k-1} - \alpha_k A p^k,\\
&p^{k+1} = z^k + \beta_{k+1} p^k,\\
&x^{k+1} = x^k + \alpha_{k+1} p^{k+1},\\
&Bz^k = r^k,\\
&\beta_{k+1} = \frac{(z^k, r^k)}{(z^{k-1}, r^{k-1})},\\
&\alpha_{k+1} = \frac{(z^k, r^k)}{(Ap^{k+1}, p^{k+1})}.
\end{aligned}$$

7.6 Неполное разложение разреженных матриц

Одним из способов задания предобуславливателя в методе сопряженных градиентов является использование матрицы неполного разложения Холецкого. Здесь мы опишем чуть более общий алгоритм неполного LU разложения (ILU-алгоритм).

Определение 7.2. Портретом разреженной матрицы A называется множество пар индексов (i, j) таких, что $a_{ij} \neq 0$, т.е.

$$P_A := \left\{(i, j) \;\middle|\; a_{ij} \neq 0\right\}.$$

Для матрицы A строится разложение

$$A = LU + R$$

такое, что

- $P_U \subset P_A, \quad P_L \subset P_A.$
- $\forall (i,j) \in P_A : \quad [LU]_{ij} = [A]_{ij}.$
- $P_A \bigcap P_R = \varnothing.$

Покажем, как это разложение можно построить. Предположим, что уже найдены $k-1$ строк матриц L и U в неполном разложении и требуется найти k-е строки. Если

$$A = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}, \qquad U = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix}, \qquad R = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \end{bmatrix}, \qquad \text{а} \quad L = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix},$$

где матрицы A_1, U_1 и R_1 имеют по k строк и n столбцов, а L_{11} — квадратная $(k \times k)$ матрица, то из

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \end{bmatrix}$$

следует, что

$$A_1 = L_{11} U_1 + R_1.$$

Перепишем это соотношение в виде

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ \bar{a}_{21} & \bar{a}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{L}_{11} & 0 \\ \bar{l}_{21} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & \bar{u}_{22} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ \bar{r}_{21} & \bar{r}_{22} \end{bmatrix},$$

где надчеркнутыми строчными буквами обозначены строки соответствующей длины. Из равенства матриц в левой и правой частях следует, что искомые строки $\bar{l}_{21}$ и $\bar{u}_{22}$ должны удовлетворять уравнениям

$$\begin{aligned} \bar{l}_{21} U_{11} &= \bar{a}_{21} - \bar{r}_{21}, \\ \bar{u}_{22} &= \bar{a}_{22} - \bar{l}_{21} U_{12} - \bar{r}_{22}. \end{aligned}$$

Согласно формуле (1.19) для элементов нижней треугольной матрицы L из LU-разложения

$$l_{kj} = \frac{1}{u_{jj}} \left[a_{kj} - r_{kj} - \sum_{i=1}^{j-1} l_{ki} u_{ij} \right].$$

Если $a_{kj} = 0$, то $l_{kj} = 0$, и это соотношение определяется r_{kj}. В противном случае, т.е. при $a_{kj} \neq 0$ элемент $r_{kj} = 0$, и эта формула работает обычным образом.

Аналогично имеем

$$u_{kj} = a_{kj} - r_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki} u_{ij}.$$

Искомые элементы строки $\bar{u}_{22}$ находятся из этого соотношения при помощи тех же рассуждений, что и выше.

III

Задача на собственные значения

8

Степенной метод и обратные итерации

8.1 Постановка задачи

Пусть A — квадратная матрица с действительными или комплексными коэффициентами, и требуется найти собственные векторы и собственные значения этой матрицы. Напомним

Определение 8.1. Число λ назывется *собственным значением* матрицы A, если однородная система

$$A\xi = \lambda\xi \tag{8.1}$$

имеет нетривиальное решение $\|\xi\| \neq 0$. Это нетривиальное решение называется *собственным вектором* матрицы A, отвечающим собственному значению λ.

Собственные значения являются нулями *характеристического многочлена*

$$\det\left[A - \lambda I\right] = 0,$$

степень которого совпадает с порядком матрицы и есть n. Тем самым, у каждой квадратной матрицы существует n собственных значений, действительных или комплексных, простых или кратных. С собственными векторами ситуация сложнее: их число может быть от 1 до n.

Определение 8.2. *Матрицы* A и B называются *подобными,* если существует невырожденная матрица S (матрица подобия) такая, что $B = S^{-1}AS$. Матрицы A и B называются унитарно (ортогонально) подобными, если матрица S унитарная (ортогональная).

Подобные матрицы имеют одинаковый набор собственных значений. Если y — собственный вектор матрицы B, подобной A, то собственный вектор матрицы A имеет вид

$$x = Sy.$$

Теорема 8.1 (Каноническая форма Жордана). *Любая матрица A преобразованием подобия $S^{-1}AS$ с подходящей матрицей подобия S может быть приведена к нормальной (жордановой) форме, т.е. к такой двухдиагональной матрице, у которой на главной диагонали стоят собственные значения, а на наддиагонали — числа ноль или единица*

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & \sigma_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \sigma_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \sigma_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_{n-1} & \sigma_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix}.$$

Теорема 8.2 (Каноническая форма Шура). *Для произвольной матрицы $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ найдется унитарная матрица Q и верхнетреугольная матрица T такие, что $Q^H AQ = T$. Собственными значениями матрицы A являются диагональные элементы матрицы T.*

Теорема 8.3 (Вещественная каноническая форма Шура). *Для любой матрицы $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ существует ортогональная матрица $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ такая, что*

$$Q^T AQ = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & \dots & R_{1n} \\ 0 & R_{22} & \dots & R_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & R_{nn} \end{bmatrix},$$

где каждый блок R_{ii} является либо действительным числом, либо матрицей второго порядка, имеющей комплексно сопряженные собственные значения.

Определение 8.3. Матрица A называется матрицей простой структуры (или диагонализуемой), если ее жордановой формой является диагональная матрица.

- Матрица простой структуры имеет ровно n линейно независимых собственных векторов. Про такую матрицу еще говорят, что она имеет полный набор собственных векторов.

- Если все собственные значения матрицы A различны, то она заведомо имеет простую структуру.

- Симметричная матрица имеет простую структуру, и поэтому у нее имеется n линейно-независимых собственных векторов. Ее собственные векторы, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны в смысле обычного скалярного произведения

$$y^T x = (x, y) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i,$$

  а собственные векторы, отвечающие кратному собственному значению (собственному значению кратности m отвечает m линейно-независимых собственных векторов), могут быть ортогонализированы.

- Матрица A^T имеет те же собственные значения, что и матрица A, а собственные векторы ξ_i и η_j матриц A и A^T, соответственно, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны (образуют биортогональную систему). Векторы ξ_i иногда называют правыми собственными векторами матрицы A, а η_j — левыми, ибо $\eta_j^T A = \lambda \eta_j^T$.

- Собственные векторы матриц A и A^{-1} совпадают, а собственные значения связаны соотношением $\lambda_i(A^{-1}) = \lambda_i^{-1}(A)$.

- Собственные векторы матриц A и $B = A + \alpha I$ совпадают, а собственные значения связаны соотношениями $\lambda_i(B) = \lambda_i(A) + \alpha$.

- Число

$$r(x) = \frac{(Ax, x)}{\|x\|_2^2}, \qquad x \in \mathbb{R}^n$$

  называется *отношением Релея*. Если $x = \xi_i$, где ξ_i — собственный вектор матрицы A, то отношение Релея равно собственному значению, отвечающему этому собственному вектору

$$\lambda_i = \frac{(A\xi_i, \xi_i)}{\|\xi_i\|^2}.$$

Задача нахождения всех собственных значений и собственных векторов называется полной проблемой собственных значений. Эта проблема в общем случае довольно сложна.

Наряду с полной проблемой собственных значений существуют частичные проблемы собственных значений, отыскание решений которых много проще.

К последним относятся:

1) Задача отыскания максимального или минимального по модулю собственного значения и, быть может, отвечающего ему собственного вектора.

2) Задача отыскания двух наибольших по модулю собственных значений и соответствующих собственных векторов.

3) Задача отыскания собственного значения, наиболее близкого к заданному числу.

Этими задачами мы сначала и займемся.

8.2 Степенной метод

Степенной метод хорошо подходит для приближенного вычисления экстремальных собственных значений матрицы, т.е. собственных значений, имеющих наибольший или наименьший модуль, равно как и отвечающих им собственных векторов.

8.2.1 Нахождение максимального по модулю собственного значения

Пусть матрица $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ является диагонализуемой. Это, в частности, означает, что матрица A имеет n линейно независимых собственных векторов, совокупность которых образует базис в $\mathbb{C}^n$. Будем считать, что эти векторы нормированы, и будем обозначать их через ξ_i, $i = 1, \ldots, n$. Предположим также, что собственные значения λ_i матрицы A, которым отвечают собственные векторы ξ_i, упорядочены в порядке убывания их модулей, причем максимальный модуль имеет только одно собственное значение λ_1, т.е.

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geqslant |\lambda_3| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_n|. \tag{8.2}$$

В этом случае λ_1 называется *доминирующим собственным значением.*

Замечание 8.1. При выполнении условий (8.2) *собственное значение* λ_1 *является действительным.*

Степенным методом называется следующий итерационный процесс: начиная с произвольного начального вектора единичной евклидовой длины $\xi^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, строятся последовательности

$$\begin{gathered} x^{(k)} = A\xi^{(k-1)}, \\ \xi^{(k)} = x^{(k)}/\|x^{(k)}\|_2, \\ \lambda^{(k)} = \left[\xi^{(k)}\right]^T A\xi^{(k)}, \qquad k = 1, 2, \ldots. \end{gathered} \tag{8.3}$$

Изучим вопрос о сходимости метода (8.3). Из первых двух соотношений (8.3) при $k = 1$ следует, что

$$\xi^{(1)} = A\xi^{(0)}/\|A\xi^{(0)}\|_2,$$

а индукцией по k находим, что

$$\xi^{(k)} = \frac{A^k\xi^{(0)}}{\|A^k\xi^{(0)}\|_2}, \qquad k = 1, 2, \ldots, . \tag{8.4}$$

Это соотношение объясняет роль степеней A в изучаемом методе.

Разложим вектор $\xi^{(0)}$ по базису ξ_i, $i = 1, 2, \ldots, n$

$$\xi^{(0)} = \sum_{i=1}^{n} c_i\xi_i, \qquad c_i \in \mathbb{C}, \qquad i = 1, 2, \ldots, n \tag{8.5}$$

и предположим, что

$$c_1 \neq 0. \tag{8.6}$$

Поскольку $A\xi_i = \lambda_i\xi_i$, то

$$\begin{gathered} A^k\xi^{(0)} = \sum_{i=1}^{n} c_i\lambda_i^k\xi_i = c_1\lambda_1^k\left(\xi_1 + \sum_{i=2}^{n}\frac{c_i}{c_1}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k\xi_i\right) = \\ = c_1\lambda_1^k\left(\xi_1 + \zeta^{(k)}\right), \end{gathered} \tag{8.7}$$

где

$$\zeta^{(k)} = \sum_{i=2}^{n}\frac{c_i}{c_1}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k\xi_i. \tag{8.8}$$

Так как в силу (8.2) $|\lambda_i/\lambda_1| < 1$ для $i = 2, 3, \ldots, n$, то при возрастании k вектор $A^k\xi^{(0)}$ (а с ним вместе и вектор $\xi^{(k)}$ из (8.4)) будет стремиться принять направление собственного вектора ξ_1, в то время как компоненты

разложения по другим направлениям ξ_i будут убывать. Используя (8.4) и (8.7), получим

$$\xi^{(k)} = \frac{c_1\lambda_1^k\left(\xi_1+\zeta^{(k)}\right)}{\|c_1\lambda_1^k(\xi_1+\zeta^{(k)})\|_2} = \pm\frac{\xi_1+\zeta^{(k)}}{\|\xi_1+\zeta^{(k)}\|_2}. \tag{8.9}$$

Имеет место

Теорема 8.4. *Пусть $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ — диагонализуемая матрица, собственные значения которой подчиняются условиям* (8.2). *Тогда, если выполнено условие* (8.6), *то существует постоянная $c > 0$ такая, что*

$$\| \pm \xi^{(k)} - \xi_1\|_2 + |\lambda^{(k)} - \lambda_1| \leqslant c\,|\lambda_2/\lambda_1|^k, \qquad k \geqslant 1, \tag{8.10}$$

где $\xi^{(k)}$ и $\lambda^{(k)}$ определяются соотношениями (8.3).

Доказательство. Из (8.9) следует, что

$$\pm\xi^{(k)} - \xi_1 = \frac{\xi_1+\zeta^{(k)}}{\|\xi_1+\zeta^{(k)}\|_2} - \xi_1 = \frac{1-\|\xi_1+\zeta^{(k)}\|_2}{\|\xi_1+\zeta^{(k)}\|_2}\xi_1 + \frac{\zeta^{(k)}}{\|\xi_1+\zeta^{(k)}\|_2}.$$

Поскольку в силу неравенства треугольника

$$\|\xi_1\|_2 - \|\zeta^{(k)}\|_2 \leqslant \|\xi_1+\zeta^{(k)}\|_2 \leqslant \|\xi_1\|_2 + \|\zeta^{(k)}\|_2,$$

а $\|\xi_1\|_2 = 1$, то

$$\left|\, 1 - \|\xi_1+\zeta^{(k)}\|_2 \,\right| \leqslant \|\zeta^{(k)}\|_2.$$

Вновь используя неравенство треугольника, находим, что

$$\| \pm \xi^{(k)} - \xi_1\|_2 \leqslant 2\frac{\|\zeta^{(k)}\|_2}{\|\xi_1+\zeta^{(k)}\|_2}.$$

Наконец, из (8.2),(8.6) и (8.8) следует, что

$$\|\zeta^{(k)}\|_2 \leqslant \sum_{i=2}^{n} |c_i/c_1|\,|\lambda_2/\lambda_1|^k,$$

а эта оценка вместе с предыдущей приводит к оценке

$$\| \pm \xi^{(k)} - \xi_1\|_2 \leqslant c\,|\lambda_2/\lambda_1|^k. \tag{8.11}$$

Далее, в силу (8.11)

$$\xi^{(k)} = \pm\xi_1 + O(|\lambda_2/\lambda_1|^k)$$

и, следовательно,

$$\lambda^{(k)} = [\xi^{(k)}]^T A\xi^{(k)} = \lambda_1 + O(|\lambda_2/\lambda_1|^k).$$

Теорема доказана.

Теорема 8.5. *Пусть A —действительная симметричная матрица, собственные значения которой подчинены условиям* (8.2). *Тогда*

$$|\lambda_1 - \lambda^{(k)}| \leqslant (|\lambda_1| + |\lambda_n|)\mathrm{tg}^2\theta|\lambda_2/\lambda_1|^{2k},$$

где $\lambda^{(k)}$ определяется соотношениями (8.3), *а θ — угол между векторами $\xi^{(0)}$ и ξ_1.*

Доказательство. В силу симметрии матрицы A ее собственные векторы ξ_i, $i = 1, 2, \ldots, n$ ортогональны. Поэтому вектор ξ_1 ортогонален вектору $\zeta^{(k)}$ из (8.8) равно как и вектору $A\zeta^{(k)}$. В силу сказанного и с учетом (8.9), соотношение (8.3) принимает вид

$$\lambda^{(k)} = \frac{[\xi_1 + \zeta^{(k)}]^T A[\xi_1 + \zeta^{(k)}]}{[\xi_1 + \zeta^{(k)}]^T[\xi_1 + \zeta^{(k)}]} = \frac{\lambda_1 + [\zeta^{(k)}]^T A[\zeta^{(k)}]}{1 + [\zeta^{(k)}]^T[\zeta^{(k)}]},$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned}
&\mid \lambda_1 - \lambda^{(k)} \mid = \frac{\mid [\zeta^{(k)}]^T A[\zeta^{(k)}] - \lambda_1[\zeta^{(k)}]^T[\zeta^{(k)}] \mid}{1 + \|\zeta^{(k)}\|_2^2} = \\
&= \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^{2k} \frac{\sum_{i=2}^n (c_i/c_1)^2 (\lambda_i/\lambda_2)^{2k} |\lambda_i - \lambda_1|}{1 + \|\zeta^{(k)}\|_2^2} \leqslant \\
&\leqslant (|\lambda_1| + |\lambda_n|) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k} \frac{\sum_{i=2}^n c_i^2}{c_1^2} = (|\lambda_1| + |\lambda_n|) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k} \frac{1 - c_1^2}{c_1^2},
\end{aligned}$$

ибо вектор $\xi^{(0)}$, коэффициенты разложения по базису ξ_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, которого являются числа c_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, нормирован. Но

$$c_1 = \xi_1^T \xi^{(0)} = \cos\,\theta,$$

что и завершает доказательство теоремы.

Замечание 8.2. Если условие $c_1 = 0$ не выполнено (априори проверить это условие нельзя), то это еще не значит, что итерационный процесс (8.3) с начальным приближением (8.5) не приведет к результату. При достаточно большом числе итераций за счет ошибок округления может появиться ненулевая компонента c_1, и итерационный процесс выйдет в конце концов на нужное решение. Но при этом нужно иметь в виду, что если $|\lambda_3| \ll |\lambda_2|$, то итерации очень быстро выйдут на второе собственное значение и второй собственный вектор, и можно обмануться, приняв их за искомые величины. Это не так вероятно, если $|\lambda_2|$ и $|\lambda_3|$ не слишком сильно различаются, а требуемая точность достаточно велика. Итерации

в этом случае будут сходиться достаточно медленно, и их потребуется много для получения требуемой точности. За это время погрешности округления накопятся, и может сформироваться новая точка притяжения итерационного процесса — (λ_1, ξ_1). Если нет уверенности в правильности найденного собственного значения, следует провести еще один или несколько расчетов с другими начальными приближениями.

Замечание 8.3. 1) Подтверждением того, что λ_1 не является кратным собственным значением, и что нет собственного значения $(-\lambda_1)$, служит сходимость итерационного процесса к одному и тому же собственному вектору при различных начальных приближениях.

2) Если при различных начальных векторах $\xi^{(0)}$ значения $\lambda^{(k)}$ сходятся к одному и тому же числу, а последовательности векторов $\xi^{(k)}$ приводят к неколлинеарным векторам, то это обстоятельство служит подтверждением того, что максимальное по модулю собственное значение является кратным. Если требуется найти собственное подпространство, или нужно определить кратность найденного собственного значения, нужно проводить вычисления с различными начальными приближениями до тех пор, пока перестанут получаться векторы, линейно-независимые с уже найденными.

8.2.2 Пример

Применим степенной метод для отыскания максимального по модулю собственного значения матрицы

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

В качестве начального приближения возьмем вектор $x^{(0)} = [0, 1]^T$. Тогда

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix},$$
$$x^{(3)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}, \ldots$$

Очевидно, что $x^{(k)} = [k\,(-k+1)]^T$, $x^{(k+1)} = [(k+1)\,(-k)]^T$. Тогда $(x^{(k)}, x^{(k)}) = 2k^2 - 2k + 1$, $(x^{(k)}, x^{(k+1)}) = 2k^2$, и, следовательно,

$$\lambda^{(k+1)} = \frac{2k^2}{2k^2(1 - 1/k + O(k^{-2}))} = 1 + \frac{1}{k} + O\left(\frac{1}{k^2}\right).$$

Сходимость к собственному значению $\lambda = 1$ очень медленна и не похожа на ту, которую мы имели в теореме 8.4.

Выясним, с чем это связано. Решая задачу на собственные значения, находим, что рассматриваемая матрица имеет двукратное собственное значение $\lambda = 1$, которому отвечает единственный собственный вектор $[1, -1]^T$. Тем самым, эта матрица не является матрицей простой структуры, как это было в теореме 8.4, а ее жордановой формой является клетка порядка два. Приведенный пример показывает, что степеной метод не отказывается работать и в том случае, когда максимальному по модулю кратному собственному значению отвечает жорданова клетка, но скорость сходимости резко падает от скорости сходимости геометрической прогрессии к скорости сходимости гармонического ряда.

8.2.3 Нахождение второго по величине модуля собственного значения

Пусть

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_n|.$$

Будем считать, что λ_1, ξ_1 и η_1 ($A^T\eta_1 = \lambda_1\eta_1$) известны, причем $\|\xi_1\| = 1$, $(\eta_1, \xi_1) = 1$. Найти λ_1, ξ_1 и η_1 можно описанным выше способом. Пусть $x^{(0)}$ — произвольный вектор, такой, что $(x^{(0)}, \eta_2) \neq 0$. Тогда

$$x^{(0)} = c_1\xi_1 + c_2\xi_2 + \cdots + c_n\xi_n, \quad c_1 = (x^{(0)}, \eta_1), \quad c_2 \neq 0.$$

Построим вектор

$$y^{(0)} = x^{(0)} - (x^{(0)}, \eta_1)\xi_1 = c_2\xi_2 + c_3\xi_3 + \cdots + c_n\xi_n$$

и вектор

$$\xi_2^{(0)} = y^{(0)}/\|y^{(0)}\|_2.$$

Итерационный процесс будем осуществлять по формулам

$$\begin{aligned}
x^{(k)} &= A\xi^{(k-1)},\\
y^{(k)} &= x^{(k)} - (x^{(k)}, \eta_1)\xi_1,\\
\xi_2^{(k)} &= y^{(k)}/\|y^{(k)}\|_2,\\
\lambda_2^{(k)} &= \xi_2^{(k)T} A\, \xi_2^{(k)}.
\end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned}
\lambda_2^{(k)} &= \lambda_2 + O(|\lambda_3/\lambda_2|^k),\\
\xi_2^{(k)} &= \pm\xi_2 + O(|\lambda_3/\lambda_2|^k).
\end{aligned}$$

8.3 Обратные итерации

В этом разделе мы будем искать приближения к собственному значению матрицы $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, которое является ближайшим к заданному числу $\mu \in \mathbb{R}$, где $\mu \notin \sigma(A)$. Для этого степенной метод (8.3) следует применить к матрице $M_\mu^{-1} := (A - \mu I)^{-1}$, определив так называемые *обратные итерации*. Число μ здесь называется *сдвигом*.

Собственные значения матрицы M_μ^{-1} суть $\mu_i = (\lambda_i - \mu)^{-1}$. Предположим, что существует такое целое число m, что

$$|\lambda_m - \mu| < |\lambda_i - \mu| \quad \forall\, i = 1, 2, \ldots, n, \quad i \neq m. \tag{8.12}$$

Это означает, что собственное значение λ_m, ближайшее к μ, является единственным собственным значением с таким свойством. Более того, (8.12) показывает, что μ_m есть собственное значение M_μ^{-1} с наибольшим модулем; в частности, если $\mu = 0$, то λ_m превращается в собственное значение A с минимальным модулем.

По заданному произвольному начальному вектору $\xi^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ единичной евклидовой длины построим последовательности

$$\begin{aligned} &(A - \mu I)y^{(k)} = \xi^{(k-1)}, \\ &\xi^{(k)} = y^{(k)}/\|y^{(k)}\|_2, \\ &\lambda^{(k)} = \left[\xi^{(k)}\right]^T A \left[\xi^{(k)}\right]. \end{aligned} \tag{8.13}$$

Заметим, что собственные векторы матрицы M_μ те же самые, что и у матрицы A. Поэтому отношение Релея вычисляется по матрице A (а не по матрице M_μ^{-1}). Основное отличие от метода (8.3) состоит в том, что на каждом шаге k нужно решать линейную систему с матрицей M_μ. Вычислительные затраты состоят из однократной LU факторизации матрицы M_μ стоимостью $O(n^3)$ действий при $k = 1$ и решения на каждом шаге двух систем с треугольными матрицами с затратами $O(n^2)$ действий.

Хотя этот метод более дорогой, чем степенной метод (8.3), обратные итерации позволяют найти приближение к любому собственному значению матрицы A (ближайшему к сдвигу μ).

8.4 Итерации с отношением Рэлея

Будем предполагать, что матрица A является не только действительной, но и симметричной. Это предположение обеспечивает действительность

собственных значений и ортогональность собственных векторов, которые мы будем предполагать нормированными.

Обратимся к отношению Рэлея

$$r(x) = \frac{x^T Ax}{x^T x}$$

и покажем, что собственные векторы ξ_j матрицы A являются стационарными точками функции $r(x)$, т.е. $\operatorname{grad} r(x) \big|_{x=\xi_j} = 0$. Дифференцируя $r(x)$ по x_j, находим, что

$$\begin{aligned}
\frac{\partial r(x)}{\partial x_j} &= \frac{\partial/\partial x_j (x^T Ax)}{x^T x} - \frac{(x^T Ax)\partial/\partial x_j (x^T x)}{(x^T x)^2} = \\
&= 2\,\frac{(Ax)_j}{x^T x} - \frac{(x^T Ax)2x_j}{(x^T x)^2} = \frac{2}{x^T x}\left(Ax - \frac{x^T Ax}{x^T x}x\right)_j = \\
&= \frac{2}{x^T x}\,(Ax - r(x)x)_j\,.
\end{aligned}$$

Собирая эти производные в n-мерный вектор, получим градиент $r(x)$, который будем обозначать как $\nabla r(x)$. Имеем

$$\nabla r(x) = \frac{2}{x^T x}\big(Ax - r(x)x\big).$$

Как было уже замечено, $r(\xi_j) = \lambda_j$ и, следовательно,

$$\nabla r(\xi_j) = 0.$$

Пусть вектор x является приближением к собственному вектору ξ_j. Оценим близость $r(x)$ к собственному значению λ_j. Поскольку $r(x)$ является гладкой функцией x всюду, кроме $x = 0$, то, раскладывая $r(x)$ в точке ξ_j по формуле Тейлора, найдем, что

$$r(x) = r(\xi_j) + \left(\nabla r(\xi_j)\right)^T (x - \xi_j) + O(\|x - \xi_j\|^2).$$

Поэтому

$$|r(x) - \lambda_j| = O(\|x - \xi_j\|^2).$$

Этот факт уже был отмечен в теореме 8.5.

Алгоритм итераций с отношением Рэлея базируется на обратных итерациях, где для улучшения сходимости на каждой итерации используется новый сдвиг — найденное на предыдущем шаге приближение к собственному значению.

Начиная с произвольного начального вектора $\xi^{(0)}$ единичной длины находится число

$$\lambda^{(0)} = \left(\xi^{(0)}\right)^T A\xi^{(0)},$$

и для $k = 1, 2, \ldots$ решается система

$$(A - \lambda^{(k-1)} I)w = \xi^{(k-1)},$$

решение которой нормируется

$$\xi^{(k)} = w/\|w\|$$

и подставляется в отношение Рэлея

$$\lambda^{(k)} = (\xi^{(k)})^T A\xi^{(k)}.$$

Теорема 8.6. *Итерации с отношением Рэлея сходятся к собственной паре (λ_j, ξ_j) для почти всех начальных векторов $\xi^{(0)}$. В малой окрестности (λ_j, ξ_j) эта сходимость кубичная, т.е. при $k \to \infty$*

$$\|\xi^{(k+1)} - (\pm)\xi_j\| = O\left(\|\xi^{(k)} - (\pm)\xi_j\|^3\right)$$

и

$$\left|\ \lambda^{(k+1)} - \lambda_j\ \right| = O\left(\left|\ \lambda^{(k)} - \lambda_j\ \right|^3\right).$$

Пример 8.1. Рассмотрим симметричную матрицу

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 4 \end{bmatrix}$$

и пусть $v^{(0)} = [1\,1\,1]^T/\sqrt{3}$ — начальный вектор. Три последовательные итерации с отношением Рэлея дает следующие приближения к собственному значению

$$\lambda^{(0)} = 5, \quad \lambda^{(1)} = 5.2131\ldots, \quad \lambda^{(2)} = 5.214319743184.$$

Действительная величина собственного значения, отвечающего собственному вектору, ближайшему к $v^{(0)}$ есть $\lambda = 5.214319743377$. Тем самым, после всего лишь трех итераций с отношением Рэлея мы получили результат с десятью верными знаками.

В рассматриваемом методе при отыскании очередного приближения к собственному вектору приходится решать систему все более близкою к вырожденной, т.е. плохо обусловленной. Как следует из предыдущего анализа, решение систем с плохо обусловленными матрицами, вообще говоря, не может быть слишком успешным. Выясним, к каким негативным последствиям это может привести в рассматриваемом нами случае.

Пусть μ — число очень близкое к одному из изолированных собственных значений матрицы A. Обозначим это число через λ_j и рассмотрим систему

$$(A - \mu I)x = b, \tag{8.14}$$

где b — некоторый вектор. Разложим векторы b и x по собственным векторам матрицы A

$$b = \sum_{j=1}^{n} d_j \xi_j, \qquad x = \sum_{j=1}^{n} c_j \xi_j.$$

Подставляя эти разложения в (8.14), найдем, что

$$c_j = d_j/(\lambda_j - \mu),$$

и, следовательно,

$$x = \sum_{j=1}^{n} \frac{d_j}{\lambda_j - \mu}\xi_j = \frac{d_J}{\lambda_J - \mu}\xi_J + \sum_{j \neq J} \frac{d_j}{\lambda_j - \mu}\xi_j.$$

Поскольку $\sum_{j \neq J} |d_j/(\lambda_j - \mu)| = O(1)$, то ортогональная к ξ_J составляющая правой части b практически не оказывает влияние на решение $x = O((\lambda_J - \mu)^{-1})$, которое сосредоточено около вектора ξ_J. То же самое происходит с погрешностью, если система решается устойчивым методом: почти вся погрешность (большая) сосредоточена вдоль вектора ξ_J. Поскольку нас интересует не сам вектор x, а лишь направление, которое он задает, то, принимая во внимание, что $\|x\| = |d_J/(\lambda_J - \mu)| + O(1)$, находим, что

$$x/\|x\| = \pm\xi_J + O(\lambda_J - \mu)$$

даже для произвольного вектора b.

9

QR - алгоритм

В этом разделе мы рассмотрим некоторую технику нахождения *всех* собственных значений матрицы A. Основная идея, которая здесь используется, состоит в сведении матрицы A при помощи подходящих преобразований подобия к форме, для которой вычисление собственных значений проще, чем для исходной матрицы.

Метод, о котором пойдет речь, есть QR-алгоритм. Здесь он будет рассмотрен только для случая действительных матриц.

Для заданной ортогональной матрицы Q_0, начиная с $A_0 = Q_0^T A Q_0$, где $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, построить последовательность

$$A_k = R_k Q_k, \qquad k = 1, 2, \ldots, \tag{9.1}$$

где R_k и Q_k — матрицы из QR разложения матрицы

$$A_{k-1} = Q_k R_k. \tag{9.2}$$

Для каждого шага k первая стадия итерации состоит в факторизации матрицы A_{k-1}, т.е. в представлении ее в виде произведения ортогональной матрицы Q_k и верхней треугольной матрицы R_k. Вторая стадия — простое перемножение матриц.

В силу того, что

$$\begin{aligned} A_k &= R_k Q_k = \left(Q_k^T Q_k\right) R_k Q_k = Q_k^T [Q_k R_k] Q_k = Q_k^T A_{k-1} Q_k = \\ &= [Q_0 Q_1 \ldots Q_k]^T A [Q_0 Q_1 \ldots Q_k], \end{aligned}$$

каждая матрица A_k ортогонально подобна A.

Обратимся к исследованию сходимости QR - алгоритма. Для этого сначала заметим, что, если матрица A — невырожденная, то невырождены

и все A_k, и в силу теоремы 2.1 о QR - факторизации можно считать, что все матрицы R_k имеют положительные главные диагонали и каждая QR - факторизация определяется однозначно.

Далее, пусть

$$Q_0 Q_1 \dots Q_k =: P_k$$

и, следовательно,

$$A_k = P_k^T A P_k. \tag{9.3}$$

Пусть также

$$R_k R_{k-1} \dots R_1 = U_k.$$

В силу вышесказанного при $\det A \neq 0$ у U_k главная диагональ положительна. Преобразуем произведение

$$P_k U_k = Q_1 \dots Q_{k-1} Q_k R_k R_{k-1} \dots R_1 = P_{k-1}(Q_k R_k) U_{k-1} = P_{k-1} A_{k-1} U_{k-1}.$$

Используя (9.3) с $k-1$ вместо k, найдем, что

$$P_k U_k = P_{k-1} P_{k-1}^T A P_{k-1} U_{k-1} = A(P_{k-1} U_{k-1}) = A \cdot A(P_{k-2} U_{k-2}) = \dots = A^k.$$

Тем самым,

$$A^k = P_k U_k. \tag{9.4}$$

Это есть QR - факторизация матрицы A^k, и, если $\det A \neq 0$, то в силу теоремы 2.1 и сделанного замечания относительно диагональных элементов U_k, она единственна.

Прежде чем приступать к анализу QR-алгоритма, сформулируем одну вспомогательную лемму.

Лемма 9.1. *Если D — невырожденная диагональная матрица, а L — нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю, то*

$$DLD^{-1} = I + B,$$

где

$$b_{ij} = \begin{cases} \ell_{ij} d_i / d_j & i > j, \\ 0 & i \leqslant j. \end{cases}$$

Упражнение 9.1. Доказать лемму 9.1.

Теорема 9.1 (О сходимости QR-алгоритма). *Пусть $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ есть матрица простой структуры, т. е. ее можно представить в виде*

$$A = X \Lambda X^{-1}, \tag{9.5}$$

где $\Lambda = \operatorname{diag}\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\}$ *— диагональная матрица собственных значений* A*, а* X *— матрица, составленная из ее нормированных собственных векторов. Если*

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| > 0, \tag{9.6}$$

а $X^{-1} = Y$ *допускает* LU *- факторизацию*

$$Y = L_y U_y, \tag{9.7}$$

то последовательность A_k *из* (9.1) *в* QR *- алгоритме такова, что*

$$\lim_{k\to\infty} (a_k)_{ii} = \lambda_i, \quad 1 \leqslant i \leqslant n,$$
$$\lim_{k\to\infty} (a_k)_{ij} = 0, \quad 1 \leqslant j < i \leqslant n.$$

Доказательство. Имеем

$$A^k = X\Lambda^k X^{-1} = X\Lambda^k L_y U_y = X\left(\Lambda^k L_y \Lambda^{-k}\right)\left(\Lambda^k U_y\right).$$

В силу леммы 9.1

$$\Lambda^k L_y \Lambda^{-k} = I + B_k,$$

где

$$(b_k)_{ij} = \begin{cases} \ell_{ij}\left(\lambda_i/\lambda_j\right)^k, & i > j, \\ 0, & i \leqslant j. \end{cases}$$

В силу (9.6) отношение $|\lambda_i/\lambda_j| < 1$ при $i > j$ и, следовательно, матрицы $B_k \to 0$ при $k \to \infty$.

Далее, матрица X невырождена, и по теореме 2.1 о QR - факторизации существует единственное разложение

$$X = Q_x R_x, \tag{9.8}$$

где R_x имеет положительную главную диагональ. Поэтому

$$A^k = Q_x R_x \left(I + B_k\right)\left(\Lambda^k U_y\right) = Q_x\left(I + R_x B_k R_x^{-1}\right)\left(R_x \Lambda^k U_y\right). \tag{9.9}$$

Так как $B_k \to 0$ при $k \to \infty$, то

$$\left(I + R_x B_k R_x^{-1}\right)$$

в конечном счете становится невырожденной, и, следовательно, при достаточно больших k существует единственная QR - факторизация

$$I + R_x B_k R_x^{-1} = \widetilde{Q}_k \widetilde{R}_k, \qquad (\tilde{r}_k)_{ii} > 0, \quad i = 1, \ldots, n. \tag{9.10}$$

Матрицы $\widetilde{Q}_k$ являются ортогональными, и, следовательно, последовательность $\{\widetilde{Q}_k\}$ ограничена ($\|\widetilde{Q}_k\|_2 = 1$). Поэтому из нее можно выделить подпоследовательность, скажем $\{\widetilde{Q}_{k\prime}\}$, которая сходится к некоторой матрице $\widetilde{Q}$, которая тоже ортогональная. Далее, так как в силу (9.10)

$$\{\widetilde{R}_{k\prime}\} = \{\widetilde{Q}_{k\prime}^T\}\left(I + R_x B_{k\prime} R_x^{-1}\right),$$

то подпоследовательность $\{\widetilde{R}_{k\prime}\}$ сходится к матрице $\widetilde{R}$, которая также является верхней треугольной с $\tilde{r}_{ii} \geqslant 0$, $i = 1, \ldots, n$. Переходя в (9.10) к пределу, находим, что

$$I = \widetilde{Q}\widetilde{R}.$$

Отсюда, в частности, следует, что на самом деле $\tilde{r}_{ii} > 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n$. В силу единственности QR - разложения I находим, что $\widetilde{Q} = \widetilde{R} = I$.

Так как эти же самые рассуждения можно повторить для любых других подпоследовательностей последовательностей $\widetilde{Q}_k$ и $\widetilde{R}_k$, то единственность предела указывает на то, что обе полные последовательности сходятся, т.е.

$$\lim_{k\to\infty} \widetilde{Q}_k = I, \qquad \lim_{k\to\infty} \widetilde{R}_k = I. \tag{9.11}$$

Из (9.9), (9.10) находим, что

$$A^k = \left(Q_x \widetilde{Q}_k\right)\left(\widetilde{R}_k R_x \Lambda^k U_y\right), \tag{9.12}$$

где первый сомножитель есть ортогональная матрица, а второй — верхняя треугольная, т.е. (9.12) есть QR - факторизация A^k (ср. с (9.4)). Однако, факторизации (9.4) и (9.12), вообще говоря, не совпадают, ибо у верхней треугольной матрицы из (9.12) из-за множителей Λ^k и U_y не все диагональные элементы обязаны быть положительными. Поэтому соотношение (9.12) следует преобразовать. Пусть D_1 и D_2 суть такие диагональные ортогональные матрицы, что матрицы $D_1\Lambda$ и $D_2 U_y$ имеют положительные диагонали. Тогда, воспользовавшись перестановочностью диагональных матриц, соотношение (9.12) можно переписать следующим образом:

$$A^k = \left[Q_x \widetilde{Q}_k D_2^{-1} D_1^{-k}\right]\left\{\left[D_1^k D_2 \widetilde{R}_k R_x D_2^{-1} D_1^{-k}\right]\left[(D_1\Lambda)^k D_2 U_y\right]\right\}. \tag{9.13}$$

Поскольку при умножении квадратной матрицы C слева и справа на невырожденную диагональную матрицу D и ей обратную DCD^{-1} диагональные элементы матрицы C не меняются, то первым сомножителем в фигурных скобках (9.13) остается верхняя треугольная матрица

с положительной диагональю. Таковой будет и вся матрица в фигурных скобках. Поэтому факторизация (9.13) единственна и совпадает с (9.4).

Из (9.4) и (9.13) следует, что

$$P_k = Q_x \widetilde{Q}_k D_2^{-1} D_1^{-k},$$

а, с учетом (9.3) находим, что

$$A_k = D_1^k D_2 \widetilde{Q}_k^T Q_x^T A Q_x \widetilde{Q}_k D_2^{-1} D_1^{-k}.$$

Далее, поскольку в силу (9.5) и (9.8)

$$A = Q_x R_x \Lambda R_x^{-1} Q_x^T,$$

то, обращая Q_x и Q_x^T, имеем равенство

$$Q_x^T A Q_x = R_x \Lambda R_x^{-1},$$

при помощи которого A_k преобразуется к виду

$$A_k = D_1^k D_2 \widetilde{Q}_k^T R_x \Lambda R_x^{-1} \widetilde{Q}_k D_2^{-1} D_1^{-k}.$$

Отсюда и из (9.11) следует, что

$$\lim_{k\to\infty} D_1^{-k} A_k D_1^k = D_2 R_x \Lambda R_x^{-1} D_2^{-1} = (D_2 R_x)\, \Lambda\, (D_2 R_x)^{-1} =: R.$$

Очевидно, что диагональные элементы матриц R и Λ совпадают, т.е.

$$r_{ii} = \lambda_i, \qquad i = 1, \ldots, n, \tag{9.14}$$

а

$$r_{ij} = 0, \qquad i > j. \tag{9.15}$$

Далее, диагональные элементы матриц $D_1^{-k} A_k D_1^k$ и A_k совпадают. Отсюда и из (9.14) следует, что

$$\lim_{k\to\infty} (a_k)_{ii} = r_{ii} = \lambda_i,$$

а, поскольку $\|D_1^k\|_2 = 1$, то

$$\lim_{k\to\infty} (a_k)_{ij} = 0 \quad \text{при} \quad i > j.$$

Теорема доказана.

Замечание 9.1. Что касается элементов $(a_k)_{ij}$ при $i < j$, то их знаки могут меняться от итерации к итерации, и поэтому сами они сходиться не могут, но сходятся их модули.

Замечание 9.2. Собственные значения расположены на диагонали предельной матрицы в порядке убывания модулей.

Замечание 9.3. Если представление (9.7) не имеет места, т.е. матрица X^{-1} не допускает LU - факторизации, то существует матрица перестановок P такая, что для PX^{-1} факторизация существует (ведь X^{-1} — невырождена). При этом сходимость QR метода сохраняется, но собственные значения на диагонали предельной матрицы будут теперь располагаться иначе.

Замечание 9.4. Можно показать, что

$$\begin{aligned} &(a_k)_{ii} = \lambda_i + O\left(\rho_i^k\right), \quad i = 1, \ldots, n, \\ &(a_k)_{i+1,i} = O\left(\rho_i^k\right), \end{aligned}$$

где

$$\rho_i = \max\left(\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}}\right|, \left|\frac{\lambda_{i+1}}{\lambda_i}\right|\right), \quad \lambda_0 = \infty, \lambda_{n+1} = 0,$$

т.е. сходимость линейная.

Следует отметить, что описанный алгоритм очень трудоемкий, ибо на каждой итерации нужно осуществлять QR факторизацию матрицы. Поэтому модифицируем его базовую версию.

Сначала напомним введенное нами ранее определение матрицы Хессенберга.

Определение 9.1. Матрица A имеет верхнюю форму Хессенберга, если $a_{ij} = 0$ для любых $i > j + 1$.

Это означает, что матрица имеет почти треугольную форму.

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * \\ & & * & * & * \\ & & & * & * \end{bmatrix}$$

Теорема 9.2. *Всякая действительная квадратная матрица при помощи ортогонального преобразования подобия может быть приведена к верхней форме Хессенберга.*

Доказательство. Построим требуемое преобразование. Этот алгоритм очень похож на алгоритм QR-разложения матрицы при помощи отражений. Приведение осуществляется за $n-2$ шага. На первом шаге необходимыми нулями заполняется первый столбец, на втором шаге — второй и т.д.

Выполним первый шаг. Запишем матрицу A в виде

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & c^T \\ b & \widehat{A} \end{bmatrix}.$$

Пусть $\widehat{U}_1$ — матрица отражения, переводящая $(n-1)$-мерный вектор b в вектор $[t_1\ 0\ \dots\ 0]^T$, и пусть

$$U_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widehat{U}_1 \end{bmatrix}. \tag{9.16}$$

Тогда

$$U_1 A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widehat{U}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & c^T \\ b & \widehat{A} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & c^T \\ \widehat{U}_1 b & \widehat{U}_1 \widehat{A} \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{c|c} a_{11} & c^T \\ \hline t_1 & \\ 0 & \\ \vdots & \widehat{U}_1\widehat{A} \\ 0 & \end{array}\right].$$

Далее, при вычислении $U_1 A U_1^{-1}$ вспомним, что $U_1^{-1} = U_1^T = U_1$, и, следовательно,

$$A^{(1)} = U_1 A U_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & c^T \\ \widehat{U}_1 b & \widehat{U}_1 \widehat{A} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widehat{U}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & c^T \widehat{U}_1 \\ \widehat{U}_1 b & \widehat{U}_1 \widehat{A} \widehat{U}_1 \end{bmatrix} =$$

$$= \left[\begin{array}{c|c} a_{11} & c^T\widehat{U}_1 \\ \hline t_1 & \\ 0 & \\ \vdots & \widehat{U}_1\widehat{A}\widehat{U}_1 \\ 0 & \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} a_{11} & * \ \dots \ * \\ \hline t_1 & \\ 0 & \\ \vdots & \widehat{A}_1 \\ 0 & \end{array}\right]. \tag{9.17}$$

Матрица $A^{(1)}$ ортогонально подобна матрице A и имеет первый столбец такого же вида, как у матрицы Хессенберга ($a_{i1}^{(1)} = 0$ при $i = 3, 4, \dots, n$). Отметим, что домножение матрицы $U_1 A$ на U_1 справа не меняет портрет матрицы $U_1 A$, приобретенный A после умножения ее на U_1 слева.

Теперь построим матрицу отражения $\widehat{U_2} \in \mathbb{R}^{(n-2)\times(n-2)}$, переводящую вектор $[a_{32}^{(1)} a_{42}^{(1)} \dots a_{n2}^{(1)}]^T$ в вектор, коллинеарный вектору $[10\dots0]^T \in \mathbb{R}^{n-2}$, и введем матрицу

$$U_2 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & \widehat{U}_2 \end{bmatrix}.$$

Выполняя преобразование подобия $U_2 A^{(1)} U_2 = A^{(2)}$, убеждаемся в том, что портрет первых двух столбцов $A^{(2)}$ совпадает с портретом тех же столбцов матрицы Хессенберга. Продолжая аналогичные преобразования, на $(n-2)$ шаге придем к матрице $A^{(n-2)}$, имеющей форму Хессенберга. Теорема доказана.

Замечание 9.5. Если бы мы попытались взять такую матрицу отражения U_1, которая оставляет в первом столбце только один ненулевой элемент, то при умножении $U_1 A$ на U_1 справа нам не удалось бы сохранить структуру первого столбца, т.е. полученные после первого умножения A на U_1 слева нули. Именно благодаря форме (9.16) матрицы U_1 операция умножения на U_1 справа не затрагивает нули в первом столбце (9.17).

Замечание 9.6. Для симметричной матрицы A ортогонально подобная ей матрица тоже симметрична и, следовательно, в этом случае матрица Хессенберга будет трехдиагональной.

Теорема 9.3. *Пусть A_m — невырожденная верхняя хессенбергова матрица и A_{m+1} получена из A_m посредством одной QR-итерации* (9.1)-(9.2). *Тогда A_{m+1} также имеет верхнюю форму Хессенберга.*

Доказательство. Для построения A_{m+1} нам нужно сначала построить разложение $A_m = Q_m R_m$, которое можно переписать в виде $Q_m = A_m R_m^{-1}$. Ранее было показано (упражнение 1.2), что обратная к невырожденной верхней треугольной матрице есть верхняя треугольная матрица, и произведение верхних треугольных матриц тоже верхняя треугольная. Поэтому R_m^{-1} является верхней треугольной. Аналогично доказывается, что произведение верхней треугольной и верхней хессенберговой матрицы в любом порядке есть верхняя хессенбергова матрица. Поэтому Q_m есть верхняя хессенбергова матрица, и $A_{m+1} = R_m Q_m$ тоже верхняя хессенбергова. Теорема доказана.

Модифицируем базовую версию QR-алгоритма, положив начальную матрицу A_0 равной матрице Хессенберга $A^{(n-2)}$ из теоремы 9.2. Будем эту матрицу обозначать через H. При таком выборе A_0 в силу теоремы 9.3 на каждом шаге QR-алгоритма будем снова получать матрицы Хессенберга.

Какой выигрыш в трудозатратах при реализации QR-алгоритма дает эта модификация? Приведение матрицы A к хессенберговой форме снова требует $O(n^3)$ итераций. Но теперь это единичная акция, осуществляемая перед началом QR-итераций. Сами же QR-итерации становятся дешевле. Чтобы увидеть это, опишем процесс QR-факторизации хессенберговой матрицы.

Пусть H — верхняя хессенбергова матрица, QR-факторизацию которой нужно найти. К верхней треугольной матрице R эту матрицу можно привести при помощи $n-1$ плоских вращений, которые преобразуют $n-1$ поддиагональных элементов в нули. Обозначим их через $T_1, T_2, \ldots, T_{n-1}$. Тогда, если

$$T = T_{n-1}T_{n-2}\ldots T_1 =: Q^T,$$

то

$$R = TH = Q^T H \qquad \text{или} \qquad H = QR.$$

QR-факторизация матрицы H построена. Очевидно (докажите), что реализация одного вращения T_i требует $O(n)$ действий, и, следовательно, QR- факторизация осуществляется за $O(n^2)$ действий.

Теперь нужно осуществить второй этап QR-шага — вычислить $H_1 = RQ$. Поскольку $H_1^T = Q^T R^T = TR^T$, то и эта процедура, приводящая к хессенберговой матрице, осуществляется за $O(n^2)$ действий.

Мы показали, что один шаг QR-алгоритма требует $O(n^2)$ действий.

9.1 Ускорение сходимости QR-алгоритма

Пусть H — матрица Хессенберга, полученная из матрицы A, с тем, чтобы применить к ней QR-алгоритм для отыскания собственных значений.

Определение 9.2. Матрица Хессенберга называется неразложимой, если все ее поддиагональные элементы $h_{i+1,i}, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1$ *отличны от нуля.*

Если для некоторого $p, \quad 1 \leqslant p \leqslant n-1$, элемент $h_{p+1,p} = 0$, то матрица Хессенберга может быть представлена в блочно-треугольном виде

$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ & H_{22} \end{bmatrix},$$

где H_{11} и H_{22} — матрицы Хессенберга порядков p и $n-p$, соответственно. Поскольку объединение спектров матриц H_{11} и H_{22} совпадает со спектром

матрицы H, то запланированные QR-итерации с целью экономии трудозатрат следует проводить не с H, а по отдельности с H_{11} и H_{22}. Поэтому в дальнейших рассуждениях будем предполагать, что матрица H является неразложимой.

Замечание 9.7. Если вышеуказанное число $p = n - 1$, т.е. нулевым поддиагональным элементом матрицы H является $h_{n,n-1}$, то порядок матрицы H_{22} равен единице, и ее единственное собственное значение, которое также является минимальным по модулю собственным значением матрицы H, совпадает с ее единственным элементом $h_{n,n}$). Отсюда можно предположить, что, если $h_{n,n-1}$ мал, то $h_{n,n}$ близок к минимальному по модулю собственному значению матрицы H.

Рассмотрим последовательность итераций QR-алгоритма для хессенберговой матрицы H с элементами $h_{i,j}$. Пусть $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ — собственные значения матрицы H, упорядоченные так, что

$$|\lambda_1| \geqslant |\lambda_2| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_n|.$$

Если все неравенства строгие, то, в силу теоремы 9.1 о сходимости QR-алгоритма, элементы

$$h_{i+1,i}^{(k)}, \qquad i = 1, 2, \ldots, n-1$$

матрицы H_k стремятся к нулю при $k \to \infty$. При этом скорость стремления к нулю является линейной и определяется отношениями $|\lambda_{i+1}/\lambda_i|$. Если для каких-то i модули собственных чисел λ_i и λ_{i+1} отличаются мало, то соответствующие элементы $h_{i+1,i}^{(k)}$ к нулю будут стремиться медленно. Однако, мы можем улучшить скорость сходимости, уменьшая одно или несколько отношений $|\lambda_{i+1}/\lambda_i|$. Сделать это можно при помощи сдвига собственных значений.

Сдвинутая матрица, т.е. матрица $H - \rho I$ имеет собственные значения

$$\lambda_1 - \rho, \lambda_2 - \rho, \ldots, \lambda_n - \rho. \tag{9.18}$$

Если мы перенумеруем собственные значения таким образом, что

$$|\lambda_1 - \rho| \geqslant |\lambda_2 - \rho| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_n - \rho|, \tag{9.19}$$

то отношениями собственных чисел, отвечающими $H - \rho I$, будут

$$|(\lambda_{i+1} - \rho)/(\lambda_i - \rho)|, \qquad i = 1, 2, \ldots, n-1.$$

На самом деле, сделать действительно малым можно лишь отношение

$$|(\lambda_n - \rho)/(\lambda_{n-1} - \rho)|.$$

При условии $\lambda_n \neq \lambda_{n-1}$ его можно сделать сколь угодно близким к нулю, если выбрать ρ очень близким к λ_n.

Заметим, что λ_i в (9.18) — это, вообще говоря, не λ_i в (9.19), ибо мы после сдвига произвели перенумерацию собственных значений. Поэтому в роли λ_n из (9.19) может выступать любое λ_i из (9.18), к которому априори мы можем найти хорошее приближение.

Если мы это сделаем и применим QR-алгоритм к сдвинутой матрице $H-\rho I$, то в новом итерационном процессе элемент $h^{(k)}_{n,n-1}$ будет стремиться к нулю очень быстро. Как только он станет достаточно малым, его можно будет рассматривать практически равным нулю. Полученная в результате QR-итераций матрица H_k приближает форму Шура матрицы $H - \rho I$. Форму Шура матрицы H будет приближать матрица

$$H_k + \rho I = \begin{bmatrix} \widehat{H}_k & & & | & * \\ & & & | & \vdots \\ & & & | & * \\ - & - & - & | & - \\ 0 & \dots & 0 & | & \tilde{h}^{(k)}_{n,n} \end{bmatrix},$$

где $\tilde{h}^{(k)}_{n,n} = h^{(k)}_{n,n} + \rho$. Эта матрица является блочно-треугольной, и поэтому ее собственными значениями будут собственные значения матрицы $\widehat{H}_k$ и число $\tilde{h}^{(k)}_{n,n}$.

Если помимо $h_{n,n}$ требуется найти и остальные собственные значения матрицы A, то дальнейшие QR-итерации можно осуществлять с хессенберговой матрицей $\widehat{H}_k$ размера $(n-1) \times (n-1)$, что в конце концов приведет к существенному уменьшению трудозатрат.

Чтобы применить эти соображения, нужно иметь хорошие приближения к собственным числам. Как можно найти эти приближения? Предположим, что сначала мы делаем несколько QR-итераций без сдвига. Через некоторое время матрицы начнут приобретать треугольный вид, а элементы главной диагонали будут приближаться к собственным значениям. В частности, $h^{(k)}_{n,n}$ будет приближаться к λ_n — наименьшему по модулю собственному значению матрицы A. Поэтому разумно в какой-то момент положить $\rho = h^{(k)}_{n,n}$ (сдвиг Рэлея) и последующие итерации выполнять для сдвинутой матрицы $H_k - \rho I$. В действительности можно сделать еще

лучше. С каждым шагом мы получаем все лучшие приближения к λ_n. Нет никаких причин, мешающих нам обновлять часто значение сдвига, чтобы улучшить скорость сходимости. На самом деле, мы можем выбирать новый сдвиг на каждом шаге. Именно это и делает QR-*алгоритм со сдвигом*:

$$A_{k-1} - \rho_{k-1}I = Q_k R_k, \qquad R_k Q_k + \rho_{k-1} I = A_k.$$

Эта последовательность генерирует матрицы, подобные A. В самом деле,

$$\begin{aligned} A_k &= R_k Q_k + \rho_{k-1} I = Q_k^T [Q_k R_k Q_k + \rho_{k-1} Q_k] = \\ &= Q_k^T [Q_k R_k + \rho_{k-1} I] Q_k = Q_k^T A_{k-1} Q_k. \end{aligned}$$

На каждом шаге ρ_{k-1} выбирается так, чтобы оно являлось приближением собственного значения, появляющегося в правом нижнем углу матрицы.

Теорема 9.4. *Пусть μ — собственное значение неприводимой хессенберговой матрицы H размера $n \times n$. Тогда, если*

$$H - \mu I = QR,$$

то у матрицы

$$\widetilde{H} = RQ + \mu I$$

в последней строке

$$h_{n,n-1} = 0, \qquad h_{n,n} = \mu.$$

Доказательство. Так как H — неприводимая хессенбергова матрица, то первые $(n-1)$ ее столбцов линейно независимы (нижний левый угловой минор H является определителем верхней треугольной матрицы с главной диагональю из ненулевых чисел). То же самое верно и для матрицы $H - \mu I$ при любом μ. Поэтому, если

$$QR = H - \mu I$$

есть QR-разложение, то $r_{i,i} \neq 0$, $i = 1, \ldots, n-1$. Но, если матрица $H - \mu I$ вырожденная, то

$$r_{1,1} \ldots r_{nn} = 0,$$

и, следовательно, $r_{n,n} = 0$. Значит, у матрицы R последняя строка нулевая, равно как и у матрицы RQ. Поэтому матрица

$$\widetilde{H} = RQ + \mu I$$

имеет последнюю строку из нулей и число μ в последней позиции. Теорема доказана.

Доказанная теорема говорит о том, что, если мы сдвигаем на точное собственное значение, то в точной арифметике исчерпывание происходит на первом шаге.

Опыт показывает, что не надо ждать, пока $a_{nn}^{(m)}$ станет хорошим приближением для λ_n: ничто не мешает нам делать сдвиги на первых же шагах.

Пример. Рассмотрим матрицу

$$A = \begin{bmatrix} 8 & 2 \\ 2 & 5 \end{bmatrix},$$

у которой собственные значения равны

$$\lambda_1 = 9 \qquad \text{и} \qquad \lambda_2 = 4.$$

Когда QR-алгоритм без сдвига применяется к A, элемент $a_{2,1}^{(k)}$ сходится к нулю линейно с коэффициентом $\lambda_2/\lambda_1 = 4/9$. Если же применить QR-алгоритм со сдвигом Рэлея, то следует положить $\rho_0 = 5$ и выполнить QR-шаг с матрицей $A - \rho_0 I$. Собственными значениями этой матрицы являются $\lambda_1 - 5 = 4$ и $\lambda_2 - 5 = -1$. Отношение $|\lambda_2 - \rho_0|/|\lambda_1 - \rho_0| = 1/4$, что меньше $4/9$, и можно ожидать улучшения сходимости для шага со сдвигом. Далее,

$$A_0 - \rho_0 I = Q_1 R_1,$$

где

$$Q_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & -3 \end{bmatrix}, \qquad R_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 13 & 6 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}.$$

Таким образом,

$$A_1 = R_1 Q_1 + \rho_0 I = \frac{1}{13} \begin{bmatrix} 51 & 8 \\ 8 & -12 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 8.9231 & 0.6154 \\ 0.6154 & 4.0769 \end{bmatrix}.$$

На четвертом шаге

$$A_4 = \begin{bmatrix} 9.\overbrace{0\ldots0}^{14} & 0.0\ldots0 \\ 0.0\ldots0 & 4.0\ldots0 \end{bmatrix}$$

Приведем другой пример, показывающий, что стратегия Рэлея не всегда срабатывает.

Пример. Рассмотрим матрицу

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix},$$

собственными значениями которой являются числа

$$\lambda_1 = 3 \qquad \text{и} \qquad \lambda_2 = 1.$$

Сдвиг Рэлея равен $\rho = 2$, что находится ровно посередине между собственными значениями. Сдвинутая матрица $A - \rho I$ имеет собственные значения ± 1, которые одинаковы по абсолютной величине. Поскольку $A - \rho I$ ортогональная, ее QR-множители суть $Q_1 = A - \rho I$ и $R_1 = I$ (В силу "единственности" QR-разложения). QR-алгоритм с таким сдвигом сходиться не будет.

Поскольку итерации со сдвигом Рэлея иногда оказываются несостоятельными, предпочтительнее оказывается другой сдвиг — сдвиг Уилкинсона, определяемый как собственное значение последней 2×2 подматрицы

$$\begin{bmatrix} a_{n-1,n-1}^{(k-1)} & a_{n-1,n}^{(k-1)} \\ a_{n,n-1}^{(k-1)} & a_{n,n}^{(k-1)} \end{bmatrix},$$

ближайшее к $a_{n,n}^{(k-1)}$. Есть надежда, что этот сдвиг лучше сдвига Рэлея. По крайней мере, для случая симметричных матриц известно, что QR-алгоритм с этим сдвигом всегда сходится.

Для общих матриц все еще остаются очень специфические случаи, когда и сдвиг Уилкинсона терпит неудачу.

Пример. Пусть

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Эта верхняя хессенбергова матрица является ортогональной, сдвиг Уилкинсона для нее равен нулю, а QR-разложение ничего не меняет, как и в предыдущем примере.

Для подавляющего числа матриц стратегия сдвига Уилкинсона работает очень хорошо. Опыт показывает, что обычно требуется от пяти до десяти QR-циклов, прежде чем появится первое собственное значение. Поэтому в среднем последующие собственные значения будут выявляться за меньшее число итераций. Обычно бóльшая часть последующих собственных значений появляется после одного-двух шагов. В среднем требуется от трех до пяти итераций на собственное значение. Для симметричных матриц дело обстоит еще лучше: требуется лишь от двух до трех итераций на собственное значение. В силу этого обстоятельства QR-алгоритм со сдвигом Уилкинсона некоторые называют "прямым"методом.

По ходу выполнения QR-итераций иногда случается, что один из поддиагональных элементов (вне последней строки) становится (практически) равным нулю. Для действительно больших матриц — это обычное явление. Всякий раз, как это происходит, задачу можно разложить, т.е. можно разбить на две меньшие задачи. Пусть, например, $a_{i+1,i}^{(k)} = 0$. Тогда A_k имеет вид

$$A_k = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ 0 & D_{22} \end{bmatrix},$$

где $B_{11} \in R^{i\times i}$, $B_{22} \in R^{j\times j}$, $i + j = n$. Теперь можно найти собственные значения B_{11} и B_{22}.

Исследованный нами ранее способ ускорения сходимости при помощи сдвигов, которые мы впредь будем называть одинарными сдвигами, не поможет нам, если на очереди стоит комплексное собственное значение, а сдвиги мы делаем действительными (как при стратегии Рэлея). Если же сдвиги делать комплексными (которые могут появиться из стратегии Уилкинсона), то нужно вроде бы переходить к комплексной арифметике, чего делать по известным причинам не хочется. Поскольку комплексное собственное значение у действительной матрицы появляется в паре с комплексно сопряженным собственным значением (они имеют одинаковые модули), то естественно эту пару попытаться находить одновременно. И сделать это можно с использованием двойного сдвига.

Пусть $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ — действительная неразложимая верхняя хессенбергова матрица. Рассмотрим пару QR-шагов со сдвигами ρ и τ, которые могут быть комплексными:

$$\begin{aligned} A - \rho I &= Q_\rho R_\rho, \qquad & R_\rho Q_\rho + \rho I &= \check{A}, \\ \check{A} - \tau I &= Q_\tau R_\tau, \qquad & R_\tau Q_\tau + \tau I &= \widehat{A} \end{aligned} \tag{9.20}$$

.

Теорема 9.5 (теорема "единственности"). *Пусть Q и P — действительные ортогональные матрицы, преобразующие действительную матрицу A в неразложимую матрицу Хессенберга*

$$H_Q = Q^T A Q, \qquad H_P = P^T A P. \tag{9.21}$$

Если первые столбцы матриц Q и P совпадают, то найдется диагональная ортогональная матрица D (т.е. диагональная матрица с ± 1 на главной диагонали) такая, что

$$P = QD, \qquad H_D = D H_Q D. \tag{9.22}$$

Иными словами, матрицы Q и P могут различаться лишь знаками столбцов, а хессенберговы матрицы H_Q и H_P — только знаками внедиагональных элементов.

Доказательство. Пусть $D = Q^T P$. Поскольку Q и P — ортогональные матрицы, то D тоже ортогональная, т.е. $D^{-1} = D^T$. Если мы еще докажем, что D является верхней треугольной матрицей, то отсюда будет следовать ее диагональность в виде

$$D = \operatorname{diag}\{\pm 1, \pm 1, \ldots, \pm 1\}.$$

Итак, нужно доказать, что D есть верхняя треугольная матрица. Принимая во внимание (9.21), находим, что

$$H_Q D = (H_Q Q^T)P = Q^T(AP) = (Q^T P)H_P = DH_P,$$

т.е. $H_Q D = DH_P$. Отсюда следует, что (если обозначить через W_j столбец с номером j матрицы W)

$$H_Q D_j = (H_Q D)_j = (DH_P)_j. \tag{9.23}$$

Пусть $d_{i,k}$ и $h_{k,j}$ суть элементы матриц D и H_P, соответственно. Тогда для элемента (i, j) матрицы DH_P имеет место представление

$$(DH_P)_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} d_{i,k} h_{k,j} = \sum_{k=1}^{j+1} d_{i,k} h_{k,j},$$

а для ее j-го столбца —

$$(DH_P)_j = \sum_{k=1}^{j+1} h_{k,j} D_k = h_{j+1,j} \cdot D_{j+1} + \sum_{k=1}^{j} h_{k,j} D_k.$$

Поэтому, с учетом (9.23)

$$h_{j+1,j} \cdot D_{j+1} = H_Q D_j - \sum_{k=1}^{j} h_{k,j} D_k. \tag{9.24}$$

Напомним, что $h_{j+1,j}$ отличны от нуля, ибо матрица H_P неразложимая. В силу определения матрицы D ее первый столбец $D_1 = Q^T P_1$. Так как строки Q^T ортогональны, а $Q_1^T = P_1$, то

$$D_1 = [10 \ldots 0]^T.$$

Мы доказали, что первый столбец матрицы D имеет вид первого столбца верхней треугольной матрицы. Пусть это верно для j-го столбца D_j. Докажем, что это будет верно и для D_{j+1}. Для этого обратимся к его представлению (9.24). Поскольку лишь первые j элементов столбца D_j отличны от нуля, то

$$h_{j+1,j}D_{j+1} = \sum_{i=1}^{j} d_{i,j}(H_Q)_i - \sum_{k=1}^{j} h_{k,j}D_k.$$

Отсюда и следует, что

$$D_{j+1} = [d_{1,j+1}d_{2,j+1}\dots d_{j+1,j+1}0\dots 0]^T.$$

Утверждаемые теоремой свойства матрицы D установлены. Из первого соотношения (9.22) и второго соотношения (9.21) следует второе соотношение (9.22). Поскольку теперь

$$h_{ij} = d_{ii}(h_Q)_{ij}d_{jj},$$

то теорема полностью доказана.

Численные методы математического анализа

10

Разностные уравнения

Пусть $y(n) = y_n$ — функция целочисленного аргумента $n \in \mathbb{Z}$. Будем ее называть сеточной функцией. Обозначим через ∇ (набла) оператор левой конечной разности (разности назад), т.е.

$$\nabla y_n = y_n - y_{n-1}. \tag{10.1}$$

Степень оператора ∇ определим рекуррентным образом

$$\nabla^k = \nabla(\nabla^{k-1}). \tag{10.2}$$

Пусть $a(n)$, $b(n)$, $c(n)$, $d(n)$ и $f(n)$ — заданные сеточные функции. Рассмотрим уравнение

$$a(n)\nabla^3 y_n + b(n)\nabla^2 y_n + c(n)\nabla y_n + d(n)y_n = f(n) \tag{10.3}$$

относительно сеточной функции y_n. Уравнение (10.3) называется *разностным уравнением*. Разностные уравнения являются аналогами дифференциальных уравнений и в значительной степени повторяют свойства последних. Как и в случае дифференциальных уравнений, важным является понятие порядка разностного уравнения. Если $a(n) \neq 0$, то казалось бы естественным объявить порядком уравнения (10.3) число три. Однако при таком определении порядка разностного уравнения нас ждут неприятности. Чтобы убедиться в этом, положим в (10.3) $a(n) = 1$, $b(n) = 0$, $c(n) = -3$, $d(n) = 2$. В результате получим уравнение

$$\nabla^3 y_n - 3\nabla y_n + 2y_n = f(n). \tag{10.4}$$

Принимая во внимание (10.1) и (10.2), находим, что

$$\nabla y_n = y_n - y_{n-1}, \quad \nabla^3 y_n = y_n - 3y_{n-1} + 3y_{n-2} - y_{n-3},$$

а, подставляя эти выражения в (10.4), будем иметь

$$y_n - 3y_{n-1} + 3y_{n-2} - y_{n-3} - 3y_n + 3y_{n-1} + 2y_n = f(n)$$

или

$$3y_{n-2} - y_{n-3} = f(n). \tag{10.5}$$

Вводя новый индекс $m = n - 2$, уравнение (10.5) преобразуем к виду

$$3y_m - y_{m-1} = f(m+2). \tag{10.6}$$

Это уравнение эквивалентно уравнению (10.4), и назвать его разностным уравнением третьего порядка просто не поворачивается язык. И дело, конечно, не просто в названии. От удачно введенного определения зависит простота последующих утверждений, использующих это определение. Поскольку запись (10.3) не содержит явным образом информации о числе, которым следовало бы определить порядок разностного уравнения, то будем разностное уравнение записывать в виде

$$\Phi(n, y_n, y_{n-1}, \ldots, y_{n-k}) = 0. \tag{10.7}$$

Определение 10.1. Уравнение (10.7) называется разностным уравнением.

Определение 10.2. Разностное уравнение (10.7), если оно явно зависит от y_n и от y_{n-k}, назывется уравнением k-го порядка.

Определение 10.3. Разностное уравнение k-го порядка называется линейным, если оно линейно зависит от $y_n, y_{n-1}, \ldots, y_{n-k}$.

Мы будем изучать только линейные разностные уравнения, которые будем записывать в виде

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j(n) y_{n-j} = f(n), \quad n \in \mathbb{Z}. \tag{10.8}$$

Пока мы предполагаем, что уравнение (10.8) задано при всех $n \in \mathbb{Z}$. Уравнение (10.8) будет уравнением k-го порядка, если коэффициенты $\alpha_0(n)$ и $\alpha_k(n)$ не обращаются в нуль ни при одном $n \in \mathbb{Z}$.

Определение 10.4. Сеточная функция y_n, $n \in \mathbb{Z}$ называется решением уравнения (10.8), если при подстановке ее в (10.8) последнее превращается в тождество.

Определение 10.5. Сеточная функция y_n, $n \in \mathbb{Z}$ называется общим решением разностного уравнения (10.8), если в ней содержится любое решение (10.8).

Для того, чтобы определить какое-либо решение уравнения (10.8) (частное решение) достаточно указать его значения в любых k последовательных точках, например, $n_0, n_0+1, \ldots, n_0+k-1$.

10.1 Линейные разностные уравнения первого порядка

Эти уравнения имеют вид

$$\alpha_0(n)y_n + \alpha_1(n)y_{n-1} = f(n). \tag{10.9}$$

Поскольку $\alpha_0(n) \neq 0$, то на этот коэффициент уравнение можно поделить. Пусть $\alpha_1(n)/\alpha_0(n) = -q_n \neq 0$, а $f(n)/\alpha_0(n)$ снова обозначим через $f(n) = f_n$. Тогда разностное уравнение первого порядка (10.9) можно переписать так

$$y_n = q_n y_{n-1} + f_n. \tag{10.10}$$

Разрешить разностное уравнение — значит выразить y_n через известные величины. Чтобы можно было решить (10.10), нужно задать начальное условие

$$y_0 = a. \tag{10.11}$$

Используя теперь рекуррентные соотношения (10.10), можно последовательно определить y_n при всех последующих значениях n:

$$\begin{aligned} &y_1 = q_1 y_0 + f_1 = q_1 a + f_1, \\ &y_2 = q_2 y_1 + f_2 = q_2(q_1 a + f_1) + f_2 = q_1 q_2 a + q_2 f_1 + f_2 \end{aligned}$$

и т.д.

Часто бывает полезно иметь не рекуррентное соотношение для последовательного вычисления решения, а некоторую формулу, представляющую решение. Найдем представление решения уравнения (10.10). Для этого рассмотрим сначала отвечающее ему однородное уравнение

$$y_n = q_n y_{n-1} \tag{10.12}$$

и найдем его решение. Имеем

$$\begin{aligned} y_1 &= q_1 y_0, \\ y_2 &= q_2 y_1, \\ &\dots\dots\dots\dots \\ y_n &= q_n y_{n-1}. \end{aligned}$$

Перемножая последовательно полученные равенства и сокращая левую и правую части на $y_1 y_2 \dots y_{n-1}$, получим

$$y_n = q_1 \dots q_n y_0 = y_0 \prod_{j=1}^{n} q_j. \tag{10.13}$$

Величина y_0 есть начальное значение y_n и является произвольной постоянной. Решение однородного уравнения (10.12) найдено.

Замечание 10.1. Напомним, что если линейное однородное дифференциальное уравнение первого порядка записать в виде $y' = P(x)y$, то его общее решение примет вид

$$y(x) = c \exp\left\{ \int_0^x P(\xi) d\xi \right\}.$$

Обратимся теперь к неоднородному уравнению (10.10). Его решение будем искать, используя решение однородного уравнения (10.12), методом вариации постоянной. Пусть

$$\overset{\circ}{y}_n = \prod_{j=1}^{n} q_j. \tag{10.14}$$

Это — решение уравнения (10.12), а $c\overset{\circ}{y}_n$ — его общее решение. Заставим коэффициент c зависеть от n и в таком виде будем искать решение уравнения (10.10)

$$y_n = c_n \overset{\circ}{y}_n. \tag{10.15}$$

Подставляя (10.15) в (10.10), получим

$$c_n \overset{\circ}{y}_n = q_n c_{n-1} \overset{\circ}{y}_{n-1} + f_n.$$

Из (10.12) $\overset{\circ}{y}_n = q_n \overset{\circ}{y}_{n-1}$ и поэтому

$$c_n \overset{\circ}{y}_n = c_{n-1} \overset{\circ}{y}_n + f_n,$$

т.е.

$$c_n = c_{n-1} + f_n/\overset{\circ}{y}_n.$$

Отсюда

$$\begin{array}{rcll} c_1 & = & c_0 & + \ f_1 \ / \ \overset{\circ}{y}_1, \\ c_2 & = & c_1 & + \ f_2 \ / \ \overset{\circ}{y}_2, \\ \multicolumn{4}{c}{\dotfill} \\ c_n & = & c_{n-1} & + \ f_n \ / \ \overset{\circ}{y}_n, \end{array}$$

Складывая эти соотношения, находим, что

$$c_n = \sum_{k=1}^{n} \frac{f_k}{\overset{\circ}{y}_k} + c_0,$$

а принимая во внимание (10.14), будем иметь

$$c_n = \sum_{k=1}^{n} f_k \prod_{j=1}^{k} q_j^{-1} + c_0.$$

Подставляя это выражение в (10.15), получим общее решение неоднородного уравнения (10.10)

$$y_n = \prod_{j=1}^{n} q_j \left(c + \sum_{k=1}^{n} f_k \prod_{j=1}^{k} q_j^{-1} \right). \tag{10.16}$$

Замечание 10.2. Напомним, что если линейное неоднородное дифференциальное уравнение первого порядка записать в виде $y' = P(x)y + f(x)$, то его общее решение примет вид

$$y(x) = \exp\left\{ \int_0^x P(\xi)d\xi \right\} \left(c + \int_0^x f(\eta) \exp\left\{ -\int_0^\eta P(\xi)d\xi \right\} d\eta \right).$$

Если коэффициент $q_n = \text{const} = q$, то из (10.16) находим, что

$$y_n = q^n \left(c + \sum_{k=1}^{n} f_k q^{-k} \right), \tag{10.17}$$

а если и $f_n = \text{const} = f$, то при $q \neq 1$

$$y_n = q^n \left(c + f \sum_{k=1}^{n} q^{-k} \right) = q^n \left(c + f \frac{q^{-1} - q^{-n-1}}{1 - q^{-1}} \right) = cq^n + f \frac{1 - q^n}{1 - q}. \tag{10.18}$$

10.2 Линейные разностные уравнения k-го порядка с постоянными коэффициентами

Если коэффициенты $\alpha_j(n)$ из (10.8) не зависят от n, то мы имеем разностное уравнение с постоянными коэффициентами

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n-j} = f_n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad \alpha_0 \alpha_k \neq 0. \tag{10.19}$$

Решение отвечающего (10.19) однородного уравнения

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j y_{n-j} = 0 \tag{10.20}$$

можно искать в виде

$$y_n = q^n, \quad \left(\text{ср. с } y(x) = e^{\lambda x}\right), \tag{10.21}$$

где $q = \text{const} \neq 0$. Подставляя (10.21) в (10.20), получим

$$q^{n-k} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j q^{k-j} = 0.$$

На q^{n-k} можно сократить, в результате чего для отыскания q получим алгебраическое уравнение степени k

$$\alpha_0 q^k + \alpha_1 q^{k-1} + \cdots + \alpha_{k-1} q + \alpha_k = 0, \tag{10.22}$$

называемое *характеристическим уравнением*, отвечающим разностному уравнению (10.20).

Характеристическое уравнение (10.22) имеет ровно k корней, включая кратные и комплексные. Обозначим их через

$$q_1, q_2, \ldots, q_k. \tag{10.23}$$

Очевидно, что сеточные функции

$$q_l^n, \quad l = 1, \ldots, k \tag{10.24}$$

являются решениями разностного уравнения (10.20).

Имеет место

Теорема 10.1. *Если корни* (10.23) *характеристического уравнения* (10.22) *простые, то решения* (10.24) *разностного уравнения* (10.20) *линейно независимы, а общее решение этого уравнения имеет вид*

$$y_n = \sum_{l=1}^{k} c_l q_l^n.$$

Доказательство. Проведем доказательство линейной независимости (10.24) при $k = 2$. Допустим противное, т.е. пусть

$$c_1 q_1^n + c_2 q_2^n \equiv 0, \quad |c_1| + |c_2| \neq 0.$$

Но тогда и

$$c_1 q_1^{n-1} + c_2 q_2^{n-1} = 0.$$

Рассмотрим эти два тождества как систему уравнений для определения c_1 и c_2. Находим, что определитель этой системы

$$\Delta = \begin{vmatrix} q_1^n & q_2^n \\ q_1^{n-1} & q_2^{n-1} \end{vmatrix} = (q_1 q_2)^{n-1}(q_1 - q_2) \neq 0$$

и, следовательно, система имеет лишь тривиальное решение $c_1 = c_2 = 0$. Это противоречит предположению, что и доказывает теорему.

Замечание 10.3. Если комплексное число $q = |q|e^{i\varphi}$, $\varphi \neq m\pi$, $m \in \mathbb{Z}$ является корнем характеристичечкого уравнения (10.22), коэффициенты которого действительны, то число $\overline{q} = |q|e^{-i\varphi}$, комплексно сопряженное к q, также является корнем характеристического уравнения (10.22), а наряду с комплексными решениями разностного уравнения (10.20)

$$q^n \quad \text{и} \quad \overline{q}^{\,n} \tag{10.25}$$

решениями указанного разностного уравнения будут и действительная и мнимая части решений (10.25), т.е.

$$|q|^n \cos n\varphi, \quad |q|^n \sin n\varphi. \tag{10.26}$$

Решения (10.26), как и (10.25), линейно независимы.

Пример 10.1. Найдем общее решение разностного уравнения

$$y_n - 2\operatorname{ch}\alpha y_{n-1} + y_{n-2} = 0, \quad \alpha \neq 0.$$

Характеристическое уравнение этого разностного уравнения имеет вид

$$q^2 - 2\operatorname{ch}\alpha q + 1 = 0,$$

а его корни суть

$$q_{1,2} = \operatorname{ch}\alpha \pm \sqrt{\operatorname{ch}^2\alpha - 1} = e^{\pm\alpha}.$$

Эти корни различные, и поэтому

$$y_n = c_1 e^{\alpha n} + c_2 e^{-\alpha n}.$$

Теорема 10.2. *Если q есть корень характеристического уравнения* (10.22) *кратности $s \geqslant 1$, то сеточная функция*

$$P_{s-1}(n) q^n,$$

где $P_{s-1}(n)$ — произвольный многочлен, степень которого не выше $s-1$, является решением разностного уравнения (10.20). *При этом решения*

$$n^l q^n, \quad l = 0, \ldots, s-1$$

линейно независимы.

Доказательство. Доказательство проведем для случая $s = k = 2$. Покажем сначала, что nq^n есть решение уравнения (10.20) при $k = 2$. Имеем

$$\begin{aligned}
&\alpha_0 n q^n + \alpha_1 (n-1) q^{n-1} + \alpha_2 (n-2) q^{n-2} = \\
&= q^{n-2}\left[(\alpha_0 q^2 + \alpha_1 q + \alpha_2)(n-2) + q(2\alpha_0 q + \alpha_1)\right] = \\
&= q^{n-1}(2\alpha_0 q + \alpha_1) = 0,
\end{aligned}$$

ибо $2\alpha_0 q + \alpha_1 = (\alpha_0 q^2 + \alpha_1 q + \alpha_2)'$ и обязано обращаться в нуль на корне кратности два. Линейная независимость решений q^n и nq^n доказывается так же, как и в предыдущей теореме.

Теорема 10.3. *Если правая часть $f(n)$ неоднородного разностного уравнения* (10.19) *имеет вид $P_m(n)\,\overset{\circ}{q}{}^n$, где $P_m(n)$ — многочлен степени m, а $\overset{\circ}{q}$ является s-кратным, $s \geqslant 0$, корнем характеристического уравнения* (10.22), *то уравнение* (10.19) *имеет решение вида*

$$y(n) = n^s Q_m(n)\,\overset{\circ}{q}{}^n. \tag{10.27}$$

Доказательство смотри, например, в [9].

Теорема 10.4. *Если правая часть $f(n)$ неоднородного разностного уравнения* (10.19) *представима в виде $f_1(n) + f_2(n)$, а $y_n^{(k)}$, $k = 1, 2$, есть решение этого уравнения с правой частью $f_k^{(n)}$, то $y_n = y_n^{(1)} + y_2^{(2)}$.*

Упражнение 10.1. Найти общее решение неоднородного разностного уравнения

$$y_n - 2y_{n-1} + y_{n-2} = n(1 + 2^n).$$

Ответ.

$$y_n = c_1 + c_2 n + \frac{1}{6}(n+3)n^2 + (n-2)2^{n+2}.$$

10.3 Системы разностных уравнений

Рассмотрим систему двух линейных однородных разностных уравнений первого порядка с двумя неизвестными функциями

$$\begin{array}{rcl} u_n & = & a_{11}u_{n-1} + a_{12}v_{n-1}, \\ v_n & = & a_{12}u_{n-1} + a_{22}v_{n-1}, \end{array} \qquad n \in \mathbb{Z}, \tag{10.28}$$

где a_{ij}, $i, j = 1, 2$ — постоянные. Введем в рассмотрение вектор-функцию

$$y(n) = [u_n \, v_n]^T$$

и матрицу

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix},$$

которую будем предполагать невырожденной, $\det A \neq 0$. Используя введенные обозначения, систему (10.28) можно переписать в векторном виде

$$y(n) = Ay(n-1), \ \det A \neq 0, \ \text{или} \ A^{-1}y(n) = y(n-1). \tag{10.29}$$

В записи (10.29) можно забыть, что $y(n)$ был двумерный вектор, а A — матрица второго порядка. Будем мыслить систему (10.29) как систему m-го порядка. Решение этой системы будем искать в виде

$$y(n) = \xi q^n \tag{10.30}$$

где $q = \text{const} \neq 0$, а ξ — ненулевой m-мерный вектор. Подставляя (10.30) в (10.29), получим

$$\xi q^n = A\xi q^{n-1},$$

а сокращая на $q^{n-1} \neq 0$, приходим к системе

$$\xi q = A\xi.$$

Эта система однородна, и, чтобы у нее были нетривиальные решения, определитель ее матрицы должен быть равен нулю

$$\left| A - qI \right| = 0. \tag{10.31}$$

Уравнение (10.31) — *характеристическое уравнение* системы (10.29) — является алгебраическим уравнением m-ой степени. Если все его корни q_k — собственные значения матрицы A — различны, то соответствующие собственные векторы ξ_k линейно независимы, и общее решение системы (10.29) принимает вид

$$y(n) = \sum_{k=1}^{m} c_k \xi_k q_k^n. \tag{10.32}$$

Матрица A может иметь полный набор линейно независимых собственных векторов и при наличии кратных корней характеристического уравнения (10.31). И в этом случае общее решение системы (10.29) имеет вид (10.32). Если же у канонической формы матрицы A имеются жордановы клетки, то для отыскания общего решения системы (10.29) нужно поступать так же, как и в случае систем дифференциальных уравнений. На этом мы останавливаться не будем.

Упражнение 10.2. Найти общее решение системы (10.29) с матрицей

$$A = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Ответ.

$$y(n) = \left\{ c_1 \begin{bmatrix} -\sin\dfrac{3\pi n}{4} \\ \cos\dfrac{3\pi n}{4} \end{bmatrix} + c_2 \begin{bmatrix} \cos\dfrac{3\pi n}{4} \\ \sin\dfrac{3\pi n}{4} \end{bmatrix} \right\} q^{n/2}.$$

Пример 10.2. Найти общее решение системы разностных уравнений

$$Z_{k+1} = AZ_k, \quad \text{где} \quad A = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -5 & 3 \end{bmatrix}.$$

Решение. Напишем характеристическое уравнение этой системы

$$\det\Big[A - \lambda I\Big] = \begin{vmatrix} -1-\lambda & 1 \\ -5 & 3-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 2\lambda + 2 = 0.$$

Корни этого уравнения комплексно сопряжены

$$\lambda_{1,2} = 1 \pm i = \sqrt{2} e^{\pm \frac{i\pi}{4}}.$$

Найдем один комплексный собственный вектор. Уравнение для его компонент есть

$$(-1-1-i)\xi_1 + \xi_2 = 0$$

и, следовательно, $\xi = [1 \quad (2+i)]^T$. Ему соответствует решение

$$2^{k/2} e^{k\pi i/4} \begin{bmatrix} 1 \\ 2+i \end{bmatrix} = 2^{k/2} \left[\cos\frac{k\pi}{4} + i\sin\frac{k\pi}{4}\right] \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} + i \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right).$$

Поэтому общее решение есть

$$Z_k = c_1 2^{k/2} \begin{bmatrix} \cos\dfrac{k\pi}{4} \\ 2\cos\dfrac{k\pi}{4} - \sin\dfrac{k\pi}{4} \end{bmatrix} + c_2 2^{k/2} \begin{bmatrix} \sin\dfrac{k\pi}{4} \\ 2\sin\dfrac{k\pi}{4} + \cos\dfrac{k\pi}{4} \end{bmatrix}$$

10.4 Разностная задача на собственные значения

До сих пор мы обсуждали вопросы отыскания общего решения разностного уравнения, которое зависит от k произвольных постоянных, если уравнение имеет порядок k. Чтобы выделить единственное решение разностного уравнения, как и в случае дифференциального уравнения k-го порядка, нужно задать k линейно независимых начальных или граничных условий. Как и для дифференциального уравнения, для разностного уравнения можно поставить задачу на собственные значения.

Займемся этой задачей, решение которой понадобится нам при дальнейших исследованиях. Пусть

$$-y_{n+1} + 2y_n - y_{n-1} = \lambda y_n, \quad n = 1, \ldots, N-1, \quad y_0 = y_N = 0. \tag{10.33}$$

Требуется найти такие значения параметра λ (собственные значения), при которых однородная задача (10.33) имеет нетривиальные решения. Если исключить из первого уравнения (10.33) неизвестное y_0, а из последнего уравнения — неизвестное y_N, то получим обычную алгебраическую задачу на собственные значения для трехдиагональной матрицы

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{bmatrix},$$

порядок которой равен $N-1$. Матрица A симметрична, и потому ее собственные значения действительны, а собственные векторы, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны в смысле скалярного произведения

$$(v,w) := \sum_{i=1}^{N-1} v_i w_i.$$

Найдем собственные значения и отвечающие им собственные функции задачи (10.33). Перепишем уравнение (10.33) в виде

$$-y_{n+1} + 2(1-\lambda/2)y_n - y_{n-1} = 0, \quad n = 1, \ldots, N-1$$

и предположим, что

$$|1-\lambda/2| \leqslant 1, \quad \text{т.е.} \quad 0 \leqslant \lambda \leqslant 4. \tag{10.34}$$

Тогда для некоторого α можно положить

$$1-\lambda/2 = \cos(\alpha/N) \tag{10.35}$$

и переписать уравнение так

$$y_{n+1} - 2\cos\frac{\alpha}{N} y_n + y_{n-1} = 0. \tag{10.36}$$

Характеристическое уравнение, отвечающее уравнению (10.36), есть

$$q^2 - 2\cos\frac{\alpha}{N} q + 1 = 0,$$

а его корни суть

$$q_{1,2} = \cos\frac{\alpha}{N} \pm \sqrt{\cos^2\frac{\alpha}{N} - 1} = \cos\frac{\alpha}{N} \pm i\sin\frac{\alpha}{N} = e^{\pm\alpha i/N}.$$

Тем самым,

$$y_n = c_1 \sin\frac{\alpha n}{N} + c_2 \cos\frac{\alpha n}{N} \tag{10.37}$$

есть общее решение уравнения (10.36). Потребуем, чтобы это решение удовлетворяло граничным условиям (10.34). Будем иметь

$$y_0 = c_2 = 0, \quad y_N = c_1 \sin\alpha = 0. \tag{10.38}$$

Эти два уравнения представляют собой однородную систему линейных уравнений относительно неизвестных c_1 и c_2. Указанная система будет иметь нетривиальное решение, если определитель ее матрицы

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \sin\alpha & 0 \end{bmatrix}$$

будет равен нулю, т.е. при $\sin\alpha = 0$ и, следовательно,

$$\alpha = k\pi, \quad k \in \mathbb{Z}. \tag{10.39}$$

Из (10.35) находим

$$\lambda = \lambda_k = 2\left(1 - \cos\frac{k\pi}{N}\right) = 4\sin^2\frac{k\pi}{2N}, \quad k \in \mathbb{Z}, \tag{10.40}$$

а из (10.38) —

$$y_n = y_n^{(k)} = c_1 \sin\frac{k\pi n}{N}. \tag{10.41}$$

При $k = 0$ решение $y_n^{(0)} \equiv 0$ и, следовательно, число $\lambda_0 = 0$ не является собственным значением. При $k = N$ решение $y_n^{(N)} = c\sin N\pi \equiv 0$, и λ_N тоже не может быть собственным значением. Собственные значения

$$\lambda_k = 4\sin^2\frac{k\pi}{2N}, \quad k = 1, \ldots, N-1 \tag{10.42}$$

различны, ибо функция $\sin t$ при $0 < t < \pi/2$ является монотонной. Поскольку изучаемая задача эквивалентна алгебраической задаче на собственные значения для матрицы $(N-1)$ порядка, то соотношения (10.42) задают все собственные значения задачи (10.33). Собственные функции

$$y_n^{(k)} = c_1 \sin\frac{k\pi n}{N}, \quad k = 1, \ldots, N-1 \tag{10.43}$$

ортогональны. Подсчитаем их нормы

$$\|y_n^{(k)}\|^2 = \left(y_n^{(k)}, y_n^{(k)}\right) = c_1^2 \sum_{n=1}^{N-1} \sin^2\frac{k\pi n}{N} =$$

$$= c_1^2 \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1 - \cos\dfrac{2k\pi n}{N}}{2} = c_1^2 \left[\frac{N-1}{2} - \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N-1}\cos\frac{2k\pi n}{N}\right].$$

Далее,

$$\sum_{n=1}^{N-1}\cos\frac{2k\pi n}{N} = \operatorname{Re}\sum_{n=1}^{N-1}\left(e^{\frac{2ik\pi}{N}}\right)^n = \operatorname{Re}\frac{e^{2ik\pi} - e^{2ik\pi/N}}{e^{2ik\pi/N} - 1} = -1.$$

Тем самым,

$$\|y_n^{(k)}\|^2 = c_1^2\, N/2 = 1 \quad \text{при} \quad c_1 = \sqrt{2/N}, \tag{10.44}$$

а ортонормированные собственные функции суть

$$y_n^{(k)} = \sqrt{2/N}\,\sin\frac{k\pi n}{N}, \quad k = 1, \ldots, N-1. \tag{10.45}$$

Из (10.42) следует, что для всех собственных значений предположение (10.34) выполнено. Поэтому в рассмотрении противоположного предположения смысла нет.

Упражнение 10.3. Решить следующую задачу на собственные значения

$$\begin{aligned} &-y_{n+1} + 2y_n - y_{n-1} = \lambda y_n, \quad n = 1, \ldots, N-1, \\ &-y_1 + y_0 + \frac{\lambda}{2}y_0 = 0, \quad y_N - y_{N-1} + \frac{\lambda}{2}y_N = 0. \end{aligned}$$

Ответ.
$\lambda_k = 4\sin^2\dfrac{k\pi}{2N}, \quad k = 0, \ldots, N, \quad y_n^{(k)} = \sqrt{2/N}\,\cos\dfrac{k\pi n}{N}.$

10.5 Сеточное преобразование Фурье и его применения

Пусть $\{x_m\}$ — совокупность равноотстоящих узлов на оси Ox. Будем использовать обозначение

$$v(x_m) = v_m, \qquad m \in \mathbb{Z}.$$

Будем предполагать, что $v_m \in l_2$, т.е.

$$\sum_{m\in\mathbb{Z}} |v_m|^2 < \infty. \tag{10.46}$$

Определение 10.6. 2π-периодическая функция

$$(Fv_m)(\xi) = \sum_{m\in\mathbb{Z}} v_m e^{-im\xi} = \tilde{v}(\xi) \tag{10.47}$$

называется сеточным преобразованием Фурье.

Определение 10.7. Обратным сеточным преобразованием Фурье называется сеточная функция

$$(F^{-1}\tilde{v})_m = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \tilde{v}(\xi)e^{im\xi}d\xi = v_m. \tag{10.48}$$

Замечание 10.4. Соотношение (10.47) на самом деле представляет собой сумму ряда Фурье, коэффициентами которого являются значения рассматриваемой нами сеточной функции v_m. С этой точки зрения (10.48) есть формула для коэффициентов Фурье 2π-периодической функции $\tilde{v}(\xi)$.

Замечание 10.5. Можно было бы называть сеточным преобразованием Фурье функцию

$$Fv_m = \sum_{m\in\mathbb{Z}} hv_m e^{-i(mh)\xi/h} \equiv \tilde{v}(\xi/h), \quad \xi/h = \xi', \tag{10.49}$$

где h — расстояние между соседними узлами $h = x_m - x_{m-1}$. Тогда обратное преобразование приняло бы вид

$$F^{-1}\tilde{v} = \frac{1}{2\pi h}\int\limits_0^{2\pi} \tilde{v}(\xi')e^{i(mh)\xi/h}d\xi = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\pi/h}^{\pi/h} \tilde{v}(\xi')e^{i(mh)\xi'}d\xi'. \tag{10.50}$$

Устремляя в (10.49) и в (10.50) h к нулю, получим обычные прямое и обратное преобразование Фурье:

$$Fv(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} v(x)e^{-ix\xi}dx = \tilde{v}(\xi),$$

$$F^{-1}\tilde{v}(\xi) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \tilde{v}(\xi)e^{ix\xi}d\xi = v(x).$$

Для дальнейшего нам потребуется известное из теории рядов Фурье равенство Парсеваля

$$\int\limits_0^{2\pi} |\tilde{v}|^2 d\xi =: \|\tilde{v}\|^2_{L_2(0,2\pi)} = \frac{1}{2\pi}\|v_m\|^2_{l_2} := \frac{1}{2\pi}\sum_{m\in\mathbb{Z}} |v_m|^2. \tag{10.51}$$

Пусть T есть оператор сдвига направо, т.е.

$$Tv_m = v_{m+1}.$$

Обратным к нему будет оператор сдвига налево

$$T^{-1}v_m = v_{m-1}.$$

Найдем сеточное преобразование Фурье этих операторов

$$F(Tv_m) = \sum_{m\in\mathbb{Z}} v_{m+1}e^{-im\xi}e^{-i\xi}e^{i\xi} = e^{i\xi}\tilde{v}(\xi).$$

Аналогично

$$F(T^{-1}v_m) = e^{-i\xi}\tilde{v}(\xi).$$

Теперь найдем преобразование Фурье разностей. Имеем

$$F(\nabla v_{m+1}) = F(T-I)v_m = \left(e^{i\xi}-1\right)\tilde{v}(\xi), \tag{10.52}$$

$$F(\nabla v_m) = \left(I-T^{-1}\right)v_m = \left(1-e^{-i\xi}\right)\tilde{v}(\xi), \tag{10.53}$$

$$\begin{aligned} F(\nabla^2 v_m) &= -(F(\nabla v_{m+1}-\nabla v_m) = \left(e^{i\xi}-1-1+e^{-i\xi}\right)\tilde{v}(\xi) = \\ &= \left(e^{i\xi/2}-e^{-i\xi/2}\right)^2\tilde{v}(\xi) = -\left(4\sin^2\xi/2\right)\tilde{v}(\xi). \end{aligned} \tag{10.54}$$

Приведем примеры использования сеточного преобразования Фурье для отыскания решений разностных уравнений.

Пример 10.3. Требуется найти принадлежащее l_2 решение следующей задачи

$$-u_{m-1}+2u_m-u_{m+1}+a^2u_m = b\delta_{m,0}, \tag{10.55}$$

где $a>0$ и b — некоторые постоянные, а $\delta_{m,0}$ — символ Кронекера, т.е. $\delta_{0,0}=1$, а при $m\neq 0$ $\delta_{m,0}=0$.

Применяя к этому уравнению сеточное преобразование Фурье и принимая во внимание соотношение (10.54), будем иметь

$$\left(4\sin^2\frac{\xi}{2}+a^2\right)\tilde{u}(\xi) = b.$$

Поскольку коэффициент при $\tilde{u}(\xi)$ отличен от нуля, это уравнение можно разрешить относительно $\tilde{u}(\xi)$:

$$\tilde{u}(\xi) = \frac{d}{4\sin^2\dfrac{\xi}{2}+a^2}.$$

Применим теперь к $\tilde{u}(\xi)$ обратное преобразование Фурье, найдем, что

$$u_m = \frac{b}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{e^{im\xi}d\xi}{4\sin^2\dfrac{\xi}{2}+a^2}. \tag{10.56}$$

Для вычисления этого интеграла можно либо воспользоваться таблицами интегралов (например, великолепными таблицами И.С. Градштейна и И.М. Рыжика), либо найти интеграл самостоятельно с использованием теоремы о вычетах. Поскольку второй путь не слишком длинный, выберем его. Для этого перейдем в интеграле к комплексной переменной

$$z = e^{i\xi}.$$

Тогда

$$ie^{i\xi}d\xi = dz, \quad \left(\sin\frac{\xi}{2}\right)^2 = \left(\frac{e^{i\xi/2} - e^{-i\xi/2}}{2i}\right)^2 = \frac{z + z^{-1} - 2}{-4}$$

и, следовательно,

$$u_m = \frac{b}{2\pi} \int\limits_{|z|=1} \frac{z^m dz}{-z^2 + (2 + a^2)z - 1}. \tag{10.57}$$

Если $m \geqslant 0$, то у подынтегральной функции имеются два простых полюса в нулях z_1 и z_1^{-1} знаменателя, причем

$$z_1 = 1 - a\sqrt{1 + a^2/4} + a^2/2 < 1$$

— тот нуль, который расположен внутри контура $|z| = 1$. Тем самым,

$$u_m = b \operatorname*{res}_{z_1} \left[\frac{z^m}{-z^2 + (2 + a^2)z - 1}\right] = b\frac{z_1^m}{-2z_1 + 2 + a^2} = \frac{b}{2a\sqrt{1 + a^2/4}} z_1^m.$$

При $m < 0$ у подынтегральной функции в (10.57) появляется еще один полюс при $z = 0$, полюс порядка $|m|$, и нужно находить еще один вычет. Однако этой процедуры можно избежать, если в (10.57) сделать замену переменной

$$z = \zeta^{-1}$$

и принять во внимание, что она меняет направление обхода контура интегрирования. Учитывая, что $dz = -d\zeta/\zeta^2$, находим

$$u_{-|m|} = \frac{-b}{2\pi} \oint\limits_{|\zeta|=1} \frac{\zeta^{|m|} d\zeta}{-\zeta^2 + (2 + a^2)\zeta - 1}.$$

Меняя направление обхода на положительное, будем иметь

$$u_m = \frac{b}{2a\sqrt{1 + a^2/4}} z_1^{|m|}.$$

Замечание 10.6. Если в уравнении (10.55) положить $a = 0$ или заменить a на ia, где $a \in (-2, 2)$, то решений, принадлежащих l_2, это уравнение иметь не будет. Отражением этого факта будет невозможность отыскания решения при помощи сеточного преобразования Фурье, ибо интеграл в (10.57) будет расходящимся.

11

Ортогональные многочлены

11.1 Общие ортогональные многочлены

Функцию $\rho(x) \not\equiv 0$ будем называть весовой функцией на интервале $(-1, 1)$, если на этом интервале она неотрицательна и интегрируема.

Пусть на $(-1, 1)$ задана последовательность многочленов

$$P_0(x), P_1(x), \ldots, P_n(x), \ldots, \tag{11.1}$$

в которой каждый многочлен $P_n(x)$ имеет степень n. Если для любых двух многочленов из этой последовательности выполняется условие

$$(\, P_m \,,\, P_n \,) := \int\limits_{-1}^{1} \rho(x) P_m(x) P_n(x) dx = 0, \quad m \neq n,$$

то многочлены (11.1) называются ортогональными на $(-1, 1)$ с весом $\rho(x)$.

Лемма 11.1. *Если в системе из $(n+1)$ ортогональных многочленов*

$$P_0(x), P_1(x), \ldots, P_n(x)$$

каждый многочлен $P_k(x)$ имеет степень k, то всякий многочлен $Q_n(x)$ степени n можно единственным образом представить в виде

$$Q_n(x) = a_0 P_0(x) + a_1 P_1(x) + \cdots + a_n P_n(x). \tag{11.2}$$

Доказательство. Пусть ортогональные многочлены $P_k(x)$ имеют вид

$$P_k(x) = c_0^{(k)} + c_1^{(k)} x + \cdots + c_k^{(k)} x^k, \quad c_k^{(k)} \neq 0,$$

а многочлен

$$Q_n(x) = c_0 + c_1 x + \cdots + c_n x^n.$$

Подставляя эти представления в (11.2)

$$c_0 + c_1 x + \dots + c_n x^n = a_0 c_0^{(0)} + a_1(c_0^{(1)} + c_1^{(1)} x) + a_2(c_0^{(2)} + c_1^{(2)} x + c_2^{(2)} x^2) + \\ + \dots + a_n(c_0^{(n)} + c_1^{(n)} x + c_2^{(n)} x^2 \dots + c_n^{(n)} x^n)$$

и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях x^k, получим следующую систему линейных алгебраических уравнений для определения неизвестных коэффициентов a_k

$$\begin{array}{ccccccccccc} c_0^{(0)} a_0 & + & c_0^{(1)} a_1 & + & c_0^{(2)} a_2 & + & \dots & + & c_0^{(n)} a_n & = & c_0, \\ & & c_1^{(1)} a_1 & + & c_1^{(2)} a_2 & + & \dots & + & c_1^{(n)} a_n & = & c_1, \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & & & & & & c_n^{(n)} a_n & = & c_n. \end{array}$$

По условию теоремы коэффициенты $c_k^{(k)}$ рассматриваемой системы многочленов отличны от нуля, и, следовательно, эта алгебраическая система имеет единственное решение. Лемма доказана.

Замечание 11.1. Умножая соотношение (11.2) на $\rho(x)P_k(x)$ и интегрируя результат по интервалу $(-1, 1)$, легко находим, что

$$a_k = \frac{(\, Q_n \,,\, P_k \,)}{\|P_k\|^2}, \quad \|P_k\|^2 = (\, P_k \,,\, P_k \,).$$

Лемма 11.2. *Для всякой весовой функции $\rho(x)$ существует единственная последовательность* ***ортонормированных*** *многочленов $\{P_n(x)\}$, имеющих положительный коэффициент при старшей степени.*

Доказательство. Обозначим коэффициент при старшей степени x многочлена $P_n(x)$ через μ_n. Доказательство теоремы проведем методом полной математической индукции. Имеем, $P_0(x) = \mu_0$, и, следовательно,

$$(\, P_0 \,,\, P_0 \,) = \mu_0^2 (\, 1 \,,\, 1 \,) = 1.$$

Поэтому

$$\mu_0 = 1/\sqrt{(\, 1 \,,\, 1 \,)}$$

и многочлен $P_0(x)$ определен.

Пусть определены ортонормированные многочлены

$$P_0(x), P_1(x), \dots, P_{n-1}(x).$$

Определим многочлен $P_n(x)$. Будем его искать в виде $P_n(x) = \mu_n x^n + Q_{n-1}(x)$. В силу леммы 11.1 находим, что

$$P_n(x) = \mu_n x^n + \sum_{k=0}^{n-1} a_k P_k(x),$$

а числа μ_n и a_k подлежат определению. Умножая это соотношение скалярно на $P_m(x)$, $\quad m = 0, \ldots, n-1$, находим, что

$$0 = \mu_n \left(x^n \, , \, P_m(x) \right) + a_m, \quad m = 0, \ldots, n-1,$$

т.е.

$$a_m = -\mu_n \left(x^n \, , \, P_m(x) \right)$$

и, следовательно,

$$P_n(x) = \mu_n \left[x^n - \sum_{k=0}^{n-1} \left(x^n \, , \, P_k \right) P_k(x) \right]$$

есть произвольный ортогональный многочлен степени n. Умножая его скалярно на самого себя и требуя нормированности, находим

$$1 = \mu_n^2 \underbrace{\left(\left(x^n - \sum_{k=0}^{n-1} (x^n \, , \, P_k) P_k(x) \right)^2 , \, 1 \right)}_{\overset{\vee}{0}} .$$

Отсюда определяем $\mu_n > 0$. Лемма доказана.

Лемма 11.3. *Если $P_n(x)$ принадлежит совокупности ортогональных многочленов, то для всякого многочлена $Q_m(x)$ степени $m < n$*

$$(Q_m \, , \, P_n(x)) = 0, \quad m < n. \tag{11.3}$$

Доказательство. В силу леммы 11.1

$$Q_m(x) = a_0 P_0(x) + a_1 P_1(x) + \cdots + a_m P_m(x).$$

Подставляя это представление в (11.3), получаем утверждение леммы.

Лемма 11.4. *Если весовая функция $\rho(x)$ четная, то каждый ортогональный многочлен $P_n(x)$ содержит только те степени x, которые имеют одинаковую с номером n четность, т.е.*

$$P_n(-x) \equiv (-1)^n P_n(x). \tag{11.4}$$

Доказательство.Пусть $\rho(x) = \rho(-x)$ и

$$\int_{-1}^{1} \rho(x)P_n(x)P_m(x)dx = 0, \quad m = 0, \ldots, n-1.$$

Заменой переменной интегрирования $x = -t$ эти условия приводятся к виду

$$\int_{-1}^{1} \rho(t)P_n(-t)P_m(-t)dt = 0, \quad m = 0, \ldots, n-1,$$

т.е. $P_m(-t)$ тоже ортогональные многочлены. Но в силу леммы 11.2 любой ортогональный многочлен определен с точностью до множителя, и поэтому

$$P_n(-x) = c_n P_n(x).$$

Отсюда в частности следует, что

$$(-1)^n a_n x^n = c_n a_n x^n,$$

т.е. $c_n = (-1)^n$ и поэтому

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x).$$

Лемма доказана.

Теорема 11.1. *Для любых трех последовательных ортогональных многочленов справедлива рекуррентная формула*

$$\alpha_n P_{n+1}(x) = (x - \beta_n)P_n(x) - \gamma_n P_{n-1}(x). \tag{11.5}$$

Доказательство. Перепишем (11.5) в виде

$$xP_n(x) = \alpha_n P_{n+1}(x) + \beta_n P_n(x) + \gamma_n P_{n-1}(x).$$

В левой части этого равенства стоит многочлен степени $n+1$. В силу леммы 11.1 он может быть разложен по многочленам $P_0, \ldots, P_{n+1}$

$$xP_n(x) = \sum_{k=0}^{n+1} a_k^{(n+1)} P_k(x), \tag{11.6}$$

где в силу замечания 11.1

$$a_k^{(n+1)} = \frac{(\, xP_n \,,\, P_k \,)}{\|P_k\|^2}. \tag{11.7}$$

Но тогда с учетом (11.6)

$$a_k^{(n+1)} = \frac{1}{\|P_k\|^2}(\,P_n\,,\,xP_k\,) = \frac{1}{\|P_k\|^2}\left(\,P_n\,,\,\sum_{j=0}^{k+1} a_j^{(k+1)} P_j\,\right) =$$

$$= \frac{1}{\|P_k\|^2}\sum_{j=0}^{k+1} a_j^{(k+1)}\,(\,P_n\,,\,P_j\,)\,.$$

Поскольку

$$(P_n, P_0) = 0, \quad (P_n, P_1) = 0, \ldots, (P_n, P_{n-1}) = 0,$$

то при $k+1 \leqslant n-1$ коэффициенты $a_k^{(n+1)} = 0$ и поэтому

$$xP_n(x) = a_{n+1}^{(n+1)} P_{n+1}(x) + a_n^{(n+1)} P_n(x) + a_{n-1}^{(n+1)} P_{n-1}(x), \tag{11.8}$$

т.е.

$$\alpha_n = a_{n+1}^{(n+1)}, \quad \beta_n = a_n^{(n+1)}, \quad \gamma_n = a_{n-1}^{(n+1)}. \tag{11.9}$$

Теорема доказана.

Теорема 11.2. *Все нули ортогонального многочлена $P_n(x)$ действительны, различны и расположены на интервале $(-1, 1)$.*

Доказательство. Достаточно показать, что многочлен $P_n(x)$ на $(-1, 1)$ меняет знак n раз. Допустим противное, т.е. что многочлен $P_n(x)$ меняет знак только в точках $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_m$, где $m < n$. Многочлен

$$Q_m(x) = (x - \xi_1)(x - \xi_2)\ldots(x - \xi_m)$$

тоже меняет знак только в этих точках. Следовательно, произведение $P_n(x)Q_m(x) \not\equiv 0$ сохраняет знак на $(-1, 1)$ и следовательно

$$\int_{-1}^{1} \rho(x) P_n(x) Q_m(x) dx \neq 0,$$

что противоречит лемме 11.3. Противоречие снимается, если $n = m$. Теорема доказана.

Замечание 11.2. В силу доказанной теоремы для нулей $x_k^{(n)}$ ортогонального многочлена $P_n(x)$ имеют место неравенства

$$-1 < x_1^{(n)} < x_2^{(n)} < \cdots < x_k^{(n)} < \cdots < x_n^{(n)} < 1. \tag{11.10}$$

Теорема 11.3. *Пусть $< x_1^{(n)} < \cdots < x_n^{(n)}$ — нули $P_n(x)$. Тогда нули многочленов $P_n(x)$ и $P_{n-1}(x)$ перемежаются, т.е.*

$$-1 < x_1^{(n)} < x_1^{(n-1)} < x_2^{(n)} < \cdots < x_{n-1}^{(n-1)} < x_n^{(n)} < 1.$$

11.2 Многочлены Чебышева первого рода

Рассмотрим следующее однородное разностное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами

$$y_{n+1} - 2xy_n + y_{n-1} = 0. \tag{11.11}$$

Здесь x — параметр. Поставим для (11.11) начальные условия

$$y_0 = 1, \quad y_1 = x. \tag{11.12}$$

Тогда

$$\begin{aligned} y_2 &= 2x \cdot x - 1 = 2x^2 - 1, \\ y_3 &= 2x(2x^2 - 1) - x = 4x^3 - 3x, \\ y_4 &= 8x^4 - 8x^2 + 1, \ldots. \end{aligned} \tag{11.13}$$

Очевидно, что значение решения задачи (11.11), (11.12) в узле n есть многочлен от x степени n.

Найдем решение задачи (11.11), (11.12) в явном виде. Характеристическое уравнение разностного уравнения (11.11) имеет вид

$$q^2 - 2xq + 1 = 0,$$

а его корни суть

$$q_1 = q = x + \sqrt{x^2 - 1} \quad \text{и} \quad q_2 = 1/q. \tag{11.14}$$

Поэтому общее решение уравнения (11.11) есть

$$y_n = c_1 q^n + c_2 q^{-n}.$$

Полагая здесь $n = 0$ и $n = 1$ и принимая во внимание начальные условия (11.12), находим, что

$$\begin{aligned} y_0 &= c_1 + c_2 = 1, \\ y_1 &= c_1 q + c_2 q^{-1} = x. \end{aligned} \tag{11.15}$$

Преобразем второе из уравнений (11.15) с учетом (11.14) и первого уравнения,

$$\begin{aligned} y_1 &= c_1(x + \sqrt{x^2 - 1}) + c_2(x - \sqrt{x^2 - 1}) = \\ &= (c_1 + c_2)x + (c_1 - c_2)\sqrt{x^2 - 1} = x + (c_1 - c_2)\sqrt{x^2 - 1} = x. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что $c_1 = c_2$, а с учетом (11.15) находим, что

$$c_1 = c_2 = 1/2,$$

и поэтому

$$y_n = \frac{q^n + q^{-n}}{2} \tag{11.16}$$

есть решение задачи (11.11), (11.12).

Как было замечено раньше, это есть многочлен от x степени n. Пусть $|x| < 1$. Тогда в силу (11.14)

$$q = x + i\sqrt{1 - x^2}$$

и, следовательно, $|q| = 1$. Пусть $q = e^{i\varphi}$. Тогда

$$\begin{aligned} &x = \cos\varphi, \quad \varphi = \arccos x, \\ &y_n = \frac{e^{in\varphi} + e^{-in\varphi}}{2} = \cos n\varphi = \cos[n \arccos x]. \end{aligned} \tag{11.17}$$

Определение 11.1. Алгебраические многочлены

$$T_n(x) = \cos[n \arccos x], \quad |x| < 1, \quad n = 0, 1, \ldots \tag{11.18}$$

называются *многочленами Чебышева* первого рода.

Они принадлежат к семейству ортогональных многочленов. Определим весовую функцию $\rho(x)$, при которой многочлены $T_n(x)$ будут ортогональными. Из (11.17) следует, что

$$d\varphi = -\frac{dx}{\sqrt{1 - x^2}}, \quad x = 1 \text{ при } \varphi = 0 \quad \text{и} \quad x = -1 \text{ при } \varphi = \pi.$$

Принимая теперь во внимание (11.18), находим, что при $m \neq n$

$$0 = \int\limits_0^\pi \cos m\varphi \, \cos n\varphi \, d\varphi = \int\limits_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}} T_m(x) T_n(x) dx.$$

Тем самым

$$\rho(x) = (1 - x^2)^{-1/2}. \tag{11.19}$$

11.3 Свойства многочленов Чебышева

1°. При четном n многочлен $T_n(x)$ является четной функцией x, а при нечетном n — нечетной.

Доказательство следует из (11.19) и леммы 11.4.

2°. Коэффициент при старшей степени многочлена $T_n(x)$ для $n \geqslant 1$ равен 2^{n-1}, т.е. $\mu_n = 2^{n-1}$, а

$$T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \ldots.$$

Доказательство. См. рекуррентную формулу (11.11).

3°. Нули многочлена $T_n(x)$ расположены в точках

$$x_k = \cos\frac{(2k-1)\pi}{2n}, \quad k = 1, 2, \ldots, n. \tag{11.20}$$

Доказательство. Из (11.18) находим, что

$$n \arccos x_k = -\frac{\pi}{2} + k\pi = \frac{(2k-1)\pi}{2}$$

или

$$\arccos x_k = \frac{(2k-1)\pi}{2n},$$

т.е.

$$x_k = \cos\frac{(2k-1)\pi}{2n}, \quad k = 1, 2, \ldots, n.$$

Так как функции $T_n(x)$ являются либо четными, либо нечетными, то нули $T_n(x)$ расположены симметрично относительно начала координат

$$x_{n+1-k} = -x_k = -\cos\frac{(2k-1)\pi}{2n}.$$

4°. $\max\limits_{[-1,1]} |T_n(x)| = 1$, причем

$$T_n(x_m) = (-1)^m,$$

где

$$x_m = \cos\frac{m\pi}{n}, \quad m = 0, \ldots, n. \tag{11.21}$$

Доказательство очевидно.

5°. Среди всех многочленов степени n с единичным коэффициентом при старшей степени многочлен

$$\overline{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x), \quad n \geqslant 1$$

на $[-1, 1]$ имеет наименьшее значение максимума модуля.

Доказательство. Допустим противное, т.е. допустим существование такого многочлена $\overline{P}_n(x) = x^n + \ldots$, что

$$\max_{[-1,1]} |\overline{P}_n(x)| < \max_{[-1,1]} |\overline{T}_n(x)|. \tag{11.22}$$

Тогда $\overline{T}_n(x) - \overline{P}_n(x) \not\equiv 0$ и это есть многочлен степени не выше $(n-1)$. Более того, в $(n+1)$ точке (11.21) этот многочлен принимает отличные от нуля значения с чередующимися знаками.

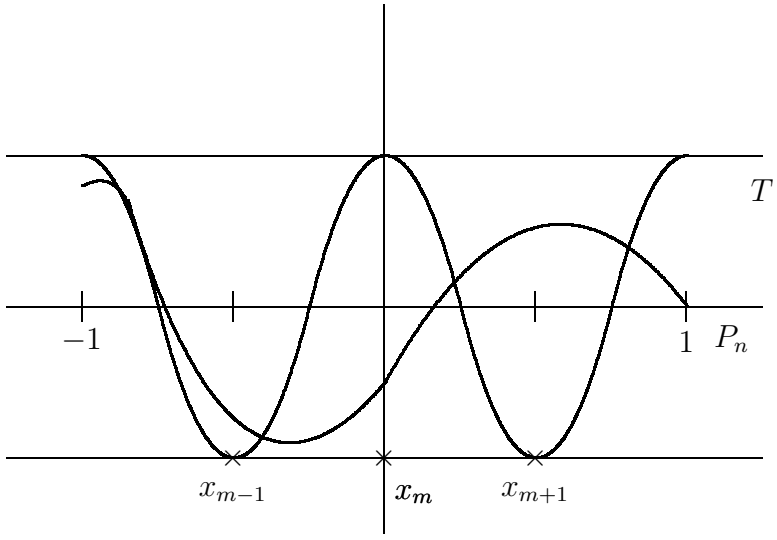


Рис. 1

Но это означает, что алгебраический многочлен $\overline{T}_n(x) - \overline{P}_n(x)$ степени меньшей n обращается в нуль по крайней мере в n точках, что невозможно.

Замечание 11.3. Можно доказать, что если $\overline{P}_n(x) = x^n + \ldots, \quad n \geqslant 1$, и

$$\max_{[-1,1]} |\overline{P}_n(x)| = 2^{-n+1},$$

то $\overline{P}_n(x) \equiv \overline{T}_n(x) = 2^{-n-1} T_n(x)$.

Благодаря свойству 5° многочлены Чебышева $T_n(x)$ называются многочленами, наименее уклоняющимися от нуля.

6°. Если $x > 1$, то

$$T_n(x) = \operatorname{ch} n \operatorname{Arch} x,$$

где

$$\operatorname{Arch} x = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}).$$

Доказательство. В силу (11.16)

$$T_n(x) = \frac{q^n + q^{-n}}{2} = \frac{e^{n \ln q} + e^{-n \ln q}}{2} =$$
$$= \operatorname{ch} n \, \ln q = \operatorname{ch} n \, \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}).$$

Замечание 11.4. $\operatorname{Arch} x$ — обратная функция к $\operatorname{ch} x$.

Упражнение 11.1. Доказать, что

$$\operatorname{ch} \operatorname{Arch} x = x,$$
$$\operatorname{Arch} \operatorname{ch} x = x.$$

11.4 Многочлены Лежандра

Многочленами Лежандра называются многочлены, которые ортогональны друг другу на $[-1, 1]$ с весом $\rho(x) \equiv 1$. Обозначаются они через $P_n(x)$

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) P_n(x) dx = 0, \quad m \neq n.$$

Если $P_0(x) \equiv 1$, то $P_1(x) \equiv x$.

Трехточечное рекуррентное соотношение для многочленов Лежандра имеет вид

$$(n+1)P_{n+1}(x) - (2n+1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x) = 0$$

и следовательно

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x),$$
$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3),$$
$$P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$$

и т.д. Общий вид $P_n(x)$ задается формулой Родрига

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n.$$

11.5 Некоторые другие классические ортогональные многочлены

Как следует из леммы 11.2, систем ортонормированных многочленов бесконечно много. Рассмотренные нами ортогональные многочлены Чебышева первого рода и Лежандра принадлежат семейству классических

ортогональных многочленов, которые широко используются в различных приложениях. Эти многочлены потребуются и нам. Среди других классических ортогональных многочленов отметим многочлены Чебышева второго рода, многочлены Якоби, многочлены Эрмита и Лагерра.

11.5.1 Многочлены Чебышева второго рода

Обозначаются эти многочлены через $U_n(x)$ и, как и многочлены Чебышева первого рода, определяются рекуррентным соотношением (11.11), но при других, по сравнению с (11.12), начальных условиях. Именно,

$$U_0(x) = 1, \quad U_1(x) = 2x.$$

Тогда

$$U_n(x) = \frac{\sin[(n+1)\arccos x]}{\sqrt{1-x^2}}, \qquad n = 0, 1, \ldots.$$

Весовая функция этих многочленов есть

$$\rho(x) = \sqrt{1-x^2}, \quad -1 \leqslant x \leqslant 1.$$

11.5.2 Многочлены Якоби

Эти многочлены обозначаются через $P_n(x;\alpha,\beta)$ и определяются весовой функцией

$$\rho(x) = (1-x)^\alpha (1+x)^\beta, \qquad \alpha > -1, \quad \beta > -1.$$

Рекуррентное соотношение для стандартных многочленов Якоби очень громоздко, и приводить его мы не будем. Сами же многочлены задаются соотношением

$$P_n(x;\alpha,\beta) = \frac{(-1)^n}{n!2^n}(1-x)^\alpha(1+x)^\beta \frac{d^n}{dx^n}\left[(1-x)^\alpha(1+x)^\beta(1-x^2)^n\right].$$

Очевидно, что многочлены Чебышева первого и второго рода, равно как и многочлены Лежандра, являются частными случаями многочленов Якоби при

$$\alpha = \beta = -1/2, \qquad \alpha = \beta = 1/2, \quad \text{и} \quad \alpha = \beta = 0,$$

соответственно, однако $T_n(x)$ и $U_n(x)$ только пропорциональны соответствующим $P_n(x;\alpha,\beta)$:

$$T_n(x) = P_n(x;-1/2,-1/2), \quad U_n(x) = P_n(x;1/2,1/2), \quad P_n(x) = P_n(x,0,0).$$

11.5.3 Многочлены Эрмита

Эти многочлены ортогональны не на отрезке $[-1\,,\,1]$, а на всей оси. Весовая функция, задающая многочлены Эрмита, есть

$$\rho(x) = e^{-x^2},$$

а сами многочлены определяются соотношением

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

Рекуррентные соотношения для них имеют вид

$$\frac{1}{2} H_{n+1} = x H_n(x) - H_{n-1}(x), \quad H_0 = 1, \quad H_1 = 2x.$$

11.5.4 Многочлены Лагерра

Эти многочлены ортогональны на $(0, \infty)$ с весом

$$\rho(x) = x^\alpha e^{-x}, \quad \alpha > -1,$$

задаются соотношением (формула Родрига)

$$L_n(x;\alpha) = \frac{1}{n!} x^{-\alpha} e^x \frac{d^n}{dx^n} \left(x^{\alpha+n} e^{-x} \right)$$

и удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$(n+1) L_{n+1}(x;\alpha) = (\alpha + 2n + 1 - x) L_n(x;\alpha) - (\alpha + n) L_{n-1}(x;\alpha)$$

при

$$L_0(x;\alpha) = 1, \quad L_1(x;\alpha) = \alpha + 1 - x.$$

12

Численное дифференцирование

12.1 Введение

Численное дифференцирование применяется, если функция задана таблицей или если ее трудно продифференцировать аналитически. Допустим, что в окрестности некоторой точки x у функции $f(x)$ существует производная. По определению

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}.$$

Если отказаться от предельного перехода, то можно положить

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \tag{12.1}$$

Это и есть простейшая формула численного дифференцирования. Оценим ее погрешность в предположении, что значения функции $f(x)$ вычисляются точно, и она дважды непрерывно дифференцируема. Используя формулу Тейлора, находим, что

$$\begin{aligned} &\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} = \frac{f(x) + \Delta x f'(x) + \frac{(\Delta x)^2}{2} f''(\xi) - f(x)}{\Delta x} = \\ &= f'(x) + \frac{\Delta x}{2} f''(\xi), \quad \xi \in (x, x + \Delta x). \end{aligned} \tag{12.2}$$

Отсюда заключаем, что формула (12.1) для функции $f(x) \in C^2$ имеет погрешность первого порядка малости относительно Δx.

Однако, в силу формулы конечных приращений Лагранжа,

$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} = f'(\xi), \quad \xi \in (x, x + \Delta x), \tag{12.3}$$

т.е. в промежутке между x и Δx существует такая точка, что отношение из левой части (12.3), которое будем называть разностным отношением, совпадает со значением производной в этой точке. Конечно, положение ξ зависит от функции f и, вообще говоря, не известно. Тем не менее, если функция $f(x)$ является многочленом второй степени $P_2(x)$, то точка ξ из (12.3) расположена точно посредине между x и $x + \Delta x$, т.е. $\xi = x + \Delta x/2$. В самом деле, разностное отношение постоянной равно нулю как и производная, разностное отношение линейной функции совпадает с ее производной в любой точке, а

$$\frac{(x+\Delta x)^2 - x^2}{\Delta x} = 2(x + \Delta x/2).$$

Это обстоятельство наводит на мысль, что и для других функций разностное отношение из (12.3) будет лучше аппроксимировать производную в точке $x + \Delta x/2$, чем в точке x. В самом деле, раскладывая значения $f(x+\Delta x)$ и $f(x)$ по формуле Тейлора в точке $x + \Delta x/2$, найдем, что

$$\begin{aligned} f(x+\Delta x) =& f(x+\Delta x/2) + \frac{\Delta x}{2} f'(x+\Delta x/2) + \frac{(\Delta x)^2}{8} f''(x+\Delta x/2) + \\ &+ \frac{1}{3!}\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 f'''(x+\theta_1 \Delta x), \end{aligned}$$

а

$$\begin{aligned} f(x) =& f(x+\Delta x/2) - \frac{\Delta x}{2} f'(x+\Delta x/2) + \frac{(\Delta x)^2}{8} f''(x+\Delta x/2) - \\ &- \frac{1}{3!}\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 f'''(x+\theta_2 \Delta x) \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$\frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = f'(x+\Delta x/2) + \frac{(\Delta x)^2}{4!} f'''(\eta).$$

Тем самым, для функций из C^3 формула

$$f'(x+\Delta x/2) \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \tag{12.4}$$

имеет погрешность второго порядка малости относительно Δx.

Пусть $x_i = x_0 + ih$, где $i \in \mathbb{Z}$, а $h > 0$ — шаг сетки. Тогда, полагая в (12.2) $x = x_i$, а $\Delta x = h$, получим

$$\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} = f'(x_i) + \frac{h}{2} f''(\xi_i). \tag{12.5}$$

Если же в (12.2) положить $\Delta x = -h$ и снова $x = x_i$, то

$$\frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{-h} = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} = f'(x_i) - \frac{h}{2} f''(\tilde{\xi}_i). \tag{12.6}$$

Из (12.5), (12.6) вытекает, что и приближенная формула

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \tag{12.7}$$

и приближенная формула

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} \tag{12.8}$$

являются формулами первого порядка точности. Однако их погрешности, вообще говоря, имеют разные знаки. Поэтому есть надежда, что у полусуммы правых частей (12.7), (12.8) погрешность будет иметь бóльший порядок малости относительно h (при бóльшей гладкости). В самом деле, используя формулу Тейлора, находим, что

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\left[\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}\right] = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} = \\
&= \left[f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2} f_i'' + \frac{h^3}{6} f'''(\bar{\xi}_i) - \left(f_i - hf_i' + \frac{h^2}{2} f_i'' - \frac{h^3}{6} f'''(\bar{\bar{\xi}}_i)\right)\right]/2h = \\
&= f_i' + \frac{h^2}{6}\,\frac{f'''(\bar{\xi}_i) + f'''(\bar{\bar{\xi}}_i)}{2} = f_i' + \frac{h^2}{6} f'''(\xi_i),\ \ \xi_i \in (\bar{\xi}_i, \bar{\bar{\xi}}_i) \subset (x_{i-1}, x_{i+1}).
\end{aligned} \tag{12.9}$$

(Мы здесь для сокращения письма использовали обозначение $f_i := f(x_i)$.) Отсюда заключаем, что для $f(x) \in C^3$ формула

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} \tag{12.10}$$

(ср. с (12.4)) имеет погрешность $O(h^2)$.

Теперь вычтем из (12.5) соотношение (12.6)

$$\frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h} = h\frac{f''(\xi_i) + f''(\tilde{\xi}_i)}{2} = f''(\tilde{\tilde{\xi}}_i)h.$$

Следовательно,

$$\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = f''(\tilde{\tilde{\xi}}_i), \qquad \tilde{\tilde{\xi}}_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}), \tag{12.11}$$

т.е. левая часть этого соотношения аппроксимирует вторую производную функции $f(x)$. Исследуем погрешность этой аппроксимации в точке x_i:

$$\begin{aligned}\frac{f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}}{h^2} &= \frac{1}{h^2}\left[f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2!}f_i'' + \frac{h^3}{3!}f_i''' + \frac{h^4}{4!}f^{IV}(\bar{\xi}_i) - \right.\\ &\left. - 2f_i + f_i - hf_i' + \frac{h^2}{2!}f_i'' - \frac{h^3}{3!}f_i''' + \frac{h^4}{4!}f^{IV}(\bar{\bar{\xi}}_i)\right] = \\ &= f_i'' + \frac{h^2}{12}\frac{f^{IV}(\bar{\xi}_i)+f^{IV}(\bar{\bar{\xi}}_i)}{2} = f''(x_i) + \frac{h^2}{12}f^{IV}(\xi_i).\end{aligned} \tag{12.12}$$

Отсюда следует, что левая часть соотношения (12.12) аппроксимирует вторую производную функции $f(x) \in C^4$ с погрешностью $O(h^2)$.

Замечание 12.1. Мы уже трижды (в (12.9), (12.12) и в формуле после соотношения (12.10)) воспользовались утверждением о том, что для непрерывной функции $0.5(f(x)+f(y)) = f(z)$, где $z \in (x, y)$. Докажем это утверждение в более общем виде. Пусть $f(x) \in C[a, b]$, $m = \min_{[a,b]} f(x)$, $M = \max_{[a,b]} f(x)$, $x_1, x_2 \in [a, b]$, $\alpha > 0$, $\beta > 0$. Тогда

$$\eta = \frac{\alpha f(x_1) + \beta f(x_2)}{\alpha + \beta} = f(x_3), \quad x_3 \in [a, b].$$

В самом деле,

$$m \leqslant \frac{\alpha f(x_1) + \beta f(x_2)}{\alpha + \beta} = \eta \leqslant M.$$

и по теореме о промежуточных значениях $\eta = f(x_3)$.

Введем следующие обозначения

$$f_{x,i} := \frac{f_{i+1} - f_i}{h}, \quad f_{\bar{x},i} := \frac{f_i - f_{i-1}}{h}, \quad f_{\overset{\circ}{x},i} := \frac{1}{2}(f_{x,i} + f_{\bar{x},i}).$$

Тогда

$$f_{\bar{x}x,i} := \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}.$$

Отсюда и из (12.5), (12.6), (12.9), (12.12) находим, что

$$\begin{aligned} f_{x,i} &= f_i' + O(h),\\ f_{\bar{x},i} &= f_i' + O(h),\\ f_{\overset{\circ}{x},i} &= f_i' + O(h^2),\\ f_{\bar{x}x,i} &= f_i'' + O(h^2). \end{aligned} \tag{12.13}$$

12.2 Метод неопределенных коэффициентов

Рассмотренные простейшие формулы численного дифференцирования были построены из тех или иных эвристических соображений. Существуют и регулярные способы построения формул численного дифференцирования. Один из них — метод неопределенных коэффициентов.

Будем строить формулу для приближенного вычисления k-ой производной в следующем виде

$$f^{(k)}(x) \approx \sum_{j=0}^{n} c_j f(x_j), \quad k \leqslant n \tag{12.14}$$

и выберем c_j из тех условий, чтобы формула была точна на многочленах некоторой степени. Рассмотрим

Пример 12.1. Пусть

$$f'(h) \approx c_0 f(0) + c_1 f(h) + c_2 f(2h). \tag{12.15}$$

Потребуем, чтобы формула была точна на линейных функциях. Подставляя в (12.15) $f(x) \equiv 1$ и $f(x) \equiv x$ и требуя выполнения точного равенства, будем иметь

$$\begin{array}{rcccccc} 0 & = & c_0 & + & c_1 & + & c_2, \\ 1 & = & & & c_1 h & + & c_2 2h. \end{array}$$

Принимая c_0 за параметр, для c_1 и c_2 получим систему

$$\begin{array}{rcrcr} c_1 & + & c_2 & = & -c_0, \\ hc_1 & + & 2hc_2 & = & 1. \end{array} \tag{12.16}$$

Определитель этой системы равен h и поэтому

$$c_1 = \begin{vmatrix} -c_0 & 1 \\ 1 & 2h \end{vmatrix} \Big/ h = (-2hc_0 - 1)/h, \quad c_2 = \begin{vmatrix} 1 & -c_0 \\ h & 1 \end{vmatrix} \Big/ h = (1 + c_0 h)/h. \tag{12.17}$$

Мы построили однопараметрическое семейство трехточечных формул численного нахождения первой производной

$$f'(h) \approx c_0 f(0) - \frac{1 + 2c_0 h}{h} f(h) + \frac{1 + c_0 h}{h} f(2h).$$

При $c_0 = 0$ имеем

$$f'(h) \approx \frac{f(2h) - f(h)}{h} = f_x(h).$$

При $c_0 = -1/h$

$$f'(h) \approx \frac{f(h) - f(0)}{h} = f_{\bar{x}}(h).$$

Это уже известные нам формулы.

Потребуем теперь, чтобы (12.15) была точна на многочленах второй степени. Тогда к уравнениям (12.16) добавится еще одно уравнение

$$2h = c_1 h^2 + c_2 4h^2.$$

Подставляя сюда c_1 и c_2 из (12.17), получим

$$-(1 + 2c_0 h)h + 4(1 + c_0 h)h = 2h,$$

откуда находим $c_0 = -1/2h$. Подставляя это значение в (12.17), будем иметь $c_1 = 0$, $c_2 = 1/2h$, и поэтому

$$f'(h) \approx \frac{f(2h) - f(0)}{2h} \equiv f_{\overset{\circ}{x}}(h).$$

И эта формула нам тоже уже известна.

Построим теперь новую формулу.

Пример 12.2. Пусть (ср. с (12.15))

$$f'(2h) \approx c_0 f(0) + c_1 f(h) + c_2 f(2h). \tag{12.18}$$

Будем требовать, чтобы формула (12.18) была точна на многочленах второй степени. Подставляя в (12.18) последовательно $f(x) \equiv 1$, $f(x) \equiv x$ и $f(x) \equiv x^2$ и требуя выполнения точного равенства, получим систему

$$\begin{array}{rcrcrcl} c_0 & + & c_1 & + & c_2 & = & 0, \\ & & hc_1 & + & 2hc_2 & = & 1, \\ & & h^2 c_1 & + & 4h^2 c_2 & = & 4h. \end{array} \tag{12.19}$$

Первые два уравнения (12.19) совпадают с (12.16). Поэтому c_1 и c_2 выражаются через c_0 при помощи (12.17). Подставляя (12.17) в последнее уравнение (12.19), находим, что

$$-(2hc_0 + 1)h + 4h(1 + hc_0) = 4h$$

и, следовательно, $c_0 = 1/2h$, а с учетом (12.17)

$$c_1 = -2/h, \qquad c_2 = 3/(2h).$$

Тем самым,

$$f'(2h) \approx \frac{f_0 - 4f_1 + 3f_2}{2h} = \frac{f_2 - f_1}{h} + \frac{f_0 - 2f_1 + f_2}{2h} = f_{\bar{x},2} + \frac{h}{2} f_{\bar{x}\bar{x},2}. \quad (12.20)$$

Эта новая формула для вычисления первой производной.

Упражнение 12.1. Показать, что для $f(x) \in C^3$ формула (12.20) имеет погрешность $O(h^2)$. Сравнить погрешность этой формулы с погрешностью из (12.9).

12.3 Использование интерполяционных формул

Наиболее универсальный способ построения формул численного дифференцирования основан на использовании интерполяционных формул.

Многочлен n-ой степени $L_n(x)$ называется интерполяционным многочленом (интерполянтом) Лагранжа функции $f(x)$, если

$$L_n(x_k) = f(x_k), \quad k = 0, 1, \ldots, n,$$

где x_k, $k = 0, 1, \ldots, n$ — узлы интерполяции. Если функция $f(x)$ такова, что $f(x_k) = 0$ при $k \neq i$, а $f(x_i) = 1$, то ее интерполянтом по этим узлам является многочлен

$$\frac{(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\ldots(x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\ldots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\ldots(x_i - x_n)} \equiv$$
$$\equiv \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k} =: p_i(x).$$

В общем же случае интерполяционный многочлен Лагранжа имеет вид

$$L_n(x) \equiv \sum_{i=0}^{n} f_i p_i(x),$$

причем

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x),$$

где $R_n(x)$ — остаточный член, для которого имеет место представление

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n} (x - x_k), \quad \xi \in (x_0, x_n).$$

Полагая

$$f^{(m)}(x) \approx L_n^{(m)}(x), \qquad 0 \leqslant m \leqslant n, \tag{12.21}$$

получим формулу численного дифференцирования.

Пример 12.3. Пусть $n = 1$, $x_1 = x_0 + h$. Тогда

$$L_1(x) = f_0 \frac{x - x_1}{-h} + f_1 \frac{x - x_0}{h}, \quad L_1'(x) = \frac{f_0}{-h} + \frac{f_1}{h} = \frac{f_1 - f_0}{h}.$$

Полагая здесь $x = 0$, получим формулу (12.7), полагая $x = h$ — формулу (12.8).

Пример 12.4. Пусть теперь $n = 2$, $x_0 = 0$, $x_1 = h$, $x_2 = 2h$. Тогда

$$L_2(x) = f_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \frac{x - x_2}{x_0 - x_2} + f_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} + f_2 \frac{x - x_0}{x_2 - x_0} \frac{x - x_1}{x_2 - x_1},$$
$$L_2'(x) = f_0 \frac{2x - (x_2 + x_1)}{(-h)(-2h)} + f_1 \frac{2x - (x_2 + x_0)}{h(-h)} + f_2 \frac{2x - (x_0 + x_1)}{2h \cdot h}.$$

Отсюда

$$L_2'(x_2) = L_2'(2h) = \frac{f_0 - 4f_1 + 3f_2}{2h}, \qquad \text{(ср. с (12.20))}$$
$$L_2'(x_1) = L_2'(h) = \frac{f_2 - f_0}{2h}, \qquad \text{(ср. с (12.10))}$$
$$L_2'(x_0) = L_2'(0) = \frac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h}.$$

Последнее соотношение задает новую формулу; ее погрешность на функциях из C^3 есть $O(h^2)$.

Пример 12.5. Пусть $n = 2$, а $x_0 = 0$, $x_1 = h_1$, $x_2 = x_1 + h_2$, $m = 2$. Легко проверить, что

$$L_2''(x) = \frac{2}{-h_1(-h_1 - h_2)} f_0 + \frac{2}{h_1(-h_2)} f_1 + \frac{2}{(h_1 + h_2)h_2} f_2.$$

Если $h_1 = h_2 = h$, то

$$L_2''(x) = \frac{f_0 - 2f_1 + f_2}{h^2} = f_{\bar{x}x}(h). \tag{12.22}$$

В противном случае

$$\begin{aligned} L_2''(x) &= \frac{1}{h_1(h_1 + h_2)/2}(f_0 - f_1) + \frac{1}{h_2(h_1 + h_2)/2}(f_2 - f_1) = \\ &= \left(\frac{f_2 - f_1}{h_2} - \frac{f_1 - f_0}{h_1} \right) \frac{1}{(h_1 + h_2)/2} = \frac{2}{h_1 + h_2} \left[f_x(x_1) - f_{\bar{x}}(x_1) \right]. \end{aligned} \tag{12.23}$$

Упражнение 12.2. Доказать, что соотношение (12.23) при $h_1 \neq h_2$ аппроксимирует производную $f''(x_1)$ с погрешностью не выше $O(h_1+h_2)$. При какой гладкости $f(x)$ такая погрешность достигается?

На самом деле для построения формул численного дифференцирования удобнее использовать интерполяционный многочлен Лагранжа в форме Ньютона. Чтобы получить эту форму, запишем интерполяционный многочлен в виде

$$L_n(x) = L_0(x)+(L_1(x) - L_0(x))+(L_2(x) - L_1(x))+\cdots+(L_n(x) - L_{n-1}(x)),$$

где $L_0(x) = \text{const} = A_0$. Многочлен $L_k(x) - L_{k-1}(x)$ имеет степень k и обращается в нуль при $x = x_0, x_1, \ldots, x_{k-1}$. Поэтому

$$L_k(x) - L_{k-1}(x) = A_k \prod_{j=0}^{k-1}(x - x_j) = A_k\omega_{k-1}(x),$$

а

$$L_n(x) = A_0 + \sum_{k=1}^{n} A_k\omega_{k-1}(x). \tag{12.24}$$

Для упрощения дальнейших рассуждений будем предполагать, что узлы интерполяции являются равноотстоящими, т.е. $\Delta x_k := x_{k+1} - x_k = h$. Пусть, кроме того, $\Delta^j := \Delta(\Delta^{j-1})$.

Найдем коэффициенты A_k из представления (12.24). Для этого последовательно положим $x = x_0$, $x = x_1$ и т.д. и примем во внимание, что $L_n(x_j) = f(x_j)$. Поскольку

$$\begin{aligned} &\omega_{k-1}(x_0) = 0, \quad k = 1, 2, \ldots, n, \\ &\omega_{k-1}(x_1) = 0, \quad k = 2, \ldots, n \quad \text{и т.д.}, \end{aligned}$$

то

$$L_n(x_0) = A_0$$

и, следовательно,

$$A_0 = f(x_0) = f_0.$$

Далее,

$$L_n(x_1) = f_0 + A_1(x_1 - x_0) = f_0 + hA_1$$

и, следовательно,

$$A_1 = \frac{f_1 - f_0}{h} = \frac{\Delta f_0}{h}.$$

Аналогично,

$$L_n(x_2) = f_0 + \frac{\Delta f_0}{h}(x_2 - x_0) + A_2(x_2 - x_0)(x_1 - x_0) = f_0 + 2\Delta f_0 + 2h^2 A_2.$$

Поэтому

$$A_2 = \frac{f_2 - f_0 - 2\Delta f_0}{2h^2} = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2} = \frac{\Delta^2 f_0}{2h^2}.$$

Индукцией можно показать, что

$$A_k = \frac{\Delta^k f_0}{k! h^k}.$$

Поэтому

$$\begin{aligned} L_n(x) = f_0 + \frac{\Delta f_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 f_0}{2h^2}(x - x_0)(x - x_1) + \dots + \\ + \frac{\Delta^n f_0}{n! h^n}(x - x_0)\dots(x - x_{n-1}). \end{aligned} \tag{12.25}$$

Это представление и называется *интерполяционным многочленом Ньютона для равных промежутков.* (Ср. с формулой Тейлора для функции $f(x)$.)

Интерполяционный многочлен в форме Ньютона может быть записан и для неравных промежутков, т.е. когда, вообще говоря, $x_{k+1} - x_k \neq x_k - x_{k-1}$, однако в этом случае его структура будет много сложнее.

Формулы численного дифференцирования и теперь определяются соотношением (12.21), однако при использовании (12.25) мы почти сразу получаем явное представление. Например, при $n = m = 2$ находим, что

$$f''(x) \approx \frac{\Delta^2 f_0}{h^2} = f_{\bar{x}x}(h),$$

что совпадает с формулой (12.22)

Для построения формул численного дифференцирования можно использовать не только интерполяционные многочлены Лагранжа, но и интерполяционные многочлены Эрмита. Такие формулы полезны, когда в узлах заданы не только значения функции, но и значения производных, а производные нужно знать в других точках. Формула численного дифференцирования и в этом случае выглядит аналогично (12.21). Если

$$f(x) = H_n(x) + R_n(x),$$

где $H_n(x)$ — *интерполяционный многочлен Эрмита*, а $R_n(x)$ — остаточный член, то

$$f^{(m)}(x) \approx H_n^{(m)}(x), \qquad 1 \leqslant m \leqslant n. \tag{12.26}$$

Пример 12.6. Пусть интерполяционный многочлен Эрмита имеет степень три и написан по значениям функции и ее первой производной в двух узлах $x_0 = 0$ и $x_1 = h$, т.е.

$$H_3(x) = p_{00}(x)f_0 + p_{01}(x)f_0' + p_{10}(x)f_1 + p_{11}(x)f_1',$$

где

$$p_{00}(x) = \frac{(2x+h)(x-h)^2}{h^3}, \qquad p_{01}(x) = \frac{x(x-h)^2}{h^2},$$
$$p_{10}(x) = \frac{x^2(3h-2x)}{h^3}, \qquad p_{11}(x) = \frac{x^2(x-h)}{h^2}.$$

Тогда формула для приближенного нахождения первой производной в точке x примет вид

$$H_3'(x) = p_{00}'(x)f_0 + p_{01}'(x)f_0' + p_{10}'(x)f_1 + p_{11}'(x)f_1'.$$

Если принять во внимание, что

$$p_{00}'(x) = 6x(x-h)/h^3, \qquad p_{01}'(x) = \frac{3x^2-4hx+h^2}{h^2},$$
$$p_{10}'(x) = -6x(x-h)/h^3, \qquad p_{11}'(x) = \frac{3x^2-2hx}{h^2},$$

то, например, $H_3'(0) = f_0'$, а

$$H_3'(h/2) = \frac{3}{2}\,\frac{f_1-f_0}{h} - \frac{f_0'+f_1'}{4}.$$

Далее, для приближенного вычисления второй производной в точке x имеем формулу

$$H_3''(x) = p_{00}''(x)f_0 + p_{01}''(x)f_0' + p_{10}''(x)f_1 + p_{11}''(x)f_1'.$$

Принимая во внимание, что

$$p_{00}''(x) = 6(2x-h)/h^3, \qquad p_{01}''(x) = 2(3x-2h)/h^2,$$
$$p_{10}''(x) = 6(-2x+h)/h^3, \qquad p_{11}''(x) = 2(3x-h)/h^2,$$

находим, например,

$$H_3''(0) = \frac{6(f_1-f_0)}{h^2} - \frac{4}{h}f_0' - \frac{2}{h}f_1'.$$

Элементарные вычисления показывают, что

$$6(f_1-f_0)/h^2 - 4f_0'/h - 2f_1'/h = f_0'' - \frac{h^2}{12}f^{IV}(\xi).$$

12.4 О корректности численного дифференцирования

В формулах численного дифференцирования линейные комбинации значений функции $f(x)$ в узлах x_i делятся на h^m, где m — порядок вычисляемой производной. Поскольку сами значения функции, как правило, задаются или вычисляются не точно, то при малых h неустранимые погрешности оказывают существенное влияние на точность численного дифференцирования.

Пусть δ_i — величина погрешности, с которой вычисляется значение функции $f(x)$ в узле x_i, т.е. вычисляемое приближенное значение есть

$$\tilde{f}_i = f_i + \delta_i.$$

Будем предполагать, что $|\delta_i| \leqslant \delta$.

Пусть для приближенного вычисления первой производной используется формула (12.10). Тогда, с учетом (12.9),

$$f'(x_i) \approx \frac{\tilde{f}_{i+1} - \tilde{f}_{i-1}}{2h} = \frac{f_{i+1} + \delta_{i+1} - f_{i-1} - \delta_{i-1}}{2h} =$$
$$= \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + \frac{\delta_{i+1} - \delta_{i-1}}{2h} = f'(x_i) + \frac{h^2}{6} f'''(\xi_i) + (\delta_{i+1} - \delta_{i-1})/(2h).$$

Отсюда находим, что для полной погрешности этой формулы $\varepsilon_1 = (\tilde{f}_{i+1} - \tilde{f}_{i-1})/(2h) - f'(x_i)$ справедлива оценка

$$|\varepsilon_1| \leqslant \frac{h^2}{6} M_3 + \delta/h, \tag{12.27}$$

где $M_3 = \max\limits_{x \in [x_{i+1}, x_{i-1}]} |f'''(x)|$. Из этой оценки следует, что при уменьшении h полная погрешность убывает только до определенного предела, после чего начинает расти. Если, например, δ сравнима с h, то *мы не можем найти приближенное значение производной*, ибо погрешность будет $O(1)$. Чтобы вычисленное значение можно было рассматривать как приближенное значение производной, нужно, чтобы h было много больше δ. Наивысшую точность мы получим при том h, при котором правая часть (12.27) достигает минимума по h. Указанное значение

$$h = h_1 = \sqrt[3]{3\delta/M_3}.$$

При этом

$$\varepsilon_1 = \frac{3}{2} \left(\frac{M_3}{3} \right)^{1/3} \delta^{2/3}.$$

Если при тех же предположениях о точности вычисления значений f_i воспользоваться формулой из левой части (12.12), дающее приближенное значение второй производной, то полная погрешность $\varepsilon_2 = (\tilde{f}_{i+1} - 2\tilde{f}_i + \tilde{f}_{i-1})/h^2 - f''(x_i)$ оценится так

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{h^2}{12} M_4 + \frac{4\delta}{h^2},$$

где $M_4 = \max\limits_{x_{i-1} \leqslant x \leqslant x_{i+1}} |f^{IV}|$. При этом оптимальное значение $h = h_2 = 2(3\delta/M_4)^{1/4}$, а $\varepsilon_2 = 2\sqrt{M_4/3}\,\delta^{1/2}$.

Следует, однако, заметить, что предельная точность при приближенном вычислении производных не всегда ниже, чем точность, с которой задана сама функция. Пусть, например, $\tilde{f}_i = f_i + \delta v_i$, где v_i — некоторая "гладкая" функция, т.е. такая, что, например, $|v_{x,i}| \leqslant M$. Тогда для формулы (12.10) полная погрешность будет оцениваться следующим образом:

$$|\varepsilon_1| \leqslant \frac{h^2}{6} M_3 + M\delta$$

и, если $h/\sqrt{\delta} = O(1)$, то $|\varepsilon_1| = O(\delta)$.

13

Методы решения нелинейных уравнений

Пусть задана непрерывная функция $f(x)$ действительной переменной x, и требуется найти ее нули, т.е. корни уравнения

$$f(x) = 0. \tag{13.1}$$

При такой формулировке задача весьма неопределенна, ибо корней может не быть вовсе, или их может быть бесконечно много. Обычно задача формулируется более конкретно с дополнительными указаниями. Например, отыскание корней на заданном интервале. Поскольку не существует регулярных методов отыскания точных значений корней уравнения (13.1), то речь должна идти об итерационных методах нахождения приближенного решения. (Только если $f(x)$ представляет собой многочлен не выше 4-ой степени, имеются методы представления его нулей в виде радикалов.)

Чтобы воспользоваться тем или иным итерационным методом, нужно иметь начальное приближение к корню. Для этого нужно, по крайней мере, изучить расположение корней и выделить области, где имеется единственный корень. В противном случае мы должны с использованием того или иного итерационного процесса уточнить значения корней или найти их с требуемой точностью.

Способы локализации корней (выделение областей, где имеется единственный корень) многообразны, и указать универсальный метод не представляется возможным. Иногда отрезки локализации известны заранее, а иногда определяются из физических соображений. В простых ситуациях хороший результат может дать графический метод; широко применяют построение таблиц функции $f(x)$ вида $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{1, n}$ для обнаружения перемен знака.

13.1 Метод бисекции (метод деления отрезка пополам)

Пусть $f(x) \in C[a,b]$ и $f(a)f(b) < 0$. Последнее означает, что на $[a,b]$ имеется, по крайней мере, один корень уравнения (13.1). (Условие существования решения.) Предположим, что решение единственное, т.е. $x^* \in (a,b)$ — единственный корень уравнения (13.1) на $[a,b]$. Положим $a_0 = a$, $b_0 = b$, найдем середину отрезка $[a_0, b_0]$

$$x_0 = \frac{a_0 + b_0}{2}$$

и примем эту величину за приближенное значение x^*. Так как положение корня x^* на отрезке $[a_0, b_0]$ неизвестно, то можно лишь утверждать, что погрешность этого приближения не превосходит половины длины $[a_0, b_0]$:

$$|x_0 - x^*| \leqslant \frac{b_0 - a_0}{2}.$$

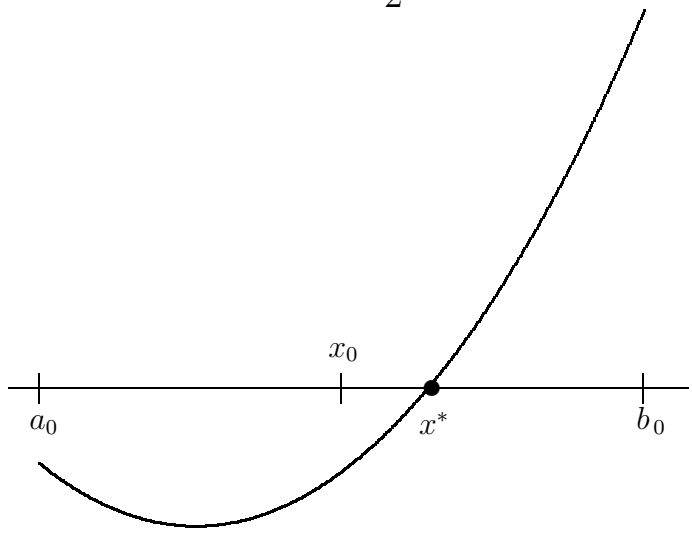


Рис. 1

Вычислим $f(x_0)$. Если $f(x_0) = 0$, то $x^* = x_0$, и вычисления на этом заканчиваются. Если $f(x_0) \neq 0$, то знак $f(x_0)$ совпадает либо со знаком $f(a_0)$, либо со знаком $f(b_0)$. Пусть для определенности $f(a_0) < 0$, $f(b_0) > 0$. Из двух отрезков $[a_0, x_0]$ и $[x_0, b_0]$ выберем тот, на концах которого $f(x)$ принимает значения с противоположными знаками. Обозначим этот отрезок через $[a_1, b_1]$, где

$$a_1 = a_0, \quad b_1 = x_0 \quad \text{при} \quad f(x_0) > 0$$

и

$$a_1 = x_0, \quad b_1 = b_0 \quad \text{при} \quad f(x_0) < 0.$$

Отрезок $[a_1, b_1]$ имеет вдвое меньшую длину, чем $[a_0, b_0]$, $f(a_1)f(b_1) < 0$ и $x^* \in (a_1, b_1)$, причем $|x_0 - x^*| \leqslant \frac{b_0 - a_0}{2}$. Найдем середину отрезка $[a_1, b_1]$ и т.д. Пусть

$$x_k = \frac{a_k + b_k}{2}, \quad k = 1, 2, \ldots,$$

и всегда

$$|x_k - x^*| \leqslant \frac{b_k - a_k}{2} = \frac{b - a}{2^{k+1}}.$$

Процесс деления отрезка пополам продолжается до тех пор, пока длина нового отрезка $[a_k, b_k]$ не станет меньше 2ε, где ε — требуемая точность в определении приближенного значения корня. Тогда

$$x_k = \widetilde{x}, \quad |\widetilde{x} - x^*| \leqslant \varepsilon,$$

т.е. изложенный метод позволяет найти приближенное решение с *гарантированной* точностью. Скорость сходимости метода не ниже скорости сходимости к нулю геометрической прогрессии со знаменателем $1/2$. Каждая итерация уменьшает погрешность не менее, чем в два раза.

Пример 13.1. Для того, чтобы уменьшить первоначальную локализацию в 10^6 раз, нужно сделать 20 итераций, ибо $2^{20} = 1048576$.

Метод деления отрезка пополам является *глобально* сходящимся итерационным методом. Какова бы ни была функция $f(x) \in C[a, b]$ и каков бы ни был отрезок $[a, b]$, на котором имеется один нуль функции $f(x)$, итерационный процесс обязательно к этому нулю сойдется.

13.2 Метод простых итераций

Чтобы применить метод простых итераций для решения нелинейного уравнения (13.1), необходимо преобразовать это уравнение к следующему виду:

$$x = \varphi(x). \tag{13.2}$$

Это можно сделать многими различными способами, некоторые из которых будут изложены позже. Пусть, например,

$$\varphi(x) = x + \tau(x)f(x), \tag{13.3}$$

где $\tau(x)$ — произвольная непрерывная знакоопределенная функция.

Выбирая некоторое начальное приближение x_0, построим итерационный процесс

$$x_{k+1} = \varphi(x_k), \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{13.4}$$

Итерационный процесс (13.4) называется *методом простых итераций.*

Теорема 13.1. *Пусть x^* — корень уравнения* (13.2). *Тогда, если $|\varphi'(x)| \leqslant q < 1$ для $x \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$, то при любом начальном приближении $x_0 \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$ метод простых итераций сходится со скоростью геометричесчкой прогрессии, знаменателем которой является число q. При этом*

$$|x_k - x^*| \leqslant q^k \, |x_0 - x^*|.$$

Доказательство. В силу (13.4)

$$x_k = \varphi(x_{k-1}),$$

а в силу (13.2)

$$x^* = \varphi(x^*).$$

Вычитая из первого соотношения второе и используя формулу конечных приращений Лагранжа, с учетом условий теоремы найдем, что

$$\begin{aligned} &|x_k - x^*| = |\varphi(x_{k-1}) - \varphi(x^*)| = |\varphi'(\xi_k)||x_{k-1} - x^*| \leqslant \\ &\leqslant q|x_{k-1} - x^*| \leqslant q^k|x_0 - x^*|. \end{aligned}$$

Здесь $\xi_k \in (x_{k-1}, x^*) \subset [x^* - \delta, x^* + \delta]$. Теорема доказана.

Определение 13.1. Говорят, что последовательность x_k, $k = 0, 1, \ldots$ *сходится линейно* при $k \to \infty$, если

$$|x_k| \leqslant q \, |x_{k-1}|, \qquad q = \text{const} < 1,$$

т.е. если она сходится со скоростью геометрической прогрессии. Эта последовательность *сходится сверхлинейно,* если

$$|x_k| \leqslant q_k \, |x_{k-1}|, \qquad \lim_{k\to\infty} q_k = 0.$$

Дадим геометрическую иллюстрацию итерационного процесса (13.4). Изобразим на плоскости Oxy прямую $y = x$ и кривую $y = \varphi(x)$. Пусть сначала $0 < \varphi'(x) < 1$.

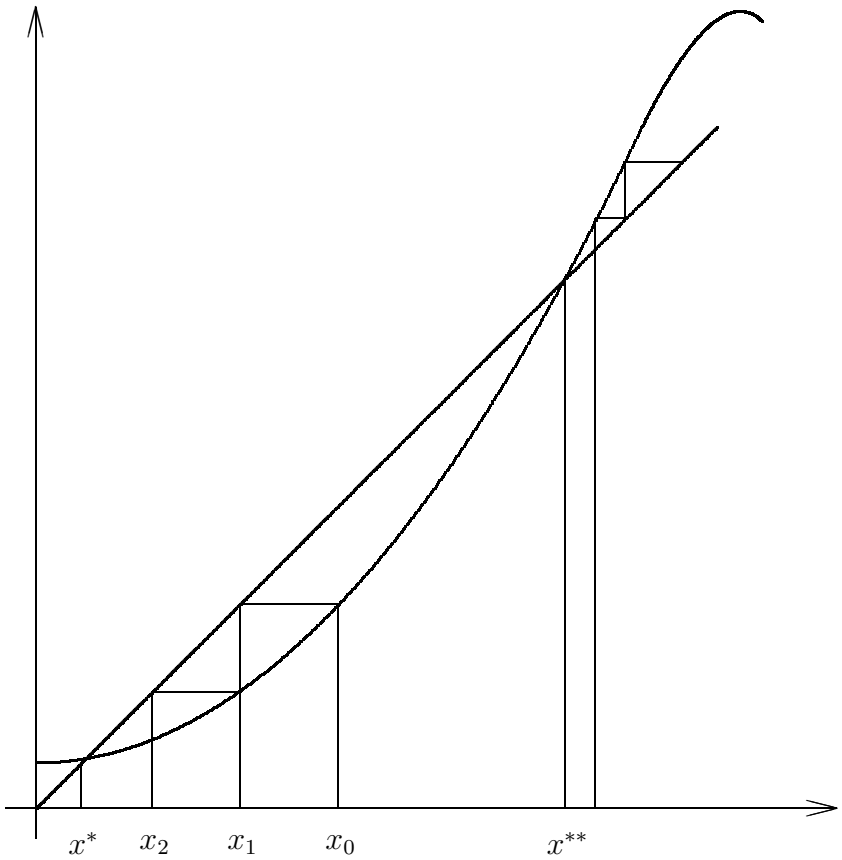


Рис. 2

Из рисунка 2 видно, что при $0 < \varphi'(x) \leqslant q < 1$ последовательность x_k монотонно сходится к x^*, причем с той стороны, с которой расположено начальное приближение.

Если $\varphi'(x^{**}) > 1$, то итерации не сходятся к x^{**}.

При $-1 < \varphi'(x) < 0$ приближения двусторонние (см. рис. 3). В этом случае по двум последовательным приближениям легко судить о достигнутой точности

$$|x_k - x^*| < |x_k - x_{k-1}|.$$

Можно также увидеть, что сходимость тем быстрее, чем меньше $|\varphi'|$. *Если* $\varphi'(x^*) \ll 1$, *то процесс сходимости ускоряется по мере приближения к корню.*

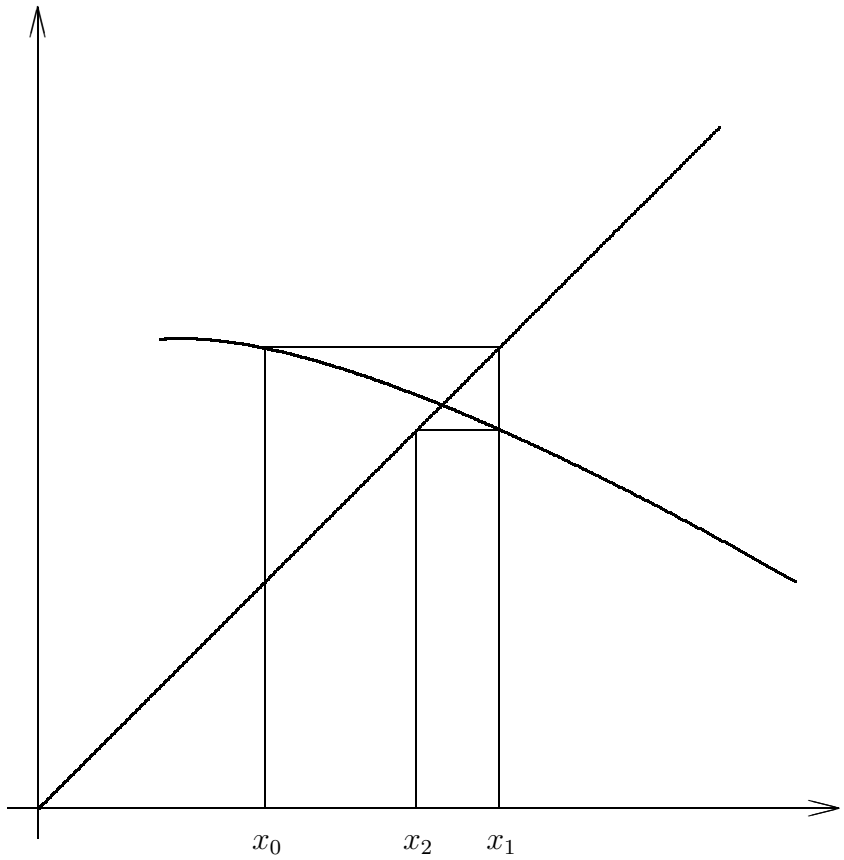


Рис. 3

13.3 Метод Ньютона

Пусть k-е приближение x_k к решению уравнения (13.1) найдено. Разложим функцию $f(x)$ в точке x_k по формуле Тейлора

$$f(x) = f(x_k) + (x - x_k)f'(x_k) + \frac{(x - x_k)^2}{2} f''(\xi_k), \quad \xi_k \in (x, x_k) \qquad (13.5)$$

или

$$\Delta f := f(x) - f(x_k) = df + O(d^2 f), \quad df := f' dx = f'(x_k)(x - x_k).$$

Заменим приближенно приращение функции ее дифференциалом

$$\Delta f \approx df$$

или

$$f(x) \approx f(x_k) + (x - x_k)f'(x_k) =: P_1(x).$$

Приравняем теперь функцию $P_1(x)$, являющуюся приближением к $f(x)$, нулю

$$P_1(x) = 0: \quad f(x_k) + (x - x_k)f'(x_k) = 0$$

и найдем корень полученного уравнения

$$x - x_k = -\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad \Rightarrow \quad x = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

Этот корень и примем за новое приближение. Итак, алгоритм метода Ньютона следующий:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, \ldots, \quad x_0 \text{ — задано.} \tag{13.6}$$

Геометрическая интерпретация метода Ньютона такова. Как известно из математического анализа, $f'(x_k)$ есть тангенс угла наклона касательной к кривой $y = f(x)$ в точке $x = x_k$. Прямая

$$y = P_1(x) \tag{13.7}$$

имеет тот же наклон, что и касательная к $f(x)$ в точке x_k. Более того, в точке $x = x_k$ значения $P_1(x)$ и $f(x)$ совпадают, и, следовательно, (13.7) есть уравнение касательной к кривой $y = f(x)$ в точке $x = x_k$. Тем самым,

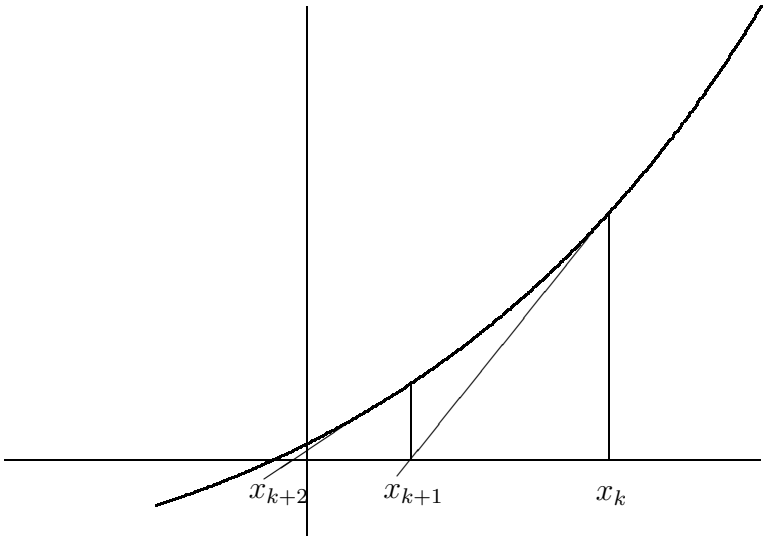


Рис. 4

в методе Ньютона на каждой итерации кривая $y = f(x)$ заменяется касательной в точке x_k, и вместо уравнения $f(x) = 0$ решается уравнение $P_1(x) = 0$.

Связь метода Ньютона с методом простых итераций. При применении метода простых итераций к решению уравнения (13.1) оно сначала преобразовывалось к виду (13.2), где функция $\varphi(x)$ определялась соотношением (13.3), а итерации проводились по формуле (13.4). Сравнивая (13.4) и (13.6), находим, что

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}, \tag{13.8}$$

т.е. $\tau(x)$ из (13.3) есть $[-f'(x)]^{-1}$. Как следует из теоремы 13.1, для сходимости метода простых итераций производная функции $\varphi(x)$ в окрестности корня x^* должна быть по модулю меньше единицы. Из (13.8)

$$\varphi'(x) = 1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} = \frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}. \tag{13.9}$$

Если x^* — простой корень уравнения (13.1), то $f'(x^*) \neq 0$, а $\varphi'(x^*) = 0$, и существует окрестность x^*, где $|\varphi'(x)| < 1$. Поэтому метод Ньютона всегда сходится, если начальное условие выбрано удачно.

Оценка скорости сходимости метода Ньютона. Полагая в (13.5) $x = x^*$, получим

$$0 = f(x_k) + (x^* - x_k)f'(x_k) + \frac{(x^* - x_k)^2}{2} f''(\xi_k^*), \quad \xi_k^* \in (x^*, x_k).$$

В силу (13.6)

$$0 = (x_{k+1} - x_k)f'(x_k) + f(x_k). \tag{13.10}$$

Вычитая это соотношение из предыдущего, получим

$$0 = (x^* - x_{k+1})f'(x_k) + \frac{1}{2}(x^* - x_k)^2 f''(\xi_k^*).$$

Отсюда

$$(x_{k+1} - x^*) = \frac{1}{2}\frac{f''(\xi_k^*)}{f'(x_k)}(x_k - x^*)^2. \tag{13.11}$$

Будем предполагать, что

$$|f'(x)| \geqslant m_1, \quad |f''(x)| \leqslant M_2. \tag{13.12}$$

Тогда

$$|x_{k+1} - x^*| \leqslant \frac{M_2}{2m_1}|x_k - x^*|^2. \tag{13.13}$$

Домножая левую и правую части этого неравенства на $M_2/(2m_1)$, получим, что

$$\beta_{k+1} = \frac{M_2}{2m_1}|x_{k+1} - x^*| \leqslant \left[\frac{M_2}{2m_1}(x_k - x^*)\right]^2 = \beta_k^2,$$

т.е.

$$\beta_{k+1} \leqslant \beta_k^2, \tag{13.14}$$

где

$$\beta_k = \frac{M_2}{2m_1}|x_k - x^*|. \tag{13.15}$$

Из (13.14) имеем

$$\beta_1 \leqslant \beta_0^2, \quad \beta_2 \leqslant \beta_1^2 \leqslant \beta_0^4 = \beta_0^{2^2}, \quad \beta_3 \leqslant \beta_2^2 \leqslant \beta_0^{2^3}$$

и вообще

$$\beta_k \leqslant \beta_0^{2^k}.$$

Принимая во внимание (13.15), находим, что

$$|x_k - x^*| \leqslant \frac{2m_1}{M_2}\left[\frac{M_2}{2m_1}|x_0 - x^*|\right]^{2^k}. \tag{13.16}$$

Для сходимости достаточно, чтобы

$$\frac{M_2}{2m_1}|x_0 - x^*| \leqslant q < 1. \tag{13.17}$$

Итак, доказана

Теорема 13.2. *Пусть $f(x) \in C^2[x^* - \delta, x^* + \delta]$, где x^* — простой корень уравнения* (13.1), *и при $x \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$ справедливы оценки* (13.12). *Тогда, если начальное приближение $x_0 \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$ таково, что справедливо* (13.17), *то метод Ньютона* (13.6) *сходится с квадратичной скоростью, и справедлива оценка* (13.16).

Пример 13.2. Пусть требуется найти корень степени p из числа $a > 0$. Тогда

$$f(x) := x^p - a$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^p - a}{px_k^{p-1}} = \frac{p-1}{p}x_k + \frac{a}{px_k^{p-1}}. \tag{13.18}$$

При $p = 2$ и $a = 3$

$$x_{k+1} = \frac{x_k}{2} + \frac{3}{2x_k}.$$

Пусть $x_0 = 2$. Тогда

$$x_1 = \frac{7}{4} = 1.75, \quad x_2 = \frac{97}{56} \approx 1.7321, \quad x_3 = \frac{97}{112} + \frac{84}{97} \approx 1.73205080,$$

а $x^* = 1.732050808\ldots$. Отсюда следует, что если в x_0 один верный знак, то в x_1 — два, в x_2 — четыре и т.д. Грубо говоря, число верных знаков после каждой итерации удваивается.

Замечание 13.1. Сходимость метода Ньютона установлена при условии, что корень x^* является простым. Ну, а что будет, если корень окажется кратным? Чтобы ответить на этот вопрос, исследуем $ff''/(f')^2$ из (13.9). Если корень x^* имеет кратность $p > 1$, то

$$\begin{aligned} f(x) &= a(x-x^*)^p + O\big((x-x^*)^{p+1}\big) \\ f'(x) &= ap(x-x^*)^{p-1} + O\big((x-x^*)^{p}\big) \\ f''(x) &= ap(p-1)(x-x^*)^{p-2} + O\big((x-x^*)^{p-1}\big). \end{aligned}$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \varphi'(x) &= \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} = \\ &= \frac{a^2p(p-1)(x-x^*)^{2p-2} + O\big((x-x^*)^{2p-1}\big)}{p^2a^2(x-x^*)^{2p-2} + O\big((x-x^*)^{2p-1}\big)} = \frac{p-1}{p} + O(x-x^*) \end{aligned} \tag{13.19}$$

и в малой окрестности x^* имеем $|\varphi'(x)| < 1$. Тем самым, метод Ньютона будет сходиться и к кратному корню, но эта сходимость не будет квадратичной; она будет всего лишь линейной.

Пример 13.3. Пусть $f(x) = x^2$. Здесь $x^* = 0$ есть двукратный корень. Метод Ньютона приводит к соотношению

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^2}{2x_k} = \frac{1}{2}x_k.$$

Эти соотношения представляют собой геометрическую прогрессию со знаменателем $q = 1/2$.

Возникает вопрос, а нельзя ли увеличить скорость сходимости к кратному корню? Ответ на этот вопрос положительный. Это можно сделать путем следующего обобщения метода Ньютона. Итерации будем вести по формуле

$$x_{k+1} = x_k - \tau\frac{f(x_k)}{f'(x_k)},$$

где значение параметра τ определяется кратностью искомого корня. Найдем это значение. Имеем

$$\varphi(x) = x - \tau\frac{f(x)}{f'(x)}, \quad \varphi'(x) = 1 - \tau\frac{f'^2 - ff''}{f'^2} = (1-\tau) + \tau\frac{ff''}{f'^2}.$$

Отсюда с учетом (13.19)

$$\varphi'(x) = (1-\tau) + \tau\left[\frac{p-1}{p} + O(x-x^*)\right] = 1 - \tau + \tau\frac{p-1}{p} + O(x-x^*).$$

Выберем τ из условия, что $\varphi'(x^*) = 0$. Тогда $\tau = p$, и обобщенный метод Ньютона

$$x_{k+1} = x_k - p\frac{f(x_k)}{f'(x_k)},$$

где p — кратность искомого корня, обладает скоростью сходимости метода Ньютона к простому корню.

Пример 13.4. Пусть $f(x) = x^2(x+1)$ и $x^* = 0$ — двукратный корень. Обобщенный метод Ньютона принимает вид

$$x_{k+1} = \frac{x_k^2}{2+3x_k}.$$

Если $x_0 = 1$, то $x_1 = \dfrac{1}{5} = 0.2$, $x_2 = \dfrac{1}{65} = 0.015$, $x_3 = 0.0000115$ и т.д.

Соотношения (13.13) и (13.16) установленные при доказательстве теоремы 13.2, представляют собой так называемые *априорные оценки* точности приближенного решения x_k. Эти оценки справедливы вне зависимости от того, проводилось ли реальное вычисление x_k или нет. Их ценность состоит в том, что они указывают скорость убывания погрешности при увеличении k. Для непосредственной же оценки точности получаемого приближения они непригодны, ибо и в левой, и в правой частях неравенств присутствует неизвестное точное решение x^*.

Наряду с априорными оценками можно установить и *апостериорные оценки*, воспользоваться которыми можно только *после* того, как мы найдем соответствующее приближение. Апостериорные оценки используются для непосредственной оценки точности полученного решения.

Теорема 13.3. *В условиях теоремы 13.2*

$$|x_{k+1} - x^*| \leqslant \frac{M_2}{2m_1}|x_{k+1} - x_k|^2.$$

Доказательство. Полагая в (13.5) $x = x_{k+1}$, найдем, что

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + (x_{k+1} - x_k)f'(x_k) + \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{2} f''(\xi_k).$$

Отсюда в силу (13.10) следует, что

$$|f(x_{k+1})| = \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{2} f''(\xi_k) \leqslant \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{2} M_2.$$

С другой стороны, на основании формулы конечных приращений и (13.1)

$$f(x_{k+1}) - f(x^*) = f'(\eta_{k+1})(x_{k+1} - x^*) = f(x_{k+1}).$$

Отсюда и из первого соотношения вытекает искомая оценка. Теорема доказана.

Упражнение 13.1. Доказать, что, если $f(x^*) = 0$, $f'(x^*) \neq 0$, $f''(x^*) = 0$, $f'''(x^*) \neq 0$, то сходимость метода Ньютона будет кубической.

13.4 Метод секущих

Основным достоинством метода Ньютона, которое делает его очень привлекательным, является высокая скорость сходимости. К недостаткам следует отнести необходимость вычисления на каждом шаге итераций производной. Второй недостаток — сильная зависимость результативности метода от начального приближения: если начальное приближение оказалось неудачным (недостаточно близким к искомому решению), метод просто расходится. Первый недостаток в какой-то мере может быть преодолен путем замены производной разностным отношением. Именно, заменим в (13.5) производную $f'(x_k)$ на разностное отношение

$$\frac{\Delta f_k}{\Delta x_k} = \frac{f_k - f_{k-1}}{x_k - x_{k-1}},$$

где $f_k = f(x_k)$. В результате будем иметь

$$x_{k+1} = x_k - f_k \frac{x_k - x_{k-1}}{f_k - f_{k-1}}, \quad k = 1, 2, \ldots. \tag{13.20}$$

Отметим, что этот метод двухшаговый: чтобы найти x_{k+1}, нужно знать x_k и x_{k-1}. В частности, для того, чтобы начать итерации, также требуются значения начальных приближений x_0 и x_1.

Обратимся к геометрической интерпретации метода (13.20). Пусть

$$L_1(x) = f_{k-1}\frac{x - x_k}{x_{k-1} - x_k} + f_k\frac{x - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} \tag{13.21}$$

— интерполяционный многочлен Лагранжа первой степени, построенный по значениям функции $f(x)$ в узлах x_{k-1} и x_k. Рассмотрим прямую

$$y = L_1(x)$$

и найдем ее нуль, т.е. решение уравнения $L_1(x) = 0$. Принимая во внимание (13.21), находим, что

$$f_{k-1}(x - x_k) = f_k(x - x_{k-1}) \equiv f_k(x - x_k) + f_k(x_k - x_{k-1}).$$

Отсюда

$$x = x_k - f_k\frac{x_k - x_{k-1}}{f_k - f_{k-1}},$$

что совпадает с x_{k+1} из (13.20). Отсюда следует, что если в методе Ньютона кривая $y = f(x)$ всякий раз заменяется касательной в точке x_k, то в методе (13.20) кривая $y = f(x)$ заменяется секущей, пересекающей $y = f(x)$ при $x = x_{k-1}$ и $x = x_k$. Эта геометрическая интерпретация метода (13.20) и дает ему название — метод секущих.

Обратимся к оценке скорости сходимости метода секущих. Сначала заметим, что в силу (13.21) и с учетом формулы конечных приращений

$$\begin{aligned}
&L_1(x_{k+1}) - L_1(x^*) = \\
&= f_{k-1}\frac{x_{k+1} - x_k}{x_{k-1} - x_k} + f_k\frac{x_{k+1} - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} - f_{k-1}\frac{x^* - x_k}{x_{k-1} - x_k} - f_k\frac{x^* - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} = \\
&= f_{k-1}\frac{x_{k+1} - x^*}{x_{k-1} - x_k} + f_k\frac{x_{k+1} - x^*}{x_k - x_{k-1}} = \frac{f_k - f_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}(x_{k+1} - x^*) = \\
&= f'(\xi_k)(x_{k+1} - x^*), \quad \xi_k \in (x_{k-1}, x_k)
\end{aligned}$$

и поэтому

$$x_{k+1} - x^* = \frac{L_1(x_{k+1}) - L_1(x^*)}{f'(\xi_k)} = -\frac{L_1(x^*)}{f'(\xi_k)}, \tag{13.22}$$

ибо по построению $L_1(x_{k+1}) = 0$. При вычислении $L_1(x^*)$ воспользуемся формулой для погрешности интерполяции

$$f(x) - L_1(x) = \frac{1}{2}f''(\eta_k)(x - x_{k-1})(x - x_k), \quad \eta_k \in (x, x_{k-1}, x_k),$$

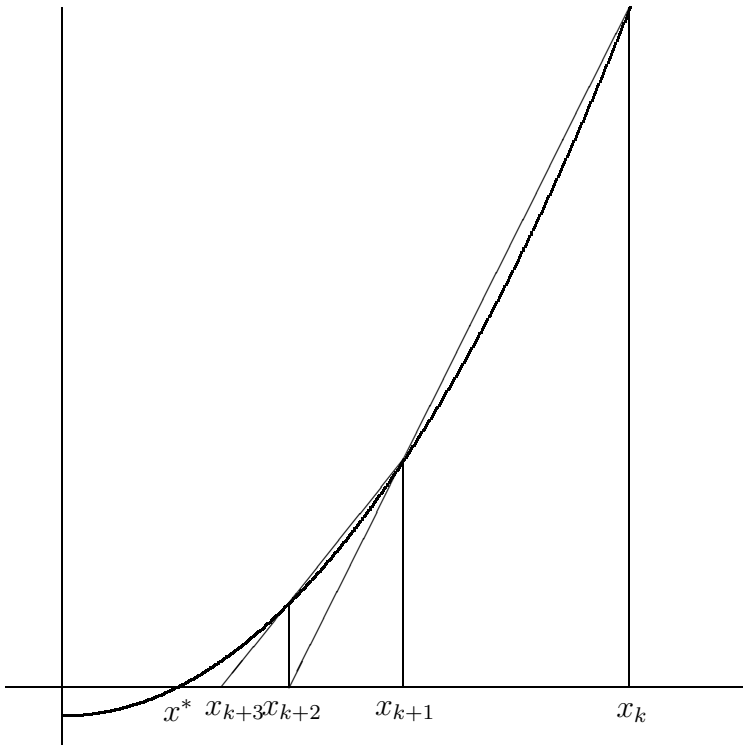


Рис. 5

где (x, x_{k-1}, x_k) — открытый интервал, концами которого являются крайние из указанных трех точек. Полагая здесь $x = x^*$ и принимая во внимание, что $f(x^*) = 0$, находим искомое выражение, подставляя которое в (13.22), с учетом вышесказанного будем иметь

$$x_{k+1} - x^* = \frac{1}{2}\frac{f''(\eta_k)}{f'(\xi_k)}(x_k - x^*)(x_{k-1} - x^*). \tag{13.23}$$

Как и при изучении метода Ньютона, будем предполагать, что

$$|f'(x)| \geqslant m_1, \quad |f''(x)| \leqslant M_2. \tag{13.24}$$

Тогда из (13.23) будем иметь оценку

$$|x_{k+1} - x^*| \leqslant \frac{M_2}{2m_1}|x_k - x^*|\,|x_{k-1} - x^*|.$$

Домножая теперь обе части этого неравенства на $M_2/(2m_1)$ и обозначая

$$\frac{M_2}{2m_1}|x_k - x^*| = \Delta_k, \tag{13.25}$$

найдем, что

$$\Delta_{k+1} \leqslant \Delta_k \Delta_{k-1}. \tag{13.26}$$

Отсюда следует, по крайней мере, сверхлинейная сходимость метода секущих. Для того, чтобы получить более точную оценку скорости сходимости, мы сначала воспользуемся не вполне строгими рассуждениями. Сравним (13.26) с оценкой (13.14), из которой следует квадратичная сходимость метода Ньютона. Скорость сходимости метода секущих, конечно, ниже. Возможно,

$$\Delta_{k+1} \leqslant \Delta_k^{\nu}, \quad \text{где} \quad 1 < \nu < 2. \tag{13.27}$$

Мы не будем пытаться доказывать эту оценку, а установим оценку типа (13.27) для мажоранты погрешности Δ_k. Заметим, что, если

$$z_{k+1} = z_k z_{k-1}, \quad z_0 \geqslant \Delta_0, \ z_1 \geqslant \Delta_1, \tag{13.28}$$

то

$$\Delta_{k+1} \leqslant z_{k+1}. \tag{13.29}$$

Оценив убывание z_k, мы получим и оценку Δ_k. Для того, чтобы оценить z_k — решение нелинейного разностного уравнения второго порядка (13.28), выясним, нет ли среди решений этого уравнения таких, которые одновременно являются решениями уравнения первого порядка

$$z_{k+1} = z_k^{\nu}. \tag{13.30}$$

при некотором ν. Если это так, то $z_k = z_{k-1}^{\nu}$, и, следовательно,

$$z_{k-1} = z_k^{1/\nu}.$$

Подставляя это соотношение и (13.30) в (13.28), получим

$$z_k^{\nu} = z_k^{1+1/\nu}.$$

Приравнивая степени z_k в левой и правой частях, находим, что

$$\nu = 1 + 1/\nu, \quad \text{т.е.} \quad \nu^2 - \nu - 1 = 0. \tag{13.31}$$

Отсюда вытекает, что наша гипотеза верна при

$$\nu_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}.$$

Корню $\nu = (1-\sqrt{5})/2$ отвечает неубывающее решение уравнения (13.30), которое не может описывать сходящийся итерационный процесс. Поэтому следует взять

$$\nu = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.6180339. \tag{13.32}$$

Итак, вместо (13.27) имеем (13.29), (13.30), (13.32), что позволяет говорить о сходимости метода секущих со скоростью (13.32). Как и ожидалось, эта скорость меньше, чем у метода Ньютона.

Пример 13.5. Пусть требуется найти корень функции $f(x) = x^2 - a$. Метод секущих применительно к этой функции принимает вид

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^2 - a}{x_k + x_{k-1}} = \frac{x_k x_{k-1} + a}{x_k + x_{k-1}}.$$

Если $a = 2$ и положить $x_0 = x_1 = 2$, то

$$x_2 = \frac{3}{2}, \quad x_3 = \frac{7}{5}, \quad x_4 = \frac{41}{29} \approx 1.41379, \quad x_5 = \frac{577}{408} \approx 1.4142156$$

при $x^* = 1.41421356\ldots$.

Замечание 13.2. Нелинейное разностное уравнение (13.30) имеет очевидное решение

$$z_k = z_0^{\nu^k}, \tag{13.33}$$

для которого, в частности, $z_1 = z_0^{\nu}$. Но в итерационном методе (13.20) используются два начальных условия, и поэтому величина z_1 не должна зависеть от z_0. Мы вынуждены констатировать, что найденное решение (13.33) не совсем правильно описывает этот процесс. То, что мы не получили решения уравнения (13.28), удовлетворяющего обоим начальным условиям, не должно вызывать удивления: мы ведь нашли решение, общее для (13.28) и (13.30), а интересующее нас решение может (13.30) и не удовлетворять.

Вернемся к задаче (13.28) и найдем ее решение. Логарифмируя уравнение (13.28), будем иметь

$$\ln z_{k+1} = \ln z_k + \ln z_{k-1}.$$

Обозначим

$$\ln z_k = y_k, \tag{13.34}$$

и получим для y_k линейное разностное уравнение с постоянными коэффициентами

$$y_{k+1} = y_k + y_{k-1}.$$

Его характеристическое уравнение есть

$$q^2 - q - 1 = 0$$

(сравни с (13.31)) с корнями

$$q_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2}, \quad q_2 = \frac{1-\sqrt{5}}{2}, \quad q_1 + q_2 = 1, \quad \frac{q_2}{q_1} = \frac{-3+\sqrt{5}}{2} \approx -0.38.$$

Поэтому

$$y_k = c_1 q_1^k + c_2 q_2^k. \tag{13.35}$$

Удовлетворяя начальным условиям (13.28), будем иметь

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 &= y_0 = \ln z_0, \\ q_1 c_1 + q_2 c_2 &= y_1 = \ln z_1. \end{aligned}$$

Отсюда находим, что

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{y_1 - y_0 q_2}{\sqrt{5}} = \frac{y_1 - y_0 + y_0 q_1}{\sqrt{5}}, \\ c_2 &= -\frac{y_1 - y_0 q_1}{\sqrt{5}} = -\frac{y_1 - y_0 + y_0 q_2}{\sqrt{5}} \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} y_k &= \frac{y_1 + (q_1 - 1) y_0}{\sqrt{5}} q_1^k - \frac{y_1 + (q_2 - 1) y_0}{\sqrt{5}} q_2^k = \\ &= \frac{\ln(z_1 z_0^{q_1 - 1})}{\sqrt{5}} q_1^k - \frac{\ln(z_1 z_0^{q_2 - 1})}{\sqrt{5}} q_2^k, \end{aligned}$$

а с учетом (13.34)

$$\begin{aligned} z_k &= \exp\left\{ \ln(z_1 z_0^{q_1 - 1}) \frac{q_1^k}{\sqrt{5}} - \ln(z_1 z_0^{q_2 - 1}) \frac{q_2^k}{\sqrt{5}} \right\} = \\ &= \left(z_1 z_0^{q_1 - 1} \right)^{q_1^k/\sqrt{5}} \Big/ \left(z_1 z_0^{q_2 - 1} \right)^{q_2^k/\sqrt{5}}. \end{aligned}$$

Отсюда, в частности, следует, что, если

$$z_1 = z_0^{q_1},$$

то

$$z_1 z_0^{q_2-1} = z_0^{q_1+q_2-1} = 1, \quad z_1 z_0^{q_1-1} = z_0^{2q_1-1} = z_0^{\sqrt{5}}$$

и, следовательно,

$$z_k = z_0^{q_1^k},$$

что совпадает с (13.33), ибо $q_1 = \nu$.

В более же реалистическом случае, когда $z_1 = z_0$,

$$z_k = z_0^{(q_1^{k+1} - q_2^{k+1})/\sqrt{5}} = z_0^{q_1^{k+1}(1-(q_2/q_1)^{k+1})/\sqrt{5}}.$$

Это соотношение дает представление погрешности на k-ой итерации через погрешности z_0 и $z_1 = z_0$.

Небезынтересен вопрос о скорости убывания погрешности на двух соседних итерациях. Пусть

$$z_{k+1} = z_k^{\nu_k}.$$

Отсюда

$$\nu_k = (\ln z_{k+1})/(\ln z_k) = y_{k+1}/y_k,$$

а с учетом (13.35)

$$\begin{aligned}
\nu_k &= \frac{y_{k+1}}{y_k} = \frac{c_1 q_1^{k+1} + c_2 q_2^{k+1}}{c_1 q_1^k + c_2 q_2^k} = \\
&= q_1 \frac{1 + \frac{c_2}{c_1}(q_2/q_1)^{k+1}}{1 + \frac{c_2}{c_1}(q_2/q_1)^k} = q_1 \left[1 - \frac{c_2}{c_1} \left(\frac{q_2}{q_1} \right)^k + O\left(\frac{q_2}{q_1} \right)^{k+1} \right] = \\
&= q_1 + O\left((q_2/q_1)^k \right).
\end{aligned}$$

Отсюда следует, что при любых начальных приближениях убывание погрешности в малой окрестности корня происходит со скоростью $\sim q_1$.

Замечание 13.3. Мы уже отмечали, что скорость сходимости метода секущих ниже, чем метода Ньютона. И, тем не менее, метод секущих может оказаться более предпочтительным по сравнению с методом Ньютона. Для реализации каждой итерации в методе Ньютона нужно вычислять значение функции и ее производной в новой точке. В методе секущих на каждой итерации нужно знать только одно новое значение функции. Если эти операции трудоемкие, то две итерации по методу секущих могут быть сравнимы по трудоемкости с одной итерацией по методу Ньютона, а это приводит к бóльшему уменьшению начальной погрешности.

13.5 Глобальная сходимость. Гибридные алгоритмы

Как уже отмечалось, метод Ньютона является локально сходящимся методом, т.е. его сходимость гарантирована лишь в том случае, если начальное приближение расположено достаточно близко к искомому решению. Обеспечить выполнение этого условия заранее весьма проблематично. Удачным выходом из создавшейся ситуации является объединение локально быстросходящегося метода Ньютона и некоторого глобально, но не слишком быстро сходящегося метода в один алгоритм, называемый *гибридным*. Таким глобально сходящимся методом с линейной скоростью сходимости может быть метод деления отрезка пополам. Однако, поскольку этот метод не имеет аналога в многомерном случае, мы рассмотрим другой метод.

На рис. 6 изображена ситуация, когда из-за неудачного выбора начальной приближения итерационный метод Ньютона начинает расходиться; по крайней мере,

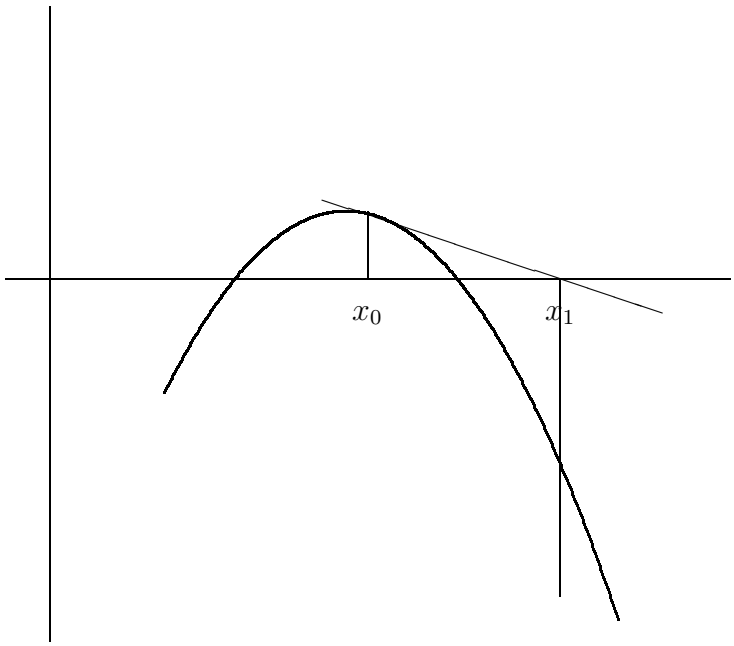


Рис. 6

$$|f(x_0)| < |f(x_1)|.$$

Тем не менее, как легко видеть, (геометрически это очевидно) на отрезке

$[x_0, x_1]$ есть точки t такие, что

$$|f(t)| < |f(x_0)|.$$

На этом факте и основан излагаемый гибридный метод. Именно, сделаем очередную итерацию по методу Ньютона (13.6), однако полученное значение обозначим не x_{k+1}, а z_{k+1} — некоторое вспомогательное значение:

$$z_{k+1,1} = x_k - \frac{f_k}{f'_k}.$$

Затем сравним f_k и $f(z_{k+1,1})$. Если

$$|f(z_{k+1,1})| < |f(x_k)|$$

то $x_{k+1} = z_{k+1,1}$, и делается новая итерация по методу Ньютона. Если же

$$|f(z_{k+1,1})| \geqslant |f(x_k)|,$$

то вычисляется

$$z_{k+1,2} = \frac{x_k + z_{k+1,1}}{2}$$

и сравнивается $f(z_{k+1,2})$ и $f(x_k)$. И т.д.

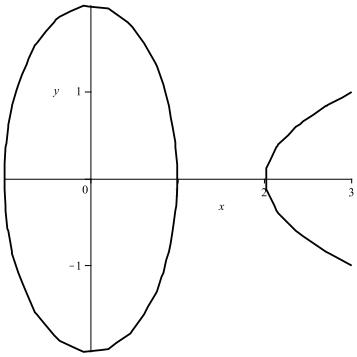
13.6 Системы нелинейных уравнений

В качестве примера сначала рассмотрим систему уравнений

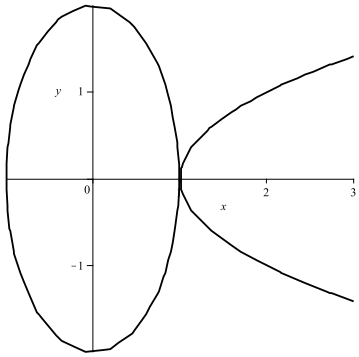
$$\begin{cases} 4x_1^2 + x_2^2 = 4, \\ x_1 - x_2^2 - t = 0. \end{cases}$$

Здесь x_1 и x_2 — неизвестные, а t — параметр. Первое уравнение задает на плоскости Ox_1x_2 эллипс с полуосями, равными 1 и 2, а второе — параболу. Координаты точек пересечения этих кривых и дают решение системы. Если значение параметра t изменяется от -2 до 5, то возможны следующие ситуации, изображенные на рисунке 7, расположенном на следующей странице.

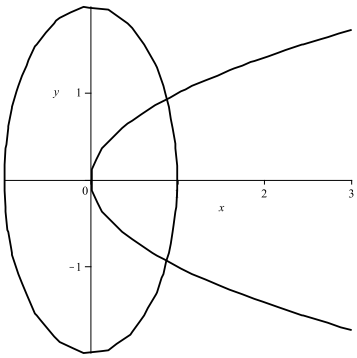
Это пример, иллюстрирующий сложности с локализацией корней в многомерном случае.



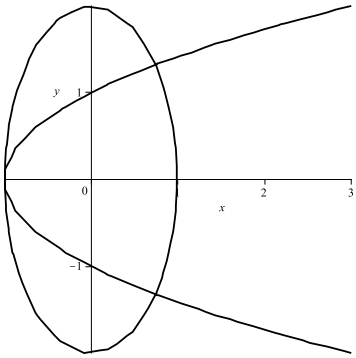
$t = -2$
Решений нет



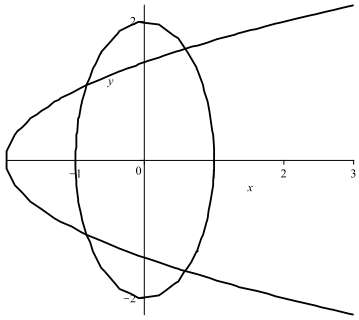
$t = -1$
Одно решение



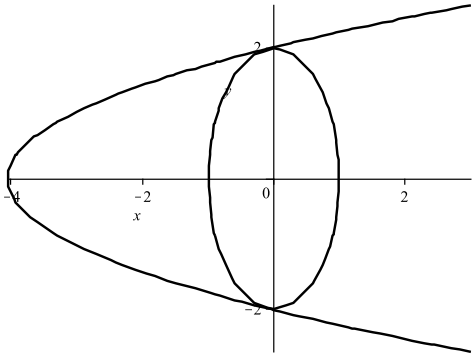
$t = 0$
Два решения



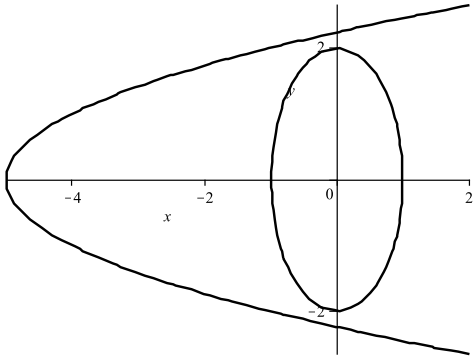
$t = 1$
Три решения



$t = 2$
Четыре решения



$t = 65/16$
Два решения



$t = 5$
Решений нет

Рис. 7

В общем случае система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0, \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0. \end{aligned}$$

Если ввести обозначения $x = [x_1\, x_2\, \ldots\, x_n]^T$, $f = [f_1\, f_2\, \ldots\, f_n]^T$, то эту систему можно записать в векторном виде

$$f(x) = 0. \tag{13.36}$$

Многие одношаговые итерационные методы решения системы (13.36) могут быть записаны в виде

$$B_k \frac{x^{k+1} - x^k}{\tau_{k+1}} + f(x^k) = 0, \qquad k = 0, 1, \ldots, \tag{13.37}$$

где B_k — некоторая невырожденная матрица. Для реализации (13.37) на каждом шаге итераций нужно решать линейную систему

$$B_k x^{k+1} = \varphi(x_k), \quad \varphi(x_k) = B_k x^k - \tau_{k+1} f(x^k). \tag{13.38}$$

Метод (13.37) называется явным, если $B_k = I$, и неявным в противном случае. Систему (13.38) можно решать либо прямым методом, либо итерационным. В последнем случае итерации, приводящие к решению линейной системы (13.38), называются внутренними, а итерации по нелинейности (13.37) — внешними.

При $B_k = I$ и $\tau_{k+1} = \tau$ из (13.37) имеем

$$x^{k+1} = \varphi(x^k), \quad \varphi(x) = x - \tau f(x), \tag{13.39}$$

т.е. метод простых итераций. В развернутой форме он принимает вид

$$\begin{aligned} x_1^{k+1} &= \varphi_1(x_1^k, x_2^k, \ldots, x_n^k), \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ x_n^{k+1} &= \varphi_n(x_1^k, x_2^k, \ldots, x_n^k). \end{aligned}$$

Пусть

$$\varphi' = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \varphi_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial \varphi_1}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial \varphi_1}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial \varphi_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial \varphi_2}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial \varphi_2}{\partial x_n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \dfrac{\partial \varphi_n}{\partial x_1} & \dfrac{\partial \varphi_n}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial \varphi_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

— матрица Якоби функции φ. Тогда метод (13.39) сходится, если

$$\|\varphi'\| \leqslant q < 1.$$

13.6.1 Метод Ньютона

Пусть

$$\Delta f = df + O(|dx|^2)$$

и

$$\Delta f \approx df = f' dx$$
$$dx = x - x^k, \quad \Delta f = f(x) - f(x^k),$$
$$f(x) \approx f(x^k) + f'(x^k)(x - x^k) = 0.$$

Отсюда

$$f'(x^k)(x^{k+1} - x^k) + f(x^k) = 0, \tag{13.40}$$

или, в разрешенном виде,

$$x^{k+1} = x^k - [f'(x^k)]^{-1} f(x^k). \tag{13.41}$$

Неразрешенная форма более естественна, ибо на каждой итерации требуется решать линейную систему с матрицей $f'(x^k)$. Очевидно, что (13.40) есть частный случай (13.37) при $B_k = f'(x^k)$ и $\tau_{k+1} = 1$. Метод очень трудоемок: на каждой итерации требуется вычисление n^2 элементов матрицы $f'(x^k)$ и решение системы с этой матрицей. Сходимость квадратичная из малой окрестности решения x^*. Более того, имеет место

Теорема 13.4. *Пусть функция $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ принадлежит $C^1(D)$, где D — открытое выпуклое множество в $\mathbb{R}^n$, причем $x^* \in D$. Пусть $[f'(x^*)]^{-1}$ существует и существуют положительные постоянные R, C и L такие, что $\|[f'(x^*)]^{-1}\| \leqslant C$,*

$$\|f'(x) - f'(y)\| \leqslant L\,\|x - y\| \quad \forall\, x, y \in B(x^*, R).$$

Тогда существует $r > 0$ такое, что для любого $x^0 \in B(x^*, r)$ последовательность (13.40) однозначно определена и сходится к x^*, причем

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leqslant CL\,\|x^k - x^*\|^2.$$

Покажем, как выглядит система (13.40) в развернутом (покоординатном)виде при $n = 2$.

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial f_1(x_1^k, x_2^k)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_1(x_1^k, x_2^k)}{\partial x_2} \\ \dfrac{\partial f_2(x_1^k, x_2^k)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_2(x_1^k, x_2^k)}{\partial x_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_1^{k+1} \\ \delta_2^{k+1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_1(x_1^k, x_2^k) \\ f_2(x_1^k, x_2^k) \end{bmatrix} = 0,$$

$$x_1^{k+1} = x_1^k + \delta_1^{k+1},$$
$$x_2^{k+1} = x_2^k + \delta_2^{k+1}.$$

Пример 13.6. Рассмотрим нелинейную систему

$$e^{x_1^2 + x_2^2} - 1 = 0,$$
$$e^{x_1^2 - x_2^2} - 1 = 0,$$

которая имеет единственное решение $x^* = 0$. Метод Ньютона с начальным приближением $x^0 = [0.1\, 0.1]^T$ за 15 итераций приводит к решению $[0.61 \cdot 10^{-5}\ \ 0.61 \cdot 10^{-5}]^T$, что демонстрирует довольно высокую скорость сходимости. Однако при другом начальном приближении $x^0 = [10\, 10]^T$ для получения того же результата требуется уже 220 итераций, а при $x^0 = [20\, 20]^T$ метод Ньютона для этой системы расходится.

Поскольку итерации по методу Ньютона сходятся не всегда (как в приведенном примере), то и в этом случае его нужно объединять с глобально сходящимся методом, например, так, как это было сделано для одного уравнения.

13.6.2 Аналог метода секущих

Несколько упростить метод Ньютона можно, как и в одномерном случае, отказавшись от точного вычисления матрицы Якоби, т.е. путем замены производных разностными отношениями. Если шаги по переменным x_i при аппроксимации производных будут постоянными, то построенный метод утратит сверхлинейную скорость сходимости метода Ньютона. Поэтому шаги должны стремиться к нулю при приближении x^k к x^*. Если положить

$$h_i^k = x_i^k - x_i^{k-1}, \qquad i = 1, \ldots, n,$$

для $n = 2$ и принять

$$B(x^{k-1}, x^k) = \begin{bmatrix} \dfrac{f_1(x_1^k, x_2^k) - f_1(x_1^{k-1}, x_2^k)}{h_1^k} & \dfrac{f_1(x_1^k, x_2^k) - f_1(x_1^k, x_2^{k-1})}{h_2^k} \\ \dfrac{f_2(x_1^k, x_2^k) - f_2(x_1^{k-1}, x_2^k)}{h_1^k} & \dfrac{f_2(x_1^k, x_2^k) - f_2(x_1^k, x_2^{k-1})}{h_2^k} \end{bmatrix},$$

то получим (в идейном плане, но не с точки зрения реализации) простейший аналог метода секущих

$$B(x^{k-1}, x^k)(x^{k+1} - x^k) + f(x^k) = 0. \tag{13.42}$$

Можно рассчитывать, как и в одномерном случае, на сверхлинейную сходимость с порядком $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$.

13.6.3 Метод Бройдена

В одномерном случае метод секущих, как мы видели, допускает двоякую интерпретацию: как аппроксимация метода Ньютона и как линейная интерполяция функции $f(x)$ по двум предшествующим приближениям. В многомерном случае первая интерпретация приводит к описанному в п. 13.6.2 аналогу метода секущих. Вторая интерпретация тоже приводит к соотношению типа (13.42), но теперь матрица B зависит не только от x^k и x^{k-1}, но и от $x^{k-2}, \ldots, x^{k-n}$. В самом деле. Пусть для простоты $n = 2$. Аппроксимируем вектор-функцию $f(x)$ линейной вектор-функцией $L(x)$

$$f(x) \approx L(x) := b + Qx$$

так, чтобы

$$f(x^l) = L(x^l), \qquad l = k, k-1, k-2. \tag{13.43}$$

Поскольку, $f(x^k) = b + Qx^k$, то

$$L(x) = f(x^k) + Q(x - x^k). \tag{13.44}$$

Отсюда и из оставшихся условий (13.43) находим матричное уравнение

$$\left[\left(\left(x^k\right) - f(x^{k-1})\right) \ \left(f(x^k) - f(x^{k-2})\right)\right] = Q\left[(x^k - x^{k-1}) \ (x^k - x^{k-2})\right] \tag{13.45}$$

для определения матрицы Q. Решение системы (13.45), если оно существует, обозначим через Q_k и подставим в (13.44). Решение системы $L(x) = 0$ и дает новое приближение x^{k+1} построенного метода

$$Q_k(x^{k+1} - x^k) + f(x^k) = 0. \tag{13.46}$$

Из (13.45) следует, что матрица Q_k зависит от трех предшествующих приближений x^k, x^{k-1}, x^{k-2}. Система (13.45) заведомо разрешима, если матрица $\left[(x^k - x^{k-1})\ (x^k - x^{k-2})\right]$ является невырожденной, т.е. векторы $(x^k - x^{k-1})$ и $(x^k - x^{k-2})$ линейно независимы. А это так, если точки x^{k-2}, x^{k-1}, x^k не лежат на одной прямой.

При сделанных предположениях итерационный метод (13.46) сверхлинейно сходится со скоростью, определяемой наибольшим корнем уравнения $q^{n+1} - q^n - 1 = 0$ (ср. с (13.31)). Однако применение этого метода на практике не приводит к успеху. Одна из основных трудностей связана с тем, что в процессе итераций векторы $(x^k - x^{k-1}), \ldots, (x^k - x^{k-n})$ стремятся стать линейно зависимыми, а это приводит к плохой обусловленности системы (13.45). Другая трудность обусловлена необходимостью хранения большого числа предшествующих итераций решения.

Не отказываясь полностью от идеи интерполяции, ограничимся интерполяцией по двум узлам, как в одномерном случае. Тогда вместо (13.45) будем иметь только одно уравнение

$$f(x^k) - f(x^{k-1}) = Q_k(x^k - x^{k-1}), \tag{13.47}$$

которое, естественно, однозначно матрицу Q_k не определяет. Используя (13.47), будем строить Q_k по образу и подобию Q_{k-1}, которая предполагается уже найденной. Линейные модели (13.44) для k-ой и $(k-1)$-ой итераций суть

$$\begin{aligned} L_k(x) &= f(x^k) + Q_k(x - x^k), \\ L_{k-1}(x) &= f(x^{k-1}) + Q_{k-1}(x - x^{k-1}). \end{aligned}$$

Вычитая из первого уравнения второе и используя (13.47), найдем, что

$$\begin{aligned} &L_k(x) - L_{k-1}(x) = f(x^k) - f(x^{k-1}) + Q_k(x - x^k) - Q_{k-1}(x - x^{k-1}) = \\ &= Q_k(x^k - x^{k-1}) + (Q_k - Q_{k-1})x - Q_k x^k + Q_{k-1}x^{k-1} = \\ &= (Q_k - Q_{k-1})(x - x^{k-1}). \end{aligned} \tag{13.48}$$

Пусть вектор $(x^k - x^{k-1})$ ортогонален полупространству L пространства $\mathbb{R}^n$. Представим вектор $(x - x^{k-1})$ в виде ортогонального разложения

$$x - x^{k-1} = \alpha(x^k - x^{k-1}) + t, \quad t \in L.$$

Тогда с учетом (13.47)

$$\begin{aligned} &(Q_k - Q_{k-1})(x - x^{k-1}) = \alpha(Q_k - Q_{k-1})(x^k - x^{k-1}) + (Q_k - Q_{k-1})t = \\ &= \alpha[f(x^k) - f(x^{k-1})] - \alpha Q_{k-1}(x^k - x^{k-1}) + (Q_k - Q_{k-1})t. \end{aligned}$$

В правой части этого соотношения от Q_k зависит только последнее слагаемое; первые два выражаются через уже найденные приближения. Есть большой соблазн последнее слагаемое обнулить. Это приведет к тому, что разность (13.48) линейных моделей на двух соседних итерациях не будет зависеть от Q_k и потому будет минимальной. Плохо это или хорошо? Мы знаем, что должны выбрать Q_k с учетом (13.47). Других соображений по поводу выбора Q_k у нас нет! Сделаем же так, чтобы наше дальнейшее вмешательство в процесс было минимальным, т.е. пусть Q_k такова, что

$$(Q_k - Q_{k-1})t = 0 \quad \forall \quad t \in L.$$

Размерность подпространства L равна $(n-1)$ и все это подпространство является ядром матрицы $(Q_k - Q_{k-1})$. Поэтому размерность образа этой матрицы равна единице. Но тогда эта матрица представима в виде одноранговой матрицы uv^T, где u и v — векторы из $\mathbb{R}^n$:

$$Q_k - Q_{k-1} = uv^T.$$

Поскольку

$$0 = [Q_k - Q_{k-1}]t = uv^T t,$$

то вектор v должен быть ортогонален t, т.е. коллинеарен $(x^k - x^{k-1})$:

$$Q_k - Q_{k-1} = u[x^k - x^{k-1}]^T.$$

Но матрица Q_k должна еще удовлетворять (13.47) и поэтому

$$[Q_k - Q_{k-1}][x^k - x^{k-1}] = f(x^k) - f(x^{k-1}) - Q_{k-1}(x^k - x^{k-1}) = \\ = u\|x^k - x^{k-1}\|^2,$$

т.е.

$$u = \|x^k - x^{k-1}\|^{-2} \left[f(x^k) - f(x^{k-1}) - Q_{k-1}(x^k - x^{k-1})\right],$$

и, следовательно,

$$Q_k - Q_{k-1} = \frac{[f(x^k) - f(x^{k-1}) - Q_{k-1}(x^k - x^{k-1})][x^k - x^{k-1}]^T}{\|x^k - x^{k-1}\|^2}.$$

Итак, построен итерационный метод, называемый методом Бройдена:

$$Q_k(x^{k+1} - x^k) + f(x^k) = 0, \qquad k = 0, 1, \ldots, \tag{13.49}$$

где

$$Q_k = Q_{k-1} + \frac{\left[(f(x^k) - f(x^{k-1})) - Q_{k-1}(x^k - x^{k-1})\right][x^k - x^{k-1}]^T}{\|x^k - x^{k-1}\|^2}, \tag{13.50}$$

x^0 — начальное приближение, а Q_0 обычно задается равным $f'(x_0)$.

Лемма 13.1. *Среди матриц Q, удовлетворяющих соотношению* (13.47), *матрица Q_k из* (13.50) *является единственной матрицей, которая минимизирует*

$$\|Q - Q_{k-1}\|_F,$$

где $\|A\|_F = \sqrt{\sum\limits_{i,j=1}^{n} a_{ij}^2}$ *— норма Фробениуса.*

Теорема 13.5. *Если выполнены предположения теоремы* 13.4, *то существуют положительные постоянные ε и γ такие, что при выполнении условий*

$$\|x^0 - x^*\| \leqslant \varepsilon, \quad \|Q_0 - f'(x^*)\| \leqslant \gamma$$

метод Бройдена (13.49), (13.50) *сходится сверхлинейно.*

Замечание 13.4. При некоторых дополнительных предположениях можно доказать, что последовательность Q_k сходится к $f'(x^*)$.

Вообще же это свойство последовательности Q_k не обязано иметь место, на что указывает следующий пример.

Пример 13.7. Методом Бройдена решается следующая система

$$\begin{cases} x_1 + x_2 - 3 = 0, \\ x_1^2 + x_2^2 - 9 = 0. \end{cases}$$

Как легко видеть, эта система имеет два решения $[0\ 3]^T$ и $[3\ 0]^T$. Метод Бройдена, начатый с $x^0 = [2\ 4]^T$ за 8 итераций сходится к $[0\ 3]^T$. Однако последовательность Q_k такова, что

$$\lim_{k\to\infty} Q_k = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 3/2 & 7/4 \end{bmatrix} \neq f'(0,3) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 6 \end{bmatrix}.$$

Пример 13.8. Рассматривается система

$$\begin{gathered} (x_1 + 3)(x_2^3 - 7) + 18 = 0, \\ \sin(x_2 e^{x_1} - 1) = 0. \end{gathered}$$

Эта система имеет решение $x^* = [0\ 1]^T$. Система решается методом Ньютона и методом Бройдена с начальным приближением $x^0 = [-0.5\ 1.4]^T$ и $Q_0 = f'(x^0)$ в методе Бройдена.

В нижеприведенной таблице содержатся$\|x^k - x^*\|$.

k	Бройден	Ньютон
0	0.64×10^0	0.64×10^0
1	0.62×10^{-1}	0.62×10^{-1}
2	0.52×10^{-3}	0.21×10^{-3}
3	0.25×10^{-3}	0.18×10^{-7}
4	0.43×10^{-4}	0.12×10^{-15}
5	0.14×10^{-6}	
6	0.57×10^{-9}	
7	0.18×10^{-11}	
8	0.87×10^{-15}	

Для получения заданной точности методу Бройдена требуется примерно в два раза больше итераций, чем методу Ньютона, сходимость которого, как легко видеть из приведенной таблицы, квадратичная.

Численные методы решения дифференциальных уравнений

IV

Численное решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений

14

Введение

Рассмотрим задачу Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка

$$\frac{d\,u}{d\,t} = f(t,u), \quad t > 0, \qquad u(0) = u_0. \tag{14.1}$$

Из курса дифференциальных уравнений известно, что для однозначной разрешимости задачи (14.1) в некоторой окрестности точки $t = 0$ достаточно, чтобы функция $f(t,u)$ была непрерывна в окрестности точки $(0,u_0)$ и удовлетворяла условию Липшица по второму аргументу. Известны примеры, иллюстрирующие отсутствие решения задачи (14.1) или его неединственность при нарушении указанных условий. Мы всегда будем предполагать, что решение задачи (14.1) существует и единственно. Для дальнейшего нам даже придется предполагать, что искомое решение достаточно гладкое.

14.1 Примеры численных методов

Приведем несколько простейших численных методов решения задачи (14.1). Для этого введем на полуоси $t \geqslant 0$ равномерную сетку, т.е. множество точек (которые назовем узлами)

$$\omega = \{t_n = n\tau, \quad n = 0,1,\dots\,; \quad \tau > 0\}$$

и будем искать приближенное решение задачи (14.1) в узлах ω. Величину τ будем называть шагом сетки ω. Договоримся приближенное решение в узле t_n обозначать той же буквой, что и решение задачи (14.1), но с индексом n внизу: u_n. Тем самым, мы отказываемся от часто используемого обозначения $u(t_n) = u_n$; теперь $u(t_n)$ — значение точного решения в

узле t_n, а u_n — значение приближенного решения в этом узле, и, вообще говоря, $u(t_n) \neq u_n$. Наоборот, $u_n - u(t_n)$ представляет собой погрешность численного метода в узле t_n, которую нам предстоит оценивать. Данное соглашение не представляется наилучшим, однако остановимся на нем.

Для построения численных методов проинтегрируем уравнение (14.1) от t_n до t_{n+1}

$$u(t_{n+1}) - u(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, u(t))\, dt \tag{14.2}$$

и заменим приближенно интеграл в правой части этой формулы какой-либо квадратурной формулой. Здесь мы рассмотрим четыре таких формулы.

Построенная в курсе "Введение в численные методы"квадратурная формула прямоугольников представляет интеграл произведением длины отрезка интегрирования и значения подынтегральной функции в середине этого отрезка

$$\int_a^b \varphi(x)\, dx \approx |b-a|\varphi\left(\frac{a+b}{2}\right). \tag{14.3}$$

Эта квадратурная формула точна на многочленах первой степени, и при малых $|b-a|$ ее погрешность есть $O(|b-a|^3)$.

Наряду с этой квадратурной формулой, которую мы впредь будем называть формулой *центральных прямоугольников*, можно ввести так называемые формулы *левых* и *правых прямоугольников*. Первая из них состоит в представлении интеграла произведением длины отрезка интегрирования и значения подынтегральной функции в левом конце отрезка

$$\int_a^b \varphi(x)\, dx \approx |b-a|\varphi(a), \tag{14.4}$$

а вторая — произведением длины отрезка интегрирования и значения подынтегральной функции в правом конце отрезка

$$\int_a^b \varphi(x)\, dx \approx |b-a|\varphi(b). \tag{14.5}$$

Обе эти формулы точны только на многочленах нулевой степени и имеют погрешность $O(|b-a|^2)$.

а) **Метод Эйлера**. Заменим интеграл в (14.2) формулой левых прямоугольников (14.4). В результате получим приближенное равенство

$$u(t_{n+1}) - u(t_n) \approx \tau f(t_n, u(t_n)). \tag{14.6}$$

Определим приближенное решение задачи (14.1) как такую сеточную функцию на ω, которая превращает соотношение (14.6) в равенство. Разделив полученное равенство на τ, будем иметь

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = f(t_n, u_n), \quad n = 0, 1, \ldots, \qquad u_0 = u(0). \tag{14.7}$$

Соотношение (14.7) позволяет рекуррентным образом найти приближенное решение во всех узлах. Численный метод решения задачи (14.1), реализуемый формулами (14.7), называется *методом Эйлера*.

б) **Неявный метод Эйлера**. Заменим теперь интеграл в (14.2) формулой правых прямоугольников (14.5). Для отыскания приближенного решения получим уравнения

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = f(t_{n+1}, u_{n+1}), \quad n = 0, 1, \ldots, \qquad u_0 = u(0). \tag{14.8}$$

Соотношения (14.8) коренным образом отличаются от соотношений (14.7): для отыскания приближенного решения u_{n+1} теперь нужно решать нелинейные уравнения

$$u_{n+1} - \tau f(t_{n+1}, u_{n+1}) = u_n.$$

Метод (14.8) называется *неявным методом Эйлера*. С точки зрения простоты вычислений он сильно уступает обычному методу Эйлера (14.7). Как будет показано позже, по точности оба метода сравнимы. Еще позже будет установлена существенно бóльшая устойчивость метода (14.8) по сравнению с (14.7).

в) **Метод Рунге**. Заменим интеграл в (14.2) формулой центральных прямоугольников (14.3)

$$u(t_{n+1}) - u(t_n) \approx \tau f(t_{n+1/2}, u(t_{n+1/2})). \tag{14.9}$$

Использованный нами ранее прием получения численного метода путем превращения приближенного равенства в точное за счет замены $u(t_n)$ на u_n здесь напрямую не проходит: в приближенном равенстве фигурирует значение f при u в точке $t_{n+1/2}$, которая не является узловой. Если же мы все же воспользуемся этим приемом и введем *промежуточное* значение приближенного решения в точке $t_{n+1/2}$, то нам потребуется дополнительное уравнение для определения приближенного решения в точке $t_{n+1/2}$. Обозначим промежуточное значение приближенного решения через $u_{n+1/2}$. Тогда из (14.9)

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = f(t_{n+1/2}, u_{n+1/2}), \tag{14.10}$$

а для отыскания $u_{n+1/2}$ напишем, например, соотношение Эйлера (14.7)

$$\frac{u_{n+1/2} - u_n}{\tau/2} = f(t_n, u_n). \tag{14.11}$$

Итак, в методе (14.10), (14.11) вычисление нового приближенного значения искомого решения u_{n+1} осуществляется поэтапно. Сначала находится промежуточное значение $u_{n+1/2}$ по формуле (14.11), а затем и само u_{n+1} из (14.10). Вычисления по обеим формулам явные. *Метод* (14.10), (14.11) был предложен немецким математиком *Рунге* и носит его имя. Будет показано, что точность метода (14.10), (14.11) выше, чем точность методов (14.7) и (14.8); для вычисления интеграла все же использована более точная квадратурная формула.

Замечание 14.1. В некоторых учебниках по численным методам метод (14.10), (14.11) называется методом предиктор-корректор (предсказывающе корректирующим).

г) **Метод трапеций.** Наконец, заменим интеграл в (14.2) *формулой трапеций*

$$\int_a^b \varphi(x)dx \approx |b-a| \, \frac{\varphi(a) + \varphi(b)}{2}.$$

В результате получим

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = \frac{f(t_n, u_n) + f(t_{n+1}, u_{n+1})}{2}, \quad n = 0, 1, \ldots, \qquad u_0 = u(0). \tag{14.12}$$

Как и в случае неявного метода Эйлера (14.8), реализация метода (14.12) требует решения нелинейного уравнения

$$u_{n+1} - \frac{\tau}{2} f(t_{n+1}, u_{n+1}) = F(u_n) := u_n + \frac{\tau}{2} f(t_n, u_n).$$

Будет показано, что точность метода (14.12) сравнима с точностью метода Рунге (14.10), (14.11), а по устойчивости он значительно превосходит последний и в этом отношении близок к неявному методу Эйлера (14.8). Метод (14.12) будем называть *методом трапеций*.

14.2 Аппроксимация.

Определение 14.1. Сеточная функция

$$z_n = u_n - u(t_n), \quad n = 1, 2, \ldots$$

называется погрешностью решения.

Замечание 14.2. Погрешность решения определена только в узлах основной сетки ω, но не в промежуточных узлах.

Выведем уравнение, которому удовлетворяет погрешность решения в методе Эйлера (14.7). Подставив $u_n = z_n + u(t_n)$ в (14.7), получим

$$\frac{z_{n+1} - z_n}{\tau} + \frac{u(t_{n+1}) - u(t_n)}{\tau} = f(t_n, u(t_n) + z_n). \tag{14.13}$$

Преобразуем правую часть этого соотношения путем разложения по формуле Тейлора

$$f(t_n, u(t_n) + z_n) = f(t_n, u(t_n)) + z_n \frac{\partial f}{\partial u}(t_n, \tilde{u}),$$

где

$$\tilde{u} = u(t_n) + \theta z_n, \qquad 0 < \theta < 1.$$

Подставляя это разложение в (14.13) и преобразовывая, найдем, что

$$\frac{z_{n+1} - z_n}{\tau} = \frac{\partial f}{\partial u}(t_n, \tilde{u}) z_n + \psi_n, \tag{14.14}$$

где

$$\psi_n = f(t_n, u(t_n)) - \frac{u(t_{n+1}) - u(t_n)}{\tau}. \tag{14.15}$$

Искомое уравнение получено.

Определение 14.2. Сеточная функция ψ_n, задаваемая соотношением (14.15), называется *погрешностью аппроксимации* дифференциального уравнения (14.1) уравнением (14.7).

Замечание 14.3. Погрешность аппроксимации представляет собой разность между правой и левой частями уравнения, определяющего численный метод, если туда вместо приближенного решения подставить точное.

Оценим погрешность аппроксимации метода Эйлера. Используя формулу Тейлора и принимая во внимание уравнение (14.1), в предположении непрерывности второй производной $u(t)$ из (14.15) будем иметь

$$\psi_n = f(t_n, u(t_n)) - \frac{u(t_n) + \tau u'(t_n) + \frac{\tau^2}{2} u''(t_n + \tilde{\theta}\tau) - u(t_n)}{\tau} =$$
$$= [f(t_n, u(t_n)) - u'(t_n)] + \frac{\tau}{2} u''(t_n + \tilde{\theta}\tau) = O(\tau).$$

Тем самым, метод Эйлера имеет первый порядок аппроксимации.

Упражнение 14.1. Исследовать погрешности аппроксимации методов (14.8) и (14.12).

Указание. Для упрощения выкладок разложение по формуле Тейлора в методе (14.8) вести в точке t_{n+1}, а в методе (14.12) — в точке $t_{n+1/2}$.

15

Методы Рунге-Кутты

15.1 Общая концепция

Основные численные методы решения уравнения

$$\frac{du}{dt} = f(t, u), \quad t > 0, \quad u(0) = u_0 \tag{15.1}$$

и систем таких уравнений, наиболее широко используемые в вычислительной практике, делятся на два больших класса: многошаговые методы и методы Рунге-Кутты. Все приведенные в качестве примеров численные методы относятся к методам Рунге-Кутты, хотя некоторые из них могут трактоваться и как многошаговые (одношаговые).

Сейчас мы опишем общую концепцию методов Рунге-Кутты. Для этого вновь обратимся к интегральному соотношению (14.2), на основе которого мы строили изложенные выше методы. Но прежде сделаем одно допущение относительно уравнения (15.1), которое в дальнейшем существенно облегчит нам жизнь. Будем предполагать, что правая часть f этого уравнения не зависит явным образом от t, т.е. $f \equiv f(u)$ и, следовательно,

$$\frac{du}{dt} = f(u), \quad t > 0, \quad u(0) = u_0. \tag{15.2}$$

Сделанное допущение не является ограничением, ибо все численные методы, построенные для одного уравнения, допускают очевидное распространение на случай системы, т.е., вообще говоря, u можно считать вектором. Если же f зависит явным образом от t, то, обозначив, например, $t = u_0(t)$ и объявив $u_0(t)$ новой неизвестной, удовлетворяющей уравнению и начальному условию

$$u_0'(t) = 1, \qquad u_0(0) = 0,$$

мы сведем задачу к ранее оговоренному случаю.

Итак, пусть $f = f(u)$. Перепишем для этого случая интегральное соотношение (14.2)

$$u(t_{n+1}) - u(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u)\,dt. \tag{15.3}$$

Сделаем в интеграле (15.3) замену переменной интегрирования, полагая

$$(t - t_n)/\tau = \theta. \tag{15.4}$$

Эта замена переводит отрезок $[t_n, t_{n+1}]$ в $[0, 1]$ так, что

$$u(t_{n+1}) - u(t_n) = \tau \int_0^1 f(\hat{u}(\theta))\,d\theta, \tag{15.5}$$

где

$$\hat{u}(\theta) = u(t(\theta)).$$

Пусть

$$0 \leqslant \theta_1 < \theta_2 < \cdots < \theta_s \leqslant 1 \tag{15.6}$$

суть узлы, а $b_1, b_2, \ldots, b_s$ — веса некоторой квадратурной формулы, аппроксимирующей $\int_0^1 \varphi(\theta)d\theta$. Используя эту формулу для аппроксимации интеграла в (15.5), будем иметь

$$u(t_{n+1}) - u(t_n) \approx \tau \sum_{i=1}^{s} b_i f\left(\hat{u}(\theta_i)\right). \tag{15.7}$$

Чтобы получить из этого соотношения численный метод, нужно точные значения искомого решения заменить на приближенные, а приближенное равенство — наоборот на точное. Но прежде мы должны ввести дополнительные обозначения. Будем обозначать значение приближенного решения в точке t, отвечающей узлу квадратурной формулы θ_i $(t = t_n + \tau\theta_i)$ через Y_i. Тогда искомое уравнение примет вид

$$u_{n+1} = u_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i f(Y_i). \tag{15.8}$$

Чтобы получить уравнение для определения Y_i, проинтегрируем (15.2) от t_n до $t_n + \tau\theta_i$ и сделаем замену (15.4)

$$\hat{u}(\theta_i) - u(t_n) = \int_{t_n}^{t_n+\tau\theta_i} f(u(t))\,dt = \tau \int_0^{\theta_i} f(\hat{u}(\theta))\,d\theta.$$

Заменим и здесь интеграл квадратурной формулой *с теми же узлами* (15.6). Эта квадратурная формула будет несколько своеобразной, ибо не все ее узлы будут лежать на отрезке интегрирования. Разумеется, ее веса, вообще говоря, должны быть отличны от b_j и даже быть своими для каждого i. Пусть

$$Y_i = u_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(Y_j), \quad i = 1, 2, \ldots, s. \tag{15.9}$$

Соотношения (15.8), (15.9) полностью определяют численный метод.

Итак, для того, чтобы найти приближенное решение u_{n+1} (когда u_n уже найдено), сначала нужно решить, вообще говоря, нелинейную систему (15.9) и определить Y_i, $i = 1, 2, \ldots, s$, которые затем следует подставить в (15.8).

Определение 15.1. Метод (15.8), (15.9) называется *s-этапным методом Рунге-Кутты.*

Этот метод принято записывать таблицей его коэффициентов, которая называется *таблицей Бутчера*

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2s} \\ & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \ldots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \ldots & b_s \end{array} \qquad c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij}. \tag{15.10}$$

Замечание 15.1. Поскольку b_i суть весовые коэффициенты квадратурной формулы для интеграла по единичному отрезку, то $\sum\limits_{i=1}^{s} b_i = 1$. Из аналогичных соображений $c_i = \sum\limits_{j=1}^{s} a_{ij} = \theta_i$.

Замечание 15.2. Если бы вместо (15.2) рассматривалось уравнение (15.1), то с учетом замечания 15.1 соотношения (15.8) и (15.9) приняли бы вид

$$u_{n+1} = u_n + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i f(t_n + \tau c_i, Y_i),$$

$$Y_i = u_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_n + \tau c_j, Y_j), \qquad i = 1, 2, \ldots, s.$$

Определение 15.2. Если в таблице Бутчера (15.10) коэффициенты $a_{ij} = 0$ при $j \geqslant i$, то метод (15.8), (15.9) называется явным s-этапным методом Рунге-Кутты.

Определение 15.3. Если $a_{ij} = 0$ при $i > j$ и хотя бы один $a_{ii} \neq 0$, то метод (15.8), (15.9) называется диагонально неявным.

Определение 15.4. Если $a_{ij} = 0$ при $j > i$, а $a_{ii} = a$, $i = 1, \ldots, s$, то метод (15.8), (15.9) называется однократно неявным.

Во всех остальных случаях мы говорим о неявных методах Рунге-Кутты.

Коэффициенты в таблице Бутчера (15.10) *при заданных ограничениях* выбираются из соображений максимальной точности численного метода.

15.2 Одноэтапные методы Рунге-Кутты

Исследуем одноэтапные ($s = 1$) методы Рунге-Кутты. При $s = 1$ соотношения (15.9), (15.8) принимают вид

$$Y_1 = u_n + \tau a_{11} f(Y_1), \tag{15.11}$$

$$u_{n+1} = u_n + \tau b_1 f(Y_1). \tag{15.12}$$

Из соображений аппроксимации (квадратурная формула должна быть точной по крайней мере на const) находим, что $b_1 = 1$. Если теперь положить $a_{11} = 0$, то метод будет явным, причем $Y_1 = u_n$, а (15.12) можно переписать в виде

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = f(u_n).$$

Мы получили метод Эйлера. Тем самым, метод Эйлера есть *явный одноэтапный метод Рунге-Кутты.*

Если взять $a_{11} = 1$, то метод (15.11), (15.12) будет неявным. При этом правые части (15.11) и (15.12) совпадают, что приводит к соотношению $Y_1 = u_{n+1}$. В этом случае система (15.11), (15.12) преобразуется к виду

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = f(u_{n+1}).$$

Это неявный метод Эйлера (14.8). Он также является одноэтапным методом Рунге-Кутты.

Исследуем теперь наиболее целесообразный выбор параметров b_1 и a_{11} с точки зрения минимизации погрешности аппроксимации. Чтобы найти погрешность аппроксимации, перепишем уравнение (15.12) в виде

$$\frac{u_{n+1}-u_n}{\tau}=b_1 f(Y_1) \tag{15.13}$$

(ср. с (14.7), (14.8), (14.10) и (14.12)), а решение уравнения (15.11) обозначим через $Y_1(u_n)$. Если, как и выше, $z_n=u_n-u(t_n)$, то

$$\frac{z_{n+1}-z_n}{\tau}=b_1 f(Y_1(u(t_n)+z_n))-\frac{u(t_{n+1})-u(t_n)}{\tau}.$$

И снова, раскладывая первое слагаемое правой части по формуле Тейлора, находим, что

$$\begin{aligned}\frac{z_{n+1}-z_n}{\tau}&=b_1\left[f(Y_1(u(t_n)))+\frac{\partial f}{\partial u}(\tilde{u})z_n\right]-\frac{u(t_{n+1})-u(t_n)}{\tau}=\\&=b_1\frac{\partial f}{\partial Y_1}\frac{\partial Y_1}{\partial u}(\tilde{u})z_n+\psi_n,\end{aligned}$$

где

$$\psi_n=b_1 f(Y_1(u(t_n)))-\frac{u(t_{n+1})-u(t_n)}{\tau} \tag{15.14}$$

— погрешность аппроксимации, а $Y_1(u(t_n))$ — решение уравнения (15.11) с $u(t_n)$ вместо u_n, т.е.

$$Y_1(u(t_n))=u(t_n)+\tau a_{11} f(Y_1(u(t_n))). \tag{15.15}$$

Замечание 15.3. Погрешность аппроксимации (15.14) представляет собой разность между правой и левой частями уравнения (15.13), если туда вместо приближенного решения подставить точное (ср. с замечанием 14.3).

Разложим погрешность аппроксимации (15.14) по степеням τ. Имеем

$$\psi_n=b_1\left[f(Y_1)\Big|_{\tau=0}+\tau\frac{d\,f(Y_1)}{d\,\tau}\Big|_{\tau=0}+\frac{\tau^2}{2}\widetilde{\frac{d^2 f}{d\tau^2}}\right]-\left[u'(t_n)+\frac{\tau}{2}u''(t_n)+\frac{\tau^2}{6}\tilde{\tilde{u}}'''\right].$$

Из (15.15) следует, что $Y_1|_{\tau=0}=u(t_n)$ и поэтому

$$f(Y_1)\Big|_{\tau=0}=f(u(t_n)).$$

Снова с использованием (15.15) находим, что

$$\frac{df(Y_1)}{d\tau}\Big|_{\tau=0}=\frac{df}{dY_1}\frac{dY_1}{d\tau}\Big|_{\tau=0}=\frac{df}{du}(u(t_n))a_{11}f(u(t_n)),$$

а из уравнения (15.2)

$$u'(t_n) = f(u(t_n)), \quad u''(t_n) = \frac{df}{dt}(u(t_n)) = \frac{df}{du}(u(t_n))\frac{du}{dt}(t_n) = \frac{df}{du}f.$$

Поэтому

$$\psi_n = (b_1 - 1)f(u(t_n)) + \tau\left[b_1 a_{11} - \frac{1}{2}\right] f(u(t_n))\frac{df}{du}(u(t_n)) + O(\tau^2).$$

Тем самым, для того, чтобы погрешность аппроксимации была $O(\tau^2)$, необходимо и достаточно, чтобы выполнялись условия

$$b_1 = 1, \qquad a_{11}b_1 = 1/2. \tag{15.16}$$

Отсюда находим

$$b_1 = 1, \qquad a_{11} = 1/2$$

и, следовательно, неявный одноэтапный метод Рунге-Кутты

$$\begin{aligned} Y_1 &= u_n + \frac{\tau}{2}f(Y_1), \\ u_{n+1} &= u_n + \tau f(Y_1) \end{aligned} \tag{15.17}$$

имеет второй порядок аппроксимации.

Замечание 15.4. Из первого уравнения (15.17) следует, что момент времени, на который Y_1 приближает $u(t)$, есть $t + \tau/2$, ибо для задачи $u' = 1$, $u(0) = 0$, имеющей решение $u = t$, $Y_1 = u_n + \tau/2 = t_n + \tau/2$. Тем самым, для уравнения (15.1) метод (15.17) принимает вид (ср. с замечанием 15.2)

$$\begin{aligned} Y_1 &= u_n + \frac{\tau}{2}f(t_{n+1/2}, Y_1), \\ u_{n+1} &= u_n + \tau f(t_{n+1/2}, Y_1). \end{aligned}$$

Упражнение 15.1. Показать, что второе из соотношений метода (15.17) получается использованием в (15.7) одноточечной формулы Гаусса (узел — полинома Лежандра первой степени на [0, 1], а весовой коэффициент квадратурной формулы — интеграл по [0, 1] соответствующего весового коэффициента интерполяционного многочлена). При этом для получения первого соотношения (15.17) используется квадратурная формула (с тем же узлом) с весовым коэффициентом, полученным интегрированием по $[0, \theta_1]$ того же весового коэффициента интерполяционного многочлена.

Соотношения (15.17) можно преобразовать. Исключив $f(Y_1)$, найдем, что $u_{n+1} = 2Y_1 - u_n$. Выражая отсюда Y_1 и подставляя его во второе уравнение (15.17), получим

$$u_{n+1} = u_n + \tau f\left(\frac{u_{n+1} + u_n}{2}\right).$$

Замечание 15.5. Метод (15.17) сильно напоминает метод Рунге (14.10), (14.11). Отличие между ними состоит в том, что здесь промежуточное значение находится по неявной формуле, а в методе Рунге по явной формуле (14.11). Метод (15.17), как мы уже сказали, является одноэтапным (неявным) методом Рунге-Кутты, а метод (14.10), (14.11) — двухэтапным (явным) методом. Подчеркнем, что слову *этап* здесь мы придаем четкий математический смысл.

15.3 Методы третьего порядка аппроксимации

Выясним ограничения на коэффициенты таблицы Бутчера (15.10), обеспечивающие третий порядок аппроксимации s-этапного метода Рунге-Кутты. Для этого нужно исследовать погрешность аппроксимации

$$\psi_n := \psi_n(\tau) := \sum_{i=1}^{s} b_i f(Y_i(u(t_n))) - \frac{u(t_{n+1}) - u(t_n)}{\tau},$$

где

$$Y_i(u(t_n)) = u(t_n) + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(Y_j(u(t_n))) =: Y_i(u(t_n); \tau), \quad i = 1, 2, \ldots, s. \tag{15.18}$$

Напомним вывод представления для ψ_n. Из (15.8)

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = \sum_{i=1}^{n} b_i f(Y_i) =: \sum_{i=1}^{s} b_i f(Y_i(u_n)).$$

Поскольку $u_n = u(t_n) + z_n$, то

$$\frac{z_{n+1} - z_n}{\tau} = \sum_{i=1}^{s} b_i f(Y_i(u(t_n) + z_n)) - \frac{u(t_{n+1}) - u(t_n)}{\tau} =$$
$$= \sum_{i=1}^{s} b_i f(Y_i(u(t_n))) + z_n \sum_{i=1}^{s} b_i \frac{df(Y_i(u))}{du}\bigg|_{u=u(t_n)+\sigma_i z_n} - \frac{u(t_{n+1}) - u(t_n)}{\tau} =$$
$$= \left(\sum_{i=1}^{s} b_i \frac{df(Y_i(u))}{du}\bigg|_{u=u(t_n)+\sigma_i z_n}\right) z_n + \psi_n.$$

Раскладывая $\psi_n(\tau)$ по τ до четвертого порядка, будем иметь

$$\psi_n(\tau) = \sum_{i=1}^{s} b_i \left[f(Y_i)\bigg|_{\tau=0} + \tau \frac{d\,f(Y_i)}{d\,\tau}\bigg|_{\tau=0} + \frac{\tau^2}{2}\frac{d^2\,f(Y_i)}{d\,\tau^2}\bigg|_{\tau=0} + \frac{\tau^3}{6}\frac{d^3\,f(Y_i)}{d\,\tau^3}\bigg|_{\tau=0} + \right.$$
$$\left. + O(\tau^4)\right] - \left[u'(t_n) + \frac{\tau}{2}u''(t_n) + \frac{\tau^2}{6}u'''(t_n) + \frac{\tau^3}{24}u^{IV}(t_n) + O(\tau^4)\right]. \tag{15.19}$$

Поскольку $f(Y_i(u(t_n)))$ есть сложная функция τ, то вычислим сначала производные по τ функции $Y_i(u(t_n);\tau)$ при $\tau = 0$. Из (15.18) с учетом (15.10), находим, что

$$Y_i\bigg|_{\tau=0} = u(t_n),$$
$$Y_i'\bigg|_{\tau=0} = \frac{d\,Y_i}{d\,\tau}\bigg|_{\tau=0} = \left[\sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(Y_j) + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \frac{d\,f}{d\,Y_j}\,Y_j'\right]\bigg|_{\tau=0} = f(u(t_n))c_i,$$
$$Y_i''\bigg|_{\tau=0} = \left[2\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\frac{df}{dY_j}Y_j' + \tau\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\frac{d^2 f}{dY_j^2}Y_j'\,Y_j' + \tau\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\frac{df}{dY_j}Y_j''\right]\bigg|_{\tau=0} =$$
$$= 2\frac{df}{du}f(u(t_n))\sum_{j=1}^{s} a_{ij}c_j.$$

Теперь можно найти производные f:

$$
\begin{aligned}
&f(Y_i(u(t_n)))\Big|_{\tau=0} = f(u(t_n)),\\
&\frac{df(Y_i)}{d\tau}\Big|_{\tau=0} = \frac{df}{dY_i}Y_i'\Big|_{\tau=0} = \frac{df}{du}f(u(t_n))c_i,\\
&\frac{d^2f(Y_i)}{d\tau^2}\Big|_{\tau=0} = \left[\frac{d^2f}{dY_i^2}(Y_i')^2+\frac{df}{dY_i}Y_i''\right]\Big|_{\tau=0} =\\
&= \frac{d^2f}{du^2}f^2(u(t_n))c_i^2 + 2\left(\frac{df}{du}\right)^2 f(u(t_n))\sum_{j=1}^{s}a_{ij}c_j.
\end{aligned}
$$

Далее, из (15.2)

$$
\begin{aligned}
&u' = f, \quad u'' = \frac{df}{du}u' = f'f, \quad u''' = f''u'f + (f')^2u' = f''f^2 + (f')^2f\\
&u^{IV} = f'''u'f^2 + f''2ff'u' + 2f'f''u'f + (f')^3u' =\\
&= f'''f^3 + 4f''f'f^2 + (f')^3f
\end{aligned}
$$

и, следовательно,

$$
\frac{u(t_{n+1}) - u(t_n)}{\tau} = f + \frac{\tau}{2}f'f + \frac{\tau^2}{6}\left(f''f^2 + (f')^2f\right) + O(\tau^3). \tag{15.20}
$$

Замечание 15.6. Если бы правая часть f уравнения в (15.1) явно зависела от t, то вместо (15.20) при разложении до $O(\tau^4)$ мы бы имели

$$
\begin{aligned}
&\frac{u(t_{n+1}) - u(t_n)}{\tau} =\\
&= f + \frac{\tau}{2}(f_t + f_uf) + \frac{\tau^2}{6}(f_{tt} + 2f_{tu}f + f_uf_t + f_{uu}ff + f_uf_uf) +\\
&+ \frac{\tau^3}{24}(f_{ttt} + 3f_{ttu}f + 3f_{tuu}ff + 3f_{uu}f_tf + 3f_{tu}f_t + 3f_{tu}f_uf + 2f_uf_{tu}f +\\
&+ f_uf_uf_t + f_uf_{tt} + f_{uuu}fff + 3f_{uu}f_uff + f_uf_{uu}ff + f_uf_uf_uf) + O(\tau^4).
\end{aligned}
$$

Подставляя теперь найденные разложения в (15.19), будем иметь

$$
\begin{aligned}
\psi_n = &\sum_{i=1}^{s} b_i\left[f + \tau f'fc_i + \frac{\tau^2}{2}\left(f''f^2c_i^2 + 2f'^2f\sum_{j=1}^{s}a_{ij}c_j\right)\right] -\\
&- \left[f + \frac{\tau}{2}f'f + \frac{\tau^2}{6}\left(f''f^2 + f'^2f\right)\right] + O(\tau^3).
\end{aligned} \tag{15.21}
$$

Отсюда, приравнивая нулю коэффициенты при различных степенях τ, находим, что *условия третьего порядка аппроксимации* суть

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{s} b_i = 1, \\ &\sum_{i=1}^{s} b_i c_i = \frac{1}{2}, \end{aligned} \tag{15.22}$$

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \\ &\sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6} \qquad (b^T A c = \frac{1}{6}). \end{aligned} \tag{15.23}$$

При этом (15.22) суть условия второго порядка аппроксимации (ср. с (15.16)).

Замечание 15.7. Чтобы иметь условия четвертого порядка аппроксимации, к условиям (15.22), (15.23) нужно добавить следующие условия:

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^3 = \frac{1}{4}, \\ &\sum_{i,j=1}^{s} b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8}, \\ &\sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}, \\ &\sum_{i,j,k=1}^{s} b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}. \end{aligned} \tag{15.24}$$

Замечание 15.8. Число условий, накладываемых на коэффициенты b_i и a_{ij} метода (15.8), (15.9) (на элементы таблицы Бутчера (15.10)) для получения метода порядка p приведено в нижеследующей таблице.

Таблица 1.

Порядок p	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Число условий	1	2	4	8	17	37	85	200	486	1205

Замечание 15.9. Условия (15.22) с учетом замечания 15.1 можно трактовать как условия точности квадратурной формулы из (15.7) на линейных функциях.[1] Добавление к этим условиям первого из соотношений (15.23), а затем и первого из соотношений (15.24) на указанную квадратурную формулу накладывает дополнительные условия точности на квадратичных и кубичных функциях.

Упражнение 15.2. Показать, что метод трапеций (14.12) является неявным двухэтапным методом Рунге-Кутты второго порядка аппроксимации. (Найти все b_i, a_{ij} и показать невыполнение хотя бы одно из условий (15.23))

Ответ:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} \qquad \left(\frac{1}{2}0^2 + \frac{1}{2}1^2\right) \neq \frac{1}{3}.$$

Упражнение 15.3. Показать, что метод Рунге (14.10),(14.11) является явным двухэтапным методом Рунге-Кутты второго порядка.

Ответ:

$$\begin{array}{c|cc} 1/2 & 1/2 & \\ \hline & 0 & 1 \end{array} \qquad \left[0 \cdot 0 + 1 \cdot \frac{1}{4}\right] \neq \frac{1}{3}.$$

15.4 Двухэтапные неявные методы третьего порядка

Положим в (15.22), (15.23) параметр $s = 2$. В результате система примет вид

$$\begin{aligned} &b_1 + b_2 = 1, \\ &c_1 b_1 + c_2 b_2 = 1/2, \\ &c_1^2 b_1 + c_2^2 b_2 = 1/3, \\ &b_1(a_{11}c_1 + a_{12}c_2) + b_2(a_{21}c_1 + a_{22}c_2) = 1/6. \end{aligned} \tag{15.25}$$

Эта система содержит четыре уравнения и шесть неизвестных (Если не считать c_1 и c_2, задаваемые (15.10)). Поэтому, вообще говоря, два из этих неизвестных должны остаться свободными, а остальные выразиться через них. Система (15.25) нелинейная, а для нелинейных систем, вообще говоря, нет регулярных способов отыскания точного решения. Однако,

[1] Ведь $c_i = \theta_i$, т.е. координата переменной интегрирования в i-ом узле.

система (15.25) может быть решена точно. Укажем один из путей, приводящих к решению этой системы.

Для отыскания решения системы (15.25) предположим сначала, что неизвестные c_1 и c_2 найдены, и рассмотрим первые три уравнения (15.25) как систему линейных уравнений относительно b_1 и b_2. Поскольку эта система переопределена, то для ее разрешимости необходимо обращение в нуль определителя расширенной матрицы, которая является квадратной,

$$\begin{aligned}&\begin{vmatrix}1 & 1 & 1\\ c_1 & c_2 & 1/2\\ c_1^2 & c_2^2 & 1/3\end{vmatrix} = \frac{1}{3}c_2 + \frac{1}{2}c_1^2 + c_1c_2^2 - c_1^2c_2 - \frac{1}{2}c_2^2 - \frac{1}{3}c_1 = \\ &= (c_2 - c_1)\left[\frac{1}{3} - \frac{c_1 + c_2}{2} + c_1c_2\right] = 0.\end{aligned} \tag{15.26}$$

Проанализируем это соотношение. Если бы $c_1 = c_2$, то последнее уравнение (15.25) приняло бы вид

$$c_1^2b_1 + c_2^2b_2 = 1/6,$$

что противоречит третьему уравнению (15.25), и поэтому

$$c_1 - c_2 \neq 0. \tag{15.27}$$

Тем самым, из (15.26) и (15.27) следует, что единственным условием разрешимости относительно b_1 и b_2 системы первых трех уравнений (15.25) является условие

$$2 - 3(c_1 + c_2) + 6c_1c_2 = 0$$

или

$$(3 - 6c_1)c_2 = 2 - 3c_1.$$

Поскольку $c_1 = 1/2$ не удовлетворяет этому уравнению, то

$$c_1 \neq 1/2 \tag{15.28}$$

и можно найти

$$c_2 = \frac{2 - 3c_1}{3(1 - 2c_1)}. \tag{15.29}$$

Разрешим теперь первые два уравнения (15.25) относительно b_1 и b_2 при помощи формул Крамера. Будем иметь

$$\Delta = \begin{vmatrix}1 & 1\\ c_1 & c_2\end{vmatrix} = c_2 - c_1 \neq 0, \quad \Delta_1 = \begin{vmatrix}1 & 1\\ 1/2 & c_2\end{vmatrix} = c_2 - \frac{1}{2}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix}1 & 1\\ c_1 & 1/2\end{vmatrix} = \frac{1}{2} - c_1,$$

и, следовательно,

$$b_1 = \frac{c_2 - 1/2}{c_2 - c_1} = \frac{1}{4(3c_1^2 - 3c_1 + 1)}, \qquad b_2 = \frac{3(1-2c_1)^2}{4(3c_1^2 - 3c_1 + 1)}. \tag{15.30}$$

Из (15.29), (15.30) следует, что c_1 можно принять за параметр. В качестве второго параметра возьмем a_{12}. Тогда

$$a_{11} = c_1 - a_{12}. \tag{15.31}$$

Поскольку

$$a_{21} = c_2 - a_{22}, \tag{15.32}$$

то, подставляя (15.31), (15.32) в последнее из уравнений (15.25), получим

$$b_1[(c_1 - a_{12})c_1 + a_{12}c_2] + b_2[(c_2 - a_{22})c_1 + a_{22}c_2] = 1/6.$$

Принимая во внимание (15.30) и второе из уравнений (15.25), после разрешения полученного соотношения относительно a_{22}, будем иметь

$$a_{22} = \frac{1/6 - c_1/2 - a_{12}(c_2 - 1/2)}{1/2 - c_1} = \frac{(1-3c_1)(1-2c_1) - a_{12}}{3(1-2c_1)^2}. \tag{15.33}$$

Теперь из (15.32), (15.29) и (15.33) находим, что

$$a_{21} = \frac{1 - 2c_1 + a_{12}}{3(1-2c_1)^2}. \tag{15.34}$$

Соотношения (15.29), (15.30), (15.31), (15.33), (15.34) задают двухпараметрическое семейство неявных двухэтапных методов Рунге-Кутты третьего порядка:

$$\begin{array}{c|cc}
c_1 & c_1 - a_{12} & a_{12} \\
\dfrac{2-3c_1}{3(1-2c_1)} & \dfrac{1-2c_1+a_{12}}{3(1-2c_1)^2} & \dfrac{(1-3c_1)(1-2c_1)-a_{12}}{3(1-2c_1)^2} \\
\hline
 & \dfrac{1}{4(3c_1^2-3c_1+1)} & \dfrac{3(1-2c_1)^2}{4(3c_1^2-3c_1+1)}
\end{array} \tag{15.35}$$

Если положить $a_{12} = 0$, то получим однопараметрическое семейство *диагонально неявных* двухэтапных *методов* третьего порядка. Полагая теперь $c_1 \equiv a_{11} \equiv a_{22}$, из (15.33) для c_1 получим квадратное уравнение $6c_1^2 - 6c_1 + 1$ с корнями $c_1 = \gamma = (3 \pm \sqrt{3})/6$. Таблица Бутчера этого двухэтапного *однократно неявного метода* третьего порядка имеет вид

$$\begin{array}{c|cc}
\theta_1 = \gamma & \gamma & 0 \\
\theta_2 = 1-\gamma & 1-2\gamma & \gamma \\
\hline
 & 1/2 & 1/2
\end{array} \qquad \gamma = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}. \tag{15.36}$$

При других значениях параметра γ метод (15.36) имеет погрешность аппроксимации $O(\tau^2)$

15.5 Явные двухэтапные методы

В силу определения для явного двухэтапного метода $a_{11} = a_{12} = a_{22} = 0$ и лишь $a_{21} \neq 0$.

Упражнение 15.4. Доказать, что при всех $a_{ij} = 0$ двухэтапный метод вырождается в одноэтапный.

Поскольку двухэтапные методы третьего порядка имеют лишь два свободных параметра, а мы задали три, то рассчитывать на третий порядок у явных двухэтапных методов, вообще говоря, не приходится. Покажем, что так оно и есть.

Принимая a_{21} за параметр, из условий второго порядка аппроксимации (15.22), которые в нашем случае принимают вид

$$b_1 + b_2 = 1, \qquad a_{21} b_2 = 1/2,$$

находим

$$b_1 = \left(1 - \frac{1}{2a_{21}}\right), \qquad b_2 = \frac{1}{2a_{21}}. \tag{15.37}$$

Тем самым, явные двухэтапные методы Рунге-Кутты второго проядка образуют однопараметрическое семейство.

Далее, поскольку в рассматриваемом случае наряду с a_{11}, a_{12}, a_{22} и $c_1 = 0$, то левая часть четвертого из условий (15.25) обращается в нуль и следовательно это условие выполненным быть не может. Мы доказали, что явных двухэтапных методов третьего порядка не существует.

Из (15.21) следует, что погрешность аппроксимации двухэтапного явного метода Рунге-Кутты второго порядка (15.37) имеет вид

$$\psi_n = \tau^2 \left\{ \frac{1}{4} \left(a_{21} - \frac{2}{3} \right) f^2 f'' - \frac{1}{6} f f'^2 \right\} + O(\tau^3).$$

Поэтому при $a_{21} = 2/3$ главный член погрешности упрощается, и погрешность принимает вид

$$\psi_n = -\frac{\tau^2}{6} f f'^2 + O(\tau^3).$$

Сам же метод в этом случае задается таблицей Бутчера

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 2/3 & 2/3 & 0 \\ \hline & 1/4 & 3/4 \end{array}.$$

Если же положить $a_{21} = 1$, то получим *метод Хойна*

$$Y_1 = u_n, \quad Y_2 = u_n + \tau f(Y_1),$$
$$u_{n+1} = u_n + \frac{\tau}{2}[f(Y_1) + f(Y_2)]$$

с таблицей Бутчера

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}.$$

При $a_{21} = 1/2$ приходим к уже известному нам методу Рунге (14.10), (14.11).

Упражнение 15.5. Выписать все построенные методы второго порядка и главные члены их погрешностей аппроксимации.

15.6 Двухэтапный метод четвертого порядка

Коэффициенты метода четвертого порядка должны удовлетворять еще четырем условиям (15.24). Хотя у двухэтапного метода третьего порядка осталось только два параметра, существует единственный двухэтапный метод четвертого порядка. Его коэффициенты суть

$$\begin{array}{c|cc} 1/2 - \sqrt{3}/6 & 1/4 & 1/4 - \sqrt{3}/6 \\ 1/2 + \sqrt{3}/6 & 1/4 + \sqrt{3}/6 & 1/4 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} \tag{15.38}$$

Замечание 15.10. Если бы f не зависела от u ($u' = f(t)$, $u_{n+1} = u_n + \tau \int_0^1 \hat{f}(\theta)\, d\theta$), то двухэтапный метод четвертого порядка получился бы, только если квадратура в (15.8) была квадратурой Гаусса, т.е. $b_1 = b_2 = 1/2$, а θ_1 и θ_2 — сдвинутые на $[0, 1]$ нули полинома Лежандра второй степени $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$. Корнями этого полинома являются числа $x_{1,2} = \pm 1/\sqrt{3}$. Делая линейную замену, переводящую отрезок $[-1, 1]$ в

отрезок $[0,1]$, находим, что узлы квадратуры Гаусса на $[0,1]$ суть $\theta_{1,2} = 1/2 \mp \sqrt{3}/6$, как в (15.38). Остальные коэффициенты получаются, если проинтегрировать по $[0,\theta_1]$ и $[0,\theta_2]$ весовые функции интерполяционного полинома Лагранжа с гауссовыми узлами.

Упражнение 15.6. Доказать, что в (15.38)

$$a_{ij} = \int_0^{\theta_j} p_i(\theta)\, d\theta,$$

где $p_i(\theta)$ — линейная функция (интерполянт по двум узлам) такая, что $p_i(\theta_i) = 1$, $p_i(\theta_j) = 0$ при $i \neq j$. Убедиться в выполнении условий (15.22)-(15.24).

15.7 Явные трехэтапные методы Рунге-Кутты третьего порядка

Рассмотрим более подробно явные трехэтапные методы. В силу определения

$$a_{11} = a_{12} = a_{13} = a_{22} = a_{23} = a_{33} = 0,$$

и указанные методы задаются таблицей

$$\begin{array}{c|ccc} c_2 & a_{21} & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & \\ \hline & b_1 & b_2 & b_3 \end{array}$$

Условия третьего порядка аппроксимации (15.22), (15.23) в рассматриваемом случае принимают вид

$$\begin{aligned} &b_1 + b_2 + b_3 = 1, \\ &b_2 c_2 + b_3 c_3 = 1/2, \\ &b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = 1/3, \\ &b_3 a_{32} c_2 = 1/6. \end{aligned} \tag{15.39}$$

Эта система имеет два однопараметрических семейства решений и одно двухпараметрическое. Найдем их. Будем рассматривать второе и третье уравнения системы (15.39) как линейную систему относительно b_2 и b_3. Эта система может быть как вырожденной (и это приводит к двум однопараметрическим семействам решений), так и невырожденной (двухпараметрическое семейство).

Пусть эта система вырождена, т.е.

$$\begin{vmatrix} c_2 & c_3 \\ c_2^2 & c_3^2 \end{vmatrix} = c_2 c_3 (c_3 - c_2) = 0. \tag{15.40}$$

В силу последнего из уравнений (15.39) $c_2 \neq 0$, и поэтому либо

$$c_3 = 0 \tag{15.41}$$

либо

$$c_2 = c_3. \tag{15.42}$$

i) Пусть сначала имеет место (15.41). Тогда второе и третье уравнения (15.39) принимают вид

$$c_2 b_2 = 1/2, \qquad c_2^2 b_2 = 1/3$$

и, следовательно,

$$c_2 = 2/3, \qquad b_2 = 3/4.$$

Если теперь $b_3 = b$ принять за параметр, то из последнего уравнения (15.39) находим

$$a_{32} = \frac{1}{4b}.$$

Поскольку $c_3 = 0$, то

$$a_{31} = -a_{32} = -\frac{1}{4b}$$

и, наконец, из первого уравнения (15.39)

$$b_1 = \frac{1}{4} - b.$$

Собирая найденные значения, получим таблицу Бутчера

$$\begin{array}{c|ccc} 2/3 & 2/3 & & \\ 0 & -\dfrac{1}{4b} & \dfrac{1}{4b} & \\ \hline & 1/4 - b & 3/4 & b \end{array} \tag{15.43}$$

ii) Теперь пусть имеет место (15.42). Снова из второго и третьего уравнений (15.39) находим, что

$$b_2 + b_3 = \frac{1}{2c_2} = \frac{1}{3c_2^2},$$

т.е.

$$a_{21} = c_2 = c_3 = 2/3, \qquad b_2 = 3/4 - b,$$

где $b = b_3$ — параметр. Из последнего уравнения (15.39)

$$a_{32} = \frac{1}{4b},$$

а из первого уравнения

$$b_1 = 1/4.$$

Наконец,

$$a_{31} = \frac{2}{3} - \frac{1}{4b}.$$

Таблица Бутчера рассматриваемого метода имеет вид

$$\begin{array}{c|ccc} 2/3 & 2/3 & & \\ 2/3 & \frac{2}{3} - \frac{1}{4b} & \frac{1}{4b} & \\ \hline & 1/4 & 3/4 - b & b \end{array} \tag{15.44}$$

iii) Если соотношение (15.40) места не имеет, то из второго и третьего уравнений (15.39) находим

$$b_2 = \frac{c_3/2 - 1/3}{c_2(c_3 - c_2)}, \qquad b_3 = \frac{1/3 - c_2/2}{c_3(c_3 - c_2)}. \tag{15.45}$$

Привлекая первое уравнение (15.39), найдем, что

$$b_1 = 1 - \frac{3(c_2 + c_3) - 2}{6c_2c_3}, \tag{15.46}$$

а из четвертого

$$a_{32} = \frac{c_3(c_3 - c_2)}{c_2(2 - 3c_2)}. \tag{15.47}$$

Таблица Бутчера этого метода такова

$$\begin{array}{c|ccc} c_2 & c_2 & & \\ c_3 & \dfrac{c_3(3c_2 - 3c_2^2 - c_3)}{c_2(2 - 3c_3)} & \dfrac{c_3(c_3 - c_2)}{c_2(2 - 3c_2)} & \\ \hline & \dfrac{6c_2c_3 - 3(c_2 + c_3) + 2}{6c_2c_3} & \dfrac{3c_3 - 2}{6c_2(c_3 - c_2)} & \dfrac{2 - 3c_2}{6c_3(c_3 - c_2)} \end{array}$$

Среди явных трехэтапных методов Рунге-Кутты третьего порядка в силу исторических причин наибольшей популярностью пользуются следующие методы из семейства (15.45)-(15.47)

$$\begin{array}{c|ccc} 1/2 & 1/2 & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & 1/6 & 2/3 & 1/6 \end{array}, \qquad \begin{array}{c|ccc} 1/3 & 1/3 & & \\ 2/3 & 0 & 2/3 & \\ \hline & 1/4 & 0 & 3/4 \end{array}. \tag{15.48}$$

15.8 Более общие методы Рунге-Кутты

Приведем без доказательства несколько теорем о свойствах методов Рунге-Кутты.

Теорема 15.1. *Не существует явного s-этапного метода Рунге-Кутты порядка p, если $p > s$.*

Для $s = 1, 2$ эта теорема нами фактически доказана.

Теорема 15.2. *При $s \geqslant 5$ не существует явного s-этапного метода Рунге-Кутты порядка $p = s$ (1963г.). При $s \geqslant 8$ не существует явного s-этапного метода Рунге-Кутты порядка $p = s - 1$ (1965г.). При $s \geqslant 10$ — порядка $p = s - 2$ (1985г.).*

Теорема 15.3. *Для данного p существует явный метод Рунге-Кутты порядка p с s этапами, если*

$$s = \begin{cases} (3p^2 - 10p + 24)/8, & p \text{ — четное}, \\ (3p^2 - 4p + 9)/8, & p \text{ — нечетное}. \end{cases}$$

Замечание 15.11. При $s = 6$ существует явный метод Рунге-Кутты порядка 5. При $s = 7$ существует явный метод порядка 6. Наивысший порядок, фактически достигнутый для явно построенных явных методов Рунге-Кутты равен 10. При этом число этапов равно 17.

Теорема 15.4. *При любом s существует единственный неявный метод Рунге-Кутты порядка $p = 2s$.*

Замечание 15.12. Для оптимального метода порядка $p = 2s$ узлы θ_j и веса b_j суть узлы и веса квадратурной формулы Гаусса, а

$$a_{ij} = \int_0^{\theta_j} p_i(\theta)\, d\theta,$$

где $p_j(\theta)$ — многочлен степени s такой, что $p_i(\theta_i) = 1$, $p_i(\theta_j) = 0$ при $i \neq j$.

Таблица 2. Минимальное число этапов для явных методов различных порядков

порядок	минимальное число этапов		
p	нижняя граница	s	верхняя граница
1		1	
2		2	
3		3	
4		4	
5		6	
6		7	
7		9	
8		11	
9	12		17
10	13		17

В вычислительной практике широко используется следующий, очень простой, явный 4-этапный метод 4-го порядка, предложенный в работе Кутты 1901 г.

$$\begin{array}{c|cccc} 1/2 & 1/2 & & & \\ 1/2 & 0 & 1/2 & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6. \end{array}$$

Замечание 15.13. В большинстве работ, посвященных методам Рунге-Кутты, вместо переменных Y_j фигурируют $k_j = f(Y_j)$. Поэтому, вместо (15.8), (15.9) пишут

$$\begin{aligned} k_i &= f(u_n + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j), \\ u_{n+1} &= u_n + \tau \sum_{j=1}^{s} b_j k_j. \end{aligned} \tag{15.49}$$

15.9 Сходимость методов Рунге-Кутты

Установим оценку погрешности приближенного решения, получаемого при помощи того или иного метода Рунге-Кутты.

Если, как и раньше,

$$z_n = u_n - u(t_n),$$

то из (15.8) находим, что z_{n+1} удовлетворяет уравнению

$$\frac{z_{n+1}-z_n}{\tau}=\left(\sum_{i=1}^{s} b_i \frac{d\,f(Y_i(u))}{d\,u}\bigg|_{u=u(t_n)+\sigma_i z_n}\right) z_n+\psi_n. \tag{15.50}$$

Прежде чем оценивать z_{n+1}, оценим коэффициент при z_n в правой части (15.50). Будем при этом предполагать, что

$$\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,f(u)}{d\,u}\right|\leqslant L. \tag{15.51}$$

Тогда

$$\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,f(Y_j(u))}{d\,u}\right|=\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,f}{d\,Y_j}\,\frac{d\,Y_j}{d\,u}\right|\leqslant L\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,Y_j}{d\,u}\right|. \tag{15.52}$$

Оценим $\left|d\,Y_j/d\,u\right|$. Из (15.9) с u вместо u_n

$$\frac{d\,Y_i}{d\,u}=1+\tau\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\frac{d\,f}{d\,Y_j}\,\frac{d\,Y_j}{d\,u}.$$

Пусть Y_{i_0} таково, что

$$\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,Y_{i_0}}{d\,u}\right|=\max_{1\leqslant j\leqslant s}\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,Y_j}{d\,u}\right|.$$

Тогда с учетом (15.51)

$$\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,Y_{i_0}}{d\,u}\right|\leqslant 1+\tau\sum_{j=1}^{s}|a_{i_0 j}|\,L\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,Y_j}{d\,u}\right|\leqslant 1+\tau asL\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,Y_{i_0}}{d\,u}\right|,$$

где

$$a=\max_{ij}\left|\,a_{ij}\,\right|, \tag{15.53}$$

и, следовательно,

$$(1-\tau asL)\max_{|u|<\infty}\left|\frac{d\,Y_{i_0}}{d\,u}\right|\leqslant 1.$$

Будем предполагать, что

$$1-\tau asL\geqslant\frac{1}{2},\quad \text{т.е.}\quad \tau\leqslant\frac{1}{2asL}. \tag{15.54}$$

Тогда

$$\left|\frac{d\,Y_j}{d\,u}\right|\leqslant 2,\quad j=1,\ldots,s. \tag{15.55}$$

Для простоты будем предполагать, что коэффициенты b_j неотрицательны. Поскольку их сумма равна единице, то с учетом (15.52), (15.55)

$$\left| \sum_{j=1}^{s} b_j \frac{d\, f(Y_j(u))}{d\, u} \right| \leqslant 2L.$$

Принимая во внимание эту оценку, из (15.50) находим, что

$$|z_{n+1}| \leqslant (1 + 2\tau L)|z_n| + \tau|\psi_n|.$$

Разрешим эти неравенства. Поскольку $z_0 = u_0 - u(0) = 0$, то

$$\begin{aligned}
&|z_1| \leqslant \tau|\psi_0|,\\
&|z_2| \leqslant (1 + 2\tau L)|z_1| + \tau|\psi_1|,\\
&|z_3| \leqslant (1 + 2\tau L)|z_2| + \tau|\psi_2|,\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\
&|z_n| \leqslant (1 + 2\tau L)|z_{n-1}| + \tau|\psi_{n-1}|.
\end{aligned}$$

Подставим теперь оценку $|z_1|$ в правую часть оценки $|z_2|$, а полученную оценку $|z_2|$ в свою очередь в правую часть оценки $|z_3|$ и т.д. Получим

$$\begin{aligned}
|z_n| \leqslant \sum_{j=0}^{n-1} \tau(1 + 2\tau L)^{n-1-j}|\psi_j| \leqslant (1 + 2\tau L)^n \sum_{j=0}^{n-1} \tau|\psi_j| \leqslant e^{2\tau LT/\tau} T \max_j |\psi_j| =\\
= e^{2LT} T \max_j |\psi_j|.
\end{aligned} \tag{15.56}$$

Из (15.56) следует

Теорема 15.5. *Если метод Рунге-Кутты* (15.8), (15.9) *аппроксимирует исходное уравнение* (15.2)*с порядком* p*, то при* $\tau \to 0$ *он сходится с тем же порядком.*

16

Линейные многошаговые методы

При изучении методов Рунге-Кутты, используемых для решения задачи Коши

$$\frac{du}{dt} = f(u), \quad t > 0, \qquad u(0) = u_0, \tag{16.1}$$

мы не обращали особого внимания на задание начальных условий, ибо это совершенно тривиальная процедура: для того, чтобы начал работать любой из рассмотренных нами методов Рунге-Кутты, нужно задать $u_0 = u(0)$, т.е. так же как и для дифференциального уравнения. Обусловлено это тем, что в каждом уравнении связаны между собой значения приближенного решения в двух соседних узлах сетки (не считая промежуточных значений). Другой класс методов составляют так называемые многошаговые методы, в которых уравнения связывают значения приближенного решения в нескольких соседних узлах.

16.1 Методы Адамса

Наиболее известными из многошаговых методов и наиболее старыми являются методы Адамса. Опишем эти методы на примере уравнения (16.1). Вновь будем предполагать, что на отрезке интегрирования введена равномерная сетка с шагом τ, а уравнение (16.1) проинтегрировано по отрезку между узлами t_n и t_{n+1}

$$u(t_{n+1}) - u(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(t))dt. \tag{16.2}$$

Заменим подынтегральную функцию в (16.2) интерполяционным многочленом Лагранжа по некоторым узлам сетки ω (а не по промежуточным

узлам, как это было в методах Рунге-Кутты (!)). В зависимости от того, участвует ли узел t_{n+1} в интерполяции $f(u(t))$ или нет, различают неявные и явные методы Адамса.

а) **Явные методы Адамса**. Предположим, что $u(t)$ известна в k узлах сетки ω

$$t_n, t_{n-1}, \ldots, t_{n+1-k}. \tag{16.3}$$

Построим по этим узлам для подынтегральной функции $f(u(t))$ из (16.2) интерполяционный многочлен Лагранжа степени $k-1$

$$f(u(t)) \approx L_{k-1}(t) := \sum_{j=1}^{k} p_j(t) f(u(t_{n+1-j})), \tag{16.4}$$

где, как обычно,

$$p_j(t) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{k} \frac{t - t_{n+1-i}}{t_{n+1-j} - t_{n+1-i}} \tag{16.5}$$

суть весовые функции интерполяционного полинома (многочлены степени $(k-1)$), обращающиеся в нуль при $t = t_{n+1-i}$, $i = 1, 2, \ldots, j-1, j+1, j+2, \ldots, k$ и в единицу при $t = t_{n+1-j}$). Подставляя (16.4), (16.5) в (16.2), производя интегрирование и заменяя приближенное равенство на точное, получим следующее уравнение для определения приближенного решения

$$u_{n+1} - u_n = \tau \sum_{j=1}^{k} b_j f(u_{n+1-j}), \tag{16.6}$$

где после замены переменной интегрирования $(t - t_n)/\tau = \theta$

$$b_j = \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} p_j(t) dt = \int_0^1 \hat{p}_j(\theta) d\theta = \int_0^1 \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{k} \frac{\theta - 1 + i}{i - j} d\theta. \tag{16.7}$$

Определение 16.1. Численный метод (16.6), (16.7) называется *явным k-шаговым методом Адамса* (иногда его называют методом Адамса-Бэшфорта).

Примеры. 1°. $k = 1$.

$$p_1(t) = \hat{p}_1(\theta) = 1, \qquad b_1 = 1.$$

2°. $k = 2$.

$$\begin{aligned} \hat{p}_1(\theta) &= \theta + 1, \quad & b_1 &= 3/2, \\ \hat{p}_2(\theta) &= -\theta, \quad & b_2 &= -1/2. \end{aligned}$$

3°. $k = 3$.

$$\begin{aligned} \hat{p}_1(\theta) &= \frac{1}{2}(\theta+1)(\theta+2), \quad & b_1 &= \frac{23}{12}, \\ \hat{p}_2(\theta) &= -\theta(\theta+2), & b_2 &= -\frac{4}{3}, \\ \hat{p}_3(\theta) &= \frac{\theta(\theta+1)}{2}, & b_3 &= \frac{5}{12}. \end{aligned}$$

Выпишем уравнения (16.6) для этих частных случаев

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + \tau f(u_n), \\ u_{n+1} &= u_n + \tau \left[\frac{3}{2} f(u_n) - \frac{1}{2} f(u_{n-1})\right], \\ u_{n+1} &= u_n + \tau \left[\frac{23}{12} f(u_n) - \frac{16}{12} f(u_{n-1}) + \frac{5}{12} f(u_{n-2})\right]. \end{aligned} \tag{16.8}$$

Упражнение 16.1. Построить явный 4-х-шаговый метод Адамса (16.6).

Ответ.

$$u_{n+1} = u_n + \tau \left[\frac{55}{24} f(u_n) - \frac{59}{24} f(u_{n-1}) + \frac{37}{24} f(u_{n-2}) - \frac{9}{24} f(u_{n-3})\right].$$

Замечание 16.1. Очевидно, что первое из уравнений (16.8) определяет исследованный нами ранее метод Эйлера. Тем самым, метод Эйлера может быть отнесен как к методам Рунге-Кутты, так и к методам Адамса.

Формулы (16.6) получены при интегрировании в пределах от t_n до t_{n+1}, в то время как узлы интерполяции располагались на отрезке $[t_{n+1-k}, t_n]$, т.е. вне интервала интегрирования (Для подынегральной функции использовалась экстраполяция). В связи с этим явные методы Адамса иногда называют экстраполяционными методами.

б) **Неявные методы Адамса**. Можно построить и неявные методы Адамса. Для этого к узлам интерполяции (16.3) нужно добавить еще узел t_{n+1}. В этом случае интерполяционный многочлен (степени k) примет вид

$$L_k(t) := \sum_{j=0}^{k} p_j(t) f(u(t_{n+1-j})), \tag{16.9}$$

а соответствующим ему уравнением будет уравнение

$$u_{n+1} - u_n = \tau \sum_{j=0}^{k} b_j f(u_{n+1-j}), \tag{16.10}$$

где (ср. с (16.7))

$$b_j = \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} p_j(t)dt = \int_0^1 \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{k} \frac{\theta - 1 + i}{i - j} d\theta. \tag{16.11}$$

Определение 16.2. Численный метод (16.10), (16.11) называется *неявным k-шаговым методом Адамса* (Иногда его называют методом Адамса-Мултона).

Примеры. 4°. $k = 0$.

$$\hat{p}_0(\theta) = 1, \quad b_0 = 1.$$

5°. $k = 1$.

$$\begin{aligned} \hat{p}_0(\theta) &= \theta, & b_0 &= 1/2, \\ \hat{p}_1(\theta) &= -\theta + 1, & b_1 &= 1/2. \end{aligned}$$

6°. $k = 2$.

$$\begin{aligned} \hat{p}_0(\theta) &= \frac{1}{2}\theta(\theta + 1), & b_0 &= \frac{5}{12}, \\ \hat{p}_1(\theta) &= -(\theta^2 - 1), & b_1 &= \frac{2}{3}, \\ \hat{p}_2(\theta) &= \frac{1}{2}\theta(\theta - 1), & b_2 &= -\frac{1}{12}. \end{aligned}$$

Напишем уравнения (16.10) для этих частных случаев

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + \tau f(u_{n+1}), \\ u_{n+1} &= u_n + \frac{\tau}{2}\left[f(u_{n+1}) + f(u_n)\right], \\ u_{n+1} &= u_n + \tau\left[\frac{5}{12}f(u_{n+1}) + \frac{8}{12}f(u_n) - \frac{1}{12}f(u_{n-1})\right]. \end{aligned} \tag{16.12}$$

Упражнение 16.2. Построить неявный 3-х-шаговый метод Адамса (16.10), (16.11).

Ответ.

$$u_{n+1} = u_n + \tau \left[\frac{9}{24} f(u_{n+1}) + \frac{19}{24} f(u_n) - \frac{5}{24} f(u_{n-1}) + \frac{1}{24} f(u_{n-2}) \right].$$

Замечание 16.2. Очевидно, что первое из уравнений (16.12), отвечающее $k = 0$, является неявным методом Эйлера, а второе уравнение, отвечающее $k = 1$, — методом трапеций. Тем самым, эти одношаговые неявные методы Адамса являются и методами Рунге-Кутты.

16.2 Формулы дифференцирования назад

Во всех предыдущих случаях, как при построении методов Рунге-Кутты, так и при построении методов Адамса, мы получали численные методы путем интегрирования уравнения (16.1) и замены подынтегральной функции $f(u)$ в (16.2) интерполяционным многочленом или замены интеграла квадратурной формулой. А можно поступать и иначе: интерполяционным многочленом заменить $u(t)$. Тогда для построения численного метода нужно будет выражение интерполяционного многочлена подставить прямо в (16.1). Чтобы получился численный метод, точка t_{n+1} должна быть в числе узлов интерполяции. Пусть

$$u(t) \approx L_k(t) = \sum_{j=0}^{k} p_j(t) u(t_{n+1-j}), \tag{16.13}$$

где

$$p_j(t) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{k} \frac{t - t_{n+1-i}}{t_{n+1-j} - t_{n+1-i}}.$$

Подставляя (16.13) в (16.1), получим приближенное равенство

$$\sum_{j=0}^{k} p_j'(t) u(t_{n+1-j}) \approx f\left(\sum_{j=0}^{k} p_j(t) u(t_{n+1-j}) \right).$$

Превратим его в точное равенство в каком-либо узле. В результате получим уравнение для определения приближенного решения. Наиболее интересным является случай, когда указанным узлом является t_{n+1}. Будем иметь

$$\sum_{j=0}^{k} p_j'(t_{n+1}) u_{n+1-j} = f(u_{n+1}).$$

Как и раньше, сделаем локальную замену переменной $(t - t_n)/\tau = \theta$. Тогда

$$p_j'(t) = \frac{dp_j(t)}{dt} = \frac{1}{\tau}\frac{d\hat{p}_j(\theta)}{d\theta} = \frac{1}{\tau}\hat{p}_j'(\theta),$$

где

$$p_j(t) = \hat{p}_j(\theta) = \prod_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{k} \frac{\theta - 1 + i}{i - j},$$

и полученный метод принимает вид

$$\sum_{j=0}^{k} \hat{p}_j'(1) u_{n+1-j} = \tau f(u_{n+1}). \tag{16.14}$$

Определение 16.3. Численные методы (16.14) называются *формулами дифференцирования назад.*

Методы (16.14) были предложены в работе Кёртиса и Хиршфельдера (1952) и, в связи с этим, иногда называются их именами. С другой стороны, методы (16.14) были реализованы в популярной в свое время программе, автором которой был Гир (1971). Это обстоятельство послужило тому, что методы (16.14) иногда фигурируют под названием методы Гира.

Примеры. 7°. $k = 1$.

$$\begin{aligned} &\hat{p}_0(\theta) = \theta, && \hat{p}_0'(1) = 1,\\ &\hat{p}_1(\theta) = -\theta + 1, && \hat{p}_1'(1) = -1. \end{aligned}$$

8°. $k = 2$.

$$\begin{aligned} &\hat{p}_0(\theta) = \frac{1}{2}\theta(\theta + 1), && \hat{p}_0'(1) = \frac{3}{2},\\ &\hat{p}_1(\theta) = 1 - \theta^2, && \hat{p}_1'(1) = -2,\\ &\hat{p}_2(\theta) = \frac{1}{2}\theta(\theta - 1), && \hat{p}_2'(1) = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Выпишем уравнения (16.14) для этих случаев

$$u_{n+1} - u_n = \tau f(u_{n+1}), \tag{16.15}$$

$$\left(\frac{3}{2}u_{n+1} - 2u_n + \frac{1}{2}u_{n-1}\right) = \tau f(u_{n+1}). \tag{16.16}$$

Упражнение 16.3. Построить формулу (16.14), отвечающую $k = 3$.

Ответ.

$$\left(\frac{11}{6}u_{n+1} - 3u_n + \frac{3}{2}u_{n-1} - \frac{1}{3}u_{n-2}\right) = \tau f(u_{n+1}).$$

16.3 Общие линейные многошаговые методы

Методы Адамса, явные и неявные, и формулы дифференцирования назад являются частными случаями формулы

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j u_{n-j} = \tau \sum_{j=0}^{k} \beta_j f(u_{n-j}), \tag{16.17}$$

где α_j и β_j — действительные числа. (Обратим внимание на то, что в этой формуле вместо нового неизвестного u_{n+1} фигурирует u_n). Будет предполагать, что

$$\alpha_0 \neq 0, \qquad |\alpha_k| + |\beta_k| \neq 0. \tag{16.18}$$

Первое из условий (16.18) обеспечивает разрешимость неявного ($\beta_0 \neq 0$) уравнения (16.17), по крайней мере, для достаточно малого шага τ. Второе из условий (16.18) всегда можно считать выполненным, уменьшив при необходимости k.

Определение 16.4. Формула (16.17) называется *линейным многошаговым (k-шаговым) методом.*

Метод является явным, если $\beta_0 = 0$, и неявным в противном случае.

Чтобы линейый многошаговый метод (16.17) можно было использовать для численного решения задачи (16.1), необходимо, чтобы уравнение (16.17) аппроксимировало уравнение (16.1).

Определение 16.5. Величина

$$\psi_n = \sum_{j=0}^{k} \beta_j f(u(t_{n-j})) - \frac{1}{\tau} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j u(t_{n-j}) \tag{16.19}$$

называется погрешностью аппроксимации метода (16.17).

Выясним вопрос о порядке погрешности аппроксимации метода (16.17) при $\tau \to 0$.

Теорема 16.1. *Многошаговый метод* (16.17) *имеет погрешщность аппроксимации порядка* $p \leqslant 2k$ *тогда и только тогда, когда выполняются следующие условия*

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j = 0, \quad \sum_{j=0}^{k} \left(\alpha_j j^q + q\beta_j j^{q-1}\right) = 0, \quad q = 1, \ldots, p. \tag{16.20}$$

Доказательство. Разложим $u(t)$ по формуле Тейлора в точке t_n:

$$u(t) = \sum_{q=0}^{p} \frac{(t-t_n)^q}{q!} u^{(q)}(t_n) + O((t-t_n)^{p+1}). \tag{16.21}$$

Так как $f(u) = u'(t)$, то, дифференцируя (16.21), получим

$$f(u(t)) = \sum_{q=0}^{p} q\frac{(t-t_n)^{q-1}}{q!} u^{(q)}(t_n) + O((t-t_n)^{p}). \tag{16.22}$$

Подставляя теперь разложения (16.21), (16.22) при $t = t_{n-j}$ в (16.19), будем иметь

$$\begin{aligned}
\psi_n = &\sum_{j=0}^{k} \beta_j \sum_{q=0}^{p} q\frac{(-j\tau)^{q-1}}{q!} u^{(q)}(t_n) - \\
&- \frac{1}{\tau} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \sum_{q=0}^{p} \frac{(-j\tau)^q}{q!} u^{(q)}(t_n) + O(\tau^p) = \\
&= \sum_{q=0}^{p} \frac{(-\tau)^{q-1}}{q!} u^{(q)}(t_n) \sum_{j=0}^{k} \left[\beta_j q j^{q-1} + \alpha_j j^q\right] + O(\tau^p).
\end{aligned}$$

Приравнивая нулю коэффициентыты при τ^{q-1} для $q = 0, 1, \ldots, p$, получим (16.20). Теорема доказана.

Замечание 16.3. Решение уравнения (16.17) не изменится, если его умножить на какое-либо число, отличное от нуля. Это означает, что его коэффициенты определяются с точностью до множителя (до мультипликативной постоянной). Чтобы устранить этот произвол, пронормируем их, полагая, например,

$$\sum_{j=0}^{k} \beta_j = 1. \tag{16.23}$$

Замечание 16.4. Иногда какие-либо из коэффициентов α_j и β_j задаются заранее. Если хотя бы один из этих коэффициентов отличен от нуля, то условие (16.23) не используется.

Замечание 16.5. Из (16.20), (16.23) имеем $(p+2)$ уравнения для $2(k+1)$ коэффициентов метода (16.17). Тем самым, максимальный порядок аппроксимации линейного k-шагового метода есть $p = 2k$.

16.4 Погрешность аппроксимации методов Адамса

Исследуем вопрос о порядке погрешности аппроксимации методов Адамса. Для этого перепишем сначала явный метод Адамса (16.6), (16.7) в виде (16.17), т.е. заменим $n+1$ на n:

$$u_n - u_{n-1} = \tau \sum_{j=1}^{k} b_j f(u_{n-j}).$$

Сравнивая это соотношение с (16.17), находим, что

$$\alpha_0 = 1,\ \alpha_1 = -1,\ \alpha_2 = \cdots = \alpha_k = 0,\ \beta_0 = 0,\ b_j = \beta_j,\ j = 1, \ldots, k.$$

Определим, для каких дифференциальных уравнений явные методы Адамса теоретически дают в узлах сетки точное решение. Это произойдет в том случае, когда интерполяционный многочлен $L_{k-1}(t)$, определяющий явный метод Адамса, совпадает с $f(u)$ или с $f(t,u)$. Пусть $f(t,u(t)) = f(t)$, т.е. f не зависит от u и является многочленом степени не выше $k-1$. Тогда $f(t)$ совпадает со своим интерподяционным многочленом $L_{k-1}(t)$, и явный метод Адамса точен для уравнений

$$u' = qt^{q-1}, \quad q = 0, \ldots, k.$$

Это означает, что погрешность аппроксимации (16.19) на решениях этих уравнений равна нулю. Подставляя решения этих уравнений $u = t^q$ в (16.19) при $n = 0$, получим

$$\psi_0 = \sum_{j=0}^{k} \left[\beta_j q(-\tau j)^{q-1} - \frac{1}{\tau}\alpha_j(-\tau j)^q \right] = 0, \quad q = 0, \ldots, k,$$

что совпадает с первыми $(k+1)$ уравнениями (16.20). Тем самым, мы доказали, что явный k-шаговый метод Адамса имеет порядок погрешности аппроксимации не ниже k. Можно показать, что его порядок аппроксимации в точности равен k.

Упражнение 16.4. Доказать, что порядок аппроксимации неявного k-шагового метода Адамса не ниже $k+1$.

Упражнение 16.5. Доказать, что порядок аппроксимации k-шаговой формулы дифференцирования назад не ниже k.

16.5 Поучительный пример

Построим двухшаговый явный метод максимального порядка аппроксимации. Согласно ранее сказанному, порядок аппроксимации этого метода должен быть равен трем. Из (16.20), (16.23) имеем

$$\begin{aligned}
\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 &= 0,\\
\alpha_1 + 2\alpha_2 &= -(\beta_0 + \beta_1 + \beta_2),\\
\alpha_1 + 4\alpha_2 &= -2(\beta_1 + 2\beta_2),\\
\alpha_1 + 8\alpha_2 &= -3(\beta_1 + 4\beta_2),\\
\beta_0 + \beta_1 + \beta_2 &= 1,\\
\beta_0 &= 0.
\end{aligned}$$

Разрешая эту линейную систему, находим, что

$$\alpha_0 = \frac{1}{6}, \quad \alpha_1 = \frac{2}{3}, \quad \alpha_2 = -\frac{5}{6}, \quad \beta_1 = \frac{2}{3}, \quad \beta_2 = \frac{1}{3}.$$

Тем самым, метод (16.17) приобретает вид

$$\left(\frac{1}{6}u_n + \frac{4}{6}u_{n-1} - \frac{5}{6}u_{n-2}\right) = \tau\left[\frac{2}{3}f_{n-1} + \frac{1}{3}f_{n-2}\right]. \tag{16.24}$$

Применим этот метод к решению уравнения (16.1) с $f(u) = \lambda u$, где λ=const. Будем при этом предполагать, что начальное значение $u_0 = 1$. В этом случае задача (16.1) примет вид

$$u'(t) = \lambda u, \quad u(0) = 1, \tag{16.25}$$

а ее решением будет функция

$$u(t) = e^{\lambda t}. \tag{16.26}$$

Отвечающий (16.25) метод (16.17) можно записать так

$$\sum_{j=0}^{k}(\alpha_j - \tau\lambda\beta_j)u_{n-j} = 0, \tag{16.27}$$

а применительно к методу (16.24)

$$\frac{1}{6}u_n + \left(\frac{4}{6} - \frac{2}{3}\tau\lambda\right) u_{n-1} + \left(-\frac{5}{6} - \frac{1}{3}\tau\lambda\right) u_{n-2} = 0. \tag{16.28}$$

Это есть линейное однородное разностное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами (см. §6). Найдем его решение. Для этого нужно написать характеристическое уравнение, отвечающее разностному уравнению (16.28), и найти его корни. Искомое характеристическое уравнение имеет вид

$$q^2 + 4(1 - \tau\lambda)q - (5 + 2\tau\lambda) = 0, \tag{16.29}$$

а его корни суть

$$\begin{aligned} q_1 &= -2 + 2\tau\lambda + \sqrt{9 - 6\tau\lambda + 4\tau^2\lambda^2} = 1 + \tau\lambda + O(\tau^2\lambda^2), \\ q_2 &= -2 + 2\tau\lambda - \sqrt{9 - 6\tau\lambda + 4\tau^2\lambda^2} = -5 + O(\tau\lambda). \end{aligned} \tag{16.30}$$

Упражнение 16.6. Доказать, что $q_1 - e^{\tau\lambda} = O(\tau^4\lambda^4)$.

Поскольку корни (16.30) характеристического уравнения различны, то общее решение разностного уравнения (16.28) имеет вид

$$u_n = c_1 q_1^n + c_2 q_2^n, \tag{16.31}$$

где c_1 и c_2 — произвольные постоянные.

Рассматриваемый нами метод (16.24) является двухшаговым, и одного начального условия

$$u_0 = 1 \tag{16.32}$$

для его реализации недостаточно. Поскольку точное решение нам известно, то не будем ломать голову над тем, как задать недостающее начальное условие при $n = 1$, а просто положим

$$u_1 = u(t_1) = e^{\tau\lambda}. \tag{16.33}$$

Потребуем, чтобы решение (16.31) удовлетворяло условиям (16.32), (16.33). После простых вычислений находим, что искомое решение имеет вид

$$u_n = \frac{e^{\tau\lambda} - q_2}{q_1 - q_2} q_1^n + \frac{q_1 - e^{\tau\lambda}}{q_1 - q_2} q_2^n. \tag{16.34}$$

Изучим поведение этого решения при $n \to \infty$. Пусть $t = n\tau$ фиксировано, а $\tau \to 0$. Тогда $n = t/\tau \to \infty$. С учетом (16.30) и упражнения 16.6 находим, что

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{e^{\tau\lambda} - q_2}{q_1 - q_2} = \frac{1 + O(\tau) + 5}{6 + O(\tau)} = 1 + O(\tau), \\ c_2 &= \frac{q_1 - e^{\tau\lambda}}{q_1 - q_2} = \frac{O(\tau^4)}{6 + O(\tau)} = O(\tau^4). \end{aligned} \tag{16.35}$$

Далее,

$$q_1^n = \left[e^{\tau\lambda} + O(\tau^4)\right]^n = e^{\lambda\tau n}(1 + O(\tau^4))^n = e^{\lambda t}(1 + O(\tau^3)). \tag{16.36}$$

Подставляя теперь (16.35), (16.36), (16.30) в (16.34), будем иметь

$$u_n = [1 + O(\tau)]\, e^{t\lambda} + O(\tau^4)\, [-5 + O(\tau)]^n\,.$$

Проанализируем полученный результат. Первое слагаемое аппроксимирует решение (16.26) задачи (16.25), а второе слагаемое является паразитным. Уже при не слишком больших n это слагаемое превосходит первое, ибо

$$O(\tau^4)\, [-5 + O(\tau)]^n = O\left(\left(\frac{t}{n}\right)^4\right)\left(-5 + O\left(\frac{t}{n}\right)\right)^n.$$

Метод (16.28) сходящимся не является.

17

Устойчивость

В теореме 15.5 было установлено, что все методы Рунге-Кутты являются сходящимися, а, следовательно, и устойчивыми, по крайней мере при выполнении условия (15.54). Пример из раздела 16.5 показал, что с многошаговыми методами дело обстоит не так благополучно. Поэтому сначала разберемся с хоть какой-нибудь устойчивостью многошаговых методов, а затем введем более жесткие условия устойчивости и изучим оба класса методов с новых позиций.

17.1 Нуль-устойчивость

Обратимся к разностному уравнению (16.27) и введем следующие обозначения

$$\rho(\zeta) := \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \zeta^{k-j}, \quad \sigma(\zeta) := \sum_{j=0}^{k} \beta_j \zeta^{k-j}. \tag{17.1}$$

Определение 17.1. Многочлены $\rho(\zeta)$ и $\sigma(\varsigma)$ из (17.1) называются соответственно первым и вторым производящими многочленами линейного многошагового метода (16.17).

Как уже было отмечено, линейный многошаговый метод (16.17) для уравнения (16.25) принимает вид линейного разностного уравнения с постоянными коэффициентами (16.27). Его характеристическое уравнение есть

$$\rho(q) - \tau\lambda\sigma(q) = 0. \tag{17.2}$$

Применительно к двушаговому методу (16.24)

$$\rho(q) = (q^2 + 4q - 5)/6,$$

а корни уравнения

$$\rho(q) = 0 \tag{17.3}$$

суть

$$q_1 = 1, \qquad q_2 = -5,$$

т.е. совпадают с главными членами корней (16.30) характеристического уравнения(16.29). Именно наличие корня q_2 и привело к неустойчивости метода (16.24). Тем самым, корни уравнения (17.3) позволяют судить об устойчивости или неустойчивости метода (16.17). А они связаны с корнями характеристического уравнения (17.2). В силу (16.18), $\alpha_0 \neq 0$ и, следовательно, степени уравнений (17.2) и (17.3) совпадают. Поэтому характеристическое уравнение (17.2) можно рассматривать как *регулярное возмущение*(при малых $\tau\lambda$) уравнения (17.3) (объяснение терминов: коэффициенты многочлена $\rho(\zeta)$ суть пределы при $\tau\lambda \to 0$ соответствующих коэффициентов характеристического многочлена, и поэтому можно говорить о возмущении; регулярность есть следствие того, что степени возмущенного и невозмущенного многочленов совпадают). Но тогда (в силу регулярности возмущения) корни уравнения (17.3) являются пределами корней уравнения (17.2) при $\tau\lambda \to 0$. Поэтому вопрос о том, будет ли решение уравнения (16.27) неограниченно возрастать при $n \to \infty$ (и фиксированном $t = n\tau$), можно решить при анализе корней уравнения (17.3). Отметим, что уравнение (17.3) является характеристическим уравнением для разностного уравнения

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j u_{n-j} = 0, \tag{17.4}$$

которое, в свою очередь, получается из (16.27), если в нем положить $\lambda = 0$. Это означает, что (17.4) есть линейный многошаговый метод для уравнения

$$u' = 0. \tag{17.5}$$

Тем самым, отбраковка "плохих"(неустойчивых) методов может быть осуществлена при анализе их свойств применительно к уравнению (17.5).

Итак, наличие у уравнения (17.3) корней, модули которых превосходят единицу, приводит к неустойчивости. Однако опасность представляют не только такие корни, но и корни, равные по модулю единице, если они кратные. В самом деле, пусть q_1 — корень характеристического уравнения (17.3) кратности $s > 1$ такой, что $|q_1| = 1$. Тогда сеточная функция

$$P_{s-1}(n) q_1^n$$

будет неограниченным решением уравнения (17.4), в то время как решением уравнения (17.5), которое и аппроксимирует изучаемое уравнение (17.4), есть постоянная.

Определение 17.2. Говорят, что линейный многошаговый метод (16.17) удовлетворяет корневому условию, если
1) все корни первого производящего многочлена (17.1) расположены в единичном круге $|\zeta| \leqslant 1$;
2) нули $\rho(\zeta)$, расположенные на единичной окружности $|\zeta| = 1$, простые.

Теорема 17.1. *Линейный многошаговый метод* (16.17), *удовлетворяющий корневому условию, устойчив (нуль-устойчив).*

Замечание 17.1. Если линейный многошаговый метод (16.17) аппроксимирует какое-либо дифференциальное уравнение, то среди нулей $\rho(\zeta)$ обязательно есть $\zeta = 1$, о чем свидетельствует первое из условий (16.20), являющее собой условие $\rho(1) = 0$.

Примеры. 1° Явный и неявный методы Адамса. В обоих случаях $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = -1$, а остальные $\alpha_j = 0$. Поэтому

$$\rho(q) = q^k - q^{k-1}$$

и, следовательно,

$$q_1 = 1, \quad q_2 = \cdots = q_k = 0.$$

Методы Адамса нуль-устойчивы.
2° Двухшаговая формула дифференцирования назад (16.16).

$$\rho(q) = \frac{3}{2}q^2 - 2q + \frac{1}{2},$$
$$q_1 = 1, \quad q_2 = 1/3.$$

Метод нуль-устойчив.
3° Трехшаговая формула дифференцирования назад (см. упражнение 16.3)

$$\rho(q) = \frac{11}{6}q^3 - 3q^2 + \frac{3}{2}q - \frac{1}{3}.$$

Хотя это и многочлен третьей степени, нули его легко находятся, ибо один из его нулей есть $q_1 = 1$. Деля $\rho(q)$ на $(q-1)$, приходим к уравнению

$$\frac{11}{6}q^2 - \frac{7}{6}q + \frac{1}{3} = 0$$

с корнями

$$q_{2,3} = \frac{7 \pm i\sqrt{39}}{22}.$$

Отсюда

$$\left|q_{2,3}\right|^2 = \frac{2}{11} < 1.$$

Метод нуль-устойчив.

Теорема 17.2 (Первый барьер Далквиста). *Порядок p устойчивого линейного k-шагового метода подчиняется следующим ограничениям:*
$p \leqslant k$ *для явных методов;*
$p \leqslant k+1$ *для неявных методов при нечетном k;*
$p \leqslant k+2$ *для неявных методов при четном k.*

В качестве иллюстрации первого утверждения теоремы может служить построенный нами в предыдущем параграфе явный двухшаговый метод максимального порядка аппроксимации $p = 3$, который оказался неустойчивым.

Упражнение 17.1. Построить общий явный устойчивый двухшаговый метод максимального порядка аппроксимации.

Ответ: α_0 — параметр метода,

$$\alpha_1 = 1 - 2\alpha_0, \qquad \alpha_2 = \alpha_0 - 1,$$
$$\beta_0 = 0, \qquad \beta_1 = \frac{1}{2} + \alpha_0, \qquad \beta_2 = \frac{1}{2} - \alpha_0.$$

Условие устойчивости: $1/2 \leqslant \alpha_0 < \infty$. При $\alpha_0 = 1$ имеем явный метод Адамса, при $\alpha_0 = 1/2$ — метод прямоугольников с шагом $\tau' = 2\tau$. При $\alpha_0 = 1/6$ метод имеет погрешность аппроксимации $O(\tau^3)$, но неустойчив.

Упражнение 17.2. Построить устойчивый двухшаговый метод максимального порядка аппроксимации.

Ответ:

$$\alpha_0 = 1/2, \quad \alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = -1/2,$$
$$\beta_0 = 1/6, \quad \beta_1 = 2/3, \quad \beta_2 = 1/6.$$

Этот метод иногда называется методом Симпсона (по аналогии с одноименной квадратурной формулой). Метод имеет четвертый порядок аппроксимации.

17.2 Жесткие задачи

При определении нуль-устойчивости многошагового метода мы могли ограничиться изучением простейшего дифференциального уравнения (17.5), ибо производящий многочлен $\rho(\zeta)$ из (17.1) многошагового метода (16.17), от расположения нулей которого зависит, будет ли метод устойчивым или нет, является характеристическим многочленом именно в применении к уравнению (17.5). Условие нуль-устойчивости предъявляет минимальные требования к численному методу, производя лишь грубую отбраковку абсолютно непригодных для вычислений методов. По существу, нуль-устойчивость метода обеспечивает лишь ограниченность приближенного решения для конечного временного интервала $[0, T]$ при $n \to \infty$.

Однако имеются задачи, отыскание решений которых при помощи только нуль-устойчивых методов оказывается весьма затруднительным, если не невозможным. Проще всего объяснить возникающие трудности не на примере одного уравнения, а на примере систем уравнений.

Рассмотрим однородную систему линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами

$$\mathbf{u}' = A\mathbf{u}, \qquad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0, \tag{17.6}$$

где $\mathbf{u} = [u_1\, u_2]^T$, а

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}.$$

Найдем и проанализируем решение задачи (17.6). Как обычно, будем его искать в виде

$$\mathbf{u}(t) = \boldsymbol{\xi} e^{\lambda t}, \tag{17.7}$$

где $\boldsymbol{\xi}$ — двумерный числовой вектор, а λ — постоянная. Подставляя (17.7) в (17.6), находим, что

$$\lambda \boldsymbol{\xi} e^{\lambda t} = e^{\lambda t} A \boldsymbol{\xi},$$

а, сокращая на $e^{\lambda t}$, получим следующую задачу на собственные значения:

$$A\boldsymbol{\xi} = \lambda \boldsymbol{\xi}. \tag{17.8}$$

Будем предполагать, что A — матрица простой структуры, т.е. у нее имеется полный набор собственных векторов. Тогда

$$A\boldsymbol{\xi}_1 = \lambda_1 \boldsymbol{\xi}_1, \qquad A\boldsymbol{\xi}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{\xi}_2$$

и $\boldsymbol{\xi}_1$ и $\boldsymbol{\xi}_2$ линейно независимы.

В рассматриваемом случае общее решение системы (17.6) принимает вид

$$\mathbf{u}(t) = c_1\boldsymbol{\xi}_1 e^{\lambda_1 t} + c_2\boldsymbol{\xi}_2 e^{\lambda_2 t}, \tag{17.9}$$

а решение задачи Коши (17.6) получается отсюда при значениях c_1 и c_2, найденных из алгебраической системы

$$\boldsymbol{\xi}_1 c_1 + \boldsymbol{\xi}_2 c_2 = \mathbf{u}_0. \tag{17.10}$$

Будем для простоты предполагать, что собственные числа λ_1 и λ_2 действительны. Более существенным для нас будет предположение об их отрицательности

$$\lambda_1 < 0, \qquad \lambda_2 < 0. \tag{17.11}$$

В силу сделанных предположений модули компонент u_1 и u_2 решения (17.9) будет стремиться к нулю при $t \to \infty$.

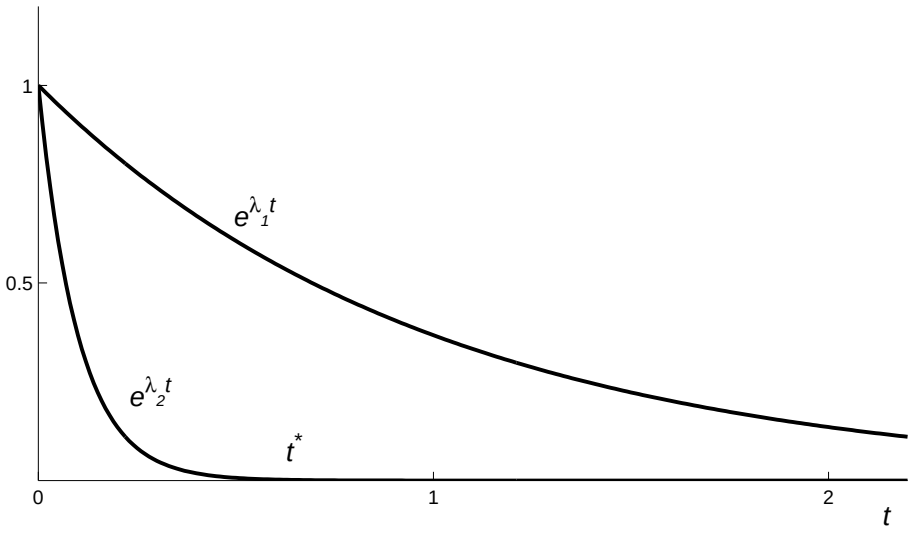


Рис. 1

Предположим теперь дополнительно, что

$$\lambda_1 = O(1), \qquad |\lambda_2| \gg |\lambda_1|. \tag{17.12}$$

Так как в этом случае $e^{\lambda_2 t}$ убывает значительно быстрее $e^{\lambda_1 t}$, то через некоторое время t^* составляющая $c_2\boldsymbol{\xi}_2 e^{\lambda_2 t}$ решения (17.9) будет практически равной нулю, и решение будет почти полностью определяться составляющей $c_1\boldsymbol{\xi}_1 e^{\lambda_1 t}$. (см. рис. 1)

В рассматриваемой ситуации естественно было бы ожидать, что и у численного решения задачи (17.6) модули компонент хотя бы не возрастали.

Применим для решения задачи (17.6) метод Эйлера

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1}-\mathbf{u}^n}{\tau}=A\mathbf{u}^n, \qquad \mathbf{u}^0=\mathbf{u}_0. \tag{17.13}$$

Найдем решение задачи (17.13). Искать его будем в виде (см. (10.30))

$$\mathbf{u}^n=\boldsymbol{\xi}q^n, \qquad q=\mathrm{const}\neq 0. \tag{17.14}$$

Подставляя (17.14) в (17.13), получим

$$q^n\frac{q-1}{\tau}\boldsymbol{\xi}=q^nA\boldsymbol{\xi},$$

а после сокращения на q^n обнаруживаем, что для отыскания $\boldsymbol{\xi}$ имеем задачу (17.8) с $\lambda=(q-1)/\tau$. Поэтому $q=1+\tau\lambda$, и решение задачи (17.13) есть

$$\mathbf{u}^n=c_1\boldsymbol{\xi}_1(1+\tau\lambda_1)^n+c_2\boldsymbol{\xi}_2(1+\tau\lambda_2)^n, \tag{17.15}$$

где c_1, c_2 — решение системы (17.10).

Чтобы модули компонент решения (17.15) не возрастали при $n\to\infty$, необходимо и достаточно, чтобы выполнялись условия

$$|1+\tau\lambda_1|\leqslant 1, \qquad |1+\tau\lambda_2|\leqslant 1,$$

что вместе с (17.11) и (17.12) приводит к условию

$$\tau\leqslant 2/|\lambda_2|\ll 1. \tag{17.16}$$

Ограничение (17.16), вообще говоря, является довольно жестким. Если при $t\leqslant t^*$ это ограничение вполне разумно, и даже из соображений аппроксимации и точности нужно требовать $\tau\ll 2/|\lambda_2|$, то при $t>t^*$, когда вторая составляющая каждой компоненты решения (17.15) вроде бы не должна поставлять новой информации, и желательно было бы увеличить шаг τ с той целью, чтобы сэкономить ресурсы и не воспроизводить первую составляющую с излишней точностью. Но тогда придется нарушить условие (17.16), что приведет к резкому возрастанию второй составляющей решения и полной потере точности.

Определение 17.3. Система дифференциальных уравнений (17.6) с постоянной матрицей A порядка m называется жесткой, если
1° $\operatorname{Re}\lambda_j < 0 \quad , j = 0, \ldots, m,$
2° отношение

$$S = \frac{\max\limits_j |\operatorname{Re}\lambda_j|}{\min\limits_j |\operatorname{Re}\lambda_j|} \gg 1. \tag{17.17}$$

Определение 17.4. Число S из (17.17) называется коэффициентом жесткости задачи (17.6).

Замечание 17.2. Для линейной системы с матрицей A, зависящей от t, коэффициент жесткости также зависит от t, и, если он велик для каких-либо t из интересующего нас интервала, то система жесткая. Для нелинейных систем жесткость определяется в окрестности какого-либо решения при помощи соответствующей матрицы Якоби.

Применим теперь для решения задачи (17.6) неявный метод Эйлера

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\tau} = A\mathbf{u}^{n+1}.$$

Подставляя сюда (17.14), находим, что

$$q^{n+1}\frac{1 - q^{-1}}{\tau}\boldsymbol{\xi} = q^{n+1}A\boldsymbol{\xi},$$

т.е. $\lambda\tau = (1 - q^{-1}), \quad q = (1 - \tau\lambda)^{-1}$ и

$$\mathbf{u}^n = c_1\boldsymbol{\xi}_1(1 - \tau\lambda_1)^{-n} + c_2\boldsymbol{\xi}_2(1 - \tau\lambda_2)^{-n}.$$

Очевидно, что при выполнении условий (17.11) модули компонент $\mathbf{u}^n$ монотонно убывают при $n \to \infty$ при *любых* τ, и, следовательно, τ можно выбирать только из соображений точности.

Неявный метод Эйлера при решении жестких систем оказался существенно более устойчивым, чем просто метод Эйлера.

Как отобрать методы, пригодные для решения жестких задач? Ужесточить требование устойчивости.

17.3 A-устойчивость

Если при определении нуль-устойчивости основной моделью было уравнение (17.5), то теперь следует обратиться к уравнению (16.25). Многошаговый метод (16.17) в применении к линейному однородному уравнению

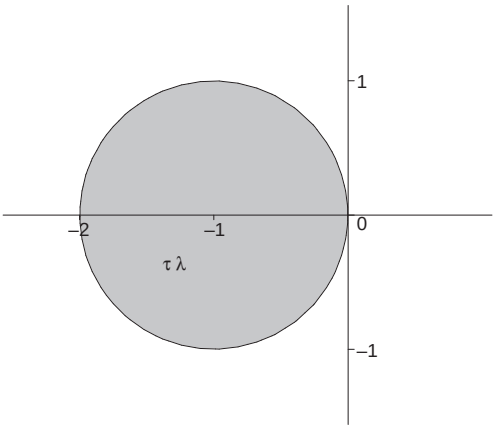


Рис. 2

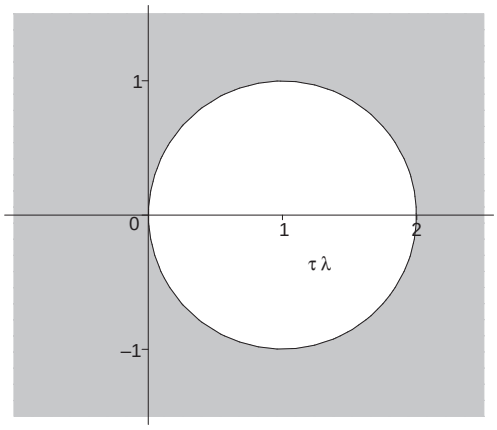


Рис. 3

(16.25) имеет вид (16.27), а характеристическое уравнение этого разностного уравнения задается соотношением (17.2).

Определение 17.5. Линейный многошаговый метод (16.17) в применении к уравнению (16.25) называется *абсолютно устойчивым* для данного λ и данного τ, если при указанном значении $\tau\lambda$ все корни характеристического уравнения (17.2) расположены внутри единичного круга.

Определение 17.6. Множество всех точек комплексной плоскости $\tau\lambda$, для которых линейный многошаговый метод (16.17) в применении к (16.25) абсолютно устойчив, называется *областью абсолютной устойчивости* метода.

Пример 4°. Метод Эйлера (14.7). Единственный корень характеристического уравнения этого метода есть $q = 1 + \tau\lambda$, условие абсолютной устойчивости имеет вид

$$|1 + \tau\lambda| \leqslant 1.$$

Тем самым, областью абсолютной устойчивости метода Эйлера является единичный круг с центром в точке $\tau\lambda = -1$ (см. рис. 2).

Пример 5°. Неявный метод Эйлера (14.8). Условие абсолютной устойчивости

$$|q| = |1 - \tau\lambda|^{-1} \leqslant 1, \quad \text{т.е.} \quad |1 - \tau\lambda| \geqslant 1.$$

Областью абсолютной устойчивости является внешность единичного круга с центром в точке $\tau\lambda = 1$ (см. рис. 3).

Определение 17.7. Линейный многошаговый метод (16.17) называется *А-устойчивым,* если его область абсолютной устойчивости содержит левую полуплоскость $\mathrm{Re}(\tau\lambda) < 0$.

Из приведенных примеров следует, что метод Эйлера не является A-устойчивым, а неявный метод Эйлера A-устойчив.

Пример 6°. Метод трапеций (14.12). Применительно к уравнению (16.25) этот метод имеет вид

$$\frac{u^{n+1}-u^n}{\tau}=\lambda\frac{u^{n+1}+u^n}{2},$$

а его характеристическое уравнение есть $(q-1)/\tau=\lambda(q+1)/2$. Отсюда находим единственный корень

$$q=\frac{1+\tau\lambda/2}{1-\tau\lambda/2}$$

и условие абсолютной устойчивости

$$|q|=\left|\frac{1+\tau\lambda/2}{1-\tau\lambda/2}\right|\leqslant 1$$

или

$$\big|1+\tau\lambda/2\big|\leqslant\big|1-\tau\lambda/2\big|.$$

Пусть $\tau\lambda=x+iy$. Тогда условие абсолютной устойчивости примет вид

$$\left|1+\frac{x}{2}+i\frac{y}{2}\right|\leqslant\left|1-\frac{x}{2}-i\frac{y}{2}\right|.$$

или

$$\left(1+\frac{x}{2}\right)^2+\frac{y^2}{4}\leqslant\left(1-\frac{x}{2}\right)^2+\frac{y^2}{4}.$$

Раскрывая скобки, находим, что условие абсолютной устойчивости есть

$$x=\mathrm{Re}(\tau\lambda)\leqslant 0.$$

Областью абсолютной устойчивости метода трапеций является левая полуплоскость $\mathrm{Re}(\tau\lambda)\leqslant 0$ (Рис. 4). Метод A-устойчив.

Теорема 17.3. *Среди линейных многошаговых методов* (16.17) *не существует явных A-устойчивых методов.*

Теорема 17.4. *Среди неявных линейных многошаговых методов* (16.17) *не существует A-устойчивых методов, имеющих порядок точности выше второго.*

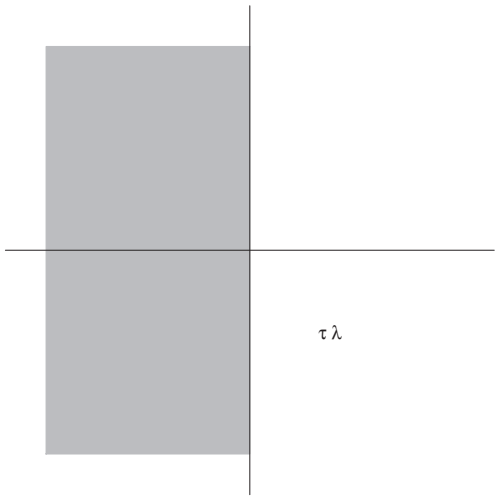


Рис. 4

Пример 7°. Двухшаговая формула дифференцирования назад. Этот метод задается соотношением (16.16)

$$\left(\frac{3}{2}u_{n+1} - 2u_n + \frac{1}{2}u_{n-1}\right) = \tau f(u_{n+1}). \tag{17.18}$$

Характеристическое уравнение, отвечающее этому методу в применении к уравнению (16.25), есть

$$\frac{3}{2}q^2 - 2q + \frac{1}{2} - \tau\lambda q^2 = 0. \tag{17.19}$$

Определим область абсолютной устойчивости этого метода. Для этого достаточно найти ее границу, т.е. такое множество комплексной плоскости $z = \tau\lambda$, где $|q(z)| = 1$. С этой целью выразим из (17.19) $\tau\lambda$ через q

$$z = \frac{3}{2} - \frac{2}{q} + \frac{1}{2q^2}. \tag{17.20}$$

Поскольку нас интересуют значения $|q| = 1$, то пусть $q = e^{-i\varphi}$. Отсюда и из (17.20) находим, что граница области абсолютной устойчивости задается уравнением

$$z = \frac{3}{2} - 2e^{i\varphi} + \frac{1}{2}e^{2i\varphi}. \tag{17.21}$$

При изменении аргумента φ от 0 до 2π точка z из (17.21) описывает замкнутую кривую, симметричную относительно действительной оси (функция $\sin k\varphi$ — нечетная), которая и является границей области абсолютной

устойчивости.

$$
\begin{aligned}
z &= \frac{3}{2} - 2\cos\varphi + \frac{1}{2}\cos 2\varphi + i(-2\sin\varphi + \frac{1}{2}\sin 2\varphi) = \\
&= \frac{3}{2} - 2\cos\varphi + \cos^2\varphi - \frac{1}{2} + i(-2\sin\varphi + \sin\varphi\cos\varphi) = \\
&= (1-\cos\varphi)^2 \pm i\sqrt{1-\cos^2\varphi}(2-\cos\varphi) = \\
&= (1-t)^2 \pm i\sqrt{1-t^2}(2-t), \qquad t = \cos\varphi.
\end{aligned}
$$

Отсюда следует, что

$$\operatorname{Re} z = (1-t)^2 \geqslant 0,$$

и, следовательно, кривая расположена в правой полуплоскости. Построим ее. Мнимая часть $z(t)$ обращается в нуль при $t = \pm 1$. Действительная часть $z(t)$ при этих значениях параметра равна 0 и 4.

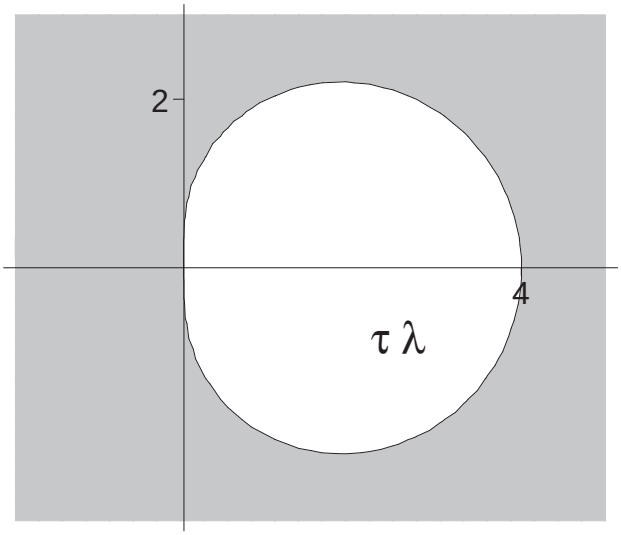


Рис. 5

Исследования показывают, что

$$
\begin{aligned}
&\max_{[-1,1]} \operatorname{Im} z(t) = \operatorname{Im} z\left(\frac{1-\sqrt{3}}{2}\right) = \frac{(3+\sqrt{3})\sqrt[4]{3}}{2\sqrt{2}} \approx 2.20, \\
&\operatorname{Re} z\left(\frac{1-\sqrt{3}}{2}\right) = \frac{2+\sqrt{3}}{2} \approx 1.86.
\end{aligned}
$$

Из (17.20) находим, что при

$$|q| \to \infty, \qquad z \to \frac{3}{2} \in G,$$

и, следовательно, внутренность области — область неустойчивости. Тем самым, вне G (Рис. 5) $|q| < 1$, и метод абсолютно устойчив, а, следовательно, и A-устойчив. Этот метод второго порядка точности.

Пример 8°. Трехшаговая формула дифференцирования назад. (Упражнение 16.3)

$$\frac{11}{6}u_{n+1} - 3u_n + \frac{3}{2}u_{n-1} - \frac{1}{3}u_{n-2} = \tau\lambda u_{n+1}. \tag{17.22}$$

Характеристическое уравнение этого разностного уравнения имеет вид

$$\frac{11}{6}q^3 - 3q^2 + \frac{3}{2}q - \frac{1}{3} = \tau\lambda q^3. \tag{17.23}$$

Снова положим $|q| = 1$, т.е. $q = e^{-i\varphi}$ и $\tau\lambda = z$. Тогда

$$z = \frac{11}{6} - 3e^{i\varphi} + \frac{3}{2}e^{2i\varphi} - \frac{1}{3}e^{3i\varphi}.$$

Обозначая $\cos\varphi = t$, после простых вычислений находим, что

$$z = -\frac{1}{3}(t-1)^2(4t-1) \pm \frac{i}{3}\sqrt{1-t^2}(4t^2 - 9t + 8).$$

При $t = \pm 1$ $\quad \operatorname{Im} z = 0$, а $\operatorname{Re} z = 0$ или $20/3$. Исследования показывают, что $\operatorname{Re} z$ как функция t принимает экстремальные значения при $t = 1/2$ и $t = 1$. Значение $t = 1$ мы уже рассмотрели, а

$$\operatorname{Re} z\,(1/2) = \min \operatorname{Re}(t) = -1/12, \quad \operatorname{Im} z(1/2) = \pm 3\sqrt{3}/4 \approx \pm 1.30$$

и, следовательно, часть границы области устойчивости расположена в левой полуплоскости. Как легко видеть, мнимую ось граница устойчивости пересекает при $t = 1/4$ и

$$\operatorname{Im} z(1/4) = \pm\sqrt{15}/2 \approx \pm 1.94.$$

Экстремальные значения $\operatorname{Im} z(t)$ принимает в точке

$$t^* = -\frac{1}{2}\left[(2+\sqrt{3})^{1/3} + (2+\sqrt{3})^{-1/3} - 1\right] \approx -0.60,$$

причем

$$\operatorname{Im} z(t^*) \approx \pm 3.96, \quad \operatorname{Re} z(t^*) \approx 2.89.$$

Область устойчивости изображена на рис. 6.

Определение 17.8. Линейный многошаговый метод называется $A(\alpha)$-*устойчивым,* если его область абсолютной устойчивости содержит угол

$$\big|\arg(-\tau\lambda)\big| < \alpha.$$

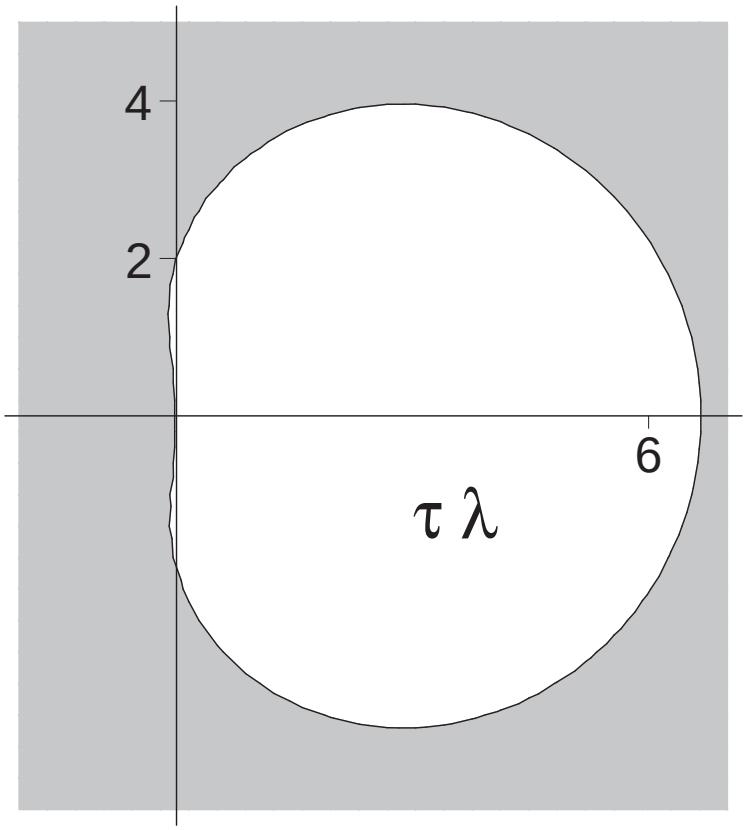


Рис. 6.

Замечание 17.3. $A(\pi/2)$- и A- устойчивости совпадают.

Теорема 17.5. *Существуют многошаговые методы* 3*-го и* 4*-го порядков точности* $A(\alpha)$*-устойчивые при любых* $\alpha < \pi/2$.

Теорема 17.6. *Явные линейные многошаговые методы не являются* $A(\alpha)$ *- устойчивыми ни при каких* α.

Теорема 17.7. *Методы дифференцирования назад при* $k \leqslant 6$ *являются* $A(\alpha)$ *-устойчивыми при соответствующих значениях* $\alpha \neq 0$.

Упражнение 17.3. Исследовать область абсолютной устойчивости двухшагового неявного метода Адамса.

17.4 Устойчивость методов Рунге-Кутты

Как было уже отмечено, методы (все) Рунге-Кутты являются нуль-устойчивыми. Исследуем области абсолютной устойчивости некоторых из этих

методов. Рассмотрим явный трехэтапный метод третьего порядка, задаваемый таблицей (15.48), которая имеет вид

$$\begin{array}{c|ccc} 1/2 & 1/2 & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & 1/6 & 2/3 & 1/6 \end{array}$$

Применительно к уравнению (16.25) этот метод задается следующими соотношениями

$$\begin{aligned} Y_1 &= u_n, \\ Y_2 &= u_n + \frac{\tau\lambda}{2} Y_1, \\ Y_3 &= u_n - \tau\lambda Y_1 + 2\tau\lambda Y_2, \\ u_{n+1} &= u_n + \tau\lambda \left(\frac{1}{6} Y_1 + \frac{2}{3} Y_2 + \frac{1}{6} Y_3 \right). \end{aligned}$$

Исключая из этих соотношений промежуточные величины Y_1, Y_2 и Y_3, будем иметь

$$\begin{aligned} Y_2 &= \left(1 + \frac{\tau\lambda}{2}\right) u_n, \\ Y_3 &= \left[1 - \tau\lambda + 2\tau\lambda \left(1 + \frac{\tau\lambda}{2}\right)\right] u_n = (1 + \tau\lambda + \tau^2\lambda^2) u_n, \\ u_{n+1} &= \left\{1 + \tau\lambda \left[\frac{1}{6} + \frac{2}{3}\left(1 + \frac{\tau\lambda}{2}\right) + \frac{1}{6}(1 + \tau\lambda + \tau^2\lambda^2)\right]\right\} u_n = \\ &= \left(1 + \tau\lambda + \frac{\tau^2\lambda^2}{2} + \frac{\tau^3\lambda^3}{6}\right) u_n. \end{aligned}$$

Это есть линейное разностное уравнение первого порядка, единственный корень характеристического уравнения которого равен

$$q = 1 + \tau\lambda + \frac{\tau^2\lambda^2}{2} + \frac{\tau^3\lambda^3}{6} = e^{\tau\lambda} + O(\tau^4\lambda^4).$$

Обозначим $\tau\lambda$ через z. Тогда

$$q = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{6}.$$

Этот корень характеристического уравнения есть многочлен третьей степени от z и в левой полуплоскости $\operatorname{Re} z < 0$ ограниченным быть не может. Метод не является $A(\alpha)$ -устойчивым ни при каком α.

Рассмотрим теперь двухэтапный однократно неявный метод третьего порядка, задаваемый таблицей (15.36), которая имеет вид

$$\begin{array}{c|cc} \gamma & \gamma & 0 \\ 1-\gamma & 1-2\gamma & \gamma \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} \qquad \gamma = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}. \tag{17.24}$$

Применительно к уравнению (16.25) этот метод записывается следующим образом

$$\begin{aligned} Y_1 &= u_n + \gamma\tau\lambda Y_1, \\ Y_2 &= u_n + \tau\lambda(1-2\gamma)Y_1 + \tau\lambda\gamma Y_2, \\ u_{n+1} &= u_n + \frac{\tau\lambda}{2}(Y_1 + Y_2). \end{aligned}$$

Как и в предыдущем примере, положим $\tau\lambda = z$ и исключим Y_1 и Y_2. Решая систему линейных алгебраических уравнений второго порядка относительно Y_1 и Y_2 (первые два уравнения) и подставляя результат в третье уравнение, находим, что

$$\begin{gathered} Y_1 = \frac{1}{1-\gamma z}u_n, \quad Y_2 = \frac{1+(1-3\gamma)z}{(1-\gamma z)^2}u_n, \\ u_{n+1} = \left[1 + \frac{z}{2}\left(\frac{1}{1-\gamma z} + \frac{1+(1-3\gamma)z}{(1-\gamma z)^2}\right)\right]u_n. \end{gathered}$$

Отсюда следует, что единственным корнем характеристического уравнения является

$$\begin{aligned} q &= \frac{1 - 2\gamma z + \gamma^2 z^2 + z/2 - \gamma z^2/2 + z/2 + (1-3\gamma)z^2/2}{(1-\gamma z)^2} = \\ &= \frac{1 + (1-2\gamma)z + (\gamma^2 - 2\gamma + 1/2)z^2}{1 - 2\gamma z + \gamma^2 z^2} = \frac{P(z)}{Q(z)}. \end{aligned}$$

Этот корень является дробно-рациональной функцией, полюсом второго порядка которой является точка $z = \gamma^{-1} = (3 \mp \sqrt{3})$, расположенная в правой полуплоскости. В левой полуплоскости эта функция аналитична и, следовательно, максимум ее модуля здесь не превосходит максимума модуля на границе, т.е. при $z = iy$. Оценим ее модуль на мнимой оси. Имеем

$$\begin{aligned} &|P(iy)|^2 = \left[1 - (\gamma^2 - 2\gamma + 1/2)y^2\right]^2 + (1-2\gamma)^2 y^2 = \\ &= 1 - 2(\gamma^2 - 2\gamma + 1/2)y^2 + (\gamma^2 - 2\gamma + 1/2)^2 y^4 + (1 - 4\gamma + 4\gamma^2)y^2 = \\ &= 1 + 2\gamma^2 y^2 + (\gamma^2 - 2\gamma + 1/2)^2 y^4 \end{aligned}$$

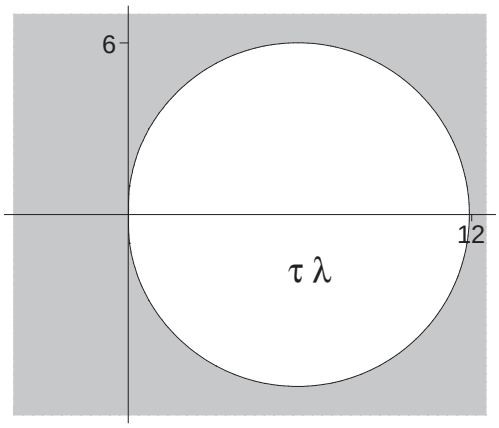


Рис. 7

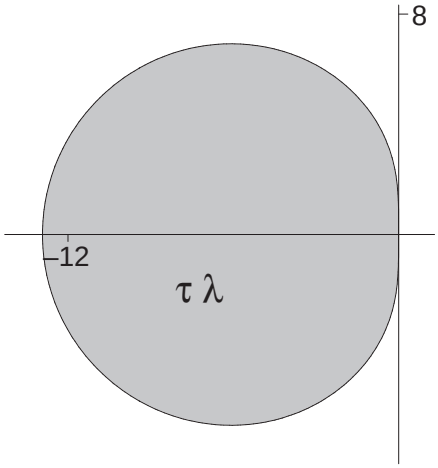


Рис. 8

и

$$|Q(iy)|^2 = (1-\gamma^2y^2)^2 + 4\gamma^2y^2 = 1 + 2\gamma^2y^2 + \gamma^4y^4.$$

Отсюда

$$\left|\frac{P(iy)}{Q(iy)}\right|^2 = \frac{1 + 2\gamma^2y^2 + (\gamma^2 - 2\gamma + 1/2)^2y^4}{1 + 2\gamma^2y^2 + \gamma^4y^4}. \tag{17.25}$$

Эта функция не будет превосходить единицу, если ее числитель не больше знаменателя, т.е. если разность между числителем и знаменателем неположительна. Из (17.25) находим, что

$$|P(iy)|^2 - |Q(iy)|^2 = (1-4\gamma)(\gamma - 1/2)^2y^4$$

и, следовательно, метод (17.24) является A-устойчивым только при $\gamma \geqslant 1/4$. Этому условию отвечает $\gamma = (3+\sqrt{3})/6$ из (17.24), в то время как при другом значении γ из (17.24) метод A-устойчивым не будет. Области абсолютной устойчивости этих методов изображены на рис. 7 и 8, соответственно.

Тем самым, один из методов (15.36), именно, отвечающий $\gamma = (3+\sqrt{3})/6$, является A-устойчивым, в то время как второй таким свойством не обладает и даже не является $A(\alpha)$-устойчивым.

Упражнение 17.4. Доказать, что неявный двухэтапный метод Рунге-Кутты четвертого порядка (оптимальный двухэтапный метод) (15.38) является $A(\alpha)$-устойчивым.

Упражнение 17.5. Исследовать область абсолютной устойчивости метода (17.24) при $\gamma = 1/4$

V

Двухточечные краевые задачи

18

Элементы теории разностных схем

18.1 Введение

Простейшим содержательным примером краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения является следующий:

$$-u''(x) = f(x), \qquad 0 < x < 1, \tag{18.1}$$

$$u(0) = g_0, \qquad u(1) = g_1. \tag{18.2}$$

У краевой задачи, в отличие от задачи Коши, дополнительные условия, выделяющие единственное решение уравнения (18.1), задаются не в одной точке, а в нескольких (обычно в двух), и называются краевыми (или граничными) условиями. Это вносит дополнительные трудности в процесс решения задачи.

Мы будем изучать разностные методы решения краевых задач. Для этого на отрезке $[0, 1]$ введем сетку

$$\overline{\omega} := \left\{ x = x_i = ih \;\middle|\; i = 0, \ldots, N \right\}.$$

Точки x_i будем называть узлами сетки, а число $h = 1/N$ — ее шагом. Введенная сетка является равномерной. Если бы расстояния между узлами менялось при переходе от одного узла к другому, то сетка была бы неравномерной.

Суть разностных методов решения краевых задач для дифференциальных уравнений состоит в том, что производные, входящие в дифференциальное уравнение и граничные условия, заменяются подходящими разностными отношениями. В результате краевая задача заменяется (аппроксимируется) системой алгебраических (линейных, если исходная

задача была линейной) уравнений, решение которой и принимается за приближенное решение краевой задачи.

Напомним простейшие аппроксимации первой и второй производных

$$\frac{u(x_i) - u(x_{i-1})}{h} = u'(x_i) + O(h), \tag{18.3}$$

$$\frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h} = u'(x_i) + O(h), \tag{18.4}$$

$$\frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})}{2h} = u'(x_i) + O(h^2), \tag{18.5}$$

$$\frac{-u(x_{i+2}) + 4u(x_{i+1}) - 3u(x_i)}{2h} = u'(x_i) + O(h^2), \tag{18.6}$$

$$\frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1})}{h^2} = u''(x_i) + O(h^2). \tag{18.7}$$

Для справедливости соотношений (18.3) и (18.4) достаточно, чтобы $u(x) \in C^2$, для справедливости (18.5) и (18.6) — $u(x) \in C^3$, для справедливости (18.7) — $u(x) \in C^4$. В этом можно убедиться путем разложения левых частей (18.3)-(18.7) в точке $x = x_i$ по формуле Тейлора.

Упражнение 18.1. Убедиться в справедливости (18.3)-(18.7).

Замечание 18.1. Если функцию $u(x)$ заменить интерполяционным многочленом Лагранжа первой степени по узлам x_{i-1} и x_i или x_i и x_{i+1}, а затем его продифференцировать, то получим левые части соотношений (18.3), (18.4). Заменяя $u(x)$ интерполяционным многочленом второй степени по узлам x_{i-1}, x_i, x_{i+1} или x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, дифференцируя полученный интерполянт и полагая $x = x_i$, получим левые части (18.5) и (18.6), соответственно.

Воспользуемся соотношением (18.7) для замены второй производной в (18.1) разностным отношением. В узлах сетки будем иметь

$$-\frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1})}{h^2} \approx f(x_i), \qquad x_i = h, 2h, \ldots, 1-h.$$

Превратим приближенные равенства в точные путем замены точного решения $u(x_i)$ в узле x_i на приближенное u_i^h:

$$-\frac{u_{i+1}^h - 2u_i^h + u_{i-1}^h}{h^2} = f_i, \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1. \tag{18.8}$$

Соотношения (18.8) представляют собой систему $(N-1)$ линейных алгебраических уравнений с $N+1$ неизвестными $u_0^h, u_1^h, \ldots, u_N^h$. Система (18.8) недоопределена (как и следовало ожидать). Воспользуемся граничными условиями (18.2) и положим

$$u_0^h = g_0, \qquad u_N^h = g_1. \tag{18.9}$$

Решение системы (18.8), (18.9), если оно существует, будем называть приближенным решением задачи (18.1), (18.2).

18.2 Основные понятия теории разностных схем

Обозначим дифференциальное выражение, стоящее в левой части (18.1), через Lu. Тогда дифференциальное уравнение (18.1) примет вид

$$Lu = f(x), \qquad 0 < x < 1. \tag{18.10}$$

Граничные условия (18.2) запишем в виде

$$lu = g. \tag{18.11}$$

Аналогично, разностное выражение, стоящее в левой части (18.8), обозначим через $L^h u^h$. Тогда из (18.8) будем иметь

$$L^h u_i^h = f_i^h, \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{18.12}$$

где $f_i^h = f_i$. Граничные условия (18.9) запишем в виде, аналогичном (18.11)

$$l^h u^h = g^h. \tag{18.13}$$

Определение 18.1. Сеточная функция

$$\Psi_v(x) := L^h v - Lv, \qquad x \in \omega, \tag{18.14}$$

определенная на сетке ω, где v — достаточно гладкая функция, заданная на $[0, 1]$, называется погрешностью аппроксимации дифференциального выражения Lv разностным выражением $L^h v$.

Определение 18.2. Разностное выражение $L^h v$ аппроксимирует диффереciальное выражение Lv, если погрешность аппроксимации $\Psi_v \to 0$ (в каком-нибудь смысле) при $h \to 0$.

Определение 18.3. Сеточная функция

$$z = u^h - u, \qquad x \in \overline{\omega}, \tag{18.15}$$

где u^h — решение задачи (18.12), (18.13), а u — решение задачи (18.10), (18.11), называется погрешностью решения.

Сформулируем задачу для погрешности решения z. Подставим в (18.12), (18.13) u^h, выражаемое из (18.15) через z и u: $u^h = z + u$. Будем иметь

$$L^h z = f^h - L^h u, \quad l^h z = g^h - l^h u. \tag{18.16}$$

Определение 18.4. Функция

$$\Psi = f^h - L^h u, \qquad x \in \omega, \tag{18.17}$$

являющаяся правой частью уравнения для погрешности решения (18.16), называется погрешностью аппроксимации уравнения (18.10) уравнением (18.12).

Определение 18.5. Функция

$$\psi = g^h - l^h u, \tag{18.18}$$

являющаяся правой частью в граничных условиях для погрешности решения (18.16), называется погрешностью аппроксимации граничных условий (18.11) граничными условиями (18.13).

Замечание 18.2. Так как в силу (18.10) $Lu - f = 0$, то, добавляя этот нуль к представлению погрешности аппроксимации (18.17), будем иметь

$$\Psi = f^h - L^h u = f^h - f - (L^h u - Lu) = (f^h - f) - \Psi_u, \tag{18.19}$$

где Ψ_u определяется соотношением (18.14). Тем самым, погрешность аппроксимации уравнения представляет собой разность между погрешностью аппроксимации правой части и погрешностью аппроксимации дифференциального выражения. Аналогичные представления имеют место и для погрешности аппроксимации граничных условий:

$$\psi = g^h - l^h u = g^h - g - (l^h u - lu) = (g^h - g) - \psi_u. \tag{18.20}$$

Определение 18.6. Задача (18.12), (18.13) аппроксимирует задачу (18.10), (18.11), если Ψ и ψ стремятся к нулю при $h \to 0$ вместе с Ψ_u и ψ_u.

Определение 18.7. Решение задачи (18.12), (18.13) сходится к решению задачи (18.10), (18.11), если $z \to 0$ (в каком-либо смысле) при $h \to 0$.

Определение 18.8. Задача (18.12), (18.13) аппроксимирует задачу (18.10), (18.11) с погрешностью порядка $n > 0$, если

$$\|\Psi_u\|_{(1)} = o(1), \quad \|\psi_u\|_{(2)} = o(1), \quad \|\Psi\|_{(1)} = O(h^n), \quad \|\psi\|_{(2)} = O(h^n)$$

Определение 18.9. Решение задачи (18.12), (18.13) сходится к решению задачи (18.10), (18.11) со скоростью $O(h^n)$, если

$$\|z\|_{(3)} = O(h^n).$$

Проиллюстрируем введенные понятия на примере задачи (18.1), (18.2). Так как в данном случае $L = -d^2v/d\,x^2$, а

$$L^h v = -\frac{v(x_{i+1}) - 2v(x_i) + v(x_{i-1})}{h^2},$$

то, в силу (18.7),

$$\Psi_v = O(h^2),$$

т.е. дифференциальное выражение v'' аппроксимируется разностным выражением $(v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1})/h^2$ на функциях $v(x) \in C^4$ с погрешностью $O(h^2)$.

Далее, так как $f_i^h = f(x_i)$, то с учетом (18.19) заключаем, что дифференциальное уравнение (18.1) аппроксимируется разностным уравнением (18.8) с погрешностью $O(h^2)$, если $u(x) \in C^4[0, l]$.

Наконец,

$$\begin{aligned} lu &= \{u(0), u(1)\}, \\ l^h u &= \{u_0, u_N\}, \\ g &= \{g_0, g_1\} = g^h, \end{aligned}$$

так что

$$\psi = g^h - l^h u = 0.$$

Итак, задача (18.8), (18.9) аппроксимирует задачу (18.1), (18.2) (при $u(x) \in C^4[0, l]$) с погрешностью $O(h^2)$.

Очевидно, что, если вместо уравнения (18.1) рассмотреть уравнение

$$L_1 u := -u''(x) + q(x)u(x) = f(x), \qquad x \in (0, 1) \tag{18.21}$$

и аппроксимировать его разностным уравнением

$$L_1^h u^h := -\frac{u_{i+1}^h - 2u_i^h + u_{i-1}^h}{h^2} + q(x_i)u_i^h = f(x_i), \quad i = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{18.22}$$

то задача (18.22), (18.9) будет аппроксимировать задачу (18.21), (18.2) тоже с погрешностью $O(h^2)$.

18.3 Разрешимость и сходимость

Исследуем вопрос о сходимости решения разностной задачи к решению задачи дифференциальной. Для уравнения (18.21) это сделать несколько проще, чем для уравнения (18.1). Поэтому к нему мы в первую очередь и обратимся. Но сначала установим существование и единственность решения задачи (18.22), (18.9).

Теорема 18.1. *Если*

$$q(x) \geqslant c_1 > 0, \quad 0 < x < 1, \tag{18.23}$$

то решение задачи (18.22), (18.9) *существует, единственно, и для него справедлива априорная оценка*

$$\|u^h\|_{L_\infty^h} := \max_i |u_i^h| \leqslant |g_0| + |g_1| + \frac{1}{c_1}\|f\|_{L_\infty^h}. \tag{18.24}$$

Доказательство. Задача (18.22), (18.9) представляет собой систему линейных алгебраических уравнений с квадратной матрицей порядка $(N+1)$. Поэтому всегда существует такая правая часть $[g_0, f_1, \ldots, f_{N-1}, g_1]$ этой системы (берется первое уравнение из (18.9), затем последовательно все уравнения (18.22) и, наконец, второе уравнение (18.9)), что решение u^h существует. Например, возьмем произвольный набор чисел $u_0^h, u_1^h, \ldots, u_N^h$ и подставим его в левые части (18.22), (18.9). Этим мы определим правые части (18.22), (18.9), при которых решение заведомо существует.

Получим априорную оценку этого решения. Пусть

$$\|u^h\|_{L_\infty^h} = |u_{i_0}^h|.$$

Если $i_0 = 0$ или $i_0 = N$, то в силу краевых условий (18.9)

$$\max_i |u_i^h| \leqslant \max\{|g_0|, |g_1|\} \leqslant |g_0| + |g_1|, \tag{18.25}$$

что согласуется с (18.24). В противном случае максимум модуля достигается во внутреннем узле $x_{i_0} \in \omega$. Запишем уравнение (18.22) в этом узле

$$-\frac{u^h_{i_0-1} - 2u^h_{i_0} + u^h_{i_0+1}}{h^2} + q_{i_0}u^h_{i_0} = f_{i_0}.$$

Если $u^h_{i_0} \geqslant 0$, то

$$-[\underbrace{(u^h_{i_0-1} - u^h_{i_0})}_{\geqslant 0} + \underbrace{(u^h_{i_0+1} - u^h_{i_0})}_{\geqslant 0}] \geqslant 0$$

и, следовательно,

$$q_{i_0}u^h_{i_0} \leqslant f_{i_0}.$$

Отсюда с учетом (18.23)

$$0 \leqslant u^h_{i_0} \leqslant \frac{f_{i_0}}{q_{i_0}} \leqslant \frac{1}{c_1}\,\|f\|_{L^h_\infty}. \tag{18.26}$$

Если же $u^h_{i_0} < 0$, то оно может быть только минимальным значением, и, следовательно,

$$-[\underbrace{(u^h_{i_0-1} - u^h_{i_0})}_{\leqslant 0} + \underbrace{(u^h_{i_0+1} - u^h_{i_0})}_{\leqslant 0}] \leqslant 0. \tag{18.27}$$

Поэтому

$$q_{i_0}u^h_{i_0} \geqslant f_{i_0}.$$

Отсюда

$$-q_{i_0}|u^h_{i_0}| \geqslant f_{i_0}$$

и снова

$$|u^h_{i_0}| \leqslant -\frac{f_{i_0}}{q_{i_0}} \leqslant \frac{1}{c_1}\,\|f\|_{L^h_\infty}. \tag{18.28}$$

Собирая оценки (18.25), (18.26), (18.28), приходим к (18.24). Априорная оценка получена.

Докажем теперь, что решение единственно. Допустим противное, т.е. допустим существование двух решений $u^h_{(1)}$ и $u^h_{(2)}$. Очевидно, что их разность $z = u^h_{(1)} - u^h_{(2)}$ удовлетворяет однородному уравнению (18.22) и однородным граничным условиям (18.9). В силу априорной оценки (18.24)

$$\max_i |z_i| \leqslant 0.$$

Следовательно, $z_i \equiv 0$, что противоречит предположению. Мы доказали, что однородная система (18.22), (18.9) имеет лишь тривиальное решение.

Следовательно, матрица этой системы невырождена, и задача (18.22), (18.9) имеет единственное решение при любых g_0, g_1 и f_i. Теорема доказана.

Теорема 18.2. *Если выполнено условие* (18.23), *и решение* $u(x)$ *задачи* (18.21), (18.2) *принадлежит* $C^4[0,1]$, *то решение* u^h *задачи* (18.22), (18.9) *сходится к решению задачи* (18.21), (18.2) *со скоростью* $O(h^2)$, *т.е.*

$$\left|u(x_i) - u_i^h\right| = O(h^2).$$

Доказательство. Напишем задачу для погрешности решения $z_i = u_i^h - u(x_i)$. Будем иметь

$$-\frac{z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1}}{h^2} + q_i z_i = \Psi_i, \qquad z_0 = z_N = 0. \tag{18.29}$$

К задаче (18.29) применим теорему 18.1, в силу которой

$$\max_i |z_i| \leqslant \frac{1}{c_1} \max_i |\Psi_i|.$$

Но в силу вышедоказанного $\Psi_i = O(h^2)$, что и доказывает теорему.

Замечание 18.3. Более детальный анализ показывает, что

$$\max_i |u_i^h - u(x_i)| \leqslant \frac{1}{c_1} \max_{x\in[0,1]} |u^{IV}(x)| \frac{h^2}{12}.$$

Теорема 18.3 (О монотонности). *Пусть* L_1^h *определяется* (18.22). *Тогда, если выполнено условие*

$$q_i \geqslant 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{18.30}$$

а сеточная функция U_i, $i = 0, 1, \ldots, N$ *такова, что*

$$U_0 \geqslant 0, \qquad U_N \geqslant 0 \tag{18.31}$$

и

$$L_1^h U_i \geqslant 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{18.32}$$

то

$$U_i \geqslant 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1. \tag{18.33}$$

Доказательство. Допустим противное, т.е. допустим, что функция U_i может принимать отрицательные значения. Тогда существует такой узел x_{i_0}, $i_0 \in \{1, 2, \ldots, N-1\}$, что

$$\min_i U_i = U_{i_0} < 0 \tag{18.34}$$

и с учетом (18.27) выражение $-(U_{i_0-1} - 2U_{i_0} + U_{i_0+1})$ либо строго меньше нуля, либо нулю равняется. Исследуем обе эти возможности. Если $-(U_{i_0-1} - 2U_{i_0} + U_{i_0+1}) < 0$, то с учетом (18.30) и (18.34)

$$L_1^h U_{i_0} = -\frac{U_{i_0-1} - 2U_{i_0} + U_{i_0+1}}{h^2} + q_{i_0} U_{i_0} < 0,$$

и мы пришли к противоречию с (18.32). Если $(U_{i_0-1} - 2U_{i_0} + U_{i_0+1}) = 0$, а $q_{i_0} \neq 0$, мы снова получаем противоречие. Для выхода из этих противоречий мы должны предположить, что $q_{i_0} = 0$ и $(U_{i_0-1} - 2U_{i_0} + U_{i_0+1}) = 0$. Но в силу (18.27), (18.34) это означает, что $U_{i_0-1} = U_{i_0} = U_{i_0+1} < 0$, и в качестве i_0 из (18.34) можно взять также $(i_0 - 1)$ или $(i_0 + 1)$. Делая этот выбор, мы теми же рассуждениями приходим к утверждению, что и $U_{i_0-2} = U_{i_0}$ (или $U_{i_0+2} = U_{i_0}$). И т.д. Поскольку в силу (18.31), (18.34) функция U_i, $i = \overline{0, N}$ не является постоянной, то существует такой узел x_{i_1}, $i_1 \in \{1, 2, \ldots, N-1\}$, что $U_{i_1} = U_{i_0}$, а U_{i_1-1} или U_{i_1+1} больше U_{i_1}. В этом узле $-(U_{i_1-1} - 2U_{i_1} + U_{i_1+1}) < 0$, и мы вернулись к уже рассмотренному случаю, который привел нас к противоречию с (18.32). Все противоречия снимаются, если мы откажемся от предположения, что U_i может принимать отрицательные значения. Теорема доказана.

Определение 18.10. Матрица A называется обратно монотонной, если для любого вектора x из условия $Ax \geqslant 0$ следует $x \geqslant 0$.

Упражнение 18.2. Доказать, что обратно монотонная матрица невырождена, а обратная к ней имеет только неотрицательные элементы.

Теорема 18.4 (Принцип сравнения). *Пусть u_i^h — решение задачи* (18.22), (18.9), *а U_i — решение следующей задачи:*

$$L_1^h U_i = F_i, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1, \quad U_0 = G_0, \quad U_N = G_1.$$

Пусть

$$|f_i| \leqslant F_i, \quad |g_0| \leqslant G_0, \quad |g_1| \leqslant G_1. \tag{18.35}$$

Тогда, если выполнено условие (18.30), *то*

$$|u_i^h| \leqslant U_i, \qquad i = 1, 2, \ldots, N-1. \tag{18.36}$$

Доказательство. Легко видеть, что функция $(U_i - u_i^h)$ является решением задачи

$$L_1^h(U - u^h)_i = F_i - f_i, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1,$$
$$U_0 - u_0^h = G_0 - g_0, \quad U_N - u_N^h = G_1 - g_1.$$

В силу (18.35) и теоремы 18.3 заключаем, что $U_i - u_i^h \geqslant 0$. Из аналогичных соображений находим, что и $U_i + u_i^h \geqslant 0$. Тем самым, $-U_i \leqslant u_i^h \leqslant U_i$, и теорема доказана.

Определение 18.11. Функция U_i из (18.36) называется *барьером.*

Теорема 18.5. *Для решения задачи* (18.22), (18.9) *при выполнении условия* (18.30) *справедлива априорная оценка*

$$\|u^h\|_{L_\infty^h} \leqslant |g_0| + |g_1| + \frac{1}{8}\|f\|_{L_\infty^h}.$$

Доказательство. Введем в рассмотрение функцию

$$U_i = |g_0|(1 - x_i) + x_i|g_1| + c\,x_i(1 - x_i) \geqslant 0, \tag{18.37}$$

где $c > 0$ — некоторая постоянная. Очевидно, что $U_0 = |u_0^h|$, $U_N = |u_N^h|$. Легко проверить, что

$$L_1^h U_i = 2c + q_i U_i =: F_i \geqslant 2c.$$

Пусть $c = 1/2 \max\limits_i |f_i|$. Тогда $|f_i| \leqslant F_i$, и мы находимся в условиях теоремы 18.4, т.е. $|u_i^h| \leqslant U_i$. Но

$$\max_i U_i \leqslant |g_0| + |g_1| + c/4.$$

Теорема доказана.

Упражнение 18.3. Сформулировать и доказать теорему о скорости сходимости разностной задачи (18.22), (18.9).

18.4 Метод баланса (конечных объемов)

Рассмотрим общее самосопряженное уравнение второго порядка

$$L_2 u := -\frac{d}{d\,x}\left(p(x)\frac{d\,u}{d\,x}\right) + q(x)u = f(x), \qquad 0 < x < 1 \tag{18.38}$$

и изучим вопрос о его аппроксимации. На первый взгляд кажется вполне естественным раздифференцировать первое слагаемое левой части (18.38)

$$-p(x)\frac{d^2\,u}{d\,x^2} - p'(x)\frac{d\,u}{d\,x} + q(x)u = f(x) \tag{18.39}$$

и в этом виде заменить d^2u/dx^2 и du/dx соответствующими разностными отношениями. Но так поступать плохо в силу целого ряда причин. В частности, уравнение (18.38) является формально самосопряженным по Лагранжу (симметричным, т.е. если $u(x)$ и $v(x)$ обращаются в нуль при $x = 0$ и $x = 1$, то $\int\limits_0^1 vL_2u\,d\,x = \int\limits_0^1 uL_2v\,d\,x$. Сравнить с симметричной матрицей $A = A^T : (Ax, y) = (x, Ay)$). Если же аппроксимировать (18.39), которое эквивалентно (18.38) при гладкой $p(x)$, то аппроксимация, вообще говоря, симметричной не будет. Уравнение (18.38) нужно аппроксимировать сразу в исходном виде. Как и раньше, будем предполагать, что на [0, 1] задана равномерная сетка узлов $x_i = ih$, $h = 1/N$, $i = 0, 1, \ldots, N$, которую будем называть основной. Помимо основной сетки введем на [0, 1] так называемую "сдвинутую" сетку с узлами $x_{i+1/2} = x_i + h/2$, $i = 0, 1, \ldots, N-1$.

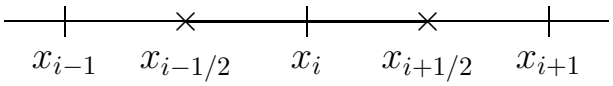


Рис. 1

Будем строить аппроксимацию (18.38) при помощи метода баланса (метода конечных объемов). Интегрируя уравнение (18.38) по отрезку $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$, будем иметь

$$-p(x_{i+1/2})u'(x_{i+1/2}) + p(x_{i-1/2})u'(x_{i-1/2}) + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [q(x)u(x) - f(x)]\,d\,x = 0. \tag{18.40}$$

Заменим в (18.40) интеграл квадратурной формулой прямоугольников, а производные — соответствующими разностными отношениями. Именно

$$\begin{gathered} \int\limits_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [q(x)u - f(x)]\,dx \approx q_iu_ih - f_ih, \\ u'_{i+1/2} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{h}, \quad u'_{i-1/2} \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{h}. \end{gathered} \tag{18.41}$$

Подставляя (18.41) в (18.40), получим приближенное равенство. Заменяя приближенное равенство на точное, получим уравнение для приближенного решения. После деления на h оно примет вид:

$$-\frac{1}{h}\left[p_{i+1/2}\frac{u_{i+1}^h-u_i^h}{h}-p_{i-1/2}\frac{u_i^h-u_{i-1}^h}{h}\right]+q_iu_i^h=f_i,\quad i=1,2,\ldots,N-1. \tag{18.42}$$

Введем следующие обозначения

$$u_x:=u_{x,i}:=\frac{u_{i+1}-u_i}{h}\text{ — правое разностное отношение,}$$
$$u_{\bar{x}}:=u_{\bar{x},i}:=\frac{u_i-u_{i-1}}{h}\text{ — левое разностное отношение.}$$

Очевидно, что $v_{x,i}\equiv v_{\bar{x},i+1}$. Далее,

$$\frac{v_{i+1}-2v_i+v_{i-1}}{h^2}=\frac{1}{h}\left[\frac{v_{i+1}-v_i}{h}-\frac{v_i-v_{i-1}}{h}\right]=$$
$$=\frac{1}{h}\left(v_{x,i}-v_{\bar{x},i}\right)=\frac{1}{h}\left(v_{\bar{x},i+1}-v_{\bar{x},i}\right)=\left(v_{\bar{x}}\right)_{x,i}=v_{\bar{x}x,i}=:v_{\bar{x}x}.$$

Используя введенные обозначения, уравнение (18.42) можно переписать так:

$$L_2^hu^h:=-\left(p^hu_{\bar{x}}^h\right)_{x,i}+q_i^hu_i^h=f_i^h,\quad i=1,2,\ldots,N-1, \tag{18.43}$$

где

$$p^h:=p_i^h:=p\left(x_i-h/2\right),\quad q^h:=q_i^h:=q(x_i),\quad f^h:=f_i^h:=f(x_i). \tag{18.44}$$

18.5 Аппроксимация граничных условий

Применим теперь метод баланса для построения аппроксимации граничного условия, содержащего производную. Пусть для уравнения (18.38) в точке $x=0$ (граничной точке) задано граничное условие

$$\alpha\frac{du}{dx}(0)+\beta u(0)=\gamma. \tag{18.45}$$

Граничное условие (18.45) содержит в себе все основные граничные условия для уравнения (18.38): именно, граничные условия первого рода ($\alpha=0$), второго рода ($\beta=0$) и третьего рода. Нас будут интересовать граничные условия второго и третьего рода, т.е. условия, содержащие производную. Простейшая аппроксимация условия (18.45) имеет вид

$$\alpha\frac{u_1^h-u_0^h}{h}+\beta u_0^h=\gamma. \tag{18.46}$$

Упражнение 18.4. Доказать, что погрешность аппроксимации граничного условия (18.45) граничным условием (18.46) при $\alpha \neq 0$ есть $O(h)$.

Мы не будем заниматься этой аппроксимацией из-за того, что она имеет большую погрешность. Построим другую аппроксимацию условия (18.45), но прежде его несколько преобразуем. По предположению $\alpha \neq 0$, и на этот коэффициент условие (18.45) можно разделить. Коэффициент $p(x)$ уравнения (18.38) будем предполагать строго положительным

$$p(x) \geqslant c_0 > 0, \tag{18.47}$$

и домножение (18.45) на $-p(0)$ приведет к эквивалентному уравнению. Будем вместо (18.45) рассматривать граничное условие

$$-p(0)\frac{du}{dx}(0) + \varkappa_0 u(0) = g_0, \tag{18.48}$$

которое при $\alpha = -p(0) \neq 0$, $\beta = \varkappa_0$ и $\gamma = g_0$ совпадает с (18.45). Комбинация $p(0)u'(0)$ в (18.48) хороша уже тем, что величина $-p(x)u'(x)$ имеет смысл потока и фигурирует в самом уравнении (18.38). Знак минус перед производной должен свидетельствовать о том, что производная берется по "внешней нормали": производная $u'(0)$ вычислена по направлению внутрь отрезка $[0, 1]$, а производная $-u'(0)$ — по направлению, выходящему из отрезка.

Чтобы построить аппроксимацию (18.48), проинтегрируем уравнение (18.38) по отрезку $(0, h/2)$. Будем иметь

$$-p(h/2)\frac{du}{dx}(h/2) + p(0)\frac{du}{dx}(0) + \int\limits_0^{h/2} [q(x)u(x) - f(x)]\, dx = 0. \tag{18.49}$$

Затем выразим $p(0)u'(0)$ из (18.48)

$$p(0)\frac{du}{dx}(0) = \varkappa_0 u(0) - g_0, \tag{18.50}$$

аппроксимируем производную

$$\frac{du}{dx}(h/2) \approx \frac{u_1 - u_0}{h} \tag{18.51}$$

и аппроксимируем интеграл в (18.49) квадратурной формулой "левых прямоугольников"

$$\int\limits_0^{h/2} [q(x)u(x) - f(x)]\, dx \approx [q(0)u(0) - f(0)]\frac{h}{2}. \tag{18.52}$$

Подставляя (18.50)-(18.52) в (18.49), получим приближенное равенство, которое превратим в точное путем замены точного решения $u(x)$ на приближенное $u^h(x)$. В результате будем иметь

$$-p_{1/2}\frac{u_1^h - u_0^h}{h} + \left(\varkappa_0 + \frac{h}{2}q_0\right)u_0^h = g_0 + \frac{h}{2}f_0$$

или, принимая обозначения (18.44),

$$-p_1^h u_{\bar{x},1}^h + (\varkappa_0 + \frac{h}{2}q_0^h)u_0^h = g_0 + \frac{h}{2}f_0^h. \tag{18.53}$$

Соотношение (18.53) представляет собой искомую аппроксимацию.

18.6 Исследование погрешности аппроксимации

Исследуем погрешность аппроксимации разностной схемы (18.43). Исследуем даже более общую схему. Пусть разностная схема имеет вид

$$-\frac{1}{h}\left[b_i u_{x,i}^h - a_i u_{\bar{x},i}^h\right] + q_i^h u_i^h = f_i^h. \tag{18.54}$$

Погрешность аппроксимации этой схемы есть

$$\begin{aligned}\Psi_i &= f_i^h + \frac{1}{h}\left[b_i u_{x,i} - a_i u_{\bar{x},i}\right] - q_i^h u_i = \\ &= [f_i^h - f(x_i)] - [q_i^h - q(x_i)]u_i + \frac{1}{h}\left[b_i u_{x,i} - a_i u_{\bar{x},i}\right] - (pu')'_i.\end{aligned} \tag{18.55}$$

При $u(x) \in C^4[0,1]$ имеют место следующие разложения

$$u_{x,i} = u'_i + \frac{h}{2}u''_i + \frac{h^2}{6}u'''_i + O(h^3),$$
$$u_{\bar{x}.i} = u'_i - \frac{h}{2}u''_i + \frac{h^2}{6}u'''_i + O(h^3).$$

Подставляя эти соотношения в (18.55), будем иметь

$$\begin{aligned}\Psi_i &= \frac{1}{h}\left[b_i(u'_i + \frac{h}{2}u''_i + \frac{h^2}{6}u'''_i + O(h^3)) - a_i(u'_i - \frac{h}{2}u''_i + \frac{h^2}{6}u'''_i + O(h^3))\right] - \\ &- (p'u' + pu'') - [q_i^h - q(x_i)]u_i + [f_i^h - f(x_i)] = \\ &= \left[\frac{b_i - a_i}{h} - p'_i\right]u'_i + \left[\frac{b_i + a_i}{2} - p_i\right]u''_i + h\frac{b_i - a_i}{6}u'''_i + O(h^2) - \\ &- (q_i^h - q_i)u_i + (f_i^h - f_i).\end{aligned}$$

Отсюда находим, что для аппроксимации $O(h^2)$ необходимо и достаточно выполнения условий

$$\begin{aligned}
&1^\circ. \quad \frac{b_i - a_i}{h} - p_i' = O(h^2),\\
&2^\circ. \quad \frac{b_i + a_i}{2} - p_i = O(h^2),\\
&3^\circ. \quad q_i^h - q_i = O(h^2),\\
&4^\circ. \quad f_i^h - f_i = O(h^2).
\end{aligned} \tag{18.56}$$

Для схемы (18.43), (18.44) условия (18.56_3) и (18.56_4) очевидны. Обратимся к (18.56_1) и (18.56_2). Имеем

$$\begin{aligned}
b_i &= p_{i+1/2} = p_i + \frac{h}{2}p_i' + \frac{h^2}{8}p_i'' + O(h^3),\\
a_i &= p_{i-1/2} = p_i - \frac{h}{2}p_i' + \frac{h^2}{8}p_i'' + O(h^3).
\end{aligned}$$

Отсюда

$$\frac{b_i - a_i}{h} = p_i' + O(h^2), \qquad \frac{b_i + a_i}{2} = p_i + O(h^2).$$

Теорема 18.6. *Если решение уравнения* (18.38) *обладает четвертыми непрерывными производными, то разностная схема* (18.43), (18.44) *имеет погрешность аппроксимации* $O(h^2)$.

Упражнение 18.5. Доказать, что разностная схема (18.43) при $b_i = a_{i+1}$ и

$$\text{а)} \quad a_i = \frac{p_i + p_{i-1}}{2}, \quad q_i^h = q_i, \quad f_i^h = f_i, \tag{18.57}$$

$$\begin{aligned}
&\text{б)} \quad a_i = \frac{1}{h}\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} p(x)\,dx, \quad q_i^h = \frac{1}{h}\int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} q(x)(1 - |x - x_i|)\,dx,\\
&f_i^h = \frac{1}{h}\int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)(1 - |x - x_i|)\,dx
\end{aligned} \tag{18.58}$$

имеет погрешность аппроксимации $O(h^2)$.

Исследуем погрешность аппроксимации ψ_0 граничного условия (18.53).

Имеем

$$\psi_0 := g_0 + \frac{h}{2} f_0 + p_{1/2} \frac{u_1 - u_0}{h} - (\varkappa_0 + \frac{h}{2} q_0) u_0 =$$
$$= g_0 + \frac{h}{2} f_0 + \left(p_0 + \frac{h}{2} p_0' + O(h^2) \right) \left(u_0' + \frac{h}{2} u_0'' + O(h^2) \right) - (\varkappa_0 + \frac{h}{2} q_0) u_0 =$$
$$= (p_0 u_0' - \varkappa_0 u_0 + g_0) + \frac{h}{2} (p_0 u_0'' + p_0' u_0' - q_0 u_0 + f_0) + O(h^2).$$

Первая скобка в этом представлении равна нулю в силу (18.48), а вторая — в силу уравнения (18.38), продолженного по непрерывности с $(0,1)$ на $[0,1)$. Тем самым, погрешность аппроксимации граничного условия (18.53) *на решении уравнения* (18.38) есть $O(h^2)$.

Упражнение 18.6. Методом баланса построить аппроксимацию граничного условия

$$p(1) \frac{du}{dx}(1) + \varkappa_1 u(1) = g_1 \tag{18.59}$$

и исследовать погрешность полученной аппроксимации.

Теорема 18.7. *Пусть выполнены условия*

$$p_i^h \geqslant c_0 > 0, \quad q_i^h \geqslant c_1 > 0, \quad \varkappa_0 > 0. \tag{18.60}$$

Тогда существует единственное решение задачи (18.43), (18.53), (18.61)

$$u_N^h = g_1, \tag{18.61}$$

и для него справедлива априорная оценка

$$\max_i |u_i^h| \leqslant \frac{|g_0|}{\varkappa_0} + |g_1| + \max_i \frac{|f_i|}{c_1}. \tag{18.62}$$

Упражнение 18.7. Доказать теорему 18.7.

Теорема 18.8. *Если выполнены условия* (18.60), *и решение задачи* (18.38), (18.48), (18.63) $u(x) \in C^4[0,1]$,

$$u(1) = g_1, \tag{18.63}$$

то решение u^h *задачи* (18.43), (18.44), (18.53), (18.61) *сходится к решению задачи* (18.38), (18.48), (18.63) *со скоростью* $O(h^2)$ *равномерно по* $x_1 \in \omega$, *т.е.*

$$\max_i |u(x_i) - u_i^h| = O(h^2).$$

Упражнение 18.8. Доказать теорему 18.8.

18.7 Уравнения с разрывными коэффициентами

Вновь обратимся к уравнению (18.38), но теперь разрешим коэффициентам этого уравнения и его правой части иметь разрывы первого рода в некотором конечном числе точек интервала (0, 1). Достаточно рассмотреть случай, когда такая точка одна. Пусть это точка $\xi \in (0,\, 1)$ и, например, $p(\xi+0) \neq p(\xi-0)$. Для того, чтобы уравнение (18.38) имело смысл, необходимо, чтобы в точке $x = \xi$ функция $u(x)$ была непрерывна, т.е.

$$u(x+0) = u(x-0).$$

Это условие принято записывать в виде

$$[u]\,\Big|_{x=\xi} = 0, \tag{18.64}$$

где квадратные скобки обозначают скачок функции, т.е.

$$[v]\,\Big|_{x=\xi} := v(\xi+0) - v(\xi-0).$$

Равенство нулю этого скачка как раз и говорит о том, что функция непрерывна в этой точке.

Для того, чтобы можно было выполнить второе дифференцирование в (18.38), необходима не непрерывность производной функции $u(x)$, а непрерывность всего выражения, стоящего под знаком внешней производной, т.е. потока

$$w(x) := -p(x)u'(x).$$

Тем самым, вторым условием должно быть условие

$$[pu']\,\Big|_{x=\xi} = 0. \tag{18.65}$$

Условия (18.64), (18.65) обычно называют условиями сопряжения. Разрывы в коэффициенте $q(x)$ и правой части $f(x)$ никак не влияют на вид условий сопряжения.

Если коэффициенты уравнения (18.38) имеют точки разрыва, то при аппроксимации этого уравнения желательно указанные точки включать в число узловых точек сетки. В противном случае, вообще говоря, погрешность аппроксимации станет слишком большой, и точность разностной схемы уменьшится по сравнению с гладким случаем. Это, правда, почти всегда приводит к неравномерной (кусочно равномерной) сетке, но этой проблемы мы коснемся чуть позже.

Итак, пусть коэффициенты уравнения (18.38) и его правая часть имеют разрыв в точке $\xi \in (0, 1)$. Будем считать, что эта точка включена в число узлов сетки, и пусть, для простоты, сетка осталась равномерной. Так будет, например, если $\xi = 1/2$, а сетка на $[0, 1]$ имеет шаг $h = 1/2N$. Пусть номер узла, отвечающего ξ, есть j. В силу непрерывности искомого решения в это точке (18.64) на сетке значению $u(\xi)$ будет отвечать просто u_j^h. Построим аппроксимацию второго условия сопряжения (18.65). Для этого в очередной раз воспользуемся методом баланса. Проинтегрируем уравнение (18.38) по отрезку $[\xi - h/2, \xi + h/2]$

$$-\int_{\xi-h/2}^{\xi+h/2} (pu')'dx = \int_{\xi-h/2}^{\xi+h/2} [f(x) - q(x)u(x)]dx.$$

Теперь вычисление левого интеграла следует проводить более осторожно: вычислять его как сумму двух интегралов по $[\xi - h/2, \xi]$ и по $[\xi, \xi + h/2]$. Будем иметь

$$\begin{aligned} &-p\left(\xi + \frac{h}{2}\right)u'\left(\xi + \frac{h}{2}\right) + p(\xi+0)u'(\xi+0) - p(\xi-0)u'(\xi-0) + \\ &+ p\left(\xi - \frac{h}{2}\right)u'\left(\xi - \frac{h}{2}\right) = \int_{\xi-h/2}^{\xi+h/2} [f(x) - q(x)u(x)]dx. \end{aligned} \tag{18.66}$$

В силу (18.65) второе и третье слагаемые левой части взаимно уничтожаются, и мы получаем в точности то же самое соотношение (18.40), что и в гладком случае. Мы несколько перестраховались, но это лучше, чем совершить ошибку. Дальнейшие наши действия напоминают действия в п. 18.4. Есть, правда, и отличия: заменять интеграл в правой части (18.66) квадратурной формулой прямоугольников, вообще говоря, нельзя, ибо в точке ξ функции $f(x)$ и $q(x)$ могут иметь разрывы. Эту трудность легко преодолеть, если в точке $x = \xi$ положить

$$f(x) = [f(\xi+0) + f(\xi-0)]/2, \quad q(x) = [q(\xi+0) + q(\xi-0)]/2$$

и формально воспользоваться формулой прямоугольников. Разумеется, аппроксимация получится хуже из-за меньшей гладкости подынтегральной функции.

Итак, аппроксимация условий сопряжения принимает вид

$$-p_{j+1}^h u_{x,j}^h + p_j^h u_{\bar{x},j}^h = h\left(q_j^h u_j^h - f_j^h\right), \tag{18.67}$$

где, например,

$$q_j^h = \frac{q(\xi+0) + q(\xi-0)}{2}, \quad f_j^h = \frac{f(\xi+0) + f(\xi-0)}{2}. \tag{18.68}$$

Поделив это соотношение на h, получим формальную аппроксимацию уравнения (18.38) в точке разрыва коэффициентов

$$-\left(p^h u^h_{\bar{x}}\right)_{x,j} + q^h_j u^h_j = f^h_j. \tag{18.69}$$

Исследуем погрешность аппроксимации этого уравнения. Для простоты будем предполагать, что $p(x)$ есть кусочно-постоянная функция

$$p(x) = \begin{cases} p_1, & 0 < x < \xi, \\ p_2, & \xi < x < 1. \end{cases} \tag{18.70}$$

Принимая во внимание (18.68), (18.70), будем иметь

$$\Psi_j = \frac{f(\xi+0)+f(\xi-0)}{2} + \frac{1}{h}\left[p_2 u_{x,j} - p_1 u_{\bar{x},j}\right] - \frac{q(\xi+0)+q(\xi-0)}{2} u(\xi) =$$

$$= \frac{f(\xi+0) - q(\xi+0)u(\xi) + f(\xi-0) - q(\xi-0)u(\xi)}{2} +$$
$$+ \frac{1}{h}\left\{p_2\left[u'(\xi+0) + \frac{h}{2}u''(\xi+0) + \frac{h^2}{6}u'''(\xi+0)\right] -\right.$$
$$\left. - p_1\left[u'(\xi-0) - \frac{h}{2}u''(\xi-0) + \frac{h^2}{6}u'''(\xi-0)\right] + O(h^3)\right\}.$$

Члены с $O(h^{-1})$ взаимно уничтожаются в силу условия сопряжения (18.65), а члены $O(1)$ — в силу условия сопряжения (18.64) и уравнения (18.38) слева и справа от точки разрыва ξ. Тем самым,

$$\Psi_j = \frac{h}{6}[pu''']_{x=\xi} + O(h^2).$$

Так как, вообще говоря, $[pu''']_{x=\xi} \neq 0$, то

$$\Psi_j = O(h). \tag{18.71}$$

Замечание 18.4. Вовсе не было большой необходимости рассматривать уравнение (18.69) как аппроксимацию (18.38) в точке разрыва (с погрешностью $O(h)$). Достаточно было бы рассматривать эквивалентное соотношение (18.67) как аппроксимацию условия сопряжения (18.65) (с погрешностью $O(h^2)$). Правда, при этом нам пришлось бы строить соответствующую априорную оценку решения новой сеточной задачи, включающей в свою формулировку условие (18.67). В трактовке (18.69) как аппроксимации уравнения (18.38) новую теорию строить не надо.

Исследуем влияние увеличения погрешности аппроксимации уравнения в одном узле до $O(h)$ (см. (18.71)). Представим погрешность аппроксимации Ψ_i, например, задачи (18.43), (18.9) в виде

$$\Psi_i = \overset{\circ}{\Psi}_i + \widetilde{\Psi}_i,$$

где

$$\overset{\circ}{\Psi}_i = \begin{cases} \Psi_i, & i \neq j, \\ 0, & i = j, \end{cases} \quad \widetilde{\Psi}_i = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ \Psi_j, & i = j. \end{cases}$$

В силу линейности задачи погрешность решения z_i примет вид

$$z_i = \overset{\circ}{z}_i + \widetilde{z}_i,$$

где

$$L_2^h \overset{\circ}{z}_i = \overset{\circ}{\Psi}_i, \quad L_2^h \widetilde{z}_i = \widetilde{\Psi}_i.$$

В силу теоремы 18.8 справедливо равенство $\overset{\circ}{z}_i = O(h^2)$, ибо $\overset{\circ}{\Psi}_i = O(h^2)$. С $\widetilde{z}_i$ нужно разбираться отдельно. Для этого воспользуемся принципом сравнения (теорема 18.4). Снова для простоты предположим, что коэффициент $p(x)$ кусочно постоянный (18.70). Возьмем в качестве барьера кусочно линейную, непрерывную функцию

$$U_i = \begin{cases} Ax_i, & x_i \leqslant x_j = \xi, \\ A\xi, & x_i > \xi \end{cases} \tag{18.72}$$

Поскольку

$$L_2^h U_i = \begin{cases} -p_1 U_{\bar{x}x,i} + q_i U_i, & i < j, \\ -\dfrac{1}{h}\left(p_2 U_{x,j} - p_1 U_{\bar{x},j}\right) + q_j^h U_j, & i = j, \\ -p_2 U_{\bar{x}x,i} + q_i U_i, & i > j, \end{cases}$$

то

$$L_2^h U_i = \begin{cases} q_i U_i, & i \neq j, \\ \dfrac{Ap_1}{h} + q_j^h A\xi, & i = j. \end{cases}$$

Если $|\Psi_j| \leqslant c\,h$, то, положив $A = c\,h^2/p_1$, находим, что

$$L_2^h U_i =: F_i \geqslant |\widetilde{\Psi}_i|$$

и, следовательно,

$$|\widetilde{z}_i| = O(h^2).$$

Тем самым, показано, что, несмотря на то, что погрешность аппроксимации в одной точке (в нескольких точках, число которых не зависит от N) есть $O(h)$, погрешность решения $z_i = \overset{\circ}{z}_i + \widetilde{z}_i$ остается величиной $O(h^2)$ (как в гладком случае).

Замечание 18.5. Такая же ситуация с погрешностью аппроксимации возникает даже в том случае, когда коэффициенты уравнения непрерывны, однако сетка является кусочно-равномерной.

Замечание 18.6. Если бы коэффициент $p(x)$ в уравнении (18.38) оставался переменным (а не кусочно-постоянным), то в качестве барьера нужно было бы брать несколько более сложную функцию.

Упражнение 18.9. Построить барьер, когда p_i^h не есть кусочно-постоянная функция.

18.8 Неравномерная сетка

При рассмотрении уравнения с разрывными коэффициентами мы столкнулись с тем обстоятельством, что для приемлемой аппроксимации дифференциального уравнения желательно использовать сетку, которая не является равномерной. Для этих целей достаточно использовать кусочно-равномерную сетку, но мы сейчас исследуем более общий случай, когда различными могут быть все шаги. Пусть

$$\widehat{\omega} = \left\{ x_i \;\middle|\; x_0 = 0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1 \right\} \tag{18.73}$$

— произвольная *неравномерная сетка* на $[0,1]$. Будем обозначать

$$h_i = x_i - x_{i-1}, \qquad \hbar_i = \frac{h_i + h_{i+1}}{2}.$$

На сетке (18.73) для уравнения (18.38) методом баланса получим следующую аппроксимацию

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{\hbar_i}\left[p\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{2}\right)\frac{u_{i+1}^h - u_i^h}{h_{i+1}} - p\left(x_i - \frac{h_i}{2}\right)\frac{u_i^h - u_{i-1}^h}{h_i}\right] + \\ &+ q(x_i)u_i^h = f(x_i), \qquad\qquad i = 1, \dots, N-1. \end{aligned} \tag{18.74}$$

Введем новое обозначение

$$(w_{i+1} - w_i)/\hbar_i =: w_{\hat{x},i}.$$

С учетом этого обозначения уравнения (18.74) переписываются в виде

$$-\left(p^h u^h_{\bar{x}}\right)_{\hat{x},i} + q^h_i u^h_i = f^h_i.$$

Если сетка (18.73) является произвольной, аппроксимация (18.74) имеет погрешность только $O(h)$, где $h = \max h_i$. Покажем это.

Снова для простоты будем предполагать, что $p(x) \equiv 1$. Тогда погрешность аппроксимации примет вид

$$\begin{aligned}
\Psi_i &= f_i - q_i u(x_i) + \frac{1}{\hbar_i}\left[\frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h_{i+1}} - \frac{u(x_i) - u(x_{i-1})}{h_i}\right] = \\
&= f_i - q_i u_i + \frac{2}{h_i + h_{i+1}}\left[u'_i + \frac{h_{i+1}}{2}u''_i + \frac{h^2_{i+1}}{6}u'''_i + \frac{h^3_{i+1}}{24}u^{\mathrm{IV}}(\xi_i) - \right. \\
&\left. - \left(u'_i - \frac{h_i}{2}u''_i + \frac{h^2_i}{6}u'''_i - \frac{h^3_i}{24}u^{\mathrm{IV}}(\eta_i)\right)\right] = \\
&= (f - qu + u'')_i + \frac{h^2_{i+1} - h^2_i}{3(h_{i+1} + h_i)}u'''_i + \frac{h^3_{i+1}u^{\mathrm{IV}}(\xi_i) + h^3_i u^{\mathrm{IV}}(\eta_i)}{12(h_{i+1} + h_i)} = \\
&= \frac{h_{i+1} - h_i}{3}u'''_i + \frac{h^2_i + h^2_{i+1} - h_i h_{i+1}}{12}u^{\mathrm{IV}}(\zeta_i).
\end{aligned} \tag{18.75}$$

Если

$$h_{i+1} - h_i = O(h^2_i),$$

то сетка называется квазиравномерной, и в этом случае

$$\Psi_i = O(h^2).$$

Если же

$$h_{i+1} - h_i \neq O(h^2_i),$$

то

$$\Psi_i = O(h).$$

Замечание 18.7. *Квазиравномерные сетки* образуются, например, в результате следующих построений. Пусть $\varphi(t) \in C^2[0,\,1]$, причем $\varphi' > 0$ на $[0,\,1]$ и $\varphi(0) = 0$, $\varphi(1) = 1$. Тогда $x = \varphi(t)$ есть взаимно однозначное отображение отрезка $[0,\,1]$ на себя. Введем на $[0,\,1]$ равномерную с шагом $\tau = 1/N$ сетку узлов $t = i/N$. Этой сетке будет соответствовать неравномерная сетка с узлами $x_i = \varphi(t_i)$. Сетка x_i будет квазиравномерной, ибо

$$\begin{aligned}
h_{i+1} - h_i &= (x_{i+1} - x_i) - (x_i - x_{i-1}) = \varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1} = \\
&= \int_{t_{i-1}}^{t_{i+1}} (\tau - |t - t_i|)\varphi''(t)dt = N^{-2}\varphi''(\tilde{t}_i), \quad \tilde{t}_i \in (t_{i-1}, t_{i+1}).
\end{aligned}$$

Какова же точность разностной схемы (18.74) на неравномерной сетке? Если сетка квазиравномерная, то так же, как в теореме 18.2 или 18.8 с использованием соответствующей априорной оценки (см., например, теорему 18.1 или теорему 18.7) доказывается, что точность разностной схемы (18.74) (при соответствующей гладкости решения) будет $O(h^2)$. Если же сетка (18.73) квазиравномерной не является, то дело с ответом на поставленный вопрос обстоит несколько сложнее. Разумеется, сходимость со скоростью $O(h)$ здесь имеет место, и доказывается это уже известным нам способом, но это не вся правда. Более тщательный анализ показывает, что и в этом случае сходимость будет $O(h^2)$. Чтобы убедиться в этом, нужно несколько преобразовать погрешность аппроксимации (18.75) и вывести новую априорную оценку. Легко видеть, что прием, использованный при оценке скорости сходимости в случае разрывных коэффициентов, здесь не проходит, ибо погрешность аппроксимации имеет только первый порядок малости в слишком большом числе узлов.

Преобразуем первое слагаемое погрешности аппроксимации (18.75). Имеем

$$\frac{h_{i+1}-h_i}{3}u_i''' = \frac{h_{i+1}^2-h_i^2}{6\hbar_i}u_i''' = \frac{1}{6}h_{\hat{x},i}^2 u_i'''.$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned}\left(h^2u'''\right)_{\hat{x},i} &= \frac{h_{i+1}^2u_{i+1}''' - h_i^2u_i''' + h_{i+1}^2u_i''' - h_{i+1}^2u_i'''}{\hbar_i} = \\ &= h_{\hat{x},i}^2u_i''' + \frac{h_{i+1}^2}{\hbar_i}(u_{i+1}''' - u_i''') = h_{\hat{x},i}^2u_i''' + \frac{h_{i+1}^3}{\hbar_i}\tilde{u}_i^{\mathrm{IV}}.\end{aligned}$$

Поэтому

$$\frac{h_{i+1}-h_i}{3}u_i''' = \frac{1}{6}\left(h^2u'''\right)_{\hat{x},i} - \frac{h_{i+1}^3}{\hbar_i}\tilde{u}_i^{\mathrm{IV}}.$$

Используя это представление в (18.75), будем иметь

$$\Psi_i = \overset{\circ}{\psi}_{\hat{x},i} + \widetilde{\psi}_i, \tag{18.76}$$

где

$$\overset{\circ}{\psi}_i = \frac{h^2u_i'''}{6} = O(h^2), \tag{18.77}$$

$$\widetilde{\psi}_i = \frac{h_i^2+h_{i+1}^2-h_ih_{i+1}}{12}u_i^{\mathrm{IV}}(\zeta_i) - \frac{h_{i+1}^3}{\hbar_i}\tilde{u}_i^{\mathrm{IV}} = O(h^2). \tag{18.78}$$

Итак, на произвольной неравномерной сетке (18.73) погрешность аппроксимации (18.75) представляет собой сумму двух сеточных функций, одна из которых $O(h^2)$, а другая является разностным отношением функции $O(h^2)$.

18.9 Априорные оценки и оценка точности

Теперь по поводу априорной оценки. Чтобы не погрязнуть в технических вопросах, нужную априорную оценку мы получим не для решения сеточной задачи, а для решения задачи дифференциальной. Для сеточной задачи все делается точно так же, но с бóльшими техническими трудностями.

Рассмотрим простейшую задачу

$$-u''(x) = f(x), \quad 0 < x < 1, \quad u(0) = u(1) = 0. \tag{18.79}$$

Для этой задачи имеет место принцип сравнения (см. теорему 18.4). Используя барьерную функцию

$$U(x) = x(1-x)\,\frac{1}{2}\max_{0<x<1}|f(x)|,$$

найдем, что

$$|u(x)| \leqslant U(x) \leqslant \max_{0<x<1}|f(x)|,$$

или

$$\|u\|_{L_\infty} \leqslant \frac{1}{8}\|f\|_{L_\infty}. \tag{18.80}$$

Эта априорная оценка аналогична оценке из теоремы 18.5.

Построим функцию Грина задачи (18.79). Для этого найдем сначала частное решение уравнения (18.79). Интегрируя уравнение (18.79) дважды, будем иметь

$$\overline{u}(x) = -\int_0^x d\xi \int_0^\xi f(\eta)d\eta.$$

Общее решение этого уравнения очевидно есть

$$u(x) = c_1 x + c_2(1-x) - \int_0^x d\xi \int_0^\xi f(\eta)d\eta.$$

Выбирая постоянные c_1 и c_2 так, чтобы выполнялись граничные условия (18.79), найдем решение задачи (18.79)

$$u(x) = x\int_0^1 d\xi \int_0^\xi f(\eta)d\eta - \int_0^x d\xi \int_0^\xi f(\eta)d\eta.$$

Преобразуем двойные интегралы к одинарным. Интегрируя по частям, будем иметь

$$u(x) = x\int_0^1 (1-\xi)f(\xi)d\xi - \int_0^x (x-\xi)f(\xi)d\xi.$$

Разбивая первый из интегралов на сумму интегралов по $(0,\, x)$ и $(x,\, 1)$, окончательно найдем, что

$$u(x) = \int_0^x [x(1-\xi)-(x-\xi)]f(\xi)d\xi + \int_x^1 x(1-\xi)f(\xi)d\xi.$$

Пусть

$$G(x,\xi) = \begin{cases} x(1-\xi), & x<\xi, \\ \xi(1-x), & x>\xi. \end{cases} \tag{18.81}$$

Тогда

$$u(x) = \int_0^1 G(x,\xi)f(\xi)d\xi, \tag{18.82}$$

т.е. (18.81) есть *функция Грина* задачи (18.79).

Воспользуемся представлением (18.82) для получения априорных оценок решения задачи (18.79). Из (18.82) вытекает, что

$$\|u\|_{L_\infty} \leqslant \max_{0\leqslant x,\xi\leqslant 1} \left|G(x,\xi)\right| \|f\|_{L_\infty}.$$

Поскольку

$$0 \leqslant G(x,\xi) \leqslant G(x,x) = x(1-x) \leqslant 1/4,$$

то

$$\|u\|_{L_\infty} \leqslant \frac{1}{4}\|f\|_{L_\infty}.$$

Эта оценка (по коэффициенту) несколько слабее оценки (18.80), однако и оценка (18.80) может быть получена из (18.82). Именно

$$\|u\|_{L_\infty} \leqslant \|f\|_{L_\infty} \max_{0<x<1} \int_0^1 G(x,\xi)d\xi.$$

Но

$$\int_0^1 G(x,\xi)d\xi = \frac{x(1-x)}{2} \leqslant \frac{1}{8},$$

Откуда и вытекает оценка (18.80).

Но не ради этого мы обратились к функции Грина и представлению решения в виде (18.82). Из (18.82) вытекает, например, такая новая оценка

$$\|u\|_{L_\infty} \leqslant \max_{0<x,\xi<1} G(x,\xi)\,\|f\|_{L_1} \leqslant \frac{1}{4}\,\|f\|_{L_1}. \tag{18.83}$$

В этой оценке для решения и правой части уравнения задействованы разные нормы, причем для решения использована более сильная норма, чем для правой части. Сеточный аналог этой оценки позволяет выявить правильную оценку скорости сходимости разностной схемы в рассмотренном ранее случае разрывных коэффициентов без построения специального барьера, как мы это делали в п. 18.7.

Но это еще не все. Преобразуем (18.82) интегрированием по частям

$$u(x) = -\int_0^1 G(x,\xi) d\left[\int_\xi^1 f(\eta)d\eta - C\right] = \int_0^1 \frac{\partial G}{\partial \xi}(x,\xi)\left[\int_\xi^1 f(\eta)d\eta - C\right] d\xi.$$

Отсюда находим, что

$$\|u\|_{L_\infty} \leqslant \min_C \max_{0<\xi<1}\left|\int_\xi^1 f(\eta)d\eta - C\right| \max_{0<x<1}\int_0^1 \left|\frac{\partial G}{\partial \xi}(x,\xi)\right| d\xi$$

Поскольку

$$\frac{\partial G}{\partial \xi} = \begin{cases} -x, & x<\xi \\ 1-x, & x>\xi, \end{cases}$$

то

$$\int_0^1 \left|\frac{\partial G}{\partial \xi}(x,\xi)\right| d\xi = 2x(1-x) \leqslant 1/2$$

и, следовательно,

$$\|u\|_{L_\infty} \leqslant \frac{1}{2}\min_C \max_{0<\xi<1}\left|\int_\xi^1 f(\eta)d\eta - C\right| =: \frac{1}{2}\,\|f\|_{W_\infty^{-1}}. \tag{18.84}$$

Ради этой оценки мы и ввели в рассмотрение функцию Грина.

Пусть

$$f(x) = \overset{\circ}{f}{}'(x) + \widetilde{f}(x).$$

Тогда и решение задачи (18.79) можно представить в виде

$$u(x) = \overset{\circ}{u}(x) + \widetilde{u}(x).$$

где $\overset{\circ}{u}(x)$ удовлетворяет уравнению (18.79) с правой частью $\overset{\circ}{f}{}'(x)$, а $\widetilde{u}(x)$ — с правой частью $\widetilde{f}(x)$. Для оценки $\overset{\circ}{u}(x)$ воспользуемся соотношением

(18.84), положив $C = \overset{\circ}{f}(1)$, а для оценки $\widetilde{u}(x)$ — соотношением (18.80). В результате получим

$$\|u\|_{L_\infty} \leqslant \|\overset{\circ}{u}\|_{L_\infty} + \|\widetilde{u}\|_{L_\infty} \leqslant \frac{1}{2}\,\|\overset{\circ}{f}\|_{L_\infty} + \frac{1}{8}\,\|\widetilde{f}\|_{L_\infty}. \tag{18.85}$$

Если, например,

$$f(x) = k\pi\,\cos k\pi x + 1, \quad k \gg 1,$$

то, в силу оценки (18.80)

$$\|u\|_{L_\infty} = O(k),$$

а, полагая

$$\overset{\circ}{f}(x) = \sin k\pi x$$

и используя оценку (18.80), найдем, что

$$\|u\|_{L_\infty} = O(1).$$

Замечание 18.8. В общем случае уравнения (18.38) с переменными коэффициентами функция Грина в явном виде не выписывается, однако ограничена и имеет ограниченные производные как по x, так и по ξ. Так что оценка (18.84) имеет место и в общем случае.

Применим полученные результаты к анализу скорости сходимости разностных схем на неравномерной сетке. Пусть (18.74) есть аппроксимация уравнения (18.79), т.е.

$$-u^h_{\bar{x}\hat{x},i} = f_i, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1, \quad u^h_0 = u^h_N = 0.$$

Легко проверить, что функция Грина этой задачи имеет вид

$$G^h(x_i, \xi_j) = \begin{cases} x_i(1-\xi_j), & x_i \leqslant \xi_j, \\ \xi_j(1-x_i), & x_i \geqslant \xi_j, \end{cases} \quad x_i, \xi_j \in \widehat{\omega},$$

а для ее решения справедливо представление

$$u^h(x_i) = \sum_{j=1}^{N-1} G^h(x_i, \xi_j) f(\xi_j) \hbar_j, \tag{18.86}$$

Поскольку

$$-\left(\sum_{l=j}^{N-1} f_l \hbar_l\right)_{\hat{x},j} = f_j = f(\xi_j),$$

а при $v_0 = 0$

$$\sum_{j=1}^{N-1} v_j w_{\hat{x},j} \hbar_j = v_1(w_2 - w_1) + v_2(w_3 - w_2) + \dots + v_{N-1}(w_N - w_{N-1}) =$$

$$= -w_1 v_1 - w_2(v_2 - v_1) - \dots - w_N(v_N - v_{N-1}) = -\sum_{j=1}^{N} v_{\bar{\xi},j} w_j h_j,$$

то представлению (18.86) можно придать вид

$$u^h(x_i) = \sum_{i=1}^{N} G_{\bar{\xi}}^h(x_i, \xi_j) \left(\sum_{l=j}^{N-1} f_l \hbar_l - C \right) h_j,$$

откуда и вытекает аналогичная (18.84) оценка

$$\|u^h\|_{L_\infty^h} \leqslant \frac{1}{2} \min_C \max_j \left| \sum_{l=j}^{N-1} f_l \hbar_l - C \right|.$$

Если

$$f_j = \overset{\circ}{f}_{\hat{\xi}_j} + \widetilde{f}_j, \tag{18.87}$$

то, как и в континуальном случае, находим, что

$$\|u^h\|_{L_\infty^h} \leqslant \frac{1}{2} \|\overset{\circ}{f}\|_{L_\infty^h} + \frac{1}{8} \|\widetilde{f}\|_{L_\infty^h}. \tag{18.88}$$

Представление погрешности аппроксимации на неравномерной сетке (18.76) полностью совпадает с представлением правой части (18.87). Поэтому для погрешности решения $z_i = u_i^h - u(x_i)$ справедлива оценка

$$\|z^h\|_{L_\infty^h} \leqslant \frac{1}{2} \|\overset{\circ}{\psi}\|_{L_\infty^h} + \frac{1}{8} \|\widetilde{\psi}\|_{L_\infty^h},$$

вытекающая из (18.88). Если теперь принять во внимание соотношения (18.77), (18.78), то получим следующую оценку погрешности решения

$$\|z^h\|_{L_\infty^h} = O(h^2).$$

Итак, погрешность решения разностной схемы на неравномерной сетке, удовлетворяющей условию $h_i \leqslant h$, есть $O(h^2)$.

18.10 Аппроксимация производной

Укажем еще на одну полезную оценку, которая следует из представления (18.82). Дифференцируя $u(x)$ из (18.82) и оценивая производную функции Грина, найдем, что

$$\|u'\|_{L_\infty} \leqslant \frac{1}{2}\,\|f\|_{L_\infty}.$$

Аналогичная оценка для сеточной задачи имеет вид

$$\|u^h_{\bar{x}}\|_{L^h_\infty} \leqslant \frac{1}{2}\,\|f^h\|_{L^h_\infty}. \tag{18.89}$$

Воспользуемся этой оценкой для анализа точности приближения первой производной решения дифференциальной задачи разностным отношением приближенного решения, вычисленного на равномерной сетке. В силу (18.89) для погрешности решения справедлива оценка

$$\|z_{\bar{x}}\|_{L^h_\infty} \leqslant \frac{1}{2}\,\|\Psi\|_{L^h_\infty}.$$

а, поскольку сетка предполагается равномерной, то $\Psi = O(h^2)$ и, следовательно,

$$z_{\bar{x},i} = O(h^2). \tag{18.90}$$

Будем аппроксимировать производную решения задачи (18.79) при помощи двух соседних значений приближенного решения u^h_i и u^h_{i-1}. Именно, в качестве аппроксимирующего значения возьмем $u^h_{\bar{x},i}$. По определению, $u^h_i = u(x_i) + z_i$ и, следовательно

$$u^h_{\bar{x},i} = u_{\bar{x},i} + z_{\bar{x},i}.$$

Поскольку

$$u_{\bar{x},i} = u'(x_{i-1/2}) + O(h^2),$$

то, с учетом (18.90),

$$u^h_{\bar{x},i} - u'(x_{i-1/2}) = O(h^2),$$

т.е. точности в определении и решения и производной имеют один и тот же порядок малости, что в корне отличается от ситуации, описанной в § 15. В данном случае о погрешности приближенного решения у нас больше информации, чем было раньше.

Упражнение 18.10. Выяснить, какую точность при приближении производной дает в рассматриваемом случае формула $(u^h_{i+1} - u^h_{i-1})/2h$.

Упражнение 18.11. Что можно сказать о точности $u^h_{\bar{x}x,i}$?

18.11 Уравнение конвекции-диффузии

Добавим к уравнению (18.38) еще один член — первую производную искомого решения, умноженную на некоторый коэффициент

$$-(pu')' - r(x)u' + q(x)u = f. \tag{18.91}$$

Как аппроксимировать первый и последний члены левой части (18.91), мы знаем. Осталось построить аппроксимацию второго члена. С точки зрения наилучшего порядка аппроксимации следует положить

$$u'_i \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} =: u_{\overset{\circ}{x}}. \tag{18.92}$$

Тогда аппроксимация уравнения (18.91) примет вид

$$-\left(p_{i-1/2}u^h_{\bar{x}}\right)_{x,i} - r_i u^h_{\overset{\circ}{x},i} + q_i u^h_i = f_i, \quad i = 1, \ldots, N-1. \tag{18.93}$$

Теорема 18.9. *Если $u \in C^4[0,1]$, то погрешность аппроксимации разностной схемы* (18.93) $\Psi = O(h^2)$.

Дополним уравнение (18.91) граничными условиями. Пусть, например,

$$u(0) = g_0, \qquad u(1) = g_1. \tag{18.94}$$

Тогда разностные уравнения (18.93) нужно дополнить граничными условиями

$$u^h_0 = g_0, \qquad u^h_N = g_1. \tag{18.95}$$

Имеет место

Теорема 18.10. *Если коэффициенты уравнения* (18.91) *удовлетворяют условиям* (18.23), (18.47), *а сетка такова, что*

$$\max_i \frac{|r(x_i)|h}{2c_0} \leqslant 1, \tag{18.96}$$

то задача (18.93), (18.95) *имеет единственное решение, и для него справедлива априорная оценка*

$$\max_i |u^h_i| \leqslant |g_0| + |g_1| + \max_i \frac{|f_i|}{c_1}. \tag{18.97}$$

Доказательство. Представим

$$u^h_{\overset{\circ}{x}} = \frac{u^h_{i+1} - u^h_{i-1}}{2h} = \frac{u^h_{i+1} - u^h_i + u^h_i - u^h_{i-1}}{2h} = \frac{1}{2}u_x + \frac{1}{2}u_{\bar{x}}.$$

Подставим это представление в (18.93)

$$-\frac{1}{h}\left(p_{i+1/2}u^h_{x,i} - p_{i-1/2}u^h_{\bar{x},i}\right) - \frac{r_i}{2}\left(u^h_{x,i} + u^h_{\bar{x},i}\right) + q_i u^h_i = f_i.$$

Отсюда

$$-\left(\frac{p_{i+1/2}}{h} + \frac{r_i}{2}\right)\frac{u^h_{i+1} - u^h_i}{h} + \left(\frac{p_{i-1/2}}{h} - \frac{r_i}{2}\right)\frac{u^h_i - u^h_{i-1}}{h} + q_i u^h_i = f_i.$$

При выполнении условий (18.96) выражения в скобках неотрицательные. Этого замечания достаточно для того, чтобы завершить доказательство этой теоремы, используя те же самые рассуждения, что и при доказательстве теорем 18.7 и 18.1.

Упражнение 18.12. Завершить доказательство теоремы 18.10.

Упражнение 18.13. Сформулировать и доказать теорему о сходимости разностной задачи (18.93), (18.95).

19

Сингулярно возмущенные уравнения

19.1 Осцилляции решения и сингулярно возмущенные уравнения

При исследовании разрешимости и сходимости разностной схемы (18.93) для уравнения конвекции-диффузии (18.91) мы ввели ограничение (18.96) на шаг сетки. Это ограничение в ряде случаев оказывается излишне обременительным, и тогда от аппроксимации (18.92) первой производной приходится отказываться. Обсудим этот вопрос на примере простейшего однородного уравнения с постоянными коэффициентами

$$\frac{d^2u}{dx^2} + r\frac{du}{dx} = 0, \qquad r = \text{const}. \tag{19.1}$$

Наряду с аппроксимацией (18.92) производной u' рассмотрим также ее аппроксимации односторонними разностными отношениями u_x и $u_{\bar{x}}$. Разумеется, порядок погрешности аппроксимации в этих случаях будет ниже. Будем рассматривать одновременно все три из указанных аппроксимаций u'. Для этого в разностное уравнение введем параметр σ

$$u^h_{\bar{x}x} + r\left[\sigma u^h_x + (1-\sigma)u^h_{\bar{x}}\right] = 0. \tag{19.2}$$

При $\sigma = 1/2$ имеем центральное разностное отношение $u_{\overset{\circ}{x}} = (u_x + u_{\bar{x}})/2$, при $\sigma = 1$ — правое разностное отношение u_x, а при $\sigma = 0$ — левое разностное отношение $u_{\bar{x}}$. Перепишем (19.2) в поточечном виде

$$\left(\frac{1}{h^2} + \frac{\sigma r}{h}\right)u^h_{i+1} - \left(\frac{2}{h^2} + \frac{(2\sigma-1)r}{h}\right)u^h_i + \left(\frac{1}{h^2} + \frac{(\sigma-1)r}{h}\right)u^h_{i-1} = 0.$$

Это есть разностное уравнение с постоянными коэффициентами. Его характеристическое уравнение имеет вид

$$\left(\frac{1}{h}+\sigma r\right)q^2-\left(\frac{2}{h}+(2\sigma-1)r\right)q+\left(\frac{1}{h}+(\sigma-1)r\right)=0. \tag{19.3}$$

Поскольку сумма коэффициентов уравнения (19.3) равна нулю, то среди его корней есть корень $q_1=1$. Второй корень

$$q_2=q=\frac{1+(\sigma-1)rh}{1+\sigma rh}. \tag{19.4}$$

Проведем качественное сравнение решений дифференциального уравнения (19.1) и разностного уравнения (19.2). Для этого предположим, что

$$r>0 \tag{19.5}$$

и поставим задачу для (19.1) на положительной полуоси Ox

$$u(0)=1, \qquad u(\infty)=0. \tag{19.6}$$

Очевидно, что решение задачи (19.1), (19.5), (19.6) имеет вид

$$u(x)=e^{-rx}. \tag{19.7}$$

Функция (19.7) положительна и монотонно убывает при $x\to\infty$.

Будем искать решение разностного уравнения (19.2), удовлетворяющее условиям

$$u_0^h=1, \qquad \lim_{i\to\infty}u_i^h=0. \tag{19.8}$$

Общее решение уравнения (19.2) в силу вышесказанного есть

$$u_i^h=c_1+c_2q^i. \tag{19.9}$$

Для того, чтобы это решение на бесконечности было хотя бы ограниченным, нужно потребовать, чтобы (см. (19.4))

$$|q|\leqslant 1, \quad \text{т.е.} \quad -1\leqslant\frac{1+(\sigma-1)rh}{1+\sigma rh}\leqslant 1. \tag{19.10}$$

Пусть $\sigma\geqslant 0$. Тогда знаменатель в (19.10) положителен, правая часть неравенства имеет место всегда, и поэтому остается только ограничение

$$-1-\sigma rh\leqslant 1+(\sigma-1)rh,$$

т.е.

$$2 + (2\sigma - 1)rh \geqslant 0.$$

Если $\sigma = 1$ или $\sigma = 1/2$, то это условие выполнено со знаком строгого неравенства, и решение задачи (19.2), (19.8) при этих значениях σ имеет вид

$$u_i^h = q^i, \qquad i \in \mathbb{N}. \tag{19.11}$$

Наложим более сильное условие на сеточное решение. Потребуем, чтобы оно было монотонным как и решение (19.7) дифференциальной задачи. Решение (19.11) будет монотонным тогда и только тогда, когда $q \geqslant 0$, т.е если

$$1 + (\sigma - 1)rh \geqslant 0. \tag{19.12}$$

При $\sigma = 1$ это условие выполнено, а при $\sigma = 1/2$ требуется, чтобы

$$rh \leqslant 2 \tag{19.13}$$

(сравнить с (18.96)).

Итак, если $\sigma = 1$, погрешность аппроксимации уравнения (19.2) есть $O(h)$, но решение (19.11) задачи (19.2), (19.8) монотонно при любых h. Если $\sigma = 1/2$, то погрешность аппроксимации есть $O(h^2)$, но решение (19.11) монотонно только при выполнении условия (19.13). В противном случае решение (19.11) будет колебаться (см. рис. 1), меняя знак при переходе от одного узла к другому.

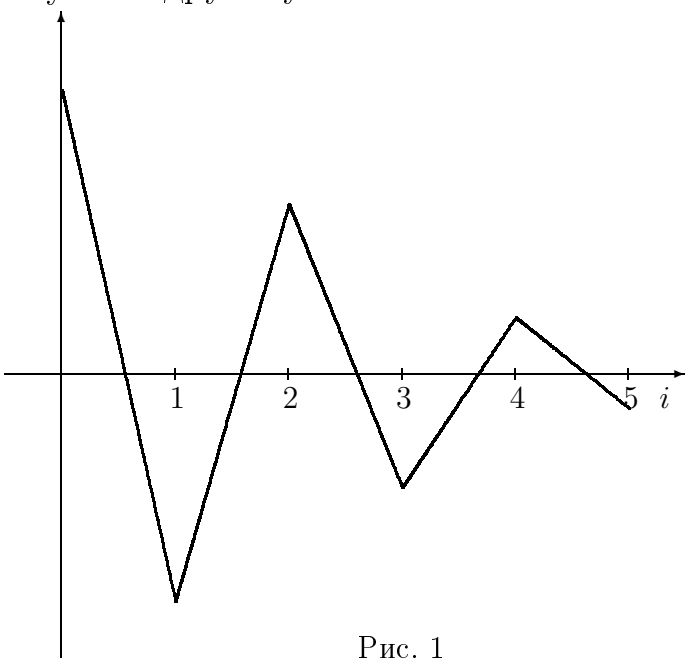


Рис. 1

Именно эти осцилляции решения разностной схемы (19.2) при $\sigma = 1/2$ и не любят прикладники.

Замечание 19.1. Проведенный анализ показал принципиальное различие между схемами (19.2) при $\sigma = 1$ и при $\sigma = 0$, хотя обе эти схемы имеют погрешность $O(h)$ и в этом смысле близки. Причина различия состоит в знаке коэффициента r. Если бы он был отрицательным, то схемы с $\sigma = 1$ и $\sigma = 0$ поменялись бы ролями.

Казалось бы, ограничение (19.13) не является слишком обременительным, чтобы всегда требовать его выполнения. Для обычных задач это так. Но есть важный класс так называемых сингулярно возмущенных уравнений, когда ограничение (19.13) оказывается весьма обременительным. Простейшим примером является уравнение

$$\varepsilon u'' + u' = 0. \tag{19.14}$$

Здесь $\varepsilon \in (0, 1]$ — малый параметр. При $\varepsilon \to 0$ дифференциальное уравнение второго порядка (19.14) переходит в уравнение первого порядка, для которого одно из двух граничных условий, выделяющих единственное решение уравнения (19.14), становится лишним. Это и является причиной непростого поведения решения соответствующей задачи для уравнения (19.14) при малых ε. Если для уравнения (19.14) поставить граничные условия

$$u(0) = 0, \qquad u(1) = 1, \tag{19.15}$$

то решением этой задачи будет функция

$$u(x) = \frac{1 - e^{-x/\varepsilon}}{1 - e^{-1/\varepsilon}} = 1 - \frac{e^{-x/\varepsilon} - e^{-1/\varepsilon}}{1 - e^{-1/\varepsilon}}, \tag{19.16}$$

являющаяся суммой гладкой, медленно меняющейся функции $u_0(x) := 1$ и быстро меняющейся функции $u_1(x) := (e^{-x/\varepsilon} - e^{-1/\varepsilon})/(1 - e^{-1/\varepsilon})$.

Поскольку уравнения (19.1) и (19.14) переходят одно в другое при $r = 1/\varepsilon$, то условие (19.13) применительно к разностной схеме (19.2) для уравнения (19.14) примет вид

$$h \leqslant 2\varepsilon. \tag{19.17}$$

Но в (19.14) параметр ε может принимать значения 10^{-2}, 10^{-4} или даже 10^{-8}, и ограничение (19.17) становится слишком обременительным. В этой ситуации следует либо ограничиться схемой с $\sigma = 1$, которая не накладывает никаких ограничений на шаг сетки с точки зрения осцилирования решения, и довольствоваться погрешностью аппроксимации $O(h)$, либо пытаться строить другие схемы, которые имеют погрешность $O(h^2)$ и не требуют ограничения типа (19.17).

19.2 Четырехточечная схема

Построим другую аппроксимацию уравнения (19.1). Будем аппроксимировать в (19.1) второе слагаемое при помощи соотношения

$$u'(x_i) \approx \frac{-u_{i+2} + 4u_{i+1} - 3u_i}{2h},$$

погрешность аппроксимации которого есть $O(h^2)$. Используя эту аппроксимацию, вместо (19.2) будем иметь

$$\frac{u_{i+1}^h - 2u_i^h + u_{i-1}^h}{h^2} + r\frac{-u_{i+2}^h + 4u_{i+1}^h - 3u_i^h}{2h} = 0. \qquad (19.18)$$

Напишем характеристическое уравнение этого разностного уравнения с постоянными коэффициентами

$$\frac{q^2 - 2q + 1}{h^2} + r\frac{-q^3 + 4q^2 - 3q}{2h} = 0.$$

Обозначим $rh/2 = \xi$ и перепишем характеристическое уравнение в виде

$$-\xi q^3 + (1 + 4\xi)q^2 - (2 + 3\xi)q + 1 = 0.$$

Сумма коэффициентов этого уравнения равна нулю, и следовательно, $q = 1$ есть корень этого уравнения. После деления многочлена из левой части на $(q - 1)$ получим уравнение

$$-\xi q^2 + (1 + 3\xi)q - 1 = 0,$$

корнями которого являются числа

$$q_{2,3} = \frac{1 + 3\xi \pm \sqrt{1 + 6\xi + 9\xi^2 - 4\xi}}{2\xi}.$$

Очевидно, что оба эти корня положительны при любых положительных ξ. Поскольку общее решение уравнения (19.18) имеет вид

$$u_i^h = c_1 + c_2 q_2^i + c_3 q_3^i,$$

то осцилляции этого решения будут отсутствовать на любой сетке, т.е. при любых h.

Аппроксимирующим экспоненту e^{-rh} будет корень

$$q_2 = \frac{1}{2\xi}\left[1 + 3\xi - \sqrt{1 + 2\xi + 9\xi^2}\right] =$$

$$= \frac{1}{2\xi}\left\{1 + 3\xi - \left[1 + \frac{2\xi + 9\xi^2}{2} - \frac{(2\xi + 9\xi^2)^2}{8} + \frac{8}{16}\xi^3 + O(\xi^4)\right]\right\} =$$

$$= 1 - 2\xi + 2\xi^2 + O(\xi^3) = 1 - rh + \frac{r^2h^2}{2} + O(h^3) = e^{-rh} + O(h^3)$$

Замечание 19.2. Поскольку уравнение (19.18) нельзя написать для $i = N - 1$, то в этом узле должна быть написана другая аппроксимация уравнения (19.1), например, (19.2) при $i = N-1$ с любым σ (либо $\sigma = 1/2$, либо $\sigma = 1$).

Замечание 19.3. Мы рассмотрели случай $r > 0$. Если $r < 0$, то, сделав в (19.1) замену независимой переменной $1 - x = t$, придем к уравнению

$$\frac{d^2u}{dt^2} - r\frac{du}{dt} = u'' + |r|u' = 0.$$

Отсюда следует, что при $r < 0$ в исходных переменных нужно использовать аппроксимацию, зеркальную к той, которая используется при $r > 0$. Именно, вместо разности вперед $(u_{i+1} - u_i)/h$ — разность назад $(u_i - u_{i-1})/h$, а вместо $(-u_{i+2} + 4u_{i+1} - 3u_i)/2h$ — аппроксимацию

$$u_{\bar{x},i} + \frac{h}{2}u_{\bar{x}x,i} = \frac{u_{i-2} - 4u_{i-1} + 3u_i}{2h}.$$

19.3 Монотонная схема Самарского

Другой подход к построению монотонной разностной схемы формально второго порядка аппроксимации был предложен А.А. Самарским. Суть его рассуждений состоит в следующем. Пусть рассматривается уравнение (18.91), коэффициенты которого, для простоты, будем считать постоянными. Напишем для этого уравнения аппроксимацию с центральным разностным отношением

$$pu^h_{\bar{x}x,i} + ru^h_{\overset{\circ}{x},i} = -f_i. \tag{19.19}$$

Поскольку

$$u^h_{\overset{\circ}{x}} = \frac{1}{2}u^h_x + \frac{1}{2}u^h_{\bar{x}} = u^h_x - \frac{1}{2}(u^h_x - u^h_{\bar{x}}) = u^h_x - \frac{h}{2}u^h_{\bar{x}x}.$$

то уравнение (19.19)можно переписать в виде

$$p\left(1 - \frac{rh}{2p}\right)u^h_{\bar{x}x,i} + ru^h_{x,i} = -f_i. \tag{19.20}$$

Замечая, что

$$\frac{1}{1 + \frac{rh}{2p}} = 1 - \frac{rh}{2p} + O\Big(\Big(\frac{rh}{2p}\Big)^2\Big),$$

напишем вместо (19.20) новое уравнение

$$\frac{p}{1+\frac{rh}{2p}}u^h_{\bar{x}x,i}+ru^h_{x,i}=-f_i. \tag{19.21}$$

Разностная схема (19.21) называется монотонной схемой Самарского.

Характеристическое уравнение для (19.21) имеет вид

$$\left(p+rh+\frac{r^2h^2}{2p}\right)q^2-\left(2p+rh+\frac{r^2h^2}{2p}\right)q+p=0.$$

Легко проверить, что один из корней этого уравнения равен 1, а второй

$$q=\left(1+\frac{rh}{p}+\frac{r^2h^2}{2p^2}\right)^{-1}.$$

т.е. оба корня положительны, и решение однородного уравнения (19.21) колебаний иметь не может. В этом смысле решения (19.21) ведут себя так же, как решения (19.2) при $\sigma=1$. Напомним, что схема (19.2) при $\sigma=1$ имеет первый порядок аппроксимации, а схема (19.21) позиционируется как схема второго порядка.

Исследуем более подробно погрешность аппроксимации схемы (19.21)

$$\psi=f_i+\frac{p}{1+\frac{rh}{2p}}u_{\bar{x}x,i}+ru_{x,i}=$$
$$=f_i+\frac{p}{1+\frac{rh}{2p}}\left(u''_i+\frac{h^2}{12}\tilde{u}^{IV}_i\right)+r\left(u'_i+\frac{h}{2}u''_i+\frac{h^2}{6}\tilde{\tilde{u}}'''_i\right).$$

Будем предполагать, что $u(x)$ — гладкое решение уравнения (18.91), т.е. все используемые в настоящих рассуждениях производные этого решения ограничены. Тогда

$$\psi_i=f_i+\frac{p}{1+\frac{rh}{2p}}u''_i+r\left(u'_i+\frac{h}{2}u''\right)_i+O\left(h^2\right)=$$
$$=f_i+ru'_i+pu''_i-\frac{r^2h^2}{2(2p+rh)}u''_i+O(h^2)=-\frac{r^2h^2}{2(2p+rh)}u''_i+O(h^2).$$

Отсюда следует, что, если p не мало́, то погрешность монотонной схемы Самарского есть $O(h^2)$, как и у схемы с центральной разностью. Последняя при конечных p также является монотонной. Если p становится малым, когда у схемы с центральной разностью возникают проблемы, порядок погрешности аппроксимациии монотонной схемы Самарского становится первым.

19.4 О равномерной по ε сходимости

Исследования показывают, что какой бы метод аппроксимации уравнения (19.1) из числа рассмотренных выше мы ни избрали, в любом случае при фиксированном N и $\varepsilon \to 0$ найдутся такие узлы равномерной сетки, в которых погрешность решения будет $O(1)$. Чтобы отметить этот факт, говорят, что разностная схема не обладает свойством *равномерной по малому параметру сходимости*.

Один из путей обеспечения равномерной по малому параметру сходимости — использование сгущающихся сеток. Одна из простейших сеток, называемая *сеткой Шишкина*, имеет вид (см. рис. 2)

$$\begin{aligned}
&\overline{\Omega} = \big\{x_i \;\big|\; x_i = ih,\ i = 0, 1, \ldots, N/2, x_i = x_{N/2} + (i - N/2)H,\\
&i = N/2 + 1, \ldots, N, \quad h = \delta/(N/2), \quad H = (1 - \delta)/(N/2),\\
&\delta = \min\{c\,\varepsilon \ln N, 1/2\}\big\},
\end{aligned}$$

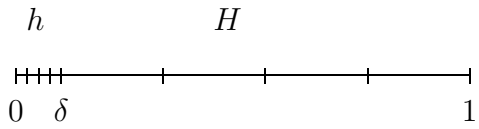


Рис. 2

или

$$x_i = x(t_i), \quad \text{где} \quad t_i = i/N, \quad \text{а}$$

$$x(t) = \begin{cases} 2\delta t, & 0 \leqslant t \leqslant 1/2,\\ 1 - 2(1-\delta)(1-t), & 1/2 < t \leqslant 1 \end{cases}$$

есть кусочно-линейное непрерывное отображение отрезка $[0, 1]$ на себя. Эта сетка является кусочно равномерной с шагом $h \ll H$ на отрезке $[0,\, \delta]$ и с шагом H на отрезке $[\delta,\, 1]$.

Равномерная по малому параметру точность разностной схемы определяется погрешностью аппроксимации разностной схемы и величиной параметра c, который должен быть выбран таким, чтобы на длине δ быстро меняющаяся составляющая точного решения успела принять столь малое значение, которое уже не влияет на погрешность приближенного решения.

20

Численные методы для задач с негладкими решениями

Рассмотрим следующее дифференциальное уравнение

$$-\frac{1}{x}(xu')' + \frac{\lambda^2}{x^2}u = 0, \quad 0 < x < 1. \tag{20.1}$$

Это уравнение не вкладывается в тот класс уравнений, который мы для себя выделили. Именно, коэффициент $p(x) := x \geqslant 0$, но не отрезан от нуля постоянной (на рассматриваемом отрезке). Поэтому для уравнения (20.1) в точке $x = 0$ нельзя ставить произвольное граничное условие. В самом деле, будем искать решение уравнения (20.1) в виде

$$u(x) = x^\alpha.$$

Подставляя это выражение в (20.1), находим, что для удовлетворения уравнения требуется выполнение условия

$$\alpha^2 = \lambda^2,$$

т.е. $\alpha = \pm\lambda$. Тем самым, мы нашли два фундаментальных решения уравнения (20.1), и его общее решение есть

$$u(x) = c_1 x^\lambda + c_2 x^{-\lambda}. \tag{20.2}$$

Без ограничения общности можно считать, что $\lambda > 0$. Если нас интересует ограниченное решение (что естественно с точки зрения приложений), то $c_2 = 0$ и

$$u(x) = c_1 x^\lambda.$$

Отсюда находим, что единственным допустимым граничным условием из числа классических является условие

$$u(0) = 0. \tag{20.3}$$

(именно это условие и будет выделять из (20.2) ограниченное решение). При $x = 1$ можно ставить любое граничное условие, например,

$$u(1) = 1. \tag{20.4}$$

Тогда решением задачи (20.1), (20.3), (20.4) будет функция

$$u(x) = x^{\lambda}. \tag{20.5}$$

Если $0 < \lambda < 1$, то уже первая производная интересующего нас решения не ограничена, не говоря уже о четвертой производной, которая фигурирует в погрешности аппроксимации. О хорошей сходимости численного решения на равномерной сетке говорить трудно. Выход из создавшегося положения можно найти на пути использования специальной сгущающейся к точке $x = 0$ сетки. Как эту сетку построить? Пусть $x = x(t)$ есть отображение отрезка $[0, 1]$ на себя. Для $t \in [0, 1]$ введем равномерную сетку с шагом $\tau = 1/N$. Тогда

$$x_i = x(t_i)$$

будет задавать узлы неравномерной сетки по x. На этой неравномерной сетке

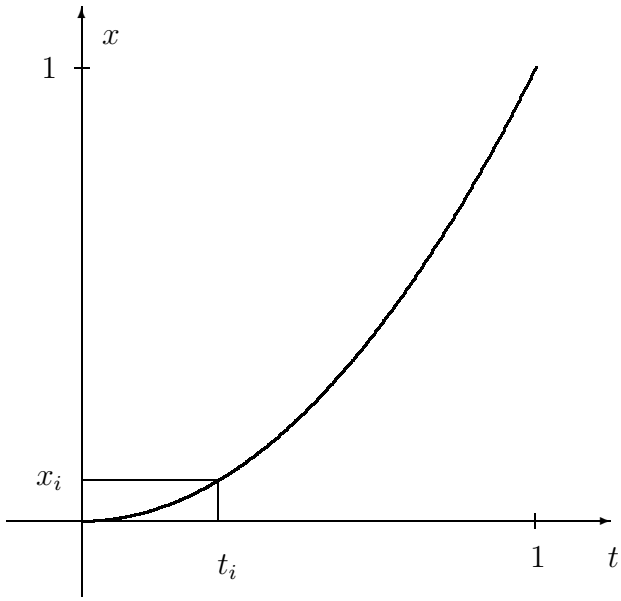


Рис. 1

и аппроксимируем уравнение (20.1). Пусть

$$h_i = x_i - x_{i-1}, \qquad \hbar_i = (h_i + h_{i+1})/2.$$

Тогда, используя, например, метод баланса (см. § 19), для уравнения (20.1) получим следующую аппроксимацию

$$\frac{1}{x_i}\frac{1}{\hbar_i}\left(x_{i+1/2}\frac{u_{i+1}^h-u_i^h}{h_{i+1}}-x_{i-1/2}\frac{u_i^h-u_{i-1}^h}{h_i}\right)-\frac{\lambda^2}{x_i^2}u_i^h=0. \tag{20.6}$$

Исследуем погрешность аппроксимации этой разностной схемы на неравномерной сетке. Используя формулу Тейлора, будем иметь

$$\begin{aligned}
\Psi_i &= \frac{1}{x_i}\frac{1}{\hbar_i}\left[x_{i+1/2}u_{x,i}-x_{i-1/2}u_{\bar{x},i}\right]-\frac{1}{x_i}(xu')'_i = \\
&= \frac{1}{x_i}\frac{1}{\hbar_i}\left[\left(x_i+\frac{h_{i+1}}{2}\right)\left(u'_i+\frac{h_{i+1}}{2}u''_i+\frac{h_{i+1}^2}{6}u'''_i+\frac{h_{i+1}^3}{24}\tilde{u}_i^{IV}\right)-\right. \\
&\left.-\left(x_i-\frac{h_i}{2}\right)\left(u'_i-\frac{h_i}{2}u''_i+\frac{h_i^2}{6}u'''_i-\frac{h_i^3}{24}\tilde{\tilde{u}}_i^{IV}\right)\right]-\frac{1}{x_i}(xu')'_i = \\
&= \frac{1}{x_i}\frac{1}{\hbar_i}\left[h_{i+1}^2\left(\frac{x_i}{6}u'''_i+\frac{1}{4}u''_i\right)+h_{i+1}^3\left(\frac{x_i}{24}\tilde{u}_i^{IV}+\frac{1}{12}u'''_i\right)+\frac{h_{i+1}^4}{48}\tilde{u}_i^{IV}-\right. \\
&\left.-h_i^2\left(\frac{x_i}{6}u'''_i+\frac{1}{4}u''_i\right)+h_i^3\left(\frac{x_i}{24}\tilde{\tilde{u}}_i^{IV}+\frac{1}{12}u'''_i\right)-\frac{h_i^4}{48}\tilde{\tilde{u}}_i^{IV}\right] = \\
&= \frac{h_{i+1}^2-h_i^2}{\hbar_i}\left(\frac{1}{6}u'''_i+\frac{1}{4}\frac{u''_i}{x_i}\right)+\frac{h_{i+1}^3}{\hbar_i}\left(\frac{1}{24}\tilde{u}_i^{IV}+\frac{1}{12}\frac{u'''_i}{x_i}\right)+ \\
&+\frac{h_i^3}{\hbar_i}\left(\frac{1}{24}\tilde{\tilde{u}}_i^{IV}+\frac{1}{12}\frac{u'''_i}{x_i}\right)+\frac{1}{48}\frac{h_{i+1}^4}{\hbar_i}\frac{\tilde{u}_i^{IV}}{x_i}-\frac{1}{48}\frac{h_i^4}{\hbar_i}\frac{\tilde{\tilde{u}}_i^{IV}}{x_i}.
\end{aligned} \tag{20.7}$$

Подставим сюда истинное значение $u(x)$ из (20.5) и оценим вклад в погрешность решения типичной составляющей погрешности аппроксимации

$$\overset{\circ}{\psi}_i = c(x_i)h_i^2x_i^{\lambda-4}.$$

Эта составляющая представлена в погрешности аппроксимации (20.7) вторым и третьим слагаемыми. Составляющую погрешности решения, отвечающую $\overset{\circ}{\psi}_i$, обозначим через $\overset{\circ}{z}_i$. Для нее имеем уравнение

$$-\frac{1}{x_i}\frac{1}{\hbar_i}\left(x_{i+1/2}\frac{\overset{\circ}{z}_{i+1}-\overset{\circ}{z}_i}{h_{i+1}}-x_{i-1/2}\frac{\overset{\circ}{z}_i-\overset{\circ}{z}_{i-1}}{h_i}\right)+\frac{\lambda^2}{x_i^2}\overset{\circ}{z}_i=c(x_i)h_i^2x_i^{\lambda-4}.$$

Как и при доказательстве теоремы 18.1 для максимума $|\overset{\circ}{z}_i|$ получаем оценку

$$\max_i|\overset{\circ}{z}_i|\leqslant\max_i\frac{c(x_i)h_i^2x_i^{\lambda-2}}{\lambda^2}. \tag{20.8}$$

Из этой оценки следует, что, если $\lambda \geqslant 2$, то никаких проблем нет, ибо в этом случае выражение, стоящее в правой части под знаком max, имеет равномерную по x_i малость $O(h_i^2)$, и сетку можно брать равномерной. Если же $\lambda < 2$, то равномерной по x_i малости $O(h_i^2)$ указанного выражения не гарантируется, если сетка не выбрана надлежащим образом. Поскольку $c(x_i)$ из правой части (20.8) меняется мало, выберем сетку при $\lambda < 2$ так, чтобы

$$h_i^2 x_i^{\lambda-2} \approx \text{const}.$$

Так как

$$h_i = x_i - x_{i-1} = N^{-1} x'(t_i^*), \tag{20.9}$$

то

$$h_i^2 x_i^{\lambda-2} = N^{-2} x'^2(t_i^*) x_i^{\lambda-2}.$$

Пусть

$$x'^2 x^{\lambda-2} = c,$$

где c — некоторая постоянная, или

$$x' x^{\lambda/2-1} = \sqrt{c} = c_1.$$

Интегрируя это уравнение, находим, что

$$x^{\lambda/2} = c_1 t + c_2,$$

или

$$x = (c_1 t + c_2)^{2/\lambda}.$$

Так как $x(0) = 0$, а $x(1) = 1$, то $c_2 = 0$, а $c_1 = 1$. Тем самым,

$$x = t^{2/\lambda}, \tag{20.10}$$

и, следовательно,

$$x_i = (i/N)^{2/\lambda}. \tag{20.11}$$

Если узлы сетки будут заданы по закону (20.11), то, в силу (20.9), (20.10) при $\lambda < 2$

$$h_i = 2N^{-1} t_i^{2/\lambda-1}/\lambda,$$

и величины шагов сетки уменьшаются при приближении к границе $x = 0$, т.е. построенная сетка является сгущающейся в окрестности $x = 0$. Если $i \sim N$, то $h_i \sim cN^{-1}$, а если $i = 1$, то

$$h_1 = N^{-2/\lambda} \ (\lambda < 2).$$

Принимая во внимание сказанное, а также (20.5), (20.10) и (20.8), легко проверить, что вклад последних четырех слагаемых погрешности аппроксимации (20.7) в погрешность решения является величиной $O(N^{-2})$.

Обратимся к первому слагаемому правой части (20.7). Используя формулу Тейлора, находим, что

$$\frac{h_{i+1}^2 - h_i^2}{\hbar_i} = 2(h_{i+1} - h_i) = 2(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) = 2N^{-2}x_i''(t^*) = c\,N^{-2}x^{1-\lambda}.$$

Снова принимая во внимание (20.5), (20.10) и (20.8), заключаем, что вклад и первого слагаемого погрешности аппроксимации (20.7) в погрешность решения оценивается величиной $O(N^{-2})$.

VI

Численные методы для дифференциальных уравнений с частными производными

21

Разностные методы для уравнения теплопроводности

Нестационарное уравнение теплопроводности являет собой простейший пример параболического уравнения — уравнения с частными производными. Возьмем его в виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x,t), \qquad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leqslant T. \tag{21.1}$$

Чтобы выделить единственное решение уравнения (21.1), нужно задать дополнительные условия. Таковыми могут быть граничные условия, задаваемые при $x = 0$ и $x = 1$, и начальное условие, задаваемое при $t = 0$. Пусть, например, граничные условия имеют вид

$$u(0,t) = u(1,t) = 0, \tag{21.2}$$

а начальное условие —

$$u(x,0) = \varphi(x). \tag{21.3}$$

Как известно из курса методов математической физики, задача (21.1)-(21.3) поставлена корректно и при надлежащей гладкости $f(x,t)$ и $\varphi(x)$ имеет единственное решение.

Посмотрим на уравнение (21.1) с точки зрения краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. Для этого обозначим $\partial u/\partial t = \dot{u}$ и перепишем (21.1) в виде

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x,t) - \dot{u} \equiv \mathcal{F}(x,t). \tag{21.4}$$

Считая $\mathcal{F}(x,t)$ в (21.4) заданной функцией, а t — параметром, мы можем условно рассматривать (21.4) как обыкновенное дифференциальное

уравнение, аппроксимацию которого мы строить умеем. На $[0,1]$ введем сетку

$$\bar{\omega}^h = \left\{ x = x_i = ih \;\middle|\; i = 0, \ldots, N \right\}$$

с внутренними узлами

$$\omega^h = \left\{ x_i \in \bar{\omega}^h \;\middle|\; i = 1, \ldots, N-1 \right\}$$

и на этой сетке дифференциальное уравнение (21.4) аппроксимируем разностным уравнением

$$-u^h_{\bar{x}x,i} = \mathcal{F}^h(x_i, t), \qquad x_i \in \omega^h. \tag{21.5}$$

Теперь нужно вспомнить (21.4), в силу которого

$$\mathcal{F}(x_i, t) = f(x_i, t) - \dot{u}(x_i, t).$$

Поэтому естественно положить

$$\mathcal{F}^h(x_i, t) = f^h(x_i, t) - \dot{u}^h_i.$$

Тогда (21.5) примет вид

$$-u^h_{\bar{x}x,i} = f^h_i(t) - \dot{u}^h_i, \quad x_i \in \omega^h. \tag{21.6}$$

Это соотношение представляет собой систему $(N-1)$ обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с $(N+1)$ неизвестными u^h_i, $i = 0, \ldots, N$. Воспользуемся граничными условиями (21.2) и положим

$$u^h_0(t) = u^h_N(t) = 0. \tag{21.7}$$

После исключения этих неизвестных из (21.6) будем иметь систему $(N-1)$ уравнений с $(N-1)$ неизвестными.

Перепишем теперь (21.6) по-другому, поставив на первое место производную

$$\dot{u}^h_i = u^h_{\bar{x}x,i} + f^h_i(t), \qquad i = 1, \ldots, N-1, \tag{21.8}$$

и введем обозначения

$$\begin{aligned} U &= [u^h_1 \ldots u^h_{N-1}]^T, \\ \Lambda &= \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 & -2 \end{bmatrix}, \\ F &= [f^h_1 \ldots f^h_{N-1}]. \end{aligned} \tag{21.9}$$

Тогда система (21.8) с учетом (21.7) примет вид

$$\frac{dU}{dt} = \Lambda U + F. \tag{21.10}$$

Введем еще одно обозначение

$$\Phi = [\varphi_1 \dots \varphi_{N-1}]^T$$

и положим

$$U(0) = \Phi. \tag{21.11}$$

Соотношения (21.10), (21.11) представляют собой задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Для приближенного решения этой задачи можно использовать уже изученные методы. Например, метод Эйлера, который приводит к соотношениям

$$\frac{U^{j+1} - U^j}{\tau} = \Lambda U^j + F^j, \qquad U^0 = \Phi, \tag{21.12}$$

или неявный метод Эйлера

$$\frac{U^{j+1} - U^j}{\tau} = \Lambda U^{j+1} + F^{j+1}, \qquad U^0 = \Phi, \tag{21.13}$$

а можно и метод трапеций

$$\frac{U^{j+1} - U^j}{\tau} = \frac{1}{2}\Lambda \left[U^{j+1} + U^j\right] + \frac{1}{2}\left(F^{j+1} + F^j\right), \qquad U^0 = \Phi. \tag{21.14}$$

Мы не будем изучать общие методы решения задачи (21.10), (21.11), а ограничимся одношаговыми, как (21.12)-(21.14), которые в теории разностных схем для параболических уравнений принято называть двухслойными.

Изучение (21.12), (21.13) и (21.14) можно проводить одновременно, если записать их единым образом за счет введения параметра σ:

$$\frac{U^{j+1} - U^j}{\tau} = \sigma\Lambda U^{j+1} + (1-\sigma)\Lambda U^j + \sigma F^{j+1} + (1-\sigma)F^j. \tag{21.15}$$

Полагая здесь $\sigma = 0$, 1 или 1/2, получим (21.12), (21.13) или (21.14), соответственно.

Посмотрим теперь на (21.15) с точки зрения аппроксимации не задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (21.10), (21.11), а с точки зрения аппроксимации задачи (21.1)-(21.3). В результате

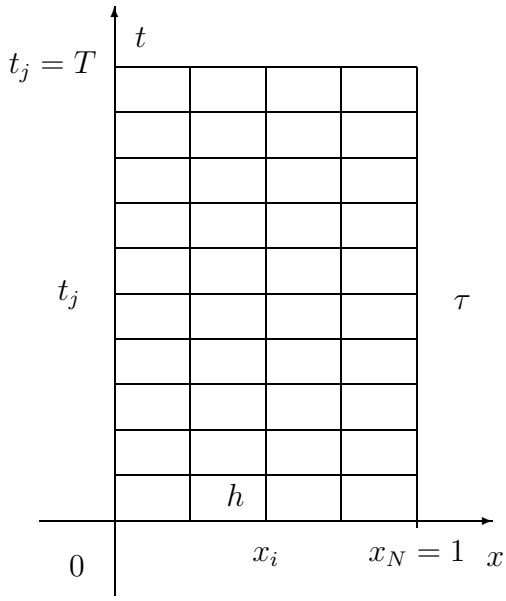


Рис. 1

двух шагов аппроксимации в области $[0,1] \times [0,T]$ образована сетка (см. рис. 1),

на которой дифференциальное уравнение (21.1) аппроксимировано системой разностных уравнений

$$\frac{u_i^{h\,j+1} - u_i^{h\,j}}{\tau} = \sigma u_{\bar{x}x,i}^{h\,j+1} + (1-\sigma) u_{\bar{x}x,i}^{h\,j} + f_i^{h\,j}, \quad i = 1, \ldots, N-1, \quad j = 0, \ldots, J-1, \tag{21.16}$$

а граничные (21.2) и начальное (21.3) условия — соотношениями

$$u_0^{h\,j} = 0, \quad u_N^{h\,j} = 0, \quad j = 1, \ldots, J, \tag{21.17}$$

и

$$u_i^{h\,0} = \varphi_i, \quad i = 0, \ldots, N, \tag{21.18}$$

соответственно. (На связи $f_i^{h\,j}$ с $f(x,t)$ мы не останавливаемся).

Введем дополнительные обозначения

$$u_i^j = u, \quad u_i^{j+1} = \hat{u}, \quad (\hat{u} - u)/\tau = u_t.$$

В новых обозначениях уравнения (21.16) примут вид

$$u_t^h = \sigma \hat{u}_{\bar{x}x}^h + (1-\sigma) u_{\bar{x}x}^h + f^h. \tag{21.19}$$

Погрешностью аппроксимации уравнения (21.1) уравнениями (21.19) будет сеточная функция

$$\Psi = f^h + \sigma \hat{u}_{\bar{x}x} + (1-\sigma) u_{\bar{x}x} - u_t,$$

где $u = u(x_i, t_j)$ — значения решения уравнения (21.1) в узлах (x_i, t_j).

Упражнение 21.1. Доказать, что при надлежащей гладкости (какой?)

$$\Psi = \begin{cases} O(\tau + h^2) & \text{при} \quad \sigma = 0, \sigma = 1, \\ O(\tau^2 + h^2) & \text{при} \quad \sigma = 1/2. \end{cases}$$

Замечание 21.1. Для написания уравнений (21.19) при $\sigma = 0$, $\sigma = 1$ или $\sigma = 1/2$ требуются следующие множества узлов

$$\begin{array}{c} j+1 \\ j \end{array} \qquad \begin{array}{c} \bullet \\ \bullet\ \bullet\ \bullet \end{array} \qquad \begin{array}{c} \bullet\ \bullet\ \bullet \\ \bullet \end{array} \qquad \begin{array}{c} \bullet\ \bullet\ \bullet \\ \bullet\ \bullet\ \bullet \end{array}$$

соответственно, называемые шаблонами.

21.1 Устойчивость по начальным данным

Исследуем разностную схему (21.16)-(21.18) на предмет ее устойчивости по начальным данным. Для этого будем считать, что правая часть в уравнениях (21.16) равна нулю, т.е.

$$\frac{u_i^{h\,j+1} - u_i^{h\,j}}{\tau} = \sigma u_{\bar{x}x,i}^{h\,j+1} + (1-\sigma) u_{\bar{x}x,i}^{h\,j}, \qquad \begin{array}{l} i = 1, \ldots, N-1, \\ j = 0, \ldots, J-1. \end{array} \tag{21.20}$$

Чтобы исследовать вопрос об устойчивости, найдем решение задачи (21.20), (21.17), (21.18). Решение будем искать методом разделения переменных. Будем искать частные решения уравнений (21.20) в виде

$$u_i^j = X_i T_j.$$

Тогда

$$\frac{T_{j+1} - T_j}{\tau} X_i = (\sigma T_{j+1} + (1-\sigma) T_j) X_{\bar{x}x,i}$$

или

$$\frac{(T_{j+1} - T_j)/\tau}{\sigma T_{j+1} + (1-\sigma) T_j} = \frac{X_{\bar{x}x,i}}{X_i} = -\lambda^h, \tag{21.21}$$

где λ^h — постоянная. С учетом граничных условий (21.17) для X_i из (21.21) получим задачу

$$X_{\bar{x}x,i} + \lambda^h X_i = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1, \quad X_0 = X_N = 0,$$

или, в развернутом виде,

$$-X_{i-1} + 2X_i - X_{i+1} = h^2 \lambda^h X_i, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1, \quad X_0 = X_N = 0. \tag{21.22}$$

Но эта задача совпадает с рассмотренной нами ранее задачей (10.33), если в последней под λ понимать $h^2\lambda^h$. Поэтому, в силу (10.35)

$$X_i^{(k)} = \sqrt{2} \sin k\pi x_i, \quad i = 1, \ldots, N-1 \tag{21.23}$$

суть собственные векторы задачи (21.22), которые ортогональны в смысле скалярного произведения

$$(u, v) = \sum_{i=1}^{N-1} u_i v_i h$$

и нормированы, т.е. $\|X_i^{(k)}\|^2 = \left(X_i^{(k)}, X_i^{(k)}\right) = 1$. В силу (10.42)

$$\lambda_k^h = \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{k\pi h}{2}, \quad k = 1, \ldots, N-1 \tag{21.24}$$

— различные собственные значения этой задачи.

Далее, из (21.21) находим, что

$$\frac{T_{j+1}^{(k)} - T_j^{(k)}}{\tau} + \lambda_k^h \left[\sigma T_{j+1}^{(k)} + (1-\sigma) T_j^{(k)}\right] = 0$$

или

$$(1 + \sigma\tau\lambda_k^h) T_{j+1}^{(k)} = (1 - (1-\sigma)\tau\lambda_k^h) T_j^{(k)}.$$

Отсюда следует, что

$$T_{j+1}^{(k)} = q_k T_j^{(k)},$$

где

$$q_k = \frac{1 - (1-\sigma)\tau\lambda_k^h}{1 + \sigma\tau\lambda_k^h} \tag{21.25}$$

и поэтому

$$T_j^{(k)} = c_k q_k^j. \tag{21.26}$$

Итак, мы нашли, что функции

$$u_i^{j(k)} = X_i^{(k)} T_j^{(k)}, \quad k = 1, \ldots, N-1,$$

где $X_i^{(k)}$ и $T_j^{(k)}$ из (21.23) и (21.26), соответственно, являются частными решениями уравнений (21.20), удовлетворяющими граничным условиям (21.17). Построим линейную комбинацию этих решений

$$u_i^{h\,j} = \sum_{k=1}^{N-1} c_k X_i^{(k)} q_k^j. \tag{21.27}$$

Полагая здесь $j = 0$, получим

$$u_i^{h\,0} = \sum_{k=1}^{N-1} c_k X_i^{(k)},$$

а принимая во внимание (21.18), заключаем, что функция (21.27) будет удовлетворять начальным условиям (21.18), если

$$\sum_{k=1}^{N-1} c_k X_i^{(k)} = \varphi_i,$$

т.е. если постоянные c_k суть коэффициенты Фурье функции φ_i при разложении по ортонормированной системе $X_i^{(k)}$

$$c_k = (\varphi, X^{(k)}) = \sum_{i=1}^{N-1} \varphi_i X_i^{(k)} h. \tag{21.28}$$

Итак, сеточная функция (21.27) с коэффициентами c_k из (21.28) удовлетворяет уравнениям (21.20), граничным условиям (21.17) и начальному условию (21.18), а поэтому является решением задачи (21.20), (21.17), (21.18).

Найдем оценку этого решения. Возводя левую и правую части (21.27) в квадрат и суммируя результат по i от 1 до $N-1$, с учетом ортогональности $X_i^{(k)}$, будем иметь

$$\|u^{h\,j}\|_{L_2^h}^2 = \sum_{i=1}^{N-1} (u_i^{h\,j})^2 h = \sum_{i=1}^{N-1} h \sum_{k,l=1}^{N-1} c_k c_l X_i^{(k)} X_i^{(l)} q_k^j q_l^j =$$

$$= \sum_{k,l=1}^{N-1} c_k c_l q_k^j q_l^j (X_i^{(k)}, X_i^{(l)}) = \sum_{k=1}^{N-1} c_k^2 q_k^{2j} \leqslant \max_k q_k^{2j} \sum_{k=1}^{N-1} c_k^2 = \max_k q_k^{2j} \|\varphi\|_{L_2^h}^2.$$

Пусть

$$|q_k| \leqslant 1. \tag{21.29}$$

Тогда

$$\|u^{h\,j}\|_{L_2^h} \leqslant \|\varphi\|_{L_2^h}, \tag{21.30}$$

т.е. L_2^h-норма решения при любом j не превосходит L_2^h-нормы начального условия.

Выясним, когда выполняется условие (21.29). С учетом (21.24), (21.25) при $\sigma \geqslant 0$ имеем

$$-\left(1 + \frac{4\tau}{h^2}\sigma \sin^2 \frac{k\pi h}{2}\right) \leqslant 1 - \frac{4\tau}{h^2}(1-\sigma)\sin^2 \frac{k\pi h}{2}$$

или, после приведения подобных членов,

$$2 - \frac{4\tau}{h^2}(1-2\sigma)\sin^2 \frac{k\pi h}{2} \geqslant 0, \quad k = 1, \ldots, N-1.$$

Отсюда вытекает условие

$$(1-2\sigma) \leqslant \frac{h^2}{2\tau} \min_k \frac{1}{\sin^2 \frac{k\pi h}{2}}.$$

Поскольку $\min\limits_k \sin^{-2} \frac{k\pi h}{2} \geqslant 1$, то (21.29) будет выполнено, если

$$(1-2\sigma) \leqslant \frac{h^2}{2\tau}$$

или, что эквивалентно,

$$\sigma \geqslant \frac{1}{2} - \frac{h^2}{4\tau}. \tag{21.31}$$

Итак, нами доказана

Теорема 21.1. *Если параметр σ схемы* (21.20) *удовлетворяет условию* (21.31), *то для решения задачи* (21.20), (21.17), (21.18) *справедлива априорная оценка*

$$\max_j \|u^{h\,j}\|_{L_2^h} \leqslant \|u^{h\,0}\|_{L_2^h}, \quad j = 1, 2, \ldots, J. \tag{21.32}$$

Определение 21.1. Говорят, что разностная схема (21.20) устойчива по начальным данным, если для решения задачи (21.20), (21.17), (21.18) справедлива оценка

$$\|u^{h\,j}\|_{(1)} \leqslant M\|u^{h\,0}\|_{(2)},$$

где $\|\cdot\|_{(1)}$ и $\|\cdot\|_{(2)}$ — некоторые нормы, а $M = \mathrm{const} > 0$ не зависит от τ и h.

Следствие 1. *Теорема 21.1 утверждает устойчивость по начальным данным схемы* (21.20) *при выполнении условий* (21.31), *когда*

$$\|\cdot\|_{(2)} = \|\cdot\|_{L_2^h}, \quad \|\cdot\|_{(1)} = \|\cdot\|_{L_\infty^h(0,T)\times L_2^h(0,1)}.$$

Обсудим условие (21.31). Если $\sigma = 1$, т.е. использован неявный метод Эйлера для системы, то (21.31) выполнено при любых τ и h. То же самое имеет место и при $\sigma = 1/2$ (схема трапеций). Если же $\sigma = 0$, то для выполнения (21.31) нужно, чтобы

$$\tau \leqslant h^2/2. \tag{21.33}$$

Про первые две схемы (при $\sigma = 1$ и $\sigma = 1/2$) говорят, что они безусловно устойчивы, а третья ($\sigma = 0$) устойчива условно (для устойчивости шаги по временно́й переменной и по пространственной связаны неравенством (21.33)).

Напомним, что все три схемы нуль-устойчивы по терминологии из обыкновенных дифференциальных уравнений, а первые две еще и A-устойчивы.

Отметим, что числа $(-\lambda_k^h)$ являются собственными числами матрицы (21.9)

$$\frac{\max\limits_k |-\lambda_k^h|}{\min\limits_k |-\lambda_k^h|} = \frac{\lambda_{N-1}^h}{\lambda_1^h} = \frac{\sin^2\frac{(N-1)\pi h}{2}}{\sin^2\frac{\pi h}{2}} =$$
$$= \frac{\cos^2\frac{\pi h}{2}}{\sin^2\frac{\pi h}{2}} = \operatorname{ctg}^2\frac{\pi h}{2} \gg 1 \quad \text{при} \quad h \ll 1,$$

т.е. система уравнений (21.8) жесткая.

21.2 Устойчивость по правой части

Обратимся теперь к неоднородному уравнению (21.19), а вместо (21.18) поставим однородные начальные условия

$$u_i^{h\,0} = 0, \qquad i = 0, \ldots, N. \tag{21.34}$$

Теорема 21.2. *Если параметр σ схемы* (21.19) *удовлетворяет условию* (21.31), *то для решения задачи* (21.19), (21.17), (21.34)*справедлива априорная оценка*

$$\max_j \|u^{h\,j}\|_{L_2^h} \leqslant T \max_j \|f^{h\,j}\|_{L_2^h}. \tag{21.35}$$

Доказательство. Разложим $u_i^{h\,j}$ и $f_i^{h\,j}$ при каждом j по собственным векторам задачи (21.22)

$$u_i^{h\,j} = \sum_{k=1}^{N-1} T_j^{(k)} X_i^{(k)}, \qquad f_i^{h\,j} = \sum_{k=1}^{N-1} f_j^{(k)} X_i^{(k)}.$$

Подставляя эти разложения в (21.19) и принимая во внимание ортогональность $X_i^{(k)}$, получим

$$\frac{T_{j+1}^{(k)} - T_j^{(k)}}{\tau} + \lambda_k^h \left[\sigma T_{j+1}^{(k)} + (1-\sigma) T_j^{(k)}\right] = f_j^{(k)}.$$

Приводя подобные члены, найдем, что

$$[1 + \sigma\tau\lambda_k^h] T_{j+1}^{(k)} = [1 - (1-\sigma)\tau\lambda_k^h] T_j^{(k)} + \tau f_j^{(k)},$$

а, разрешая относительно $T_{j+1}^{(k)}$, будем иметь

$$T_{j+1}^{(k)} = q_k T_j^{(k)} + \frac{\tau}{1 + \sigma\tau\lambda_k^h} f_j^{(k)}.$$

В силу (21.29) $|q_k| \leqslant 1$, а при $\sigma \geqslant 0$ знаменатель $(1+\sigma\tau\lambda_k^h) \geqslant 1$ и поэтому

$$\mid T_{j+1}^{(k)} \mid \leqslant \mid T_j^{(k)} \mid |q_k| + \tau \mid f_j^{(k)} \mid \leqslant \mid T_j^{(k)} \mid + \tau \mid f_j^{(k)} \mid .$$

Далее

$$\|u^{h\,j+1}\|_{L_2^h} = \sqrt{\sum_{k=1}^{N-1} \left(T_{j+1}^{(k)}\right)^2} \leqslant \sqrt{\sum_{k=1}^{N-1} \left(\mid T_j^{(k)} \mid + \tau \mid f_j^{(k)} \mid\right)^2} \leqslant \|u^{h\,j}\|_{L_2^h} + \tau \|f^{h\,j}\|_{L_2^h}.$$

Суммируя это неравенство по j в нужных пределах, придем к (21.35). Теорема доказана.

Теорема 21.3 (сходимости). *Если выполнено условие* (21.31), *и решение задачи* (21.1)-(21.3) $u(x,t) \in C^4[0,1] \times C^3[0,T]$, *то решение* u^h *задачи* (21.16)-(21.18) *при соответствующей* $f_i^{h\,j}$ *сходится к решению* u *задачи* (21.1)-(21.3) *со скоростью* $O(h^2 + (\sigma - 1/2)\tau + \tau^2)$.

Доказательство. Пусть $z_i^j = u_i^{h\,j} - u(x_i, t_j)$ — погрешность решения. Выражая $u_i^{h\,j}$ через z_i^j и $u(x_i, t_j)$ и подставляя результат в (21.16)-(21.18), для z_i^j получим задачу

$$\begin{gathered} \frac{z_i^{j+1} - z_i^j}{\tau} = \sigma z_{\bar{x}x,i}^{j+1} + (1-\sigma) z_{\bar{x}x,i}^j + \Psi_i^j, \\ z_0^j = z_N^j = 0, \qquad z_i^0 = 0. \end{gathered} \tag{21.36}$$

Для задачи (21.36) справедлива оценка, устанавливаемая теоремой 21.2, т.е.

$$\max_j \|z_i^j\|_{L_2^h} \leqslant T \max_j \|\Psi_i^j\|_{L_2^h}.$$

Используя теперь результаты упражнения 21.1, приходим к утверждению теоремы.

21.3 Устойчивость в смысле максимума модуля

Теорема 21.4. *Если выполнено условие*

$$\frac{2(1-\sigma)}{h^2}\tau \leqslant 1, \tag{21.37}$$

то для решения задачи (21.16)-(21.18) *справедлива априорная оценка*

$$\max_{ij} |u_i^{hj}| \leqslant \max_i |\varphi_i| + T \max_{ij} |f_i^{hj}|. \tag{21.38}$$

Доказательство. Перепишем уравнение (21.16) в поточечном виде

$$\frac{u_i^{hj+1} - u_i^{hj}}{\tau} = \sigma \frac{u_{i-1}^{hj+1} - 2u_i^{hj+1} + u_{i+1}^{hj+1}}{h^2} + (1-\sigma)\frac{u_{i-1}^{hj} - 2u_i^{hj} + u_{i+1}^{hj}}{h^2} + f_i^{hj}$$

и приведем подобные члены

$$\left(\frac{1}{\tau} + \frac{2\sigma}{h^2}\right) u_i^{hj+1} =$$
$$= \frac{\sigma}{h^2} u_{i-1}^{hj+1} + \frac{\sigma}{h^2} u_{i+1}^{hj+1} + \left(\frac{1}{\tau} - \frac{2(1-\sigma)}{h^2}\right) u_i^{hj} + \frac{1-\sigma}{h^2} u_{i-1}^{hj} + \frac{1-\sigma}{h^2} u_{i+1}^{hj} + f_i^{hj}.$$

Возьмем модули левой и правой частей и оценим правую часть этого соотношения через максимальные значения модулей u_i^{hj}, u_i^{hj+1} и f_i^{hj}. Будем иметь

$$\left(\frac{1}{\tau} + \frac{2\sigma}{h^2}\right) |u_i^{hj+1}| \leqslant$$
$$\leqslant \frac{2\sigma}{h^2} \max_i |u_i^{hj+1}| + \left(\left| \frac{1}{\tau} - \frac{2(1-\sigma)}{h^2} \right| + \frac{2(1-\sigma)}{h^2}\right) \max_i |u_i^{hj}| + \max_i |f_i^{hj}|.$$

Беря теперь максимум по i левой части и приводя подобные члены, после домножения на τ получим:

$$\max_i |u_i^{hj+1}| \leqslant \left(\left| 1 - \frac{2(1-\sigma)\tau}{h^2} \right| + \frac{2(1-\sigma)\tau}{h^2}\right) \max_i |u_i^{hj}| + \tau \max_i |f_i^{hj}|.$$

Изучим коэффициент при $\max_i |u_i^{h\,j}|$:

$$\left|1-\frac{2(1-\sigma)\tau}{h^2}\right|+\frac{2(1-\sigma)}{h^2}\tau=\begin{cases}1 & \text{при } \dfrac{2(1-\sigma)}{h^2}\tau\leqslant 1,\\ \dfrac{4(1-\sigma)\tau}{h^2}-1>1 & \text{при } \dfrac{2(1-\sigma)}{h^2}\tau>1\end{cases}.$$

В силу условия (21.37) теоремы реализуется первая возможность, и следовательно

$$\max_i |u_i^{h\,j+1}|\leqslant \max_i |u_i^{h\,j}|+\tau\max_i |f_i^{h\,j}|. \tag{21.39}$$

Пусть

$$\max_j\max_i |u_i^{h\,j}|=\max_i |u_i^{h\,j_0}|.$$

Тогда

$$\max_{i\,j} |u_i^{h\,j}|=\max_i |u_i^{h\,j_0}|\leqslant \max_i |u_i^{h\,j_0-1}|+\tau\max_i |f_i^{h\,j_0-1}|.$$

Прибавляя сюда все предыдущие неравенства (21.39) при $j=j_0-2,\ldots,j=0$, получим

$$\max_{i\,j} |u_i^{h\,j}|\leqslant \max_i |\varphi_i|+\sum_{j=1}^{J}\tau\max_i |f_i^{h\,j-1}|\leqslant \max_i |\varphi_i|+T\max_{i\,j} |f_i^{h\,j}|.$$

Теорема доказана.

Следствие 2. При $\sigma=1$ оценка (21.38) верна на любой сетке. При $\sigma=0$ (21.37) совпадает с (21.31), и для справедливости оценки (21.38) должно быть выполнено условие (21.33). Если же $\sigma=1/2$, то оценка (21.38) верна при

$$\tau/h^2\leqslant 1. \tag{21.40}$$

21.4 Устойчивость по начальным данным разностной схемы для уравнения теплопроводности

Рассмотрим разностную схему (21.19) при $f^h\equiv 0$ на сетке, заданной на всей оси Ox, т.е. пусть

$$u_{t,m}^h=\sigma\hat{u}_{\bar{x}x,m}^h+(1-\sigma)u_{\bar{x}x,m}^h,\qquad m\in\mathbb{Z}. \tag{21.41}$$

Теорема 21.5. *Если параметр σ схемы* (21.41) *положителен и удовлетворяет условию*

$$\sigma \geqslant \frac{1}{2} - \frac{h^2}{4\tau} \tag{21.42}$$

то для решения (21.41) *имеет место априорная оценка*

$$\max_j \|u^{h\,j}\|_{L_2^h} \leqslant \|u^{h\,0}\|_{L_2^h}, \quad j = 1, 2, \ldots. \tag{21.43}$$

Доказательство. Сделаем в (21.41) сеточное преобразование Фурье

$$\tilde{u}_t + \frac{4\sin^2 \xi/2}{h^2}(\sigma\hat{\tilde{u}} + (1-\sigma)\tilde{u}) = 0.$$

Разрешая это обыкновенное разностное уравнение первого порядка относительно $\hat{\tilde{u}}$, получим

$$\hat{\tilde{u}} = q(\xi)\tilde{u}, \tag{21.44}$$

где

$$q(\xi) = \frac{1 - (1-\sigma)\dfrac{4\tau}{h^2}\sin^2\dfrac{\xi}{2}}{1 + \sigma\dfrac{4\tau}{h^2}\sin^2\dfrac{\xi}{2}}. \tag{21.45}$$

Из (21.44)

$$\|\hat{\tilde{u}}\|_{L_2(0,2\pi)} = \|q(\xi)\tilde{u}\|_{L_2(0,2\pi)} \leqslant \max_{0\leqslant\xi\leqslant 2\pi} |q(\xi)|\, \|\tilde{u}\|_{L_2(0,2\pi)}.$$

Отсюда следует, что L_2-норма образа Фурье решения не будет возрастать, если

$$|q(\xi)| \leqslant 1. \tag{21.46}$$

При этом

$$\|\hat{\tilde{u}}\|_{L_2(0,2\pi)} \leqslant \|\tilde{u}\|_{L_2(0,2\pi)} \leqslant \cdots \leqslant \|\tilde{u}^0\|_{L_2(0,2\pi)}.$$

Принимая теперь во внимание равенство Парсеваля (10.51), приходим к (21.43).

Покажем теперь, что (21.46) следует из (21.42). Так как $\sigma \geqslant 0$, то знаменатель в (21.45) положителен, и всегда $q \leqslant 1$. Осталось проверить условие $q \geqslant -1$, которое эквивалентно условию

$$2 - (1-2\sigma)\frac{4\tau}{h^2}\sin^2\frac{\xi}{2} \geqslant 0$$

или

$$1 - 2\sigma \leqslant \frac{h^2}{2\tau \sin^2 \dfrac{\xi}{2}}.$$

Но это условие будет выполнено, если

$$1 - 2\sigma \leqslant \min_{\xi} \frac{h^2}{2\tau \sin^2 \dfrac{\xi}{2}} = \frac{h^2}{2\tau},$$

что эквивалентно (21.42). Теорема доказана.

Упражнение 21.2. Рассмотреть неоднородное уравнение и установить оценку решения через правую часть.

22

Разностные схемы для уравнения колебаний струны

22.1 Аппроксимация

Рассмотрим другой пример уравнения с частными производными — уравнение колебаний струны

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < T. \tag{22.1}$$

Это — гиперболическое уравнение. Корректной для него является смешанная задача, например,

$$u(0,t) = u(1,t) = 0, \quad u(x,0) = \bar{u}(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = \bar{\bar{u}}(x). \tag{22.2}$$

Граничные условия при $x = 0$ и $x = 1$ предполагаются однородными граничными условиями первого рода, а в качестве начальных функций взяты некоторые функции $\bar{u}(x)$ и $\bar{\bar{u}}(x)$.

Как и при построении аппроксимации уравнения теплопроводности, аппроксимируем сначала производную по пространственной переменной x. В результате получим задачу

$$\begin{aligned} &\ddot{u}_i^h(t) = u_{\bar{x}x,i}^h(t), \quad i = 1, \ldots, N-1, \\ &u_0^h(t) = u_N^h(t) = 0, \\ &u^h(x_i, 0) = \bar{u}(x_i), \quad \dot{u}^h(x_i, 0) = \bar{\bar{u}}(x_i), \end{aligned} \tag{22.3}$$

которая представляет собой задачу Коши для системы $(N-1)$ дифференциальных уравнений второго порядка. Теперь произведем аппроксимацию по временно́й переменной: производную $\ddot{u}(t)$ заменим вторым

разностным отношением

$$u_{\bar{t}t}(t_j) \equiv [u(t_{j+1}) - 2u(t_j) + u(t_{j-1})]/\tau^2,$$

а правую часть (22.3) — линейной комбинацией ее значений при $t = t_{j-1}$, $t = t_j$ и $t = t_{j+1}$. В результате будем иметь

$$u^h_{\bar{t}t,i} = \sigma \hat{u}^h_{\bar{x}x,i} + (1 - 2\sigma) u^h_{\bar{x}x,i} + \sigma \check{u}^h_{\bar{x}x,i}, \quad i = 1, \ldots, N-1, \tag{22.4}$$

где наряду с уже введенным ранее обозначением $\hat{v}_i = v_i(t_{j+1})$ принято обозначение $\check{v}_i = v_i(t_{j-1})$. Правая часть (22.4) представляет собой не общую линейную комбинацию, а линейную комбинацию, симметричную относительно t_{j-1} и t_{j+1}.

К уравнениям (22.4) нужно добавить граничные и начальные условия, которые должны аппроксимировать соответственно условия (22.3)

$$u^{h\,j}_0 = \; u^{h\,j}_N = 0, \qquad j = 0, \ldots, J, \tag{22.5}$$

$$u^{h\,0}_i = \quad \bar{u}(x_i), \qquad i = 1, \ldots, N-1. \tag{22.6}$$

Второе из начальных условий (22.3) содержит производную. Аппроксимируя ее по двум точкам, получим

$$u^{h\,0}_{t,i} = \bar{\bar{u}}(x_i), \quad i = 1, \ldots, N-1. \tag{22.7}$$

Теорема 22.1. *Если решение $u(x,t)$ уравнения* (22.1) *обладает непрерывными четвертыми производными, то погрешность аппроксимации разностной схемы* (22.4) *есть $O(\tau^2 + h^2)$.*

Доказательство.

$$\Psi^j_i = \sigma \hat{u}_{\bar{x}x,i} + (1-2\sigma) u_{\bar{x}x,i} + \sigma \check{u}_{\bar{x}x,i} - u_{\bar{t}t,i} = \sigma\tau^2 u_{\bar{x}x\bar{t}t,i} + u_{\bar{x}x,i} - u_{\bar{t}t,i} =$$
$$= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(h^2) - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + O(\tau^2) = O(\tau^2 + h^2).$$

Теорема доказана.

Найдем погрешность аппроксимации начального условия (22.7)

$$\begin{aligned} \mathring{\psi}_i &= -u^0_{t,i} + \bar{\bar{u}}(x_i) = -\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, 0) - \frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, 0) + O(\tau^2) + \bar{\bar{u}}(x_i) = \\ &= -\frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, 0) + O(\tau^2). \end{aligned} \tag{22.8}$$

Погрешность аппроксимации начального условия (22.7) есть $O(\tau)$. Построим другую аппроксимацию с погрешностью не хуже $O(\tau^2 + h^2)$. Для этого преобразуем (22.8). В силу (22.1) $\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,0) = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,0)$, и поэтому

$$\overset{\circ}{\psi}_i = -\frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i,0) + O(\tau^2).$$

Принимая теперь во внимание (22.2), будем иметь

$$\overset{\circ}{\psi}_i = -\frac{\tau}{2}\bar{u}''(x_i) + O(\tau^2).$$

Отсюда и из (22.8) следует, что если вместо $\bar{\bar{u}}(x_i)$ в (22.7) положить $\bar{\bar{u}}(x_i) + \dfrac{\tau}{2}\bar{u}''(x_i)$, т.е. написать условие

$$u_{t,i}^{h\,0} = \bar{\bar{u}}_i + \frac{\tau}{2}\bar{u}_i'', \tag{22.9}$$

то погрешность этой аппроксимации будет $O(\tau^2)$. Очевидно также, что если вместо $\bar{u}_i''$ в (22.9) подставить $\bar{u}_{\bar{x}x,i}$, т.е. взять

$$u_{t,i}^{h\,0} = \bar{\bar{u}}_i + \frac{\tau}{2}\bar{u}_{\bar{x}x,i}, \tag{22.10}$$

то погрешность этой аппроксимации будет $O(\tau^2 + h^2)$.

Аппроксимация (22.10) всем хороша за исключением одного но. Именно, для аппроксимации уравнения (22.1) мы использовали однопараметрическое семейство разностных схем, среди которых имеются как явная ($\sigma = 0$), так и неявные ($\sigma \neq 0$). Аппроксимация же (22.10) всегда явная. Внесем параметр и в начальное условие. Пусть

$$u_{t,i}^{h\,0} = \bar{\bar{u}}_i + \frac{\tau}{2}[\gamma u_{\bar{x}x,i}^{h\,1} + (1-\gamma)u_{\bar{x}x,i}^{h\,0}].$$

Ясно, что погрешность этой аппроксимации снова не хуже $O(\tau^2 + h^2)$. Наконец, согласуем параметр γ с параметром σ, полагая $\gamma/2 = \sigma$. Аппроксимация второго начального условия (22.2) примет следующий окончательный вид

$$u_{t,i}^{h\,0} = \tau\sigma u_{\bar{x}x,i}^{h\,1} + \tau(\frac{1}{2} - \sigma)u_{\bar{x}x,i}^{h\,0} + \bar{\bar{u}}_i. \tag{22.11}$$

22.2 Устойчивость по начальным данным

Исследуем вопрос об устойчивости схемы (22.4) по начальным данным. Ограничимся изучением задачи Коши, т.е. будем предполагать, что уравнения (22.4) и начальные условия (22.6) и (22.11) заданы для всех $i \in \mathbb{Z}$.

Именно, будем рассматривать следующую задачу

$$u^h_{\bar{t}t,i} = \sigma \hat{u}^h_{\bar{x}x,i} + (1-2\sigma) u^h_{\bar{x}x,i} + \sigma \check{u}^h_{\bar{x}x,i}, \quad i \in \mathbb{Z}, \tag{22.12}$$

$$u^{h\,0}_i = \bar{u}_i, \quad u^{h\,0}_{t,i} = \tau\sigma u^{h\,1}_{\bar{x}x,i} + \tau(\frac{1}{2} - \sigma) u^{h\,0}_{\bar{x}x,i} + \bar{\bar{u}}_i, \quad i \in \mathbb{Z}. \tag{22.13}$$

Теорема 22.2. *Если параметр σ задачи* (22.12), (22.13) *неотрицателен и удовлетворяет условию*

$$\sigma \geqslant \frac{1}{4} - \frac{h^2}{4\tau^2}, \tag{22.14}$$

то для решения этой задачи справедлива априорная оценка

$$\|u^{h\,j}\|_{L^h_2} \leqslant \|\bar{u}\|_{L^h_2} + T\,\|\bar{\bar{u}}\|_{L^h_2}. \tag{22.15}$$

Доказательство. Сделаем сеточное преобразование Фурье (22.12), (22.13). Для образа Фурье $\tilde{u}^j(\xi)$ решения $u^{h\,j}_i$ получим задачу

$$\begin{aligned} &\tilde{u}_{\bar{t}t} + \frac{4\sin^2\frac{\xi}{2}}{h^2}[\sigma\hat{\tilde{u}} + (1-2\sigma)\tilde{u} + \sigma\check{\tilde{u}}] = 0, \\ &\tilde{u}^0 = \tilde{\bar{u}}, \quad \tilde{u}^0_t + \frac{4\tau\,\sin^2\frac{\xi}{2}}{h^2}\left[\sigma\tilde{u}^1 + \left(\frac{1}{2} - \sigma\right)\tilde{u}^0\right] = \tilde{\bar{\bar{u}}}. \end{aligned} \tag{22.16}$$

Умножим теперь уравнение (22.16) на τ^2 и перепишем в поточечном виде

$$\tilde{u}^{j+1} - 2\tilde{u}^j + \tilde{u}^{j-1} + \frac{4\tau^2}{h^2}\,\sin^2\frac{\xi}{2}[\sigma\tilde{u}^{j+1} + (1-2\sigma)\tilde{u}^j + \sigma\tilde{u}^{j-1}] = 0.$$

Введем обозначение

$$\frac{2\tau}{h}\,\sin\frac{\xi}{2} = \lambda \tag{22.17}$$

и напишем характеристическое уравнение разностного уравнения

$$(1+\sigma\lambda^2)q^2 - 2\left(1 + \left(\sigma - \frac{1}{2}\right)\lambda^2\right)q + (1+\sigma\lambda^2) = 0$$

или

$$q^2 - 2\frac{1 + (\sigma - 1/2)\lambda^2}{1+\sigma\lambda^2}q + 1 = 0.$$

Отсюда находим корни

$$\begin{aligned} q_{1,2} &= \frac{1 + (\sigma - 1/2)\lambda^2}{1+\sigma\lambda^2} \pm \\ &\pm \frac{\sqrt{[1 + (\sigma - 1/2)\lambda^2 + 1 + \sigma\lambda^2][1 + (\sigma - 1/2)\lambda^2 - 1 - \sigma\lambda^2]}}{1+\sigma\lambda^2} = \\ &= \frac{1 + (\sigma - 1/2)\lambda^2 \pm \sqrt{[1 + (\sigma - 1/4)\lambda^2](-\lambda^2)}}{1+\sigma\lambda^2}. \end{aligned} \tag{22.18}$$

Если

$$1+\left(\sigma-\frac{1}{4}\right)\lambda^2>0,$$

то корни q_1 и q_2 будут комплексными и равными по модулю 1. Если же

$$1+\left(\sigma-\frac{1}{4}\right)\lambda^2=0,$$

то

$$q_{1,2}=\frac{1+(\sigma-1/2)\lambda^2}{1+\sigma\lambda^2}=\frac{-1/4\,\lambda^2}{1/4\,\lambda^2}=-1$$

и снова $|q_{1,2}|=1$.

Выясним, когда

$$1+\left(\sigma-\frac{1}{4}\right)\lambda^2\geqslant 0,$$

или, что то же самое,

$$(1/4-\sigma)\leqslant\frac{1}{\lambda^2}.$$

Это неравенство будет выполнено при всех $\xi\in(0,2\pi]$, если (см. (22.17))

$$\frac{1}{4}-\sigma\leqslant\min_{\xi}\frac{1}{\lambda^2}=\frac{h^2}{4\tau^2}.$$

Но это условие совпадает с условием (22.14) теоремы 22.2, и, следовательно, $|q_{1,2}|=1$.

Введем обозначение

$$q_{1,2}=e^{\pm i\varphi(\xi)}=\cos\varphi\pm i\sin\varphi,$$

где, согласно (22.18),

$$\cos\varphi=\frac{1+(\sigma-1/2)\lambda^2}{1+\sigma\lambda^2},\quad \sin\varphi=\frac{|\lambda|\sqrt{1+(\sigma-1/4)\lambda^2}}{1+\sigma\lambda^2},\tag{22.19}$$

и найдем решение задачи (22.16). Общее решение разностного уравнения (22.16) есть

$$\tilde{u}^j=c_1\cos j\varphi+c_2\sin j\varphi.$$

При $j=0$

$$\tilde{u}^0=c_1=\widetilde{\bar{u}},$$

а при $j=1$

$$\tilde{u}^1=c_1\cos\varphi+c_2\sin\varphi.$$

Из вышесказанного следует, что

$$c_2 = \frac{\tilde{u}^1 - \widetilde{\bar{u}} \cos\varphi}{\sin\varphi}. \tag{22.20}$$

Далее, из второго начального условия (22.16)

$$\tilde{u}^1(1+\sigma\lambda^2) = \left(1 + \left(\sigma - \frac{1}{2}\right)\lambda^2\right)\tilde{u}^0 + \tau\widetilde{\bar{\bar{u}}},$$

и, следовательно,

$$\tilde{u}^1 = \frac{1+(\sigma-1/2)\lambda^2}{1+\sigma\lambda^2}\tilde{u}^0 + \frac{\tau\widetilde{\bar{\bar{u}}}}{1+\sigma\lambda^2},$$

а с учетом (22.19)

$$\tilde{u}^1 = \cos\varphi\,\widetilde{\bar{u}} + \frac{\tau\widetilde{\bar{\bar{u}}}}{1+\sigma\lambda^2}.$$

Подставляя это значение $\tilde{u}^1$ в (22.20), найдем, что

$$c_2 = \frac{\tau\widetilde{\bar{\bar{u}}}}{(1+\sigma\lambda^2)\sin\varphi}.$$

Окончательно для решения задачи (22.16) получаем представление

$$\tilde{u}^j = \widetilde{\bar{u}}\cos j\varphi + \tau\,\frac{\widetilde{\bar{\bar{u}}}}{1+\sigma\lambda^2}\,\frac{\sin j\varphi}{\sin\varphi}. \tag{22.21}$$

Чтобы оценить правую часть (22.21), нам потребуется

Лемма 22.1. *При* $n \in \mathbb{N}$

$$|\sin(n\varphi)/\sin\varphi| \leqslant n.$$

Доказательство. Имеем

$$\left|\frac{e^{in\varphi} - e^{-in\varphi}}{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}\right| = \left|\frac{e^{2in\varphi}-1}{e^{2i\varphi}-1}\,\frac{e^{i\varphi}}{e^{in\varphi}}\right| = \left|\frac{e^{2in\varphi}-1}{e^{2i\varphi}-1}\right| =$$
$$= \left|e^{2i(n-1)\varphi} + e^{2i(n-2)\varphi} + \dots + 1\right| \leqslant n.$$

Лемма доказана.

Используя лемму 22.1, из (22.21) находим, что

$$|\tilde{u}^j| \leqslant |\widetilde{\bar{u}}| + \tau j|\widetilde{\bar{\bar{u}}}| \leqslant |\widetilde{\bar{u}}| + T|\widetilde{\bar{\bar{u}}}|.$$

Отсюда

$$\|\tilde{u}^j\|_{L_2(0,2\pi)} \leqslant \|\widetilde{\bar{u}}\|_{L_2(0,2\pi)} + T\|\widetilde{\bar{\bar{u}}}\|_{L_2(0,2\pi)},$$

а с учетом равенства Парсеваля

$$\|u^j\|_{L_2^h} \leqslant \|\bar{u}\|_{L_2^h} + T\|\bar{\bar{u}}\|_{L_2^h}.$$

Теорема доказана.

Следствие 3. При $\sigma \geqslant 1/4$ условие (22.14) выполнено, и оценка (22.15) решения имеет место для любых h и τ. При $\sigma = 0$ (явная схема) условие (22.14) выполнено, если $\tau \leqslant h$, и поэтому оценка (22.15) имеет место только при указанном соотношении между τ и h.

Литература

1. А.А. Амосов, Ю.А. Дубинский, Н.В. Копченова. Вычислительные методы для инженеров. М.: Высшая школа. 1991.
2. Н.С.Бахвалов, Н.П.Жидков, Г.М.Кобельков. Численные методы. М.: Наука. 1989.
3. В.М.Вербжицкий. Основы численных методов. М.: Высшая школа. 2002.
4. Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун. Матричные вычисления. М.: Мир. 1999.
5. Дж. Деммель. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. М.: Мир. 2001.
6. Х.Д.Икрамов. Численные методы линейной алгебры. М.: Знание. 1987 (Новое в жизни, науке, технике. Сер. Математика, кибернетика. N 4/1987).
7. Д. Каханер, К. Моулер, С. Нэш. Численные методы и программное обеспечение. М.: Мир. 2001.
8. А.А.Самарский, А.В.Гулин. Численные методы. М.: Наука. 1989.
9. А.А.Самарский, Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука. 1978.
10. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Ред. Дж. Холл и Дж. Уатт. М.: Мир. 1979.
11. Е.Е. Тыртышников. Методы численного анализа. М.: Академия. 2007.
12. Д. Уоткинс. Основы матричных вычислений. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2006.
13. Э.Хайрер, С.Нёрсетт, Г.Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир. 1990.

14. A. Quarteroni, R. Sacco, E. Saleri. Numerical Mathematics. Springer-Verlag. 2000.

15. L.N. Treffethen, D. Bau, III. Numerical linear algebra. Philadelphia SIAM. 1997.