Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики

Лекции по курсу

Численные методы

Лектор
Н. И. Ионкин

Москва, 2015

Оглавление

Предисловие

Читателю предлагается курс лекций по численным методам, который автор читает в течение более трех десятков лет студентам III – IV курсов потока программистских кафедр факультета ВМК МГУ. Безусловно, программа и содержание курса неоднократно менялись за эти годы как в связи с обновлением курса, так и в связи с преобразованиями учебных планов, происходившими в разные годы на факультете ВМК. Здесь представлен вариант курса, читаемого в последние годы.

Отечественными математиками написан ряд замечательных учебных пособий по численным методам (см. список цитируемой литературы). При подготовке курса существенно использовалось учебное пособие А. А. Самарского и А. В. Гулина «Численные методы».

Решение издать курс лекций обусловлено постоянными из года в год просьбами студентов, слушающих этот курс, оформить лекции в печатной и электронной версиях.

Данный курс лекций ориентирован на студентов (и читателей), основной специализацией которых не является разработка и теоретическое обоснование численных методов решения прикладных задач. Предполагается, что читатель знаком с базовыми понятиями линейной алгебры, математического анализа, дифференциальных уравнений и уравнений математической физики. При построении и обосновании численных алгоритмов использован наиболее простой, по возможности, математический аппарат перечисленных выше разделов математики.

Одной из главных задач курса является обретение студентами навыка ориентирования в области численных методов. В процессе работы над предложенным курсом читатель знакомится с основными идеями построения и обоснования вычислительных алгоритмов и приобретает знания, достаточные для разработки новых алгоритмов.

Подход к подбору материала курса и его изложению формировался под влиянием моего учителя А. А. Самарского и моего коллеги — профессора А. В. Гулина, которым я бесконечно признателен и благодарен за многочисленные советы и рекомендации.

Считаю своим приятным долгом выразить благодарность студентам, помогавшим в оформлении лекций курса и особенно Иванову Д. И., Кислых Д. М. и Шохину К. О. за труд при работе над данной версией курса лекций.

Лауреат Ломоносовской премии МГУ за педагогическую деятельность, заслуженный преподаватель МГУ, доцент Н. И. Ионкин

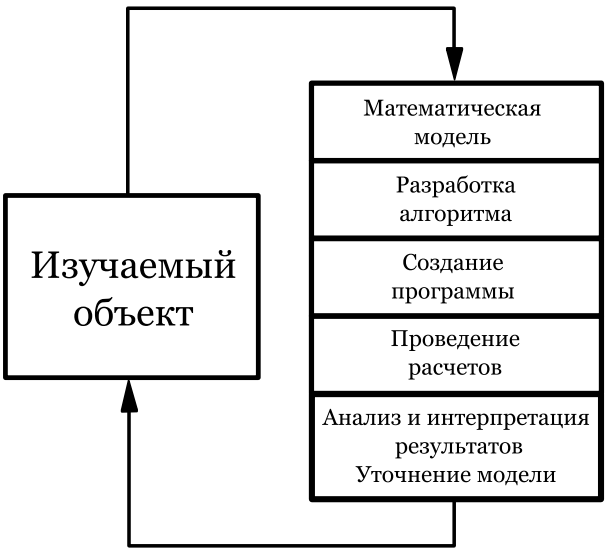
Введение

Предмет численных методов, если его понимать не как учебный курс, а как отрасль науки, весьма обширен и неоднороден. В очень общих чертах его можно охарактеризовать как совокупность приемов и методов, позволяющих с помощью компьютера решать те или иные задачи, уже получившие математическую формулировку.

Предполагается, что читатель знаком с некоторыми численными методами. Так, в курсах анализа и алгебры рассматривались приближенные методы вычисления определенных интегралов, нахождения корней алгебраических уравнений, решения систем линейных алгебраических уравнений. Из курса «Введение в численные методы» читатель получил представление о приближенном решении обыкновенных дифференциальных уравнений с помощью метода конечных разностей.

Нетрудно видеть, что общим для всех перечисленных методов является построение и обоснование алгоритма, позволяющего дать решение исходной задачи в виде числа или таблицы чисел.

Обычно процесс решения прикладной задачи складывается из нескольких крупных этапов, образующих, как иногда говорят, «колесо Самарского» (А. А. Самарский — один из крупнейших математиков XX века в области численных методов решения актуальных прикладных задач).



Принцип колеса Самарского заключен в следующем: сначала по изучаемому объекту строится его математическая модель, которая отражает существенные в данной задаче свойства изучаемого объекта. Затем для построенной модели предлагается алгоритм решения поставленной задачи и приводится его обоснование. По предложенному алгоритму создается программа для выполнения численных расчетов на ЭВМ, после чего уже производятся сами расчеты, анализ результатов выполнения алгоритма, их интерпретация и,

возможно, уточнение модели. Получение новых данных расширяет существующие знания об изучаемом объекте, появляются новые задачи, и колесо Самарского замыкается.

В рамках данного курса численных методов рассматривается этап разработки алгоритма для некоторых классов математических моделей. Мы предполагаем, что каждая из рассматриваемых нами математических моделей поставлена корректно (рассмотрение решения задач для некорректных математических моделей выходит за рамки нашего курса).

Данный курс разделен на пять глав. В главе I рассматриваются прямые и итерационные численные методы решения систем линейных алгебраических уравнений, а также исследуются итерационные методы решения частичной и полной проблем собственных значений. В главе II представлены методы интерполирования и приближения функций. В главе III описаны методы решения нелинейных уравнений и систем нелинейных уравнений. На практике часто встречается задача численного решения дифференциальных уравнений, которой посвящены главы IV и V. Так, в главе IV приводятся описание и анализ разностных методов решения задач математической физики. А в заключительной, пятой, главе рассматриваются методы численного решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.

В приложении А размещена информация об ученых, упомянутых в тексте, которая была взята из интернета. Информация носит ознакомительный характер, не претендует на оригинальность и, надеемся, будет весьма интересна читателю.

Список обозначений

$\mathbb{N}$ — множество натуральных чисел: $\{1,2, \dots\}$;
$\mathbb{Z}$ — множество целых чисел;
$\mathbb{Z}_+$ — множество целых неотрицательных чисел;
$\mathbb{R}$ — множество вещественных чисел;
$\mathbb{R}_+$ — множество вещественных неотрицательных чисел;
$\mathbb{C}$ — множество комплексных чисел;
$f(x) = \mathrm{O}\big(g(x)\big)$ — функция f асимптотически ограничена сверху функцией g (с точностью до постоянного множителя);
$\boldsymbol{f}(x)$ — вектор-функция;
$[x]$ — целая часть числа x.

В следующих обозначениях m и n — натуральные числа.
$A\ (m \times n)$ — вещественная (если не сказано иное) матрица A, содержащая m строк и n столбцов;
$\mathbb{R}^{m\times n}$ — множество всех матриц размера $m \times n$ над полем вещественных чисел;
$\mathbb{C}^{m\times n}$ — множество всех матриц размера $m \times n$ над полем комплексных чисел.

Размер следующих матриц и вектора определяется по контексту.
θ — нулевой вектор-столбец;
E — единичная матрица;
$\mathbf{0}$ — нулевая матрица;

$\square$ — конец доказательства;
δ_{ij} — символ Кронекера:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } \ i = j, \\ 0 & \text{при } \ i \neq j. \end{cases}$$

Глава I

Численные методы линейной алгебры

§1 Основные задачи главы I

Решение систем линейных уравнений

Рассмотрим матричное уравнение вида

$$Ax = f, \tag{1}$$

где $|A| \neq 0,\ A\ (m \times m),\ x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T,\ f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)^T$.
Так как матрица A невырождена, то решение системы (1) существует и единственно (см. [7], гл.VI, стр.104). Существуют две группы методов решения СЛАУ:

1. Прямые методы (методы Гаусса, Крамера, Холецкого и другие (см. [1], [4])), позволяющие за конечное число действий получить решение задачи. Эффективность методов этой группы оценивается по необходимому числу умножений и делений. Несмотря на то, что эти методы часто называют точными, прямые методы таковыми не являются из-за ошибок округления при вычислении.

2. Итерационные методы (методы Якоби, Зейделя, попеременно-треугольный итерационный метод и другие), в которых задается начальное приближение x^0 и итерационный процесс, по которому строится x^n — последовательность приближений, такая, что $\|x - x^n\| < \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$ — точность приближения).

   Эффективность итерационного метода определяется числом итераций $n_0 = n_0(\varepsilon)$, необходимых для получения решения с заданной точностью ε.

Поиск собственных значений матрицы

Задача нахождения собственных значений матрицы $A\ (m \times m)$ состоит в решении уравнения

$$Ax = \lambda x,\ x \neq \theta. \tag{2}$$

Здесь λ — собственное значение, x — собственный вектор. Собственные значения находятся из уравнения $|A - \lambda E| = 0$, которое в общем случае представляет из себя многочлен степени n. Однако, как было доказано Абелем и Галуа, при $n \geqslant 5$ данное уравнение не имеет общего решения в радикалах. Таким образом, в общем виде задачу можно решить только вычислительными методами.

Рассматривают две проблемы поиска собственных значений:

1. Частичная проблема собственных значений — нахождение отдельных собственных значений (например, максимального и минимального по модулю).

2. Полная проблема собственных значений (для решения часто используется метод QR–разложения матрицы A) — нахождение всех собственных значений матрицы.

Нахождение обратной матрицы

Определение. *Матрица A^{-1} называется обратной к матрице A, если она удовлетворяет равенствам*

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E.$$

Из курса линейной алгебры известно, что если найдена матрица, обратная к матрице A, например, в задаче поиска решения системы линейных уравнений (1), то решение находится очень просто: $x = A^{-1}f$. В дальнейшем будем активно использовать понятие обратной матрицы не только в контексте прямого поиска решения, но и при исследовании на сходимость численных методов нахождения решений различных задач и оценке скорости их сходимости.

§2 Связь метода Гаусса с факторизацией матрицы

Рассмотрим матричное уравнение вида

$$Ax = f, \tag{1}$$

где $|A| \neq 0$, A $(m \times m)$, $x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T$, $f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)^T$. Матрица A, вообще говоря, может быть матрицей с комплексными элементами.

Рассмотрим факторизацию (разложение в произведение) матрицы A $(m \times m)$

$$A = B \cdot C, \tag{2}$$

где B — нижняя треугольная матрица, а C — верхняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали:

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mm} \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & c_{12} & \cdots & c_{1m} \\ 0 & 1 & \cdots & c_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Ясно, что не любую матрицу A можно представить в виде (2). В дальнейшем покажем, что нахождение элементов матриц B и C возможно при определенном ограничении на матрицу A. Запишем выражение элемента a_{ij} матрицы $A = BC$ как произведение i-й строки матрицы B и j-ого столбца матрицы C:

$$a_{ij} = \sum_{l=1}^{m} b_{il}c_{lj}.$$

Выделим j-ое слагаемое:

$$a_{ij} = \sum_{l=1}^{j-1} b_{il}c_{lj} + b_{ij}c_{jj} + \sum_{l=j+1}^{m} b_{il}c_{lj}.$$

Учитывая структуру матрицы C ($c_{lj} = 0, l > j, c_{jj} = 1$), получим

$$b_{ij} = a_{ij} - \sum_{l=1}^{j-1} b_{il} c_{lj}, \quad i \geqslant j. \tag{3}$$

Аналогично, в определении элемента a_{ij} матрицы A выделим i-ое слагаемое:

$$a_{ij} = \sum_{l=1}^{i-1} b_{il} c_{lj} + b_{ii} c_{ij} + \sum_{l=i+1}^{m} b_{il} c_{lj}.$$

Исходя из вида матрицы B ($b_{il} = 0, l > i$), получим

$$b_{ii} c_{ij} = a_{ij} - \sum_{l=1}^{i-1} b_{il} c_{lj}.$$

Предполагая, что $b_{ii} \neq 0$, поделим левую и правую части уравнения на b_{ii}:

$$c_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum\limits_{l=1}^{i-1} b_{il} c_{lj}}{b_{ii}}, \quad i < j. \tag{4}$$

Уравнения (3) и (4) позволяют сформулировать следующий алгоритм нахождения элементов матриц B и C.

1. Положим $b_{11} = a_{11}$. Найдем элементы 1-й строки матрицы C:

$$c_{1j} = \frac{a_{1j}}{b_{11}}, \quad j = \overline{2, m}.$$

2. Рассмотрим элементы 1-ого столбца матрицы B:

$$b_{i1} = a_{i1}, \quad i = \overline{2, m}.$$

3. Положим $b_{22} = a_{22} - b_{21} c_{12}$. Далее, аналогично первому шагу, найдем элементы 2-й строки матрицы C по формулам:

$$c_{2j} = \frac{a_{2j} - b_{21} c_{1j}}{b_{22}}, \quad j = \overline{3, m}.$$

4. Вычислим элементы 2-ого столбца матрицы B аналогично второму шагу:

$$b_{i2} = a_{i2} - b_{i1} c_{12}, \quad i = \overline{3, m}.$$

5. Повторяя последовательно шаги алгоритма для столбцов матрицы B и строк матрицы C, найдем все элементы матриц B и C.

Утверждение. *Пусть все угловые миноры матрицы A отличны от нуля. Тогда представление матрицы A в виде (2) существует и единственно.*

Доказательство. Обозначим $|A_1| = a_{11} \neq 0$, $A_2 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \ldots, A_i = \begin{pmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \ldots & a_{ii} \end{pmatrix}$, $i = \overline{1,m}$.

Поскольку $|A_i| \neq 0, \quad i = \overline{1,m}$, введем для определенности $|A_0| = 1$. Ясно, что

$$A_i = B_i \cdot C_i, \quad i = \overline{1,m},$$

где B_i и C_i матрицы угловых миноров i-го порядка для матриц B и C соответственно.

Вычислим значение определителя матрицы A_i, приняв во внимание вид матриц C_i и B_i и равенство $|C_i| = 1$:

$$|A_i| = |B_i||C_i| = \underbrace{b_{11}b_{22} \cdot \ldots \cdot b_{i-1,i-1}}_{|A_{i-1}|} b_{ii},$$

Следовательно,

$$b_{ii} = \frac{|A_i|}{|A_{i-1}|} \neq 0, \quad i = \overline{1,m}.$$

Таким образом, факторизация матрицы A в виде (2) существует и определяется единственным образом. □

Задача. *Показать, что для вычисления элементов матриц B и C по формулам (3) и (4) требуется $\frac{m^3-m}{3}$ умножений и делений. (Число умножений и делений далее будем называть числом операций.)*

Решение. Оценим необходимое число операций для вычисления элементов b_{ij} по формуле (3). Для вычисления фиксированного b_{ij} потребуется $(j-1)$ умножение. Зафиксировав i и учитывая, что $i \geqslant j$, получим

$$\sum_{j=1}^{i}(j-1) = \frac{i(i-1)}{2}.$$

Далее, варьируя i от 1 до m, получим

$$\sum_{i=1}^{m} \frac{i(i-1)}{2} = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{m} i^2 - \sum_{i=1}^{m} i\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{m(m+1)(2m+1)}{6} - \frac{m(m+1)}{2}\right) = \frac{m(m-1)(m+1)}{6}.$$

Оценим необходимое число операций для вычисления элементов c_{ij} по формуле (4). Для вычисления фиксированного c_{ij} потребуется $(i-1)$ умножение и одно деление. При фиксированном j получим

$$\sum_{i=1}^{j-1} i = \frac{j(j-1)}{2}.$$

Далее, варьируя j от 1 до m, получим аналогичную формулу:

$$\sum_{j=1}^{m} \frac{j(j-1)}{2} = \frac{m(m-1)(m+1)}{6}.$$

Сложив необходимое число операций для вычисления b_{ij} и c_{ij}, получим искомый результат:

$$\frac{m(m-1)(m+1)}{6} + \frac{m(m-1)(m+1)}{6} = \frac{m^3-m}{3}.$$

□

Замечание. *Классическим методом решения СЛАУ вида (1) является метод Гаусса. Кратко напомним, в чем он заключается:*

1. *Прямой ход. С помощью элементарных преобразований матрица $[A|f]$, получаемая приписыванием к матрице A вектор-столбца f правых частей системы уравнений (1), приводится к матрице $[A'|f']$, где A' — верхняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали:*

$$[A|f] \to \ldots \to [A'|f'].$$

На этом этапе мы получили новую СЛАУ

$$A'y = f', \tag{5}$$

эквивалентную данной: ее решение совпадает с решением исходной задачи.

2. *Обратный ход метода Гаусса. Последовательно, начиная с последнего уравнения СЛАУ (5) и поднимаясь к первому, по явным формулам вычисляются все компоненты решения системы.*

Число действий, необходимое для преобразований матрицы в прямом ходе метода Гаусса равно $\frac{m^3-m}{3}$. Подробный подсчет числа действий можно найти, например, в [8] с. 13. Заметим, что матрица A', к которой приводится матрица A в прямом ходе метода Гаусса, в точности совпадает с матрицей C, полученной в результате факторизации матрицы A в виде (2). Таким образом факторизация матрицы A в виде (2) требует такое же число действий, что и сведение матрицы A к A' в прямом ходе метода Гаусса.

В матричном уравнении (1) подставим $A = BC$: $BCx = f$, обозначим $Cx = y$ и получим две системы уравнений с треугольными матрицами:

$$\begin{cases} By = f & (6) \\ Cx = y, \qquad y = (y_1, \ldots, y_m)^T. & (7) \end{cases}$$

Запишем i-ое уравнение системы (6):

$$b_{i1}y_1 + b_{i2}y_2 + \ldots + b_{ii}y_i = f_i, \quad i = \overline{1,m}.$$

Предполагая, что $b_{ii} \neq 0$, получим

$$y_i = \frac{f_i - \sum\limits_{l=1}^{i-1} b_{il}y_l}{b_{ii}}.$$

Для вычисления y_i требуется $(i-1)$ умножение и 1 деление — всего i операций. Учитывая, что i изменяется от 1 до m, получим, что для решения системы (6) требуется $1+2+\ldots+m = \frac{m(m+1)}{2}$ операций.

Замечание 1. *На вычисление новых правых частей, т.е. вектора f', в методе Гаусса уходит $\frac{m(m+1)}{2}$ действий. Как мы можем видеть, это число совпадает с числом операций, необходимых для вычисления вектора y при решении системы (6).*

Аналогично, запишем i-ое уравнение системы (7):

$$x_i + c_{i,i+1}x_{i+1} + \ldots + c_{im}x_m = y_i,$$

$$x_i = y_i - \sum_{l=i+1}^{m} c_{il}x_l, \quad i = \overline{1,m}.$$

Для вычисления x_i требуется $(m-i)$ умножений. Изменяя i от 1 до m, получим, что для решения системы (7) требуется $(m-1)+(m-2)+\ldots+2+1 = \frac{m(m-1)}{2}$ умножений.

Замечание 2. *Число операций, затрачиваемых на выполнение обратного хода метода Гаусса, равно* $\frac{m(m-1)}{2}$*, что совпадает с числом действий, требуемых для решения системы* (7).

В итоге получим, что для решения систем (6) и (7) требуется $\frac{m(m-1)}{2} + \frac{m(m+1)}{2} = m^2$ операций. Тогда все решение системы (1) с использованием факторизации матриц требует $\frac{m^3-m}{3} + m^2 = \frac{m^3+3m^2-m}{3}$ операций, что равно общему числу операций, необходимых для решения этой же системы методом Гаусса. Таким образом, решение системы (1) методом Гаусса эквивалентно по числу операций факторизации матрицы и решению двух систем уравнений.

Замечание 3. *Поясним, в каких случаях выгодно решать СЛАУ* (1) *именно с использованием факторизации вместо классического метода Гаусса. На практике: как правило, решаются целые серии задач с одной и той же матрицей* A*, которая описывает математическую модель изучаемого объекта или процесса, и с различными правыми частями* f*, которые соответствуют изменяющимся входным условиям. Таким образом, можно один раз факторизовать матрицу* A*, а затем для нахождения решения каждой задачи решать лишь СЛАУ вида* (6) *и* (7) *для каждого наблюдения. Так как в методе Гаусса наибольшее число действий требуется на преобразование матрицы* A *к верхнему треугольному виду* ($\frac{m^3-m}{3}$)*, то решая серию СЛАУ с фиксированной матрицей* A *с использованием факторизации, разложение* $A = BC$ *осуществляется лишь один раз, затрачивая на это* $\frac{m^3-m}{3}$ *действий, а затем решается серия СЛАУ с меняющимися правыми частями. В итоге, общее число операций на решение серии СЛАУ будет меньше, чем при решении той же серии классическим методом Гаусса. Этот выигрыш будет виден при решении задачи обращения невырожденной матрицы.*

§3 Обращение матрицы методом Гаусса-Жордана

Рассмотрим задачу обращения (поиска обратной матрицы) невырожденной матрицы A ($m \times m$). Согласно критерию обратимости матрицы, для невырожденной матрицы всегда существует обратная. Введем обозначение: $A^{-1} = X = (x_{ij}),\ i,j = \overline{1,m}$. С учетом этого задача обращения матрицы состоит в решении системы

$$AX = E, \tag{1}$$

где A ($m \times m$), $|A| \neq 0$, или, если записать поэлементно:

$$\sum_{l=1}^{m} a_{il}x_{lj} = \delta_{ij},\ i = \overline{1,m},\ j = \overline{1,m}. \tag{2}$$

Можно приступить к решению последней системы методом Гаусса без учета структуры матрицы коэффициентов. Эта система имеет m^2 неизвестных переменных, число требуемых для решения операций будет пропорционально m^6. Покажем, что существует способ обращения матрицы, требующий ровно m^3 операций. Более того, в случае, если матрица A имеет специальную структуру (например, если матрица A — блочная или трехдиагональная), число операций уменьшится.

Сведем уравнение (2) к решению m систем линейных уравнений с матрицей A. Для этого введем вектор-столбец матрицы X: $X^{(j)} = (x_{1j}, x_{2j}, \ldots, x_{mj})^T$ и вектор-столбец правой части $\delta^{(j)} = (0, 0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0)^T$ с единицей на j-й позиции. Теперь можем записать матричное уравнение (1) в виде m систем:

$$AX^{(j)} = \delta^{(j)}, \quad j = \overline{1,m}. \tag{3}$$

Факторизуем матрицу A в виде

$$A = B \cdot C. \tag{4}$$

Для этого требуется $\frac{m^3-m}{3}$ умножений и делений. Получаем две системы линейных уравнений:

$$\begin{cases} By^{(j)} = \delta^{(j)}, \quad j = \overline{1,m}, & (5) \\ Cx^{(j)} = y^{(j)}. & (6) \end{cases}$$

При фиксированном j решение систем (5) и (6) потребует m^2 действий. Для решения m таких систем при $j = \overline{1,m}$ потребуется m^3 действий. Значит, в целом для обращения матрицы A необходимо $m^3 + \frac{m^3-m}{3} \sim \frac{4}{3}m^3$ операций. Покажем теперь, что это число операций можно уменьшить. Рассмотрим систему уравнений (5):

$$\begin{aligned} b_{11}y_1^{(j)} = 0 \quad &\Rightarrow \quad y_1^{(j)} = 0, \\ b_{21}y_1^{(j)} + b_{22}y_2^{(j)} = 0 \quad &\Rightarrow \quad y_2^{(j)} = 0, \\ b_{31}y_1^{(j)} + b_{32}y_2^{(j)} + b_{33}y_3^{(j)} = 0 \quad &\Rightarrow \quad y_3^{(j)} = 0, \\ &\dots \\ b_{j-1,1}y_1^{(j)} + \ldots + b_{j-1,j-1}y_{j-1}^{(j)} = 0 \quad &\Rightarrow \quad y_{j-1}^{(j)} = 0. \end{aligned}$$

Рассмотрим j-ое уравнение: $b_{jj}y_j^{(j)} = 1$. Предполагая, что $b_{jj} \neq 0$, получим:

$$y_j^{(j)} = \frac{1}{b_{jj}}. \tag{7}$$

Запишем уравнения системы при $i > j$

$$b_{ij}y_j^{(j)} + b_{i,j+1}y_{j+1}^{(j)} + \ldots + b_{ii}y_i^{(j)} = 0, \quad i = \overline{(j+1),m}, \tag{8}$$

и выразим из них $y_i^{(j)}$:

$$y_i^{(j)} = \frac{-\sum\limits_{l=j}^{i-1} b_{il}y_l^{(j)}}{b_{ii}}, \quad i = \overline{(j+1),m}. \tag{9}$$

Перейдем к подсчету числа операций, необходимых для решения систем уравнений (5) и (6). При фиксированных i и j в формуле (9) получаем $(i-j)$ умножений и одно деление в уравнении (7). Варьируя индекс i от 1 до m, при фиксированном j получаем

$$(m-j) + (m-j-1) + \ldots + 1 = \frac{(m-j)(m-j+1)}{2}$$

умножений и $(m-j+1)$ делений. Таким образом, число действий, необходимое для решения одной системы (5) равно

$$\frac{(m-j)(m-j+1)}{2} + \frac{2(m-j+1)}{2} = \frac{(m-j+1)(m-j+2)}{2}.$$

Общее число действий, необходимое для решения всех m систем (5) равно

$$\sum_{j=1}^{m} \frac{(m-j+1)(m-j+2)}{2}. \tag{10}$$

Задача. *Показать, что сумма* (10) *равна* $\frac{m(m+1)(m+2)}{6}$.

Решение. Сделаем замену $k = m - j + 1$ в формуле (10):

$$\sum_{j=1}^{m} \frac{(m-j+1)(m-j+2)}{2} = \sum_{k=1}^{m} \frac{k(k+1)}{2}.$$

Преобразовав полученное выражение, получим искомый результат:

$$\frac{1}{2}\left(\sum_{k=1}^{m} k^2 + \sum_{k=1}^{m} k\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{m(m+1)(2m+1)}{6} + \frac{m(m+1)}{2}\right) = \frac{m(m+1)(m+2)}{6}.$$

□

Аналогично получаем, что число операций для решения всех m систем вида (6) равно $\frac{m^2(m-1)}{2}$. Просуммируем число операций для факторизации исходной матрицы и для решения систем (5) и (6) при $j = \overline{1,m}$:

$$\frac{m^3 - m}{3} + \frac{m(m+1)(m+2)}{6} + \frac{m^2(m-1)}{2} = m^3.$$

Описанный выше метод обращения произвольной невырожденной матрицы называется методом Гаусса-Жордана. Отметим, что он является самым эффективным методом обращения невырожденных матриц произвольного вида.

§4 Метод квадратного корня

Определение. *Квадратная матрица A называется эрмитовой (самосопряженной), если ее элементы связаны соотношением $a_{ij} = \overline{a_{ji}}$). В этом случае будем записывать $A = A^*$.*

Рассмотрим задачу

$$Ax = f, \tag{1}$$

где $A \in \mathbb{C}^{m\times m}$, $A = A^*$, $|A| \neq 0$, $x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T$, $f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)^T$, и один из прямых методов ее решения — метод квадратного корня (метод Холецкого).

Заметим, что хотя класс эрмитовых матриц с точки зрения линейной алгебры достаточно узок, на практике часто возникают модели, описываемые именно этим классом матриц. Поэтому с практической точки зрения такое ограничение на систему (1) вполне допустимо. Факторизуем эрмитову матрицу A в виде

$$A = S^* D S, \tag{2}$$

где матрица S — верхнетреугольная матрица с положительными элементами на главной диагонали, а D — диагональная матрица со значениями ± 1 на главной диагонали:

$$S = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1m} \\ 0 & s_{22} & \cdots & s_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s_{mm} \end{pmatrix}, \ s_{ii} > 0, \qquad D = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_{mm} \end{pmatrix}, \ d_{ii} = \pm 1.$$

Покажем, что факторизация (2) возможна на примере вещественной симметрической матрицы второго порядка. Не ограничивая общности, будем полагать $a_{11} \neq 0$.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = A^T, \quad a_{12} = a_{21}.$$

Матрицы S и D будем искать в виде

$$S = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ 0 & s_{22} \end{pmatrix},\ s_{ii} > 0,\ i = 1, 2,$$

$$S^* = S^T = \begin{pmatrix} s_{11} & 0 \\ s_{12} & s_{22} \end{pmatrix},$$

$$D = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 \\ 0 & d_{22} \end{pmatrix},\ d_{ii} = \pm 1,\quad i = 1, 2.$$

Найдем матрицу DS:

$$DS = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 \\ 0 & d_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ 0 & s_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11}s_{11} & d_{11}s_{12} \\ 0 & d_{22}s_{22} \end{pmatrix}.$$

Домножим матрицу DS слева на S^T:

$$S^T DS = \begin{pmatrix} s_{11} & 0 \\ s_{12} & s_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{11}s_{11} & d_{11}s_{12} \\ 0 & d_{22}s_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11}s_{11}^2 & d_{11}s_{11}s_{12} \\ d_{11}s_{11}s_{12} & d_{11}s_{12}^2 + d_{22}s_{22}^2 \end{pmatrix}.$$

Приравняем элементы матриц A и $S^T DS$:

$$\begin{cases} a_{11} = d_{11}s_{11}^2 & (3) \\ a_{12} = d_{11}s_{11}s_{12} & (4) \\ a_{22} = d_{11}s_{12}^2 + d_{22}s_{22}^2. & (5) \end{cases}$$

Из неравенства $s_{11} > 0$ и из уравнения (3) следует, что

$$d_{11} = \operatorname{sgn} a_{11},\ s_{11} = \sqrt{|a_{11}|}.$$

Рассмотрим уравнение (4). Заметим, что $s_{11}d_{11} \neq 0$, тогда

$$s_{12} = \frac{a_{12}}{s_{11}d_{11}}.$$

Наконец, рассмотрим уравнение (5). Получим соотношение $s_{22}^2 d_{22} = a_{22} - d_{11}s_{12}^2$, правая часть которого известна. Следовательно,

$$d_{22} = \operatorname{sgn}(a_{22} - s_{12}^2 d_{11}),\ s_{22} = \sqrt{|a_{22} - s_{12}^2 d_{11}|}.$$

Таким образом, вещественную симметрическую матрицу второго порядка можно факторизовать в виде (2).

Рассмотрим теперь произвольную эрмитову матрицу A $(m \times m)$. Запишем уравнение для элементов матрицы DS:

$$(DS)_{ij} = \sum_{l=1}^{m} d_{il}s_{lj}, \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Учитывая диагональную структуру матрицы D, получим:

$$(DS)_{ij} = d_{ii}s_{ij}.$$

Домножим матрицу DS слева на S^*:

$$a_{ij} = (S^* DS)_{ij} = \sum_{l=1}^{m} (S^*)_{il} d_{ll} s_{lj}, \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Выделим i-ое слагаемое из последней суммы и учтем, что $(S^*)_{ij} = \overline{s}_{ji}$:

$$a_{ij} = \sum_{l=1}^{i-1} \overline{s}_{li} d_{ll} s_{lj} + \overline{s}_{ii} d_{ii} s_{ij} + \sum_{l=i+1}^{m} \overline{s}_{li} d_{ll} s_{lj}, \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Третье слагаемое из равенства равно нулю в силу того, что матрица S^* является нижнетреугольной: $\overline{s}_{li} = 0,\ l > i$. Тогда получим:

$$a_{ij} = \sum_{l=1}^{i-1} \overline{s}_{li} d_{ll} s_{lj} + \overline{s}_{ii} d_{ii} s_{ij}, \quad i, j = \overline{1, m}. \tag{6}$$

Так как матрица A эрмитова, достаточно рассматривать это равенство только в случае $i \leqslant j$. При $i = j$ получим:

$$a_{ii} = \sum_{l=1}^{i-1} \overline{s}_{li} d_{ll} s_{li} + \overline{s}_{ii} d_{ii} s_{ii}, \quad i = \overline{1, m}.$$

Учтем, что $s_{ij}\overline{s}_{ij} = |s_{ij}|^2$:

$$a_{ii} = \sum_{l=1}^{i-1} d_{ll} |s_{li}|^2 + d_{ii} |s_{ii}|^2, \quad i = \overline{1, m},$$

$$d_{ii} |s_{ii}|^2 = a_{ii} - \sum_{l=1}^{i-1} |s_{li}|^2 d_{ll}, \quad i = \overline{1, m}.$$

Выразим d_{ii} и s_{ii}:

$$d_{ii} = \operatorname{sgn}(a_{ii} - \sum_{l=1}^{i-1} |s_{li}|^2 d_{ll}), \quad i = \overline{1, m}, \tag{7}$$

$$s_{ii} = \sqrt{\left| a_{ii} - \sum_{l=1}^{i-1} |s_{li}|^2 d_{ll} \right|}, \quad i = \overline{1, m}. \tag{8}$$

Рассмотрим случай $i \neq j$ $(i < j)$. В уравнении (6) выделим второе слагаемое:

$$\overline{s}_{ii} d_{ii} s_{ij} = a_{ij} - \sum_{l=1}^{i-1} \overline{s}_{li} d_{ll} s_{lj}, \quad i, j = \overline{1, m}.$$

В силу того, что s_{ii} — вещественные положительные числа, получим

$$s_{ii} d_{ii} s_{ij} = a_{ij} - \sum_{l=1}^{i-1} \overline{s}_{li} d_{ll} s_{lj}, \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Так как $s_{ii} d_{ii} \neq 0$, то получим выражения для коэффициентов s_{ij}:

$$s_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum\limits_{l=1}^{i-1} \overline{s}_{li} d_{ll} s_{lj}}{s_{ii} d_{ii}}, \quad i, j = \overline{1, m},\ i < j. \tag{9}$$

Таким образом, для вычисления элементов матриц в разложении (2) были получены явные формулы (7) – (9).

Метод квадратного корня позволяет примерно вдвое уменьшить число операций, необходимых для решения системы (1), по сравнению с методом Гаусса — до $\sim \frac{m^3}{6}$ умножений и делений. Кроме этого необходимо m операций извлечения квадратного корня. Заметим, что метод справедлив только в случае, если матрица системы линейных уравнений эрмитова.

§5 Примеры и канонический вид итерационных методов решения СЛАУ

Рассмотрим матричное уравнение

$$Ax = f, \tag{1}$$

где $|A| \neq 0,\ A\ (m \times m),\ x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T,\ f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)^T$.
Распишем систему (1) покоординатно:

$$\sum_{j=1}^{m} a_{ij} x_j = f_i, \quad i = \overline{1, m}. \tag{2}$$

Выделим i-ое слагаемое в сумме:

$$\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j + a_{ii} x_i + \sum_{j=i+1}^{m} a_{ij} x_j = f_i, \quad i = \overline{1, m}.$$

Предположим, что элементы главной диагонали матрицы A отличны от нуля: $a_{ii} \neq 0,\ i = \overline{1, m}$. Тогда уравнение (2) разрешимо относительно x_i:

$$x_i = \frac{f_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j - \sum\limits_{j=i+1}^{m} a_{ij} x_j}{a_{ii}}, \quad i = \overline{1, m}.$$

Все итерационные методы основаны на построении последовательности векторов $x^n = (x_1^n, \ldots, x_m^n)$ такой, что $x^n \to x$ при $n \to \infty$, где x — точное решение матричного уравнения (1). Вектор x^n называется *n-й итерацией метода*.

Отметим, что при выборе итерационного метода важно, чтобы метод был легко реализуем и сходился к решению достаточно быстро.

Определение. *Итерационный метод называется двухслойным, если для вычисления текущей итерации используются только элементы предыдущей итерации.*

Замечание. *Двухслойный итерационный метод также называют одношаговым.*

Для того, чтобы начать процесс построения последовательности x^n, необходимо задать начальное приближение x^0. Далее будем предполагать, что *начальное приближение уже задано*.

Рассмотрим в качестве примера два простейших двухслойных итерационных метода: метод Якоби и метод Зейделя.

Метод Якоби

Метод Якоби является явным итерационным методом и задается правилом

$$x_i^{n+1} = \frac{f_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^n - \sum\limits_{j=i+1}^{m} a_{ij} x_j^n}{a_{ii}}, \quad i = \overline{1, m},\ n \in \mathbb{Z}_+.$$

Забегая вперед, заметим, что метод Якоби является легко реализуемым, но при этом медленно сходящимся, особенно при больших m.

Метод Зейделя

Метод Зейделя, в отличие от метода Якоби, является неявным итерационным методом и задается уравнением

$$x_i^{n+1} = \frac{f_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{n+1} - \sum\limits_{j=i+1}^{m} a_{ij} x_j^n}{a_{ii}}, \quad i = \overline{1,m},\ n \in \mathbb{Z}_+.$$

В правой части уравнения используются координаты $(n+1)$-й итерации, поэтому метод Зейделя является неявным. Но если разумно организовать вычисления, то можно найти координаты $(n+1)$-й итерации по явным формулам.
Рассмотрим метод Зейделя при $i = 1$:

$$x_1^{n+1} = \frac{f_1 - \sum\limits_{j=2}^{m} a_{1j} x_j^n}{a_{11}}, \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Видно, что x_1^{n+1} находится по явной формуле. Рассмотрим вторую координату $(n+1)$-й итерации:

$$x_2^{n+1} = \frac{f_2 - a_{21} x_1^{n+1} - \sum\limits_{j=3}^{m} a_{2j} x_j^n}{a_{22}}, \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Так как координата x_1^{n+1} известна, то координату x_2^{n+1} можно найти по явной формуле. Продолжая вычисления, получим, что каждый элемент $(n+1)$-й итерации можно найти по явным формулам от уже известных элементов. Заметим, что метод Зейделя прост в реализации, но медленно сходится.

Каноническая запись итерационных методов

Для исследования сходимости итерационных методов удобно записывать их в матричном виде. Представим матрицу A в виде

$$A = R_1 + D + R_2,$$

где R_1 — нижнетреугольная матрица с нулевой главной диагональю, D — диагональная матрица, R_2 — верхнетреугольная матрица с нулевой главной диагональю:

$$R_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{mm} \end{pmatrix}, \quad R_2 = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Перепишем матричное уравнение (1) в виде

$$(R_1 + D + R_2)x = f.$$

Оставим в левой части слагаемое с матрицей D, остальные слагаемые перенесем в правую часть уравнения:

$$Dx = f - R_1 x - R_2 x.$$

Предположим, что матрица D обратима ($a_{ii} \neq 0,\ i = \overline{1,m}$). Тогда получим:

$$x = D^{-1} f - D^{-1} R_1 x - D^{-1} R_2 x. \tag{3}$$

Запишем итерационные методы Якоби и Зейделя исходя из уравнения (3):

$$\begin{aligned} \text{Метод Якоби}: &\quad x^{n+1} = D^{-1}f - D^{-1}R_1x^n - D^{-1}R_2x^n, \qquad n \in \mathbb{Z}_+, \\ \text{Метод Зейделя}: &\quad x^{n+1} = D^{-1}f - D^{-1}R_1x^{n+1} - D^{-1}R_2x^n, \quad n \in \mathbb{Z}_+. \end{aligned}$$

Рассмотрим эти два метода записав их в виде:

$$\begin{aligned} \text{Метод Якоби}: &\quad Dx^{n+1} + (R_1 + R_2)x^n = f, \quad n \in \mathbb{Z}_+, \\ \text{Метод Зейделя}: &\quad (D + R_1)x^{n+1} + R_2x^n = f, \quad n \in \mathbb{Z}_+. \end{aligned}$$

Наконец, перепишем эти соотношения в виде

$$\text{Метод Якоби}: \quad D(x^{n+1} - x^n) + Ax^n = f, \qquad n \in \mathbb{Z}_+, \tag{4}$$

$$\text{Метод Зейделя}: \quad (D + R_1)(x^{n+1} - x^n) + Ax^n = f, \quad n \in \mathbb{Z}_+. \tag{5}$$

Из формул (4) и (5) видно, что если в каждом из методов последовательность итераций сходится, то она сходится к решению системы (1).

Мы видим, что один и тот же итерационный метод можно записать различными способами. Поэтому целесообразно ввести какую-то стандартную (каноническую) форму записи итерационных методов.

Определение. *Канонической формой записи двухслойного итерационного метода решения системы* (1) *называется его запись в виде*

$$B_{n+1}\frac{x^{n+1} - x^n}{\tau_{n+1}} + Ax^n = f, \tag{6}$$

где $n \in \mathbb{Z}_+$, *начальное приближение* x^0 *задано,* τ_{n+1} *— положительное вещественное число, называемое итерационным параметром,* B_{n+1} *— некоторая обратимая матрица.*

Определение. *Если в методе* (6) *параметр* τ_{n+1} *и матрица* B_{n+1} *не зависят от номера итерации* ($B_{n+1} = B$, $\tau_{n+1} = \tau$), *то такой метод называется стационарным, в противном случае — нестационарным.*

Определение. *Если* $B_{n+1} = E$, *то метод* (6) *называется явным, в противном случае — неявным.*

При рассмотрении итерационных методов обычно исследуют условия, при которых данный метод сходится, и оценивают скорость сходимости метода.

Рассмотрим далее еще несколько примеров итерационных методов: метод простой итерации, метод Ричардсона и попеременно-треугольный итерационный метод. В этих методах введение параметров τ и B позволяет увеличить скорость сходимости по сравнению с методами Якоби и Зейделя.

Метод простой итерации

Метод простой итерации (метод релаксации) определяется итерационной схемой вида

$$\frac{x^{n+1} - x^n}{\tau} + Ax^n = f, \ \tau > 0, \ n \in \mathbb{Z}_+, \ x^0 \text{ — задано.} \tag{7}$$

Метод Ричардсона

Метод Ричардсона определяется итерационной схемой вида

$$\frac{x^{n+1}-x^n}{\tau_{n+1}}+Ax^n=f,\ \tau_{n+1}>0,\ n\in\mathbb{Z}_+,\ x^0-\text{задано}. \tag{8}$$

Замечание. *Для итерационных методов (7) и (8) в случае, когда матрица A является симметричной и положительно определенной, известен такой набор итерационных параметров (Чебышевский набор), при котором сходимость этих методов будет наиболее быстрая.*

Попеременно-треугольный итерационный метод

Представим матрицу A в виде

$$A=R_1+R_2,$$

где R_1 — нижнетреугольная матрица, R_2 — верхнетреугольная матрица:

$$R_1=\begin{pmatrix}0.5a_{11}&0&\cdots&0\\a_{21}&0.5a_{22}&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\a_{m1}&a_{m2}&\cdots&0.5a_{mm}\end{pmatrix},\quad R_2=\begin{pmatrix}0.5a_{11}&a_{12}&\cdots&a_{1m}\\0&0.5a_{22}&\cdots&a_{2m}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\0&0&\cdots&0.5a_{mm}\end{pmatrix}.$$

Попеременно-треугольный метод имеет вид

$$(E+\omega R_1)(E+\omega R_2)\frac{x^{n+1}-x^n}{\tau}+Ax^n=f,\ n\in\mathbb{Z}_+, \tag{9}$$

где $\tau>0,\ \omega>0$ — итерационные параметры, позволяющие, вообще говоря, ускорить процесс сходимости итерационного метода, матрица E — единичная. Рассматриваемый метод формально является неявным, однако можно показать, что $(n+1)$-я итерация выражается с помощью явных формул за три шага. Введем обозначения:

$$W^{n+1}=(E+\omega R_2)\frac{x^{n+1}-x^n}{\tau},$$

$$v^{n+1}=\frac{x^{n+1}-x^n}{\tau}.$$

Определение. *Вектор $r^n=f-Ax^n$ называется невязкой на n-й итерации.*

В нашем случае невязка r^n известна. Предположим, что матрицы $E+\omega R_1$ и $E+\omega R_2$ имеют обратные. На первом шаге решим уравнение

$$(E+\omega R_1)W^{n+1}=r^n.$$

Заметим, что $(E+\omega R_1)$ — нижнетреугольная матрица. Нахождение вектора решения системы с нижнетреугольной матрицей осуществляется по явным формулам, начиная с первой компоненты вектора W^{n+1}. На втором шаге аналогично решим уравнение с верхнетреугольной матрицей $(E+\omega R_2)$:

$$(E+\omega R_2)v^{n+1}=W^{n+1}.$$

На третьем шаге найдем $(n+1)$-ю итерацию по формуле

$$x^{n+1}=x^n+\tau v^{n+1}.$$

Таким образом, несмотря на то, что попеременно-треугольный итерационный метод является неявным, его реализация не представляет никакой трудности.

§6 Теоремы о сходимости итерационных методов

Рассмотрим матричное уравнение вида

$$Ax = f, \tag{1}$$

где $|A| \neq 0,\ A\ (m \times m),\ x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T,\ f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)^T$.
Рассмотрим также двухслойный стационарный метод решения уравнения (1):

$$B\frac{x^{n+1} - x^n}{\tau} + Ax^n = f, \tag{2}$$

где $n \in \mathbb{Z}_+$, начальное приближение x^0 задано, τ — положительное вещественное число, B — обратимая матрица порядка $(m \times m)$.

Чтобы говорить о сходимости итерационного метода, необходимо ввести линейное пространство и определить в нем норму. Внимательный читатель может помнить из курса линейной алгебры, что в конечномерном пространстве все нормы эквивалентны. То есть найдутся такие константы, при помощи которых можно оценить одну норму через другую. Но при исследовании сходимости итерационных методов будем устремлять к нулю параметры этих методов, и если они будут участвовать в записях констант перехода от одной нормы к другой, то смысл таких оценок, вообще говоря, может сойти на нет. Поэтому всегда при рассмотрении сходимости итерационных методов будем указывать, в какой именно норме производится исследование.

Пусть H — линейное вещественное пространство размерности m:

$$\dim H = m.$$

Рассмотрим два произвольных вектора x и y из этого пространства:

$$x \in H, \quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T,$$

$$y \in H, \quad y = (y_1, y_2, \ldots, y_m)^T.$$

Определим скалярное произведение двух векторов, заданных в ортонормированном базисе пространства H:

$$(x, y) = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i.$$

Введем евклидову норму:

$$\|x\| = \sqrt{(x, x)} = \left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Эту норму также часто называют среднеквадратичной нормой.

Далее будем считать, что понятия линейный оператор и матрица эквивалентны. Рассмотрим самосопряженный положительный линейный оператор $D = D^* > 0$.

Определение. *Линейный оператор D называется положительным (неотрицательным), если $(Dx, x) > 0\ \ \forall x \in H,\ x \neq \theta$ (соответственно $(Dx, x) \geqslant 0\ \ \forall x \in H$). Положительность оператора D обозначается как $D > 0$.*

В дальнейшем понятия положительный оператор и положительно определенный линейный оператор считаются тождественными.

Определение. *Скалярным произведением в смысле оператора D называется скалярное произведение, определяемое соотношением*

$$(x, y)_D = (Dx, y).$$

Определение. *Энергетической нормой, порождаемой линейным самосопряженным положительно определенным оператором D, называется норма, задаваемая соотношением*

$$\|x\|_D = \sqrt{(x, x)_D} = \sqrt{(Dx, x)}.$$

Задача. *Пусть $D = D^* > 0$. Доказать, что $\exists\ \delta > 0 :\ (Dx, x) \geqslant \delta(x, x) = \delta\|x\|^2$.*

Рассмотрим свойства положительного самосопряженного линейного оператора.
Если $D = D^* > 0$, то определены

$$D^{-1} = \left(D^{-1}\right)^* > 0, \quad D^{\frac{1}{2}} = \left(D^{\frac{1}{2}}\right)^* > 0, \quad D^{-\frac{1}{2}} = \left(D^{-\frac{1}{2}}\right)^* > 0.$$

Определение. *Погрешностью итерационного метода на n-й итерации называется вектор*

$$v^n = x^n - x. \tag{3}$$

Определение. *Итерационный метод сходится в норме $\|\cdot\|$, если $\|v^n\| \to 0$ при $n \to \infty$.*

Выразим x^n из формулы (3) и подставим в уравнение (2). Получим однородное уравнение:

$$B\frac{v^{n+1} - v^n}{\tau} + Av^n = 0, \tag{4}$$

где $n \in \mathbb{Z}_+,\ v^0 = x^0 - x$.

Приступим к исследованию задачи (4). Выразим $(n+1)$-ю итерацию через n-ю с учетом того, что для матрицы B существует обратная. Домножим уравнение (4) на B^{-1} слева:

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\tau} + B^{-1}Av^n = 0.$$

Выразим из уравнения погрешность на $(n+1)$-й итерации:

$$v^{n+1} = v^n - \tau B^{-1}Av^n = (E - \tau B^{-1}A)v^n = Sv^n.$$

Таким образом, мы получили матрицу S, которая связывает погрешность на предыдущей итерации с погрешностью на следующей:

$$S = E - \tau B^{-1}A. \tag{5}$$

Определение. *Матрица S из равенства (5) называется матрицей перехода от n-й итерации к $(n+1)$-й.*

Теорема 1. *Итерационный метод (2) решения системы (1) сходится при любом начальном приближении тогда и только тогда, когда все собственные значения матрицы перехода S по модулю меньше единицы. (Без доказательства, доказательство см. [1], стр.92).*

Таким образом, сходимость итерационного метода (2) всецело зависит от свойств матрицы S, а именно, от ее спектра.

Заметим, что данная теорема практически неприменима, так как задача нахождения полного спектра матрицы S аналитически решается крайне редко.

Приступим к рассмотрению вопроса сходимости итерационного метода. В дальнейшем будем считать, что линейное пространство H задано над полем $\mathbb{R}$ вещественных чисел.

Теорема 2 (теорема Самарского). *Пусть A — самосопряженный положительно определенный оператор, τ — положительное вещественное число и выполнено операторное неравенство*

$$B - \frac{\tau}{2}A > 0. \tag{6}$$

Тогда итерационный метод (2) решения системы (1) сходится в среднеквадратичной норме при любом начальном приближении:

$$\|x^n - x\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{m}\left(x_j^n - x_j\right)^2} \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0, \quad \forall x^0.$$

Доказательство. Пусть $v^n = x^n - x$. Введем числовую последовательность $y_n = (Av^n, v^n)$. Покажем, что $\{y_n\}$ — невозрастающая и ограниченная снизу последовательность. Для этого рассмотрим y_{n+1}:

$$y_{n+1} = (Av^{n+1}, v^{n+1}) = (ASv^n, Sv^n) = ((A - \tau AB^{-1}A)v^n, (E - \tau B^{-1}A)v^n). \tag{7}$$

Воспользуемся линейностью скалярного произведения и преобразуем правую часть равенства:

$$(Av^n, v^n) - \tau(Av^n, B^{-1}Av^n) - \tau(AB^{-1}Av^n, v^n) + \tau^2(AB^{-1}Av^n, B^{-1}Av^n). \tag{8}$$

В силу того, что оператор A — самосопряженный ($A = A^*$), получим

$$\left(AB^{-1}Av^n, v^n\right) = \left(B^{-1}Av^n, A^*v^n\right) = \left(Av^n, B^{-1}Av^n\right).$$

Преобразуем выражение (8):

$$y_n - 2\tau(Av^n, B^{-1}Av^n) + \tau^2(AB^{-1}Av^n, B^{-1}Av^n) = y_n - 2\tau\left(\left(B - \frac{\tau}{2}A\right)B^{-1}Av^n, B^{-1}Av^n\right).$$

Подставив полученное выражение в равенство (7), получим тождество

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} + 2\left(\left(B - \frac{\tau}{2}A\right)B^{-1}Av^n, B^{-1}Av^n\right) = 0, \tag{9}$$

в котором оператор $\left(B - \frac{\tau}{2}A\right)$ положителен по условию. Следовательно, второе слагаемое тождества неотрицательно.Отсюда следует, что $y_{n+1} \leqslant y_n$, что и означает монотонность последовательности $\{y_n\}$. Так как $A > 0$, то $y_n = (Av^n, v^n) \geqslant 0$.

У невозрастающей последовательности $\{y_n\}$, все члены которой неотрицательны, по теореме Вейерштрасса существует предел y:

$$\lim_{n\to\infty} y_n = y.$$

Для дальнейшего доказательства нам понадобится свойство положительно определенного линейного оператора, которое мы сформулируем в виде задачи.

Задача. *Пусть H — вещественное линейное пространство, C — положительный линейный не обязательно самосопряженный оператор в H. Доказать, что*

$$\exists\ \delta > 0 :\ (Cx, x) \geqslant \delta\|x\|^2, \quad \forall x \in H. \tag{10}$$

Воспользуемся свойством (10): существует константа $\delta > 0$ такая, что

$$\left(\left(B - \frac{\tau}{2}A\right) B^{-1}Av^n, B^{-1}Av^n\right) \geqslant \delta\|B^{-1}Av^n\|^2 \geqslant 0. \tag{11}$$

Введем вектор w^n:

$$w^n = B^{-1}Av^n. \tag{12}$$

Устремим n к бесконечности в равенстве (9):

$$\frac{y - y}{\tau} + 2\lim_{n\to\infty}\left(\left(B - \frac{\tau}{2}A\right) w^n, w^n\right) = 0.$$

Устремим теперь n к бесконечности в неравенстве (11) и примем во внимание полученное равенство:

$$0 \leqslant \lim_{n\to\infty} \delta\|w^n\|^2 \leqslant 0.$$

Получим, что

$$\lim_{n\to\infty}\|w^n\| = 0.$$

Выразим погрешность на n-й итерации из равенства (12):

$$v^n = A^{-1}Bw^n.$$

Оператор A^{-1} существует вследствие предположения $A > 0$. Очевидно, что $\|v^n\| \leqslant \|A^{-1}B\|\|w^n\|$, но $\|A^{-1}B\|$ не зависит от n. Следовательно,

$$\lim_{n\to\infty}\|v^n\| = \lim_{n\to\infty}\|x^n - x\| = 0.$$

Так как в ходе доказательства мы не использовали начальное приближение, то оно может быть произвольным. □

Следствие 1. *Пусть $A = A^* > 0$. Тогда метод Якоби сходится в среднеквадратичной норме при любом начальном приближении, если выполнено неравенство:*

$$2D > A,$$

где $A = R_1 + D + R_2$, $D = \operatorname{diag}(a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{mm})$.

Доказательство. В методе Якоби $\tau = 1$, а $B = D$. По теореме Самарского метод сходится, если

$$B - \frac{\tau}{2}A > 0.$$

В нашем случае

$$D - \frac{1}{2}A > 0,$$

а это выполняется в силу условия $2D > A$. Следовательно, метод Якоби сходится в среднеквадратичной норме при любом начальном приближении. □

Следствие 2. *Пусть положительная симметричная матрица ($A = A^* > 0$) является матрицей со строгим диагональным преобладанием:*

$$a_{ii} > \sum_{j=1, j\neq i}^{m} |a_{ij}|, \quad i = \overline{1, m}.$$

Тогда метод Якоби сходится в среднеквадратичной норме при любом начальном приближении x^0.

Доказательство. Рассмотрим квадратичную форму с матрицей A:

$$(Ax, x) = \sum_{i,j=1}^{m} a_{ij} x_i x_j \leqslant \sum_{i,j=1}^{m} |a_{ij}|\ |x_i|\ |x_j|. \tag{13}$$

Для дальнейшей оценки квадратичной формы (13) воспользуемся неравенством $ab \leqslant \frac{a^2+b^2}{2}$:

$$(Ax, x) \leqslant \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} |a_{ij}|\ |x_i|^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} |a_{ij}|\ |x_j|^2.$$

Преобразуем правую часть неравенства с учетом того, что матрица A является симметричной ($|a_{ij}| = |a_{ji}|$):

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} |a_{ij}|\ |x_i|^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{m} |a_{ij}|\ |x_i|^2 = \sum_{i,j=1}^{m} |a_{ij}|\ |x_i|^2.$$

Вынесем суммирование по индексу i и воспользуемся свойством диагонального преобладания матрицы A:

$$\sum_{i=1}^{m} |x_i|^2 \left(a_{ii} + \sum_{j=1, j\neq i}^{m} |a_{ij}| \right) < \sum_{i=1}^{m} 2x_i^2 a_{ii} = (2Dx, x),$$

где $D = \operatorname{diag}(a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{mm})$. Таким образом, мы получили, что

$$(Ax, x) < (2Dx, x).$$

Из этого неравенства следует, что $2D > A$.

Следовательно, выполняется условие следствия 1, и итерационный метод Якоби сходится при любом начальном приближении. □

Задача. *Пусть матрица $A = A^* > 0$. Доказать, что $a_{ii} > 0,\ i = \overline{1, m}$.*

Следствие 3. *Пусть $A = A^* > 0$. Тогда метод Зейделя сходится в среднеквадратичной норме при любом начальном приближении x^0.*

Доказательство. Из условия теоремы Самарского следует, что для сходимости метода Зейделя достаточно выполнения неравенства

$$B - \frac{\tau}{2} A > 0. \tag{14}$$

Представим матрицу A в виде $A = R_1 + D + R_2$. В канонической записи метода Зейделя $\tau = 1,\ B = R_1 + D$. Тогда достаточное условие (14) преобразуется к виду

$$D + R_1 - \frac{R_1 + D + R_2}{2} > 0.$$

И, следовательно,

$$D + R_1 - R_2 > 0. \tag{15}$$

Запишем это неравенство в виде

$$(Dx, x) + (R_1 x, x) - (R_2 x, x) > 0, \quad x \neq \theta.$$

Так как $A = A^*$, то $R_2^* = R_1$. Тогда

$$(R_2 x, x) = (x, R_2^* x) = (x, R_1 x) = (R_1 x, x).$$

Следовательно, неравенство (15) принимает вид

$$(Dx, x) > 0, \quad x \neq \theta. \tag{16}$$

Если матрица симметричная и положительно определенная, то все ее диагональные элементы больше нуля (см. задачу). Следовательно, матрица D также является положительно определенной, откуда следует неравенство (16). □

Следствие 4. *Пусть* $A = A^* > 0$, $\gamma_2 = \max\limits_{1 \leqslant k \leqslant m} \lambda_k > 0$. *Если* $0 < \tau < \frac{2}{\gamma_2}$, *то метод простой итерации сходится в среднеквадратичной норме при любом начальном приближении* x^0.

Доказательство. Из условия теоремы Самарского следует, что для того, чтобы метод простой итерации сходился в среднеквадратичной норме при любом начальном приближении, достаточно выполнения неравенства

$$B - \frac{\tau}{2} A > 0. \tag{17}$$

В методе простой итерации $B = E$. Следовательно, условие (17) преобразуется к виду

$$E - \frac{\tau}{2} A > 0. \tag{18}$$

Неравенство (18) выполнено, если $\lambda^E - \frac{\tau}{2}\lambda^A > 0$, что справедливо, если

$$1 - \frac{\tau}{2}\gamma_2 > 0.$$

Из положительности параметра τ следует, что для сходимости метода простой итерации достаточно выполнения условия

$$0 < \tau < \frac{2}{\gamma_2}.$$

□

§7 Оценка скорости сходимости итерационных методов

Рассмотрим матричное уравнение вида

$$Ax = f, \tag{1}$$

где $|A| \neq 0$, A $(m \times m)$, $x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T$, $f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)^T$ и двухслойный стационарный метод решения этого уравнения:

$$B\frac{x^{n+1} - x^n}{\tau} + Ax^n = f, \tag{2}$$

где $n \in \mathbb{Z}_+$, начальное приближение x^0 задано, τ — положительное вещественное число, B — обратимая матрица размера $(m \times m)$.

Введем погрешность $v^n = x^n - x$. Тогда из уравнения (2) получим задачу:

$$B\frac{v^{n+1} - v^n}{\tau} + Av^n = 0, \quad n \in \mathbb{Z}_+, \quad v^0 = x^0 - x. \tag{3}$$

Предположим, что выполняется оценка

$$\|v^{n+1}\| \leqslant \rho\|v^n\|, \quad 0 < \rho < 1. \tag{4}$$

Тогда можно говорить о скорости сходимости итерационного метода (2) в зависимости от параметра ρ. Применив эту оценку n раз получим:

$$\|v^n\| \leqslant \rho^n\|v^0\|. \tag{5}$$

При $0 < \rho < 1$ видно, что $\|v^n\| \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0$. Заметим, что чем ближе параметр ρ к нулю, тем выше скорость сходимости метода (2). Кроме того, оценка (5) позволяет посчитать необходимое число итераций для достижения заданной точности $\varepsilon > 0$:

$$\|x^n - x\| \leqslant \varepsilon\|x^0 - x\| \tag{6}$$

Из неравенств (5) и (6) получим

$$\rho^n \leqslant \varepsilon, \ \frac{1}{\rho^n} \geqslant \frac{1}{\varepsilon}.$$

Прологарифмируем обе части второго неравенства:

$$n \geqslant \frac{\ln\frac{1}{\varepsilon}}{\ln\frac{1}{\rho}}.$$

Таким образом, для достижения заданной точности ε достаточно провести число итераций, равное

$$n_0(\varepsilon) = \left[\frac{\ln\frac{1}{\varepsilon}}{\ln\frac{1}{\rho}}\right], \text{ где } [x] \text{ — целая часть числа } x.$$

Определение. *Величина* $\ln\dfrac{1}{\rho}$ *называется скоростью сходимости итерационного метода.*

Пусть H — вещественное линейное пространство размерности m. Введем в H скалярное произведение и среднеквадратичную норму:

$$(x, y) = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i, \|x\| = \sqrt{(x, x)}.$$

Пусть $D = D^* > 0$. Введем энергетическую норму, порождаемую оператором D:

$$\|x\|_D = \sqrt{(Dx, x)}.$$

В пространстве H существует ортонормированный базис $\{e_k\}$ из собственных векторов оператора D:

$$De_k = \lambda_k^D e_k, \ e_k \neq \theta, \ k = \overline{1, m},$$

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j, \end{cases} \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Тогда любой вектор $x \in H$ можно однозначно разложить по этому базису:

$$x = \sum_{k=1}^{m} c_k e_k, \ c_k = (x, e_k).$$

Кроме того, в линейном пространстве с заданной в нем нормой и ортонормированным базисом выполняется равенство Парсеваля:

$$\|x\|^2 = \sum_{k=1}^{m} c_k^2, \quad x \in H. \tag{7}$$

Теорема 1 (об оценке скорости сходимости). *Пусть* $A = A^* > 0, B = B^* > 0$. *Пусть также существует число* ρ, $0 < \rho < 1$, *такое, что выполнено операторное неравенство:*

$$\frac{1-\rho}{\tau}B \leqslant A \leqslant \frac{1+\rho}{\tau}B. \tag{8}$$

Тогда для погрешности итерационного метода (2) *решения системы* (1) *справедлива оценка:*

$$\|v^{n+1}\|_B \leqslant \rho\|v^n\|_B, \quad n \in \mathbb{Z}_+. \tag{9}$$

Доказательство. Так как $B = B^* > 0$, то существует матрица $B^{-\frac{1}{2}} = \left(B^{-\frac{1}{2}}\right)^*$. Домножим обе части уравнения (3) на $B^{-\frac{1}{2}}$ слева:

$$B^{\frac{1}{2}}\frac{v^{n+1}-v^n}{\tau} + B^{-\frac{1}{2}}Av^n = 0. \tag{10}$$

Введем вектор $z^n = B^{\frac{1}{2}}v^n$ и перепишем задачу (10) через вектор z^n:

$$\frac{z^{n+1}-z^n}{\tau} + B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}}z^n = 0.$$

Выразим z^{n+1} через z^n:

$$z^{n+1} = z^n - \tau B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}}z^n = Sz^n.$$

Здесь матрица

$$S = E - \tau B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}} \tag{11}$$

называется матрицей перехода от n-й итерации к $(n+1)$-й итерации вектора z.
В силу определения z^{n+1} и с учетом самосопряженности оператора B верно равенство

$$\|z^{n+1}\|^2 = (z^{n+1}, z^{n+1}) = (B^{\frac{1}{2}}v^{n+1}, B^{\frac{1}{2}}v^{n+1}) = (Bv^{n+1}, v^{n+1}) = \|v^{n+1}\|_B^2.$$

Таким образом, чтобы доказать утверждение теоремы, достаточно получить оценку

$$\|z^{n+1}\| \leqslant \rho\|z^n\|.$$

Покажем, что S — самосопряженный оператор:

$$S^* = \left(E - \tau B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}}\right)^* = E - \tau\left(B^{-\frac{1}{2}}\right)^*A^*\left(B^{-\frac{1}{2}}\right)^* = S.$$

Пусть s_k – собственные значения матрицы S. В силу самосопряженности матрицы S в линейном пространстве H существует ортонормированный базис из собственных векторов оператора S:

$$Se_k = s_k e_k, \ e_k \neq \theta, \ k = \overline{1,m}. \tag{12}$$

Покажем, что все собственные значения s_k не превосходят по модулю ρ: $|s_k| \leqslant \rho$, $k = \overline{1,m}$.
Подставим выражение S из (11) в (12) и умножим слева обе части равенства на $B^{\frac{1}{2}}$:

$$\left(B^{\frac{1}{2}} - \tau AB^{-\frac{1}{2}}\right)e_k = s_k B^{\frac{1}{2}}e_k, \quad k = \overline{1,m}.$$

Введем вектор $y = B^{-\frac{1}{2}}e_k$ и перепишем это равенство в виде

$$(B - \tau A)y = s_k By, \quad k = \overline{1,m}.$$

Отсюда следует равенство:

$$Ay = \frac{1 - s_k}{\tau} By.$$

Умножим левую и правую части этого равенства скалярно на вектор y:

$$(Ay, y) = \frac{1 - s_k}{\tau} (By, y).$$

Воспользуемся неравенством (8) из условия теоремы:

$$\frac{1 - \rho}{\tau} (By, y) \leqslant \frac{1 - s_k}{\tau} (By, y) \leqslant \frac{1 + \rho}{\tau} (By, y).$$

Из данных неравенств и неравенства $y \neq \theta$ следует, что $(By, y) > 0$ и, следовательно,

$$|s_k| \leqslant \rho, \ k = \overline{1, m}.$$

Разложим вектор z^n по ортонормированному базису $\{e_k\}$ из собственных векторов матрицы S:

$$z^n = \sum_{k=1}^{m} c_k^{(n)} e_k, \ c_k^{(n)} = (z^n, e_k).$$

Найдем разложение для z^{n+1}:

$$z^{n+1} = Sz^n = \sum_{k=1}^{m} c_k^{(n)} Se_k = \sum_{k=1}^{m} c_k^{(n)} s_k e_k.$$

Запишем равенство Парсеваля (7) для z^{n+1}:

$$\|z^{n+1}\|^2 = \sum_{k=1}^{m} \left(c_k^{(n)} s_k \right)^2.$$

В силу того, что $|s_k| \leqslant \rho, \ k = \overline{1, m}$, верно неравенство

$$\|z^{n+1}\|^2 \leqslant \rho^2 \sum_{k=1}^{m} \left(c_k^{(n)} \right)^2 = \rho^2 \|z^n\|^2.$$

Из этого неравенства следует оценка $\|z^{n+1}\| \leqslant \rho \|z^n\|$, которая, как мы показали выше, эквивалентна утверждению теоремы. □

Замечание. *Оценка (9) справедлива и в энергетической норме* $\|\cdot\|_A$.

Следствие 1. *Пусть* A, B *— самосопряженные положительно определенные операторы, и пусть существуют* $\gamma_2 > \gamma_1 > 0$*, для которых выполняется условие*

$$\gamma_1 B \leqslant A \leqslant \gamma_2 B.$$

Тогда, если

$$\tau = \tau_0 = \frac{2}{\gamma_1 + \gamma_2},$$

то двухслойный итерационный метод решения системы уравнений сходится, и верна оценка

$$\|x^{n+1} - x\|_B \leqslant \rho \|x^n - x\|_B, \tag{13}$$

где $\rho = \frac{1-\xi}{1+\xi}, \ \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$.

Доказательство. Для того, чтобы воспользоваться теоремой 1, рассмотрим неравенство (8) из условия теоремы. Очевидно, что $\gamma_1 = \frac{1-\rho}{\tau}$ и $\gamma_2 = \frac{1+\rho}{\tau}$. Сложив эти равенства, получим

$$\gamma_1 + \gamma_2 = \frac{2}{\tau},\ \tau = \frac{2}{\gamma_1 + \gamma_2}.$$

Вычитая из второго равенства первое, получим

$$\gamma_2 - \gamma_1 = \frac{2\rho}{\tau} = \rho(\gamma_1 + \gamma_2),$$

$$\rho = \frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2} = \frac{1-\xi}{1+\xi},\ \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}.$$

Таким образом, оценка (13) выполнена с найденной выше константой ρ. □

Сформулируем следующее следствие для метода простой итерации:

$$\frac{x^{n+1} - x^n}{\tau} + Ax^n = f, \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Следствие 2. *Пусть A — самосопряженный положительно определенный оператор, а γ_1 и γ_2 — его минимальное и максимальное собственные значения:*

$$\gamma_1 = \min_{1 \leqslant k \leqslant m} \lambda_k^A,\ \gamma_2 = \max_{1 \leqslant k \leqslant m} \lambda_k^A.$$

Кроме того, пусть $\tau = \frac{2}{\gamma_1+\gamma_2}$. Тогда верна оценка

$$\|x^{n+1} - x\| \leqslant \rho \|x^n - x\|,$$

где $\rho = \frac{1-\xi}{1+\xi},\ \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$.

Доказательство следствия 2 очевидно.

§8 Исследование скорости сходимости ПТИМ

Рассмотрим матричное уравнение вида

$$Ax = f, \tag{1}$$

где $|A| \neq 0,\ A\ (m \times m),\ x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T,\ f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)^T$.
Представим матрицу A в виде

$$A = R_1 + R_2,$$

где R_1 — нижнетреугольная матрица, R_2 — верхнетреугольная матрица:

$$R_1 = \begin{pmatrix} 0.5a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0.5a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & 0.5a_{mm} \end{pmatrix}, \quad R_2 = \begin{pmatrix} 0.5a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ 0 & 0.5a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0.5a_{mm} \end{pmatrix}.$$

Очевидно, что такое представление существует для произвольной матрицы A.

Запишем каноническую форму попеременно-треугольного итерационного метода (ПТИМ):

$$(E + \omega R_1)(E + \omega R_2)\frac{x^{n+1} - x^n}{\tau} + Ax^n = f,\ \ \omega > 0,\ \ \tau > 0,\ \ n \in \mathbb{Z}_+.$$

Обозначим

$$B = (E + \omega R_1)(E + \omega R_2).$$

Теорема 1 (о сходимости ПТИМ). *Пусть A — самосопряженный положительно определенный оператор и $\omega > \frac{\tau}{4}$. Тогда* ПТИМ *сходится в среднеквадратичной норме при любом начальном приближении x^0.*

Доказательство. Раскроем скобки в выражении для B, учитывая, что $R_1 = R_2^*$:

$$B = (E + \omega R_2^*)(E + \omega R_2) = E + \omega(R_2^* + R_2) + \omega^2 R_2^* R_2 = E + \omega A + \omega^2 R_2^* R_2. \tag{2}$$

Очевидно, что

$$B = (E - \omega R_2^*)(E - \omega R_2) + 2\omega A. \tag{3}$$

Кроме того,

$$((E - \omega R_2^*)(E - \omega R_2)x, x) = ((E - \omega R_2)x, (E - \omega R_2)x) \geqslant 0.$$

Тогда из равенства (3) следует неравенство

$$B \geqslant 2\omega A. \tag{4}$$

Учитывая условие теоремы ($\omega > \frac{\tau}{4}$), получим, что $B > \frac{\tau}{2}A$ и ПТИМ сходится по теореме Самарского при любом начальном приближении x^0. □

Теорема 2 (о скорости сходимости ПТИМ). *Пусть A — самосопряженный положительно определенный оператор и числа $\delta > 0,\ \Delta > 0$ таковы, что выполняются неравенства*

$$A \geqslant \delta E,\ R_2^* R_2 \leqslant \frac{\Delta}{4} A. \tag{5}$$

Положим

$$\omega = \frac{2}{\sqrt{\delta\Delta}},\ \tau = \frac{2}{\gamma_1 + \gamma_2},\ \gamma_1 = \frac{\sqrt{\delta}}{2}\left(\frac{\sqrt{\delta\Delta}}{\sqrt{\delta} + \sqrt{\Delta}}\right),\ \gamma_2 = \frac{\sqrt{\delta\Delta}}{4}.$$

Тогда ПТИМ *сходится и имеет место оценка*

$$\|x^{n+1} - x\|_B \leqslant \rho \|x^n - x\|_B,$$

где $\rho = \frac{1-\sqrt{\eta}}{1+3\sqrt{\eta}},\ \eta = \frac{\delta}{\Delta}$.

Доказательство. Покажем, что из неравенств (5) следует $\eta \leqslant 1$. Рассмотрим второе неравенство и воспользуемся определением сопряженного оператора:

$$R_2^* R_2 \leqslant \frac{\Delta}{4} A \ \Rightarrow\ (R_2^* R_2 x, x) = (R_2 x, R_2 x) = \|R_2 x\|^2 \leqslant \frac{\Delta}{4}(Ax, x). \tag{6}$$

Рассмотрим первое неравенство:

$$A \geqslant \delta E \ \Rightarrow\ (Ax, x) \geqslant \delta \|x\|^2.$$

Очевидно, что из представления $A = R_1 + R_2 = R_2^* + R_2$ следует равенство

$$(Ax, x) = (R_2^* x, x) + (R_2 x, x) = 2(R_2 x, x).$$

Предположим, что x — ненулевой вектор, и получим

$$\delta \|x\|^2 \leqslant (Ax, x) = \frac{(Ax, x)^2}{(Ax, x)} = \frac{4(R_2 x, x)^2}{(Ax, x)}.$$

Воспользуемся неравенством Коши-Буняковского и неравенством (6):

$$\delta\|x\|^2 \leqslant \frac{4\|R_2x\|^2\|x\|^2}{(Ax,x)} \leqslant \frac{4\Delta(Ax,x)\|x\|^2}{4(Ax,x)} = \Delta\|x\|^2.$$

Таким образом, справедливо неравенство $\delta \leqslant \Delta$.

При доказательстве будем опираться на следствие 1 из теоремы об оценке скорости сходимости итерационного метода общего вида. Чтобы воспользоваться следствием 1 из теоремы об оценке скорости сходимости, найдем из условия теоремы числа γ_1 и γ_2 такие, что

$$\gamma_1 B \leqslant A \leqslant \gamma_2 B. \tag{7}$$

Из неравенства (4) ($B \geqslant 2\omega A$), полученного в ходе доказательства теоремы о сходимости ПТИМ следует оценка $A \leqslant \frac{B}{2\omega}$. Тогда можно положить в неравенстве (7) $\gamma_2 = \frac{1}{2\omega}$.
Оценим выражение (2), воспользовавшись неравенствами (5):

$$B = E + \omega A + \omega^2 R_2^* R_2 \leqslant \frac{1}{\delta}A + \omega A + \frac{\Delta\omega^2}{4}A = \left(\frac{1}{\delta} + \omega + \frac{\Delta\omega^2}{4}\right)A.$$

Тем самым неравенство (7) выполнено с постоянной $\gamma_1 = \left(\frac{1}{\delta} + \omega + \frac{\Delta\omega^2}{4}\right)^{-1}$.

Для нахождения максимально возможной скорости сходимости будем минимизировать функцию $\rho(\omega)$ (как известно, чем меньше ρ, тем быстрее сходится метод):

$$\rho(\omega) = \frac{1-\xi(\omega)}{1+\xi(\omega)},\ \xi(\omega) = \frac{\gamma_1(\omega)}{\gamma_2(\omega)},$$

что эквивалентно минимизации функции $f(\omega)$:

$$f(\omega) = \frac{\gamma_2(\omega)}{\gamma_1(\omega)} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{\omega\delta} + \frac{\Delta\omega}{4}\right).$$

Для нахождения экстремальных точек найдем производную $f(\omega)$ и приравняем ее к нулю:

$$f'(\omega) = \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta}{4} - \frac{1}{\omega^2\delta}\right) = 0 \ \Rightarrow\ \omega = \omega_0 = \frac{2}{\sqrt{\delta\Delta}}.$$

Учтем, что $\omega > 0$, и проверим, что точка ω_0 доставляет минимум функции $f(\omega)$, найдя знак второй производной функции в этой точке:

$$f''(\omega) = \frac{1}{\delta\omega^3} > 0.$$

Подставим ω_0 в выражения для γ_1, γ_2, ρ:

$$\gamma_1 = \frac{1}{\frac{1}{\delta} + \frac{2}{\sqrt{\delta\Delta}} + \frac{\Delta}{4}\frac{4}{\delta\Delta}} = \frac{1}{\frac{2}{\delta} + \frac{2}{\sqrt{\delta\Delta}}} = \frac{\delta\sqrt{\Delta}}{2\sqrt{\Delta} + 2\sqrt{\delta}} = \frac{\sqrt{\delta}}{2}\left(\frac{\sqrt{\delta\Delta}}{\sqrt{\Delta} + \sqrt{\delta}}\right),$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{2\omega_0} = \frac{\sqrt{\delta\Delta}}{4}.$$

Отсюда

$$\xi(\omega) = \frac{\gamma_1(\omega)}{\gamma_2(\omega)} = \frac{4}{\sqrt{\delta\Delta}}\frac{\sqrt{\delta}}{2}\left(\frac{\sqrt{\delta\Delta}}{\sqrt{\Delta} + \sqrt{\delta}}\right) = \frac{2\sqrt{\delta}}{\sqrt{\Delta} + \sqrt{\delta}}$$

и

$$\left.\begin{aligned} 1-\xi &= 1-\frac{2\sqrt{\delta}}{\sqrt{\Delta}+\sqrt{\delta}} = \frac{\sqrt{\Delta}-\sqrt{\delta}}{\sqrt{\Delta}+\sqrt{\delta}} \\ 1+\xi &= 1+\frac{2\sqrt{\delta}}{\sqrt{\Delta}+\sqrt{\delta}} = \frac{\sqrt{\Delta}+3\sqrt{\delta}}{\sqrt{\Delta}+\sqrt{\delta}} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \rho = \frac{1-\xi}{1+\xi} = \frac{\sqrt{\Delta}-\sqrt{\delta}}{\sqrt{\Delta}+3\sqrt{\delta}} = \frac{1-\sqrt{\eta}}{1+3\sqrt{\eta}},\ \eta = \frac{\delta}{\Delta}\ (\Delta \neq 0).$$

Исходя из полученных соотношений и следствия 1, получаем оценку

$$\|x^{n+1}-x\|_B \leqslant \rho\|x^n-x\|_B.$$

Таким образом, теорема 2 доказана. □

Покажем, что ПТИМ сходится на порядок быстрее метода простой итерации, метода Зейделя и метода Якоби.

Число итераций, необходимое для достижения заданной точности $\varepsilon > 0$ равно

$$n_0(\varepsilon) = \left[\frac{\ln\frac{1}{\varepsilon}}{\ln\frac{1}{\rho}}\right],$$

где $[x]$ означает целую часть числа x, а $\ln\frac{1}{\rho}$ — скорость сходимости итерационного метода. В практических задачах, когда m велико, отношение $\eta = \frac{\delta}{\Delta}$ часто является величиной порядка $\mathrm{O}\big(m^{-2}\big)$.

Оценим скорость сходимости ПТИМ:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1+3\sqrt{\eta}}{1-\sqrt{\eta}} = \frac{(1+3\sqrt{\eta})(1+\sqrt{\eta})}{1-\eta} \approx 1+4\sqrt{\eta},$$

$$\ln\frac{1}{\rho} \approx \ln(1+4\sqrt{\eta}) = \mathrm{O}\big(m^{-1}\big),\ n_0(\varepsilon) = \mathrm{O}\big(m\big).$$

Оценим скорость сходимости метода простой итерации:

$$\rho = \frac{1-\xi}{1+\xi} = \frac{1-\eta}{1+\eta},\ \frac{1}{\rho} = \frac{1+\eta}{1-\eta} = \frac{(1+\eta)^2}{1-\eta^2} \approx 1+2\eta,$$

$$\ln\frac{1}{\rho} \approx \ln(1+2\eta) = \mathrm{O}\big(m^{-2}\big),\ n_0(\varepsilon) = \mathrm{O}\big(m^2\big).$$

Таким образом, метод простой итерации сходится на порядок медленнее, чем ПТИМ. Методы Якоби и Зейделя имеют тот же порядок сходимости, что и метод простой итерации.

§9 Методы решения задач на собственные значения

Рассмотрим задачу поиска собственных значений, которая состоит в нахождении чисел λ и векторов x, удовлетворяющих уравнению

$$Ax = \lambda x,\ x \neq \theta,$$

где A — вещественная матрица порядка $(m\times m)$. Число λ называется *собственным значением* матрицы A, а x — соответствующим ему *собственным вектором*. У любой вещественной матрицы порядка $(m\times m)$ существует, с учетом кратности, ровно m собственных значений, вообще говоря, комплексных.

Собственный вектор определяется с точностью до константы $C \neq 0$. В вычислительных методах собственные векторы обычно нормируют с условием $\|x\| = 1$, чтобы избежать быстрого накопления ошибок округления.

Задача поиска собственных значений эквивалентна задаче нахождения корней характеристического многочлена матрицы A:

$$|A - \lambda E| = a_m\lambda^m + a_{m-1}\lambda^{m-1} + \ldots + a_1\lambda + a_0 = 0,$$

где $a_i \in \mathbb{R}$, $i = \overline{0,m}$, $a_m \neq 0$. Это уравнение имеет общее решение в радикалах только при $m \leqslant 4$, в реальных же задачах m может быть порядка 10^5 или 10^6 и выше. Таким образом, при больших m задачу поиска собственных значений, за редким исключением, можно решить только численными методами.

Собственные значения необходимы для оценки скорости сходимости итерационных методов решения систем линейных уравнений. При этом обычно достаточно найти минимальное и максимальное по модулю собственные значения. Таким образом, различают два вида проблем, связанных с поиском собственных значений матрицы:

1. Частичная проблема собственных значений, которая заключается в нахождении отдельных собственных значений.
2. Полная проблема собственных значений, которая заключается в нахождении всего спектра матрицы.

Очевидно, что частичная проблема является более простой, чем полная проблема.

Степенной метод

Рассмотрим частичную проблему собственных значений. Будем искать собственный вектор по формуле (см. [6], гл.VI, §4)

$$x^{n+1} = Ax^n, \quad n \in \mathbb{Z}_+,\ x^0 \text{ задано.} \tag{1}$$

Пусть $\{\lambda_k\}_{k=1}^m$ — собственные значения матрицы A, среди которых могут быть повторяющиеся. Упорядочим их по неубыванию модулей:

$$|\lambda_1| \leqslant |\lambda_2| \leqslant \ldots \leqslant |\lambda_m|.$$

Будем доказывать сходимость степенного метода при выполнении трех условий:

A) В вещественном пространстве $\mathbb{R}^m$ существует базис $\{e_k\}$, $k = \overline{1,m}$ из собственных векторов матрицы A.

B) $\left|\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right| < 1$.

C) $x^0 = c_1e_1 + c_2e_2 + \ldots + c_me_m$, где $c_m \neq 0$.

Утверждение. *Пусть вещественная матрица A $(m\times m)$ такова, что выполнены условия A) – C). Тогда степенной метод для матрицы A сходится по направлению к собственному вектору, отвечающему максимальному по модулю собственному значению:*

$$x^n \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} e_m.$$

Кроме того, для последовательности $\left\{\lambda_m^{(n)}\right\}$, заданной одной из формул

$$\lambda_m^{(n)} = \frac{x_i^{n+1}}{x_i^n},\ i = \overline{1,m}, \text{ либо } \lambda_m^{(n)} = \frac{(Ax^n, x^n)}{(x^n, x^n)}$$

справедлива следующая оценка сходимости к λ_m*:*

$$\lambda_m^{(n)} - \lambda_m = \mathrm{O}\left(\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^n\right).$$

Доказательство. Покажем, что при выполнении условий A) – C) степенной метод сходится по направлению к собственному вектору матрицы A, отвечающему максимальному по модулю собственному значению.

Из рекуррентной формулы (1) получим:

$$x^n = A^n x^0, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Воспользуемся условиями A), C) и разложим n-ю итерацию по базису из собственных векторов $\{e_k\}$ матрицы A:

$$x^n = A^n x^0 = \sum_{k=1}^{m} c_k A^n e_k = \sum_{k=1}^{m} c_k \lambda_k^n e_k = c_m \lambda_m^n e_m + c_{m-1}\lambda_{m-1}^n e_{m-1} + \ldots + c_1 \lambda_1^n e_1.$$

В силу условия C) $c_m \neq 0$. Кроме того, считаем, что у матрицы A существует хотя бы одно ненулевое собственное значение, и значит максимальное по модулю из них гарантированно не равно нулю: $\lambda_m \neq 0$. Поделив равенство на $c_m \lambda_m^n$, получим:

$$\frac{x^n}{c_m \lambda_m^n} = e_m + \frac{c_{m-1}}{c_m}\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^n e_{m-1} + \ldots + \frac{c_1}{c_m}\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_m}\right)^n e_1.$$

Перейдя к пределу при $n \to \infty$ и учитывая условие B), получим, что x^n сходится по направлению к e_m:

$$\lim_{n\to\infty} x^n = e_m.$$

Рассмотрим два способа вычисления максимального по модулю собственного значения матрицы A. Первый способ состоит в вычислении отношения i-х координат $(n+1)$-й и n-й итераций.

$$x_i^n = c_1 \lambda_1^n e_1^{(i)} + \ldots + c_m \lambda_m^n e_m^{(i)}, \quad i = \overline{1,m},$$
$$x_i^{n+1} = c_1 \lambda_1^{n+1} e_1^{(i)} + \ldots + c_m \lambda_m^{n+1} e_m^{(i)}, \quad i = \overline{1,m}.$$

Здесь $e_j^{(i)}$ — i-я координата вектора e_j, $j = \overline{1,m}$. Обозначая

$$\lambda_m^{(n)} = \frac{x_i^{n+1}}{x_i^n}, \tag{2}$$

получим

$$\lambda_m^{(n)} = \frac{c_m \lambda_m^{n+1} e_m^{(i)} + c_{m-1}\lambda_{m-1}^{n+1} e_{m-1}^{(i)} + \ldots + c_1 \lambda_1^{n+1} e_1^{(i)}}{c_m \lambda_m^n e_m^{(i)} + c_{m-1}\lambda_{m-1}^n e_{m-1}^{(i)} + \ldots + c_1 \lambda_1^n e_1^{(i)}} =$$

$$= \frac{c_m \lambda_m^{n+1} e_m^{(i)} \left(1 + \frac{c_{m-1}}{c_m}\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^{n+1} \frac{e_{m-1}^{(i)}}{e_m^{(i)}} + \ldots + \frac{c_1}{c_m}\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_m}\right)^{n+1} \frac{e_1^{(i)}}{e_m^{(i)}}\right)}{c_m \lambda_m^n e_m^{(i)} \left(1 + \frac{c_{m-1}}{c_m}\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^{n} \frac{e_{m-1}^{(i)}}{e_m^{(i)}} + \ldots + \frac{c_1}{c_m}\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_m}\right)^{n} \frac{e_1^{(i)}}{e_m^{(i)}}\right)} = \lambda_m + \mathrm{O}\left(\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^n\right).$$

Заметим, что начальное приближение x^0 — ненулевой вектор, и в силу этого вектор $x^n = A^n x^0$ имеет хотя бы одну ненулевую координату. Поэтому возможно деление на i-ю координату вектора x^n, где i — некоторое целое число от 1 до m.

Второй способ состоит в вычислении выражения

$$\lambda_m^{(n)} = \frac{(Ax^n, x^n)}{(x^n, x^n)} = \frac{(x^{n+1}, x^n)}{(x^n, x^n)}. \tag{3}$$

Пусть A — самосопряженная матрица. Тогда в пространстве $\mathbb{R}^{m\times m}$ существует ортонормированный базис $\{e_k\}$ из собственных векторов матрицы A:

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j, \end{cases} \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Тогда выражение (3) можно преобразовать следующим образом:

$$\lambda_m^{(n)} = \frac{c_m^2\lambda_m^{2n+1} + c_{m-1}^2\lambda_{m-1}^{2n+1} + \ldots + c_1^2\lambda_1^{2n+1}}{c_m^2\lambda_m^{2n} + c_{m-1}^2\lambda_{m-1}^{2n} + \ldots + c_1^2\lambda_1^{2n}} =$$

$$= \frac{c_m^2\lambda_m^{2n+1}\left(1 + \left(\frac{c_{m-1}}{c_m}\right)^2\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^{2n+1} + \ldots + \left(\frac{c_1}{c_m}\right)^2\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_m}\right)^{2n+1}\right)}{c_m^2\lambda_m^{2n}\left(1 + \left(\frac{c_{m-1}}{c_m}\right)^2\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^{2n} + \ldots + \left(\frac{c_1}{c_m}\right)^2\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_m}\right)^{2n}\right)} = \lambda_m + \mathrm{O}\left(\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^{2n}\right).$$

Заметим, что показатель степени равен $2n$, в отличие от заявленного в условии утверждения показателя, равного n. Таким образом, если матрица A — самосопряженная, то оценку сходимости из условия утверждения можно улучшить.

Рассмотрим теперь выражение (3) для произвольной матрицы A и воспользуемся условием A) сходимости степенного метода:

$$\lambda_m^{(n)} = \frac{\sum\limits_{i,j=1}^{m} c_i c_j \lambda_i^{n+1}\lambda_j^n (e_i, e_j)}{\sum\limits_{i,j=1}^{m} c_i c_j \lambda_i^n \lambda_j^n (e_i, e_j)} =$$

$$= \frac{\lambda_m^{2n+1}c_m^2(e_m, e_m) + \lambda_m^{n+1}\lambda_{m-1}^n c_{m-1}c_m(e_{m-1}, e_m) + \ldots + c_1^2\lambda_1^{2n+1}(e_1, e_1)}{\lambda_m^{2n}c_m^2(e_m, e_m) + \lambda_m^n\lambda_{m-1}^n c_{m-1}c_m(e_{m-1}, e_m) + \ldots + c_1^2\lambda_1^{2n}(e_1, e_1)} =$$

$$= \frac{\lambda_m^{2n+1}c_m^2(e_m, e_m)\left(1 + \frac{c_{m-1}}{c_m}\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^{n+1}\frac{(e_{m-1}, e_{m-1})}{(e_m, e_m)} + \ldots + \left(\frac{c_1}{c_m}\right)^2\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_m}\right)^{2n+1}\frac{(e_1, e_1)}{(e_m, e_m)}\right)}{\lambda_m^{2n}c_m^2(e_m, e_m)\left(1 + \frac{c_{m-1}}{c_m}\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^{n}\frac{(e_{m-1}, e_{m-1})}{(e_m, e_m)} + \ldots + \left(\frac{c_1}{c_m}\right)^2\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_m}\right)^{2n}\frac{(e_1, e_1)}{(e_m, e_m)}\right)}.$$

Отсюда получаем

$$\lambda_m^{(n)} = \lambda_m + \mathrm{O}\left(\left(\frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_m}\right)^{n}\right).$$

Утверждение доказано. □

Замечание. *Пусть у вещественной матрицы A $(m \times m)$ существует комплексное собственное значение: $\lambda = \lambda_0 + i\lambda_1$, $\lambda_1 \neq 0$. Тогда соответствующий собственный вектор — комплексный: $x = x_0 + ix_1$, $x_1 \neq \theta$, и начальное приближение x^0 вектора x в итерационном методе также должно быть комплексным.*

Доказательство. Подействуем на x оператором A:

$$A(x_0 + ix_1) = (\lambda_0 + i\lambda_1)(x_0 + ix_1).$$

Разделим вещественную и мнимую части уравнения:

$$\begin{cases} Ax_0 = \lambda_0 x_0 - \lambda_1 x_1 \\ Ax_1 = \lambda_0 x_1 + \lambda_1 x_0 \end{cases}.$$

Предположим, что $x_1 = \theta$. Тогда из второго уравнения следует, что $x_0 = \theta$ и $x = \theta$. Однако x — собственный вектор и поэтому не может быть нулевым. Полученное противоречие завершает доказательство. □

Метод обратных итераций

Пусть матрица A — невырожденная. Рассмотрим следующую форму записи неявного итерационного метода:

$$Ax^{n+1} = x^n, \quad n \in \mathbb{Z}_+, \ x^0 \text{ задано.}$$

Будем называть такой метод методом обратных итераций. Умножим обе части равенства слева на A^{-1} и получим формулу степенного метода для матрицы A^{-1}:

$$x^{n+1} = A^{-1}x^n, \quad n \in \mathbb{Z}_+, \ x^0 \text{ задано.} \tag{4}$$

Из свойств обратной матрицы следует, что собственные значения невырожденной матрицы A и обратной к ней матрицы A^{-1} связаны соотношением

$$\lambda_k^{A^{-1}} = \frac{1}{\lambda_k^A}, \ k = \overline{1, m}.$$

Заметим, что если собственные значения λ_k^A упорядочены по возрастанию модулей, то соответствующие им собственные значения $\lambda_k^{A^{-1}}$ будут упорядочены по убыванию модулей. В данном методе обозначим $\lambda_k = \lambda_k^A$, и пусть $\{\lambda_k\}$ упорядочены по возрастанию модулей.

Сформулируем три условия:

A) В пространстве $\mathbb{R}^m$ существует базис $\{e_k\}$ из собственных векторов матрицы A.

B) $\left|\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right| < 1$.

C) $x^0 = c_1 e_1 + c_2 e_2 + \ldots + c_m e_m, \ c_1 \neq 0$.

Утверждение. *Пусть невырожденная вещественная матрица A $(m \times m)$ такова, что выполнены условия A) – C). Тогда метод обратных итераций сходится по направлению к собственному вектору, отвечающему минимальному по модулю собственному значению:*

$$x^n \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} e_1.$$

Доказательство. Разложим n-ю итерацию по базису $\{e_k\}$ из собственных векторов матрицы A:

$$x^n = A^{-n}x^0 = \sum_{k=1}^{m} c_k A^{-n} e_k = \sum_{k=1}^{m} c_k \lambda_k^{-n} e_k = c_1\lambda_1^{-n}e_1 + c_2\lambda_2^{-n}e_2 + \ldots + c_m\lambda_m^{-n}e_m.$$

В силу условия C) $c_1 \neq 0$. Кроме того, поскольку матрица A невырождена, $\lambda_1^n \neq 0$. Поделив равенство на $c_1\lambda_1^{-n}$, получим

$$\frac{x^n}{c_1\lambda_1^{-n}} = e_1 + \frac{c_2}{c_1}\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^n e_2 + \ldots + \frac{c_m}{c_1}\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_m}\right)^n e_m.$$

Перейдя к пределу при $n \to \infty$ и учитывая условие B), получим, что x^n сходится по направлению к e_1:

$$\lim_{n\to\infty} x^n = e_1.$$

□

Сформулируем утверждения о вычислении минимального собственного значения в виде задачи.

Задача. *Пусть выполнены условия A) – C) сходимости метода обратных итераций. Показать, что в случае произвольной матрицы A справедливы следующие оценки:*

$$\lambda_1 - \frac{x_i^n}{x_i^{n+1}} = \mathrm{O}\left(\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^n\right),$$

$$\lambda_1 - \frac{(x^n, x^n)}{(x^{n+1}, x^n)} = \mathrm{O}\left(\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^n\right).$$

Показать, что если матрица A — самосопряженная, то последнюю оценку можно улучшить:

$$\lambda_1 - \frac{(x^n, x^n)}{(x^{n+1}, x^n)} = \mathrm{O}\left(\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^{2n}\right).$$

Метод обратных итераций со сдвигом

Рассмотрим итерационный метод, задаваемый формулой

$$(A - \alpha E)x^{n+1} = x^n, \quad n \in \mathbb{Z}_+,\ x^0 \text{ задано},$$

где α — такое вещественное число, что матрица $(A - \alpha E)$ невырождена. Домножим обе части равенства слева на $(A - \alpha E)^{-1}$ и получим формулу степенного метода с матрицей $(A - \alpha E)^{-1}$:

$$x^{n+1} = (A - \alpha E)^{-1}x^n. \tag{5}$$

Таким образом, метод обратных итераций со сдвигом эквивалентен степенному методу, записанному для матрицы $B = (A - \alpha E)^{-1}$. Следовательно, векторы x^n будут сходиться при $n \to \infty$ по направлению к такому собственному вектору e_r матрицы A, для которого величина

$$|\lambda_r - \alpha|^{-1} = \max_{1\leqslant k\leqslant m} |\lambda_k - \alpha|^{-1}.$$

Это означает, что если требуется найти собственный вектор e_r, отвечающий данному собственному значению λ_r, то надо задать число α, близкое к λ_r, и вычислить векторы x^n, исходя из формулы (5).

Само собственное значение λ_r находится из выражения:

$$\lambda_r = \lim_{n\to\infty}\left(\alpha + \frac{x_n^{(i)}}{x_{n+1}^{(i)}}\right), \quad i = \overline{1, m}.$$

Следовательно, метод обратных итераций со сдвигом позволяет в принципе отыскать любое собственное значение матрицы A. Этот метод очень часто используют для нахождения и уточнения собственных векторов, если собственные значения уже известны.

§10 Приведение матрицы к верхней почти треугольной форме

Рассмотрим полную проблему собственных значений матрицы A $(m \times m)$.
Идея QR-алгоритма (см. [9], гл.VI, §§45,46), позволяющего решить эту проблему, состоит в использовании сохраняющих спектр преобразований для приведения матрицы A к более простому виду: верхней почти треугольной форме, и построении итерационного процесса, приводящего преобразованную матрицу к виду, в котором найти спектр матрицы достаточно легко — верхнетреугольной или диагональной форме.

Определение. *Матрица A имеет верхнюю почти треугольную форму* (ВПТФ), *если ее можно записать в виде*

$$A = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \dots & \times & \times \\ \times & \times & \times & \dots & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \dots & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \dots & \times & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \times & \times \end{pmatrix},$$

где символами $\times$ обозначены, вообще говоря, ненулевые элементы матрицы.

Определение. *Элементарным отражением, соответствующим вещественному вектор-столбцу $v = (v_1, v_2, \dots, v_m)^T$, называется преобразование, задаваемое матрицей*

$$H = E - 2\frac{vv^T}{\|v\|^2}. \tag{1}$$

Убедимся, что формула (1) задает матрицу порядка $(m \times m)$:

$$v^T v = v_1^2 + v_2^2 + .. + v_m^2 = \|v\|^2 - \text{число},$$

$$vv^T = \begin{pmatrix} v_1^2 & v_1v_2 & \cdots & v_1v_m \\ v_2v_1 & v_2^2 & \cdots & v_2v_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_mv_1 & v_mv_2 & \cdots & v_m^2 \end{pmatrix} - \text{симметричная (эрмитова) матрица.}$$

Сформулируем свойства матрицы элементарного отражения:

1. H — симметрическая матрица, $H = H^T$.
2. H — ортогональная матрица, $H^{-1} = H^T$.

   Для доказательства этого свойства рассмотрим произведение $H^T H$:

$$H^T H = H^2 = \left(E - 2\frac{vv^T}{\|v\|^2}\right)\left(E - 2\frac{vv^T}{\|v\|^2}\right) = E^2 - 4\frac{vv^T}{\|v\|^2} + 4\frac{v(v^Tv)v^T}{\|v\|^4} = E.$$

   Домножив полученное равенство на H^{-1} справа, получим требуемое утверждение.

Утверждение. *Пусть задан вещественный вектор-столбец $x = (x_1, x_2, .., x_m)^T$. Тогда можно выбрать вектор v так, чтобы было выполнено равенство*

$$Hx = (-\|x\|, 0, 0, .., 0)^T, \quad \|x\| = \sqrt{(x, x)},$$

где H — элементарное отражение, соответствующее вектор-столбцу v.

Доказательство. Будем искать вектор v в виде

$$v = x + \sigma z, \quad \sigma \in \mathbb{R}_+, \ z = (1, 0, .., 0)^T.$$

Подставим выражение для v в формулу (1):

$$Hx = x - 2\frac{(x+\sigma z)(x+\sigma z)^T x}{(x+\sigma z)^T(x+\sigma z)} = x - (x+\sigma z)\frac{2(x+\sigma z)^T x}{(x+\sigma z)^T(x+\sigma z)}. \tag{2}$$

Рассмотрим отдельно числитель и знаменатель дроби:

$$2(x+\sigma z)^T x = 2(\|x\|^2 + \sigma x_1),$$

$$(x+\sigma z)^T(x+\sigma z) = \|x\|^2 + \sigma x_1 + \sigma x_1 + \sigma^2.$$

Пусть $\sigma = \|x\|$. Тогда

$$\frac{2(x+\sigma z)^T x}{(x+\sigma z)^T(x+\sigma z)} = 1.$$

Подставив последнее выражение в равенство (2), получим искомое равенство:

$$Hx = x - x - \sigma z = (-\|x\|, 0, 0, \ldots, 0)^T.$$

□

Утверждение. *Любую вещественную матрицу A $(m \times m)$ можно привести к верхней почти треугольной форме с помощью преобразования подобия с ортогональной матрицей Q:*

$$C = Q^{-1}AQ = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \ldots & \times & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & \times & \times \end{pmatrix},$$

где $Q^T = Q^{-1}$.

Доказательство. Представим матрицу A в виде

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & y_{m-1} \\ x_{m-1} & A_{m-1} \end{pmatrix},$$

где $x_{m-1} = (a_{21}, a_{31}, .., a_{m1})^T$, $y_{m-1} = (a_{12}, a_{13}, .., a_{1m})$.

Согласно предыдущему утверждению, можно задать такое элементарное отражение с матрицей H_{m-1} порядка $(m-1)$, что будет справедливо равенство

$$H_{m-1}x_{m-1} = -\sigma_1 z_{m-1} = (-\|x_{m-1}\|, 0, 0, .., 0)^T, \ z_{m-1} = (\underbrace{1, 0, \ldots, 0}_{m-1})^T, \ \sigma_1 = \|x_{m-1}\|. \tag{3}$$

Соответствующий матрице H_{m-1} вещественный вектор v можно представить в виде

$$v = x_{m-1} + \sigma_1 z_{m-1}, \text{ где } \sigma_1 = \|x_{m-1}\|, z_{m-1} = (\underbrace{1, 0, \ldots, 0}_{m-1})^T.$$

Из-за несовпадения размерностей мы не можем напрямую применить преобразование H_{m-1} к матрице A. Поэтому рассмотрим матрицу U_1 $(m \times m)$:

$$U_1 = \begin{pmatrix} 1 & \theta^T \\ \theta & H_{m-1} \end{pmatrix}, \ \theta = (\underbrace{0, 0, \ldots, 0}_{m-1})^T.$$

В силу того, что матрица H_{m-1} симметрическая и ортогональная, матрица U_1 также является симметрической и ортогональной. Вычислим матрицу $C_1 = U_1^{-1} A U_1$, полученную действием преобразования подобия U_1 на матрицу A:

$$U_1^{-1} A = \begin{pmatrix} 1 & \theta^T \\ \theta & H_{m-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & y_{m-1} \\ x_{m-1} & A_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & y_{m-1} \\ H_{m-1} x_{m-1} & H_{m-1} A_{m-1} \end{pmatrix},$$

$$U_1^{-1} A U_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & y_{m-1} \\ H_{m-1} x_{m-1} & H_{m-1} A_{m-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \theta^T \\ \theta & H_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & y_{m-1} H_{m-1} \\ H_{m-1} x_{m-1} & H_{m-1} A_{m-1} H_{m-1} \end{pmatrix}.$$

В силу равенства (3) матрица C_1 имеет следующий вид:

$$C_1 = U_1^{-1} A U_1 = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times & \times \end{pmatrix}.$$

Введем вектор $x_{m-2} = (c_{32}^{(1)}, c_{42}^{(1)}, \ldots, c_{m2}^{(1)})^T$, где $c_{i2}^{(1)}, i = \overline{3, m}$ — элементы матрицы C_1, стоящие во втором столбце. Воспользуемся предыдущим утверждением и построим матрицу H_{m-2}, удовлетворяющую равенству

$$H_{m-2} x_{m-2} = -\sigma_2 z_{m-2} = (-\|x_{m-2}\|, 0, \ldots, 0)^T, \ z_{m-2} = (\underbrace{1, 0, \ldots, 0}_{m-2})^T, \ \sigma_2 = \|x_{m-2}\|.$$

По аналогичным соображениям рассмотрим матрицу U_2 $(m \times m)$:

$$U_2 = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & \\ 0 & 1 & \mathbf{0} \\ \hline & \mathbf{0} & H_{m-2} \end{array} \right).$$

Матрица U_2 ортогональна и симметрична. Матрица $C_2 = U_2^{-1} C_1 U_2$ имеет следующий вид:

$$C_2 = U_2^{-1} C_1 U_2 = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \ldots & \times & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \times & \ldots & \times & \times \end{pmatrix} = U_2^{-1} U_1^{-1} A U_1 U_2.$$

Через $(m-2)$ шага получим матрицу C, имеющую ВПТФ:

$$C = U_{m-2}^{-1} U_{m-3}^{-1} \ldots U_2^{-1} U_1^{-1} A U_1 U_2 \ldots U_{m-3} U_{m-2} = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \ldots & \times & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & \times & \times \end{pmatrix}.$$

Определим матрицу $Q = U_1 U_2 \dots U_{m-2}$. Покажем, что Q — ортогональная матрица:

$$Q^T = (U_1 U_2 \dots U_{m-2})^T = U_{m-2}^T U_{m-3}^T \dots U_1^T = U_{m-2}^{-1} \dots U_1^{-1} = (U_1 U_2 \dots U_{m-2})^{-1} = Q^{-1}.$$

Таким образом, произвольную матрицу A можно привести к матрице C с ВПТФ с помощью преобразования подобия, задаваемого ортогональной матрицей Q:

$$C = Q^{-1} A Q,\ c_{ij} = 0 \text{ при } i \geqslant j + 2.$$

□

Замечание 1. *Преобразование подобия сохраняет спектр матрицы:* $\lambda_k^C = \lambda_k^A,\ k = \overline{1, m}$.

Доказательство. Рассмотрим ненулевой собственный вектор x_k матрицы A, отвечающий собственному значению λ_k^A:

$$Ax_k = \lambda_k^A x_k,\ x_k \neq \theta.$$

Домножим обе части равенства на матрицу Q^{-1} слева:

$$Q^{-1} A x_k = \lambda_k^A Q^{-1} x_k.$$

Обозначим $y_k = Q^{-1} x_k$. Отсюда $x_k = Q y_k$. Тогда справедливо равенство

$$\underbrace{Q^{-1} A Q}_{C} y_k = \lambda_k^A y_k.$$

Таким образом, y_k является собственным вектором матрицы C, и выполнено требуемое равенство $\lambda_k^C = \lambda_k^A$. Доказательство в обратную сторону очевидно. □

Замечание 2. *Если A — симметрическая матрица, то C также является симметрической матрицей:*

$$A = A^T \ \Rightarrow\ C = C^T.$$

Доказательство. $C = Q^{-1} A Q$. Запишем и преобразуем выражение для C^T:

$$C^T = (Q^{-1} A Q)^T = Q^T A^T \left(Q^{-1}\right)^T = Q^T A^T Q = Q^{-1} A Q = C.$$

□

Замечание 3. *Симметричная матрица, имеющая верхнюю почти треугольную форму, является симметричной трехдиагональной матрицей.*

§11 Понятие о QR-алгоритме решения полной проблемы собственных значений

Утверждение. *Произвольная матрица A $(m \times m)$ может быть представлена в виде:*

$$A = QR, \tag{1}$$

где Q — ортогональная матрица, а R — матрица, имеющая верхнюю треугольную форму (ВТФ).

Доказательство. Возьмем вектор $x = (a_{11}, a_{21}, \ldots, a_{m1})^T$ — первый столбец матрицы A. Рассмотрим вектор

$$v = x + \|x\| z, \quad z = (\underbrace{1, 0, \ldots, 0}_{m})^T$$

и построим матрицу

$$H_1 = E - 2\frac{vv^T}{\|v\|^2}.$$

По доказанному выше

$$H_1 x = (-\|x\|, 0, 0, \ldots, 0)^T.$$

Тогда матрица $A_1 = H_1 A$ будет иметь следующий вид:

$$A_1 = H_1 A = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \ldots & \times \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times \end{pmatrix}.$$

Пусть теперь $x = \left(a_{22}^{(1)}, a_{32}^{(1)}, \ldots, a_{m2}^{(1)}\right)$, где $a_{i2}^{(1)}$, $i = \overline{2, m}$ элементы второго столбца A_1. По вектору x однозначно определяется элементарное отражение с матрицей H ($(m-1) \times (m-1)$), удовлетворяющей равенству

$$Hx = (-\|x\|, 0, \ldots, 0)^T.$$

Пусть $H_2 = \begin{pmatrix} 1 & \theta^T \\ \theta & H \end{pmatrix}$. Тогда матрица $A_2 = H_2 A_1$ имеет следующий вид:

$$A_2 = H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \ldots & \times \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times \\ 0 & 0 & \times & \ldots & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \times & \ldots & \times \end{pmatrix}.$$

После $(m-1)$-го шага получим матрицу $R = H_{m-1} H_{m-2} \ldots H_2 H_1 A$, имеющую ВТФ:

$$R = H_{m-1} H_{m-2} \ldots H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \ldots & \times \\ 0 & \times & \times & \ldots & \times \\ 0 & 0 & \times & \ldots & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & \times \end{pmatrix}.$$

Введем матрицу $Q = H_1 H_2 \ldots H_{m-1}$. Покажем, что матрица Q ортогональная, воспользовавшись свойством ортогональности элементарного отражения:

$$Q^{-1} = H_{m-1}^{-1} \ldots H_2^{-1} H_1^{-1} = H_{m-1}^T \ldots H_2^T H_1^T = (H_1 H_2 \ldots H_{m-1})^T = Q^T.$$

Таким образом, справедливо разложение (1) матрицы A. В силу того, что в ходе преобразований на матрицу A не накладывались ограничения, разложение справедливо для произвольной матрицы. □

Замечание. *Число операций, необходимых для вычисления QR-разложения матрицы A, зависит от вида матрицы A. Для произвольной матрицы число операций можно оценить величиной порядка m^3, для матрицы с* ВПТФ, *— порядка m^2, для трехдиагональной матрицы — порядка m.*

Рассмотрим оптимальную версию QR-алгоритма. Приведем матрицу A к матрице A_0, имеющей ВПТФ, и осуществим QR-разложение матрицы A_0:

$$A_0 = Q_0 R_0,$$

где Q_0 — ортогональная, а R_0 — верхнетреугольная матрица. Построим матрицу

$$A_1 = R_0 Q_0.$$

Покажем, что спектры матриц A_0 и A_1 совпадают. Из вида матриц A_0 и A_1 получим

$$R_0 = Q_0^{-1} A_0,$$

$$A_1 = Q_0^{-1} A_0 Q_0.$$

Матрица A_1 подобна матрице A_0, и из этого следует, что спектры матриц равны.

На следующем шаге осуществим QR-разложение матрицы $A_1 = Q_1 R_1$ и построим матрицу $A_2 = R_1 Q_1$. Аналогичным образом продолжая вычисления, на k-м шаге осуществим QR-разложение матрицы $A_k = Q_k R_k$ и построим $A_{k+1} = R_k Q_k$. Справедливо следующее утверждение, которое мы приводим без доказательства ввиду его сложности. Доказательство можно посмотреть в [9] и [10].

Утверждение. *Если все собственные значения матрицы A вещественны, то последовательность матриц $\{A_k\}$ сходится к матрице, имеющей* ВТФ*:*

$$A_k \underset{k\to\infty}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} \lambda_1 & \times & \dots & \times \\ 0 & \lambda_2 & \dots & \times \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_m \end{pmatrix}.$$

Если же матрица имеет комплексную пару собственных значений $\lambda_0 \pm i\lambda_1$, то ей на главной диагонали предельной матрицы будет соответствовать клетка размера 2×2:

$$A_k \underset{k\to\infty}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} \times & & & & & \times \\ & \times & & & & \\ & & \lambda_0 & \lambda_1 & & \\ & & -\lambda_1 & \lambda_0 & & \\ & & & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & & & \times \end{pmatrix}.$$

Замечание 1. *Итерационный процесс останавливается, когда все элементы ниже главной диагонали, либо ниже побочной (в случае комплексно-сопряженных собственных значений) матрицы A_n при некотором n становятся равными нулю. Однако следует заметить, что в данном случае под нулем мы понимаем либо машинный ноль, либо число, меньшее некоторой заданной величины — необходимой точности вычисления.*

Замечание 2. *QR-алгоритм применим к произвольной матрице A.*

Замечание 3. *QR-алгоритм является очень затратным по необходимому числу операций и объему памяти, используемому для хранения промежуточных матриц.*

§12 Предварительное преобразование матрицы к ВПТФ. Неухудшение ВПТФ при QR-алгоритме

Лемма 1. *Пусть $C = BA$, где B имеет* ВТФ, *а A имеет* ВПТФ. *Тогда C имеет* ВПТФ.

Доказательство. Выпишем элемент матрицы C по определению произведения матриц:

$$c_{ij} = \sum_{\alpha=1}^{m} b_{i\alpha} a_{\alpha j},\ i, j = \overline{1, m}.$$

Учтем, что $b_{i\alpha} = 0$ при $\alpha < i$ и $a_{\alpha j} = 0$ при $\alpha > j + 1$:

$$c_{ij} = \sum_{\alpha=i}^{m} b_{i\alpha} a_{\alpha j} = \sum_{\alpha=i}^{j+1} b_{i\alpha} a_{\alpha j},\ i, j = \overline{1, m}.$$

При $i > j + 1$ получим, что $c_{ij} = 0$. Таким образом, C имеет ВПТФ и лемма доказана. □

Аналогичным образом доказывается следующая лемма (ее непосредственное доказательство предоставляется читателю).

Лемма 2. *Пусть $C = BA$, где B — матрица с* ВПТФ, *а A — матрица с* ВТФ. *Тогда C — матрица с* ВПТФ.

Рассмотрим применение QR-алгоритма для матрицы A. Приведем матрицу A к верхней почти треугольной матрице A_0. Запишем QR-разложение матрицы A_0:

$$A_0 = Q_0 R_0.$$

Поскольку R_0 и R_0^{-1} — матрицы, имеющие ВТФ, то матрица Q_0, определяемая выражением

$$Q_0 = A_0 R_0^{-1},$$

в силу леммы 2 имеет ВПТФ. Матрица $A_1 = R_0 Q_0$ в силу леммы 1 также имеет ВПТФ. Таким образом, леммы 1 и 2 гарантируют на каждом шаге QR-алгоритма неухудшение ВПТФ матрицы $A_k,\ k \in \mathbb{Z}_+$. Таким образом, если нужно найти все собственные значения матрицы A, сначала приведем ее к ВПТФ, которую обозначим A_0, и для этой матрицы осуществим QR-алгоритм: $A_k = Q_k R_k, A_{k+1} = R_k Q_k, k = 0, 1, 2, \ldots$. Так как A_0 имеет ВПТФ, то все матрицы A_k в QR-алгоритме не ухудшают ВПТФ, а разложения $Q_k R_k$ и$R_k Q_k$ требуют число действий пропорциональное m^2, а не m^3 в случае, если A_0 не имеет ВПТФ. Следовательно, все собственные значения A будут найдены с меньшими затратами.

Глава II

Интерполирование и приближение функций

§13 Постановка задачи интерполирования

Рассмотрим некоторый технологический процесс, характеризуемый множеством параметров. Разместим в среде протекания процесса конечное число датчиков, позволяющих получать точные значения параметров процесса в ограниченном числе точек среды. Для получения исчерпывающей информации о протекании процесса необходимо уметь оценивать значения параметров процесса в точках, в которых нет возможности их измерить.

Под интерполированием (точное определение будет дано ниже) понимается процесс восстановления промежуточных значений функции по имеющемуся дискретному набору известных значений. В вычислительной математике интерполирование обычно рассматривается в рамках задачи вычисления промежуточных значений функций, например, при вычислении значений специальных функций, являющихся решениями дифференциальных уравнений специального вида (функции Бесселя, Ханкеля и другие). Как правило, значения функций такого рода задаются таблицами, шаг которых может оказаться слишком большим для конкретной задачи. В таком случае используют интерполирование для получения значений функции с заданной точностью.

Интерполирование функций используется при исследовании сходимости разностных методов решения дифференциальных задач. При исследовании сходимости необходимо уметь сравнивать сеточные и непрерывные функции. Эту задачу можно решить двумя методами. Первый метод состоит в проецировании непрерывной функции на сетку и последующем сравнении сеточных функций. Второй способ состоит в восстановлении непрерывной функции по сеточной с помощью интерполирования и последующем сравнении непрерывных функций.

Постановка задачи. *Рассмотрим вещественную функцию*

$$f(x), \quad x \in [a, b] \subset \mathbb{R}$$

и заданное разбиение области определения этой функции, удовлетворяющее условиям:

$$a \leqslant x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n \leqslant b.$$

Точки $\{x_i\}_{i=0}^n$ *называются узловыми точками функции* $f(x)$*. В этих точках задано значение функции:*

$$f(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0, n}.$$

Задача интерполирования состоит в нахождении значений функции $f(x)$ на всем отрезке $[a, b]$ по ее значениям в узловых точках.

Заметим, что в постановке задачи интерполирования не указан конкретный метод построения приближенных значений функции $f(x)$. В силу этого задача допускает сколь угодно много решений. В этой главе рассматривается задача приближения заданной функции вещественными полиномами:

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n, \quad a_i \in \mathbb{R}, \quad \sum_{i=0}^{n} a_i^2 \neq 0.$$

Определение. *Вещественный полином n-й степени $P_n(x)$ называется интерполяционным полиномом для функции $f(x)$, построенным по узлам $\{x_i\}_{i=0}^n$, если его значения в узловых точках совпадают со значениями функции в этих точках:*

$$P_n(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0, n}. \tag{1}$$

Утверждение. *Для любой функции $f(x)$ существует единственный интерполяционный полином степени n, построенный по $(n+1)$-му узлу.*

Доказательство. Распишем систему (1) покоординатно:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \ldots + a_n x_0^n = f_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \ldots + a_n x_1^n = f_1 \\ \ldots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \ldots + a_n x_n^n = f_n \end{cases}. \tag{2}$$

Получили систему линейных уравнений относительно коэффициентов полинома $P_n(x)$ с матрицей

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{pmatrix}.$$

Определитель матрицы A — это определитель Вандермонда $(n+1)$-го порядка:

$$|A| = \prod_{0 \leqslant j < i \leqslant n} (x_i - x_j).$$

Поскольку все узлы различны, матрица A невырождена: $|A| \neq 0$.

Из невырожденности матрицы A следует существование и единственность решения системы (2). Таким образом, для любой функции $f(x)$ существует интерполяционный полином $P_n(x)$, и его коэффициенты однозначно определяются по значениям функции в заданных узлах. □

Замечание. *Помимо интерполирования иногда решают задачу экстраполирования — прогнозирования поведения функции за пределами отрезка. Задача экстраполирования имеет большую погрешность, чем задача интерполирования.*

§14 Интерполяционная формула Лагранжа

Рассмотрим вещественную функцию

$$f(x), \quad x \in [a,b] \subset \mathbb{R},$$

заданную в узловых точках произвольного разбиения отрезка $[a,b]$:

$$a \leqslant x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n \leqslant b,$$

$$f(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0,n}.$$

Определение. *Интерполяционный полином для функции $f(x)$, заданный формулой*

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k(x) f(x_k), \quad k = \overline{0,n}, \tag{1}$$

где $c_k(x)$ — полином степени n, называется интерполяционным полиномом в форме Лагранжа.

Из определения интерполяционного полинома следует, что

$$L_n(x_i) = f(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0,n}.$$

Из этих равенств следуют условия

$$c_k(x_l) = \delta_{kl}, \quad k,l = \overline{0,n}. \tag{2}$$

Будем искать полиномы $c_k(x)$ с учетом этих условий.

Рассмотрим полином $(n+1)$-й степени вида

$$\omega(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i).$$

Выделим множитель $(x - x_k)$:

$$\omega(x) = (x - x_k) \left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} (x - x_i) \right),$$

продифференцируем по x:

$$\omega'(x) = (x - x_k) \left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} (x - x_i) \right)' + \left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} (x - x_i) \right)$$

и подставим в полученное выражение $x = x_k$:

$$\omega'(x_k) = \left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} (x_k - x_i) \right), \quad k = \overline{0,n}.$$

Искомые полиномы $c_k(x)$ можно представить следующим образом:

$$c_k(x) = \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)}, \quad k = \overline{0, n}. \tag{3}$$

Заметим, что условия (2) для полиномов $c_k(x)$ выполнены. Учитывая равенства (1) и (3), запишем интерполяционный полином в форме Лагранжа:

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} f(x_k).$$

Оценим точность приближения функции $f(x)$ интерполяционным полиномом в форме Лагранжа.

Определение. *Пусть $L_n(x)$ — интерполяционный полином для функции $f(x)$. Тогда функция*

$$\psi_{L_n}(x) = f(x) - L_n(x) \tag{4}$$

называется погрешностью интерполирования функции $f(x)$ интерполяционным полиномом $L_n(x)$.

Пусть существует $(n+1)$-я производная функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$. Тогда

$$\psi_{L_n}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x), \quad \text{где } \xi \in [a, b]. \tag{5}$$

Обычно оценку погрешности аппроксимации (5) записывают в виде

$$|\psi_{L_n}(x)| \leqslant \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega(x)|, \quad \text{где } M_{n+1} = \sup_{x \in [a,b]} \left| f^{(n+1)}(x) \right|. \tag{6}$$

Замечание 1. *Вывод формул (5) и (6) в данном курсе не рассматривается, его можно найти в* [1].

Замечание 2. *Если исходная функция является полиномом степени, не превышающей n, то интерполяционный полином приближает ее точно, то есть $\psi_{L_n}(x) \equiv 0$.*

Замечание 3. *Наличие в оценке погрешности (6) быстро убывающего множителя $\frac{1}{(n+1)!}$ вовсе не гарантирует сходимость интерполяционного полинома к заданной функции при увеличении числа узлов в разбиении. Более того, начальное разбиение может быть выбрано так, что мы вовсе не получим сходимости. Поэтому на практике лучше разбивать область определения функции на меньшие отрезки, на каждом из которых приближать функцию полиномом невысокой степени, и потом «сшивать» полученные приближения в одну функцию, определенную уже на всем отрезке.*

§15 Разделенные разности

Рассмотрим вещественную функцию

$$f(x), \quad x \in [a, b] \subset \mathbb{R},$$

заданную в узловых точках произвольного разбиения отрезка $[a, b]$:

$$a \leqslant x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n \leqslant b,$$

$$f(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0, n}.$$

Определение. *Разделенной разностью первого порядка, построенной по несовпадающим узлам x_i и x_j, называется отношение*

$$f(x_i, x_j) = \frac{f(x_j) - f(x_i)}{x_j - x_i}, \quad 0 \leqslant i, j \leqslant n. \tag{1}$$

Обычно мы будем рассматривать разделенные разности, составленные по соседним узлам. Например,

$$f(x_0, x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}, \quad f(x_1, x_2) = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}.$$

Замечание. *Отношение (1) является дискретным аналогом первой производной.*

Определение. *Разделенной разностью второго порядка, построенной по несовпадающим узлам $x_0,\ x_1,\ x_2$, называется отношение*

$$f(x_0, x_1, x_2) = \frac{f(x_1, x_2) - f(x_0, x_1)}{x_2 - x_0}. \tag{2}$$

Определение. *Пусть даны $f(x_j, \ldots, x_{j+k})$ и $f(x_{j+1}, \ldots, x_{j+k+1})$ — разделенные разности k-го порядка по соответствующим узлам, где $0 \leqslant j, k \leqslant n$. Тогда разделенной разностью $(k+1)$-го порядка, построенной по несовпадающим узлам $x_j,\ x_{j+1},\ \ldots,\ x_{j+k+1}$, называется отношение*

$$f(x_j, x_{j+1}, \ldots, x_{j+k+1}) = \frac{f(x_{j+1}, x_{j+2}, \ldots, x_{j+k+1}) - f(x_j, x_{j+1}, \ldots, x_{j+k})}{x_{j+k+1} - x_j}. \tag{3}$$

Введем следующие обозначения:

$$\omega(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) = \omega_{0,n}(x),$$

$$\omega_{\alpha,\beta}(x) = \prod_{i=\alpha}^{\beta} (x - x_i), \quad \alpha = 0, 1, \ldots, \beta,\ \beta = \overline{0, n}.$$

Очевидно, что

$$\omega'_{0,n}(x_i) = \prod_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^{n} (x_i - x_j),\ \omega'_{\alpha,\beta}(x_i) = \prod_{\substack{j=\alpha \\ i \neq j}}^{\beta} (x_i - x_j),\ i = \alpha, \alpha+1, \ldots, \beta.$$

Покажем, как разделенная разность произвольного порядка выражается через значения функции $f(x)$ в узлах $\{x_i\}_{i=0}^n$.

Утверждение. *Разделенная разность k-го порядка представима в виде*

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_k) = \sum_{i=0}^{k} \frac{f(x_i)}{\omega'_{0,k}(x_i)}. \tag{4}$$

Доказательство. Воспользуемся методом математической индукции.
Пусть $k = 1$. Тогда

$$f(x_0, x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0} + \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1}.$$

Таким образом утверждение выполнено при k=1. Пусть теперь утверждение верно для некоторого $k = l$. Докажем его для $k = l + 1$.

Следующие соотношения вытекают из предположения индукции:

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_l) = \sum_{i=0}^{l} \frac{f(x_i)}{\omega'_{0,l}(x_i)}, \tag{5}$$

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_{l+1}) = \sum_{i=1}^{l+1} \frac{f(x_i)}{\omega'_{1,l+1}(x_i)}. \tag{6}$$

Запишем разделенную разность $(l+1)$-го порядка:

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_{l+1}) = \frac{f(x_1, x_2, \ldots, x_{l+1}) - f(x_0, x_1, \ldots, x_l)}{x_{l+1} - x_0}. \tag{7}$$

Подставим выражения (5) и (6) в равенство (7) и вынесем общий множитель за скобку:

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_{l+1}) = \frac{1}{x_{l+1} - x_0} \left(\sum_{i=1}^{l+1} \frac{f(x_i)}{\omega'_{1,l+1}(x_i)} - \sum_{i=0}^{l} \frac{f(x_i)}{\omega'_{0,l}(x_i)} \right).$$

Вынесем за скобку $(l+1)$-е слагаемое первой суммы и нулевое слагаемое второй:

$$\begin{aligned} f(x_0, x_1, \ldots, x_{l+1}) = \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_{l+1})\omega'_{0,l}(x_0)} + \frac{f(x_{l+1})}{(x_{l+1} - x_0)\omega'_{1,l+1}(x_{l+1})} + \\ + \frac{1}{x_{l+1} - x_0} \left(\sum_{i=1}^{l} f(x_i) \left(\frac{1}{\omega'_{1,l+1}(x_i)} - \frac{1}{\omega'_{0,l}(x_i)} \right) \right). \end{aligned} \tag{8}$$

Рассмотрим отдельно некоторые элементы этого равенства. Заметим, что:

$$(x_0 - x_{l+1})\omega'_{0,l}(x_0) = \omega'_{0,l+1}(x_0),$$

$$(x_{l+1} - x_0)\omega'_{1,l+1}(x_{l+1}) = \omega'_{0,l+1}(x_{l+1}),$$

$$\frac{1}{x_{l+1} - x_0} \left(\frac{1}{\omega'_{1,l+1}(x_i)} - \frac{1}{\omega'_{0,l}(x_i)} \right) =$$

$$= \frac{1}{x_{l+1} - x_0} \left(\frac{x_i - x_0}{\omega'_{1,l+1}(x_i)(x_i - x_0)} - \frac{x_i - x_{l+1}}{\omega'_{0,l}(x_i)(x_i - x_{l+1})} \right) = \frac{1}{\omega'_{0,l+1}(x_i)}.$$

Подставив найденные выражения в равенство (8), получим:

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_{l+1}) = \frac{f(x_0)}{\omega'_{0,l+1}(x_0)} + \frac{f(x_{l+1})}{\omega'_{0,l+1}(x_{l+1})} + \sum_{i=1}^{l} \frac{f(x_i)}{\omega'_{0,l+1}(x_i)} = \sum_{i=0}^{l+1} \frac{f(x_i)}{\omega'_{0,l+1}(x_i)}.$$

Утверждение для $k = l + 1$ доказано, и в силу индукции справедлива формула (4). □

Утверждение. *Значение функции $f(x)$ в произвольном узле x_k, $k = \overline{0,n}$ можно выразить через значение функции в узле x_0 и разделенные разности до порядка k включительно.*

Доказательство. Пусть $k = 1$. Запишем разделенную разность первого порядка:

$$f(x_0, x_1) = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0}.$$

Домножим обе части равенства на $(x_1 - x_0) \neq 0$:

$$(x_1 - x_0)f(x_0, x_1) = f(x_1) - f(x_0).$$

Следовательно,

$$f(x_1) = f(x_0) + (x_1 - x_0)f(x_0, x_1).$$

Докажем утверждение для $k = 2$. Аналогично предыдущему случаю запишем разделенную разность 2-ого порядка и домножим обе части равенства на $(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) \neq 0$:

$$(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)f(x_0, x_1, x_2) = -\frac{x_2 - x_1}{x_0 - x_1}f(x_0) + \frac{x_2 - x_0}{x_0 - x_1}f(x_1) + f(x_2).$$

Введем обозначения:

$$\alpha = \frac{x_2 - x_0}{x_0 - x_1}f(x_1) = \frac{x_2 - x_0}{x_0 - x_1}(f(x_0) + (x_1 - x_0)f(x_0, x_1)) =$$

$$= \frac{x_2 - x_0}{x_0 - x_1}f(x_0) - (x_2 - x_0)f(x_0, x_1),$$

$$\beta = -\frac{f(x_0)(x_2 - x_1)}{x_0 - x_1}.$$

Следовательно,

$$(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)f(x_0, x_1, x_2) = \alpha + \beta + f(x_2) =$$

$$= \frac{x_2 - x_0}{x_0 - x_1}f(x_0) - (x_2 - x_0)f(x_0, x_1) - \frac{(x_2 - x_1)}{x_0 - x_1}f(x_0) + f(x_2) =$$

$$= f(x_2) - f(x_0) - (x_2 - x_0)f(x_0, x_1).$$

Выразив из последнего выражения $f(x_2)$, получим:

$$f(x_2) = f(x_0) + (x_2 - x_0)f(x_0, x_1) + (x_2 - x_0)(x_2 - x_1)f(x_0, x_1, x_2).$$

Переход от $k = l$ к $k = l + 1$ для произвольного $l \in N$ производится по аналогии с рассмотренным переходом от $k = 1$ к $k = 2$, но здесь не приводится, так как сопровождается более громоздкими выкладками. Далее мы иногда будем пользоваться таким приемом, чтобы избегать громоздкости выкладок.

Обобщив полученные результаты, запишем формулу для $f(x_n)$:

$$\begin{aligned} f(x_n) = f(x_0) + (x_n - x_0)f(x_0, x_1) + (x_n - x_0)(x_n - x_1)f(x_0, x_1, x_2) + \\ + \ldots + (x_n - x_0)(x_n - x_1)\ldots(x_n - x_{n-1})f(x_0, x_1, \ldots, x_n). \end{aligned} \tag{9}$$

□

Замечание. *Формула* (9) *является дискретным аналогом формулы Тейлора*

$$f(x_n) = f(x_0) + (x_n - x_0)f'(x_0) + \frac{(x_n - x_0)^2}{2}f''(x_0) + \ldots + \frac{(x_n - x_0)^n}{n!}f^{(n)}(x_0) + \ldots.$$

§16 Интерполяционная формула Ньютона

Рассмотрим вещественную функцию

$$f(x), \quad x \in [a,b] \subset \mathbb{R},$$

заданную в узловых точках произвольного разбиения отрезка $[a,b]$:

$$a \leqslant x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n \leqslant b,$$

$$f(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0,n}.$$

Воспользуемся результатами предыдущего параграфа и запишем формулу для $f(x_n)$:

$$\begin{gathered} f(x_n) = f(x_0) + (x_n - x_0)f(x_0,x_1) + (x_n - x_0)(x_n - x_1)f(x_0,x_1,x_2) + \\ + \ldots + (x_n - x_0)(x_n - x_1)\ldots(x_n - x_{n-1})f(x_0,x_1,\ldots,x_n). \end{gathered} \tag{1}$$

Подставив в эту формулу x вместо x_n, получим полином степени n от x:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f(x_0,x_1) + (x - x_0)(x - x_1)f(x_0,x_1,x_2) +$$

$$+ \ldots + (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})f(x_0,x_1,\ldots,x_n).$$

Обозначим полученный полином как $N_n(x)$:

$$\begin{gathered} N_n(x) = f(x_0) + (x - x_0)f(x_0,x_1) + (x - x_0)(x - x_1)f(x_0,x_1,x_2) + \\ + \ldots + (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})f(x_0,x_1,\ldots,x_n). \end{gathered} \tag{2}$$

Утверждение. *Полином* (2) *интерполирует функцию* $f(x)$.

Доказательство. Для доказательства утверждения достаточно показать, что

$$N_n(x_i) = f(x_i), \quad i = \overline{0,n}.$$

Подставив в формулу (2) x_i вместо x, получим:

$$\begin{gathered} N_n(x_i) = f(x_0) + (x_i - x_0)f(x_0,x_1) + (x_i - x_0)(x_i - x_1)f(x_0,x_1,x_2) + \\ + \ldots + (x_i - x_0)(x_i - x_1)\ldots(x_i - x_{n-1})f(x_0,x_1,\ldots,x_n). \end{gathered} \tag{3}$$

В равенстве (3) все слагаемые, начиная с i-ого, содержат множитель $(x_i - x_i)$, равный нулю. Тогда получим

$$\begin{gathered} N_n(x_i) = f(x_0) + (x_i - x_0)f(x_0,x_1) + (x_i - x_0)(x_i - x_1)f(x_0,x_1,x_2) + \\ + \ldots + (x_i - x_0)(x_i - x_1)\ldots(x_i - x_{i-1})f(x_0,x_1,\ldots,x_i) = f(x_i), \quad i = \overline{0,n}, \end{gathered}$$

что и требовалось доказать. □

Определение. *Интерполяционный полином, задаваемый формулой* (2)*, называется интерполяционным полиномом Ньютона.*

Замечание 1. *Интерполяционный полином Ньютона тождественно совпадает с интерполяционным полиномом в форме Лагранжа.*

Доказательство. Этот факт следует из доказанного в первом параграфе утверждения, что для любой функции $f(x)$ существует единственный интерполяционный полином, построенный по $(n+1)$ узлу. То есть интерполяцоннный полином Ньютона и интерполяцоннный полином в форме Лагранжа являются различными вариантами записи одного и того же полинома. □

Замечание 2. *Так как интерполяционный полином Ньютона тождественно совпадает с интерполяционным полиномом в форме Лагранжа, он имеет такую же погрешность:*

$$|\psi_{N_n}(x)| \leqslant \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\,|\omega(x)|\,, \quad \textit{где } M_{n+1} = \sup_{x\in[a,b]} \left|f^{(n+1)}(x)\right|.$$

Замечание 3. *Аналогично случаю с интерполяционным полиномом Лагранжа, если исходная функция является полиномом степени, не превышающей n, то интерполяционный полином Ньютона приближает ее точно.*

Замечание 4. *Выбор формы записи интерполяционного полинома функции $f(x)$ зависит от особенностей каждой конкретной задачи. Например, если узлы зафиксированы и их число постоянно, а искомая функция меняется, то удобно использовать интерполяционный полином в форме Лагранжа. Если же появляется необходимость в добавлении или удалении узлов при условии сохранения функции, то удобно использовать интерполяционный полином в форме Ньютона.*

§17 Интерполирование с кратными узлами. Полином Эрмита

Рассмотрим вещественную функцию

$$f(x), \quad x \in [a,b] \subset \mathbb{R},$$

заданную в узловых точках произвольного разбиения отрезка $[a,b]$:

$$a \leqslant x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_m \leqslant b,$$

$$f(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0,m}.$$

Пусть, кроме того, в узле x_k заданы значения всех производных функции $f(x)$ до порядка $(a_k - 1)$, $k = \overline{0,m}$. Натуральное число a_k называется кратностью соответствующего узла x_k.

Постановка задачи. *Требуется построить полином $H_n(x)$ степени n, удовлетворяющий условию:*

$$H_n^{(i)}(x_k) = f^{(i)}(x_k), \quad i = \overline{0,(a_k-1)},\ k = \overline{0,m}.$$

Определение. *Полином $H_n(x)$ называется интерполяционным полиномом Эрмита.*

Будем искать интерполяционный полином $H_n(x)$ в виде

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{m} \sum_{i=0}^{a_k-1} c_{k,i}(x) f^{(i)}(x_k),$$

где $c_{k,i}(x)$ - полиномы степени n.

Сформулируем условие, при котором можно найти интерполяционный полиномом Эрмита.

Утверждение. *Если сумма кратностей узлов функции f(x) равна $(n+1)$:*

$$\sum_{k=0}^{m} a_k = n+1,$$

то существует, причем единственный, интерполяционный полином Эрмита степени n для функции $f(x)$.

Рассмотрение задачи построения интерполяционного полинома Эрмита в общей постановке, которую мы привели выше, выходит за рамки нашего курса. Интересующиеся могут обратиться к [1], мы же далее будем рассматривать частный случай: построение интерполяционного полинома Эрмита для функции $f(x)$ по трем узлам, один из которых имеет кратность 2.

Построение полинома Эрмита по трем узлам

Рассмотрим функцию $f(x)$, определенную вместе со своей первой производной на отрезке $[a, b]$. Построим для функции $f(x)$ интерполяционный полином Эрмита $H_3(x)$ по трем узлам x_0, x_1 и x_2: $a \leqslant x_0 < x_1 < x_2 \leqslant b$, где узел x_1 — кратный.

По определению интерполяционного полинома Эрмита для $H_3(x)$ должны выполняться следующие равенства:

$$H_3(x_0) = f(x_0),\ H_3(x_1) = f(x_1),\ H_3(x_2) = f(x_2),\ H_3'(x_1) = f'(x_1). \tag{1}$$

Будем искать полином Эрмита $H_3(x)$ в виде

$$H_3(x) = c_0(x)f(x_0) + c_1(x)f(x_1) + c_2(x)f(x_2) + b_1(x)f'(x_1), \tag{2}$$

где $b_1(x)$ и $c_i(x),\ i = \overline{0,2}$ — полиномы третьей степени.
Равенства (1) и (2) позволяют сформулировать условия нахождения коэффициентов $b_1(x)$ и $c_i(x),\ i = \overline{0,2}$:

$$\begin{aligned}
&c_0(x_0) = 1, \quad c_1(x_0) = 0, \quad c_2(x_0) = 0, \quad b_1(x_0) = 0,\\
&c_0(x_1) = 0, \quad c_1(x_1) = 1, \quad c_2(x_1) = 0, \quad b_1(x_1) = 0,\\
&c_0(x_2) = 0, \quad c_1(x_2) = 0, \quad c_2(x_2) = 1, \quad b_1(x_2) = 0,\\
&c_0'(x_1) = 0, \quad c_1'(x_1) = 0, \quad c_2'(x_1) = 0, \quad b_1'(x_1) = 1.
\end{aligned}$$

Воспользуемся этими условиями и получим коэффициенты интерполяционного полинома (2) в явном виде.

Из условий $c_0(x_1) = 0$, $c_0(x_2) = 0$ и $c_0'(x_1) = 0$ следует, что узлы x_1 и x_2 являются корнями полинома $c_0(x)$ двойной и единичной кратности соответственно. Поэтому коэффициент $c_0(x)$ будем искать в виде

$$c_0(x) = k(x - x_1)^2(x - x_2), \quad \text{где } k \in \mathbb{R}.$$

Для нахождения k воспользуемся условием $c_0(x_0) = 1$:

$$c_0(x_0) = k(x_0 - x_1)^2(x_0 - x_2) = 1.$$

Поделим это равенство на $(x_0 - x_1)^2(x_0 - x_2)$ (мы можем это сделать, так как узлы x_0, x_1, x_2 различны):

$$k = \frac{1}{(x_0 - x_1)^2(x_0 - x_2)}.$$

Замечание. *В дальнейшем при делении на множители, содержащие разности узлов, мы не будем оговаривать неравенство нулю этих множителей, считая это очевидным.*

Запишем представление для $c_0(x)$ с учетом выражения для коэффициента k:

$$c_0(x) = \frac{(x - x_1)^2(x - x_2)}{(x_0 - x_1)^2(x_0 - x_2)}.$$

Очевидно, что коэффициент $c_2(x)$ имеет аналогичную структуру с двукратным корнем x_1 и однократным корнем x_0:

$$c_2(x) = \frac{(x-x_1)^2(x-x_0)}{(x_2-x_1)^2(x_2-x_0)}.$$

Рассмотрим коэффициент $b_1(x)$, для которого точки x_0, x_1, x_2 являются однократными корнями. Тогда

$$b_1(x) = k_1(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2),$$

$$b_1'(x) = k_1((x-x_1)(x-x_2) + (x-x_0)(x-x_2) + (x-x_0)(x-x_1)).$$

Для нахождения k_1 воспользуемся условием $b_1'(x_1) = 1$:

$$b_1'(x_1) = k_1(x_1-x_0)(x_1-x_2) = 1.$$

Получаем выражение для k_1:

$$k_1 = \frac{1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}.$$

Тогда $b_1(x)$ принимает вид

$$b_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}.$$

Из условий $c_1(x_0) = 0$, $c_1(x_2) = 0$ следует, что коэффициент $c_1(x)$ обращается в ноль в точках x_0 и x_2. Будем искать его в виде

$$c_1(x) = (x-x_0)(x-x_2)(ax+b), \quad \text{где } a, b \in \mathbb{R}.$$

Так как $c_1(x_1) = 1$, то получаем, что

$$c_1(x_1) = (x_1-x_0)(x_1-x_2)(ax_1+b) = 1.$$

Перепишем равенство относительно (ax_1+b):

$$ax_1 + b = \frac{1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}. \tag{3}$$

Для нахождения коэффициента a вычислим производную $c_1'(x)$ в точке x_1:

$$c_1'(x) = a(x-x_0)(x-x_2) + (ax+b)(2x-x_0-x_2).$$

Значит,

$$0 = c_1'(x_1) = a(x_1-x_0)(x_1-x_2) + (ax_1+b)(2x_1-x_0-x_2).$$

Подставив вместо (ax_1+b) равенство (3), получим представление для коэффициента a:

$$a = -\frac{(2x_1-x_0-x_2)}{(x_1-x_0)^2(x_1-x_2)^2}.$$

Выразим из равенства (3) коэффициент b:

$$b = \frac{1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} - ax_1 = \frac{1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + x_1\frac{(2x_1-x_0-x_2)}{(x_1-x_0)^2(x_1-x_2)^2}.$$

Тогда коэффициент $c_1(x)$ принимает вид:

$$c_1(x) = (x-x_0)(x-x_2)\left(-\frac{(2x_1-x_0-x_2)}{(x_1-x_0)^2(x_1-x_2)^2}x + \frac{1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + x_1\frac{(2x_1-x_0-x_2)}{(x_1-x_0)^2(x_1-x_2)^2}\right).$$

Упростив последнее выражение, получим

$$c_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\left(1 - \frac{(x-x_1)(2x_1-x_0-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\right).$$

Итак, мы нашли все необходимые коэффициенты для построения полинома Эрмита $H_3(x)$.

Замечание. *Заметим, что из-за появления кратных узлов сложность вычисления коэффициентов полинома Эрмита значительно возросла. Если для интерполяционных полиномов в форме Лагранжа и в форме Ньютона существуют единые формулы для вычисления всех коэффициентов, то для полинома Эрмита необходимо вычислять коэффициенты для разных узлов по-разному.*

Оценка погрешности для $H_3(x)$

Зафиксируем $x \in (x_0, x_2) \subset \mathbb{R}$: $x \neq x_1$. Введем функцию $g(s)$:

$$g(s) = f(s) - H_3(s) - K\omega(s), \quad s \in [x_0, x_2],$$

где $\omega(s) = (s-x_0)(s-x_1)^2(s-x_2)$, а K — некая зависящая от x постоянная.
Выберем константу K так, чтобы $g(x) = 0$. Тогда

$$f(x) - H_3(x) - K\omega(x) = 0,$$

$$K = \frac{f(x) - H_3(x)}{\omega(x)}.$$

Введем погрешность для полинома Эрмита $H_3(x)$:

$$\psi_{H_3}(x) = f(x) - H_3(x).$$

Пусть для любого $x \in [x_0, x_2]$ существует $f^{(4)}(x)$. Функция $g(s)$ имеет не менее четырех нулей: три — в узлах x_0, x_1, x_2, а четвертый — в точке x (мы подобрали коэффициент K таким образом, чтобы x был корнем). Воспользуемся теоремой Ролля. Так как $g(s)$ имеет не менее четырех нулей, то $g'(s)$ имеет не менее трех нулей на отрезке $[x_0, x_2]$. Так как узел x_1 является кратным узлом для интерполяционного полинома Эрмита $H_3(x)$, то точка x_1 является нулем $g'(s)$: $g'(x_1) = 0$. Следовательно, первая производная имеет не меньше четырех нулей. Вторая производная имеет не менее трех нулей, а третья — не менее двух. Следовательно, существует точка ξ такая, что

$$g^{(4)}(\xi) = 0 = \left(f^{(4)}(s) - 4!\,K\right)\Big|_{s=\xi} = f^{(4)}(\xi) - 4!\frac{f(x) - H_3(x)}{\omega(x)}.$$

В результате получим следующее выражение для погрешности:

$$\psi_{H_3}(x) = f(x) - H_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}\omega(x).$$

Обозначим

$$M_4 = \sup_{x\in[x_0,x_2]}\left|f^{(4)}(x)\right|.$$

Отсюда приходим к оценке

$$|\psi_{H_3}(x)| \leqslant \frac{M_4}{4!}|\omega(x)|,$$

где $\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)$.

Замечание 1. *В общем случае погрешность интерполяционного полинома Эрмита степени $n \in \mathbb{N}$ для функции $f(x)$ имеет вид (см. [1] с. 137)*

$$\psi_{H_n}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{a_0}(x-x_1)^{a_1}\dots(x-x_m)^{a_m}, \quad a_0+a_1+\dots+a_m = n+1,$$

где $\{x_i\}_{i=0}^m$ — разбиение области определения функции $f(x)$, $m \in \mathbb{N}$, и функция $f(x)$ должна быть $(n+1)$ раз дифференцируема на своей области определения.

Замечание 2. *Интерполяционный полином Эрмита дает более гладкое приближение, чем ранее рассмотренные интерполяционные полиномы в форме Лагранжа и в форме Ньютона.*

Задача. *Показать, что интерполяционный полином Эрмита $H_3(x)$ можно получить из интерполяционного полинома Лагранжа $L_3(x)$ с помощью предельного перехода.*

Решение. Пусть x_0, x_1, x_2 — узловые точки функции $f(x)$ на отрезке $[x_0, x_2]$. Добавим фиктивный узел $x_3 \in [x_0, x_2]$, $x_3 \neq x_i$, $i = \overline{0,2}$. Построим полином в форме Лагранжа по этим четырем узлам:

$$\begin{aligned} L_3(x) = {} & \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}f(x_3) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)}f(x_1) + \\ & + \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}f(x_2). \end{aligned} \tag{4}$$

Покажем, что $\lim\limits_{x_3 \to x_1} L_3(x) = H_3(x)$.

При стремлении x_3 к x_1, коэффициент при $f(x_0)$ в формуле (4) примет вид:

$$\frac{(x-x_1)^2(x-x_2)}{(x_0-x_1)^2(x_0-x_2)} = c_0(x).$$

Аналогично получим, что выражение коэффициента при $f(x_2)$ совпадает с коэффициентом $c_2(x)$ из интерполяционного полинома Эрмита (2) при $x_3 \to x_1$.

Рассмотрим два оставшихся коэффициента: обозначим через $\alpha(x_3)$ первые два слагаемых суммы (4). $\alpha(x_3)$ можно представить в виде

$$\alpha(x_3) = \frac{\beta(x_3)}{x_3-x_1},$$

$$\beta(x_3) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_2)}f(x_3) - \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1).$$

При переходе к пределу функции $\alpha(x_3)$ при $x_3 \to x_1$ возникает неопределенность вида $0/0$. Для вычисления предела воспользуемся правилом Лопиталя и получим:

$$\lim_{x_3 \to x_1} \alpha(x_3) = \lim_{x_3 \to x_1} \frac{\beta'(x_3)}{(x_3-x_1)'} = \lim_{x_3 \to x_1} \beta'(x_3).$$

Так как $\beta'(x_3)$ уже не содержит неопределенности при $x_3 \to x_1$, то

$$\lim_{x_3 \to x_1} \beta'(x_3) = \beta'(x_1).$$

После проведения всех необходимых вычислений получим, что

$$\beta'(x_1) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f'(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\left(1 - \frac{(x-x_1)(2x_1-x_0-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\right)f(x_1).$$

Видно, что при $f'(x_1)$ и $f(x_1)$ мы получили выражения, в точности совпадающие с коэффициентами $b_1(x)$ и $c_1(x)$ из формулы для интерполяционного полинома Эрмита (2).

□

§18 Использование интерполяционного полинома Эрмита $H_3(x)$ для оценки погрешности квадратурной формулы Симпсона

Рассмотрим задачу приближенного вычисления определенного интеграла

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{1}$$

от интегрируемой по Риману на отрезке $[a, b] \subset \mathbb{R}$ функции $f(x)$.

Построим разбиение отрезка $[a, b]$:

$$a \leqslant x_0 < x_1 < \ldots < x_n \leqslant b, \quad \text{где } n \in \mathbb{N},$$

так, чтобы выполнялось условие

$$x_i - x_{i-1} = h, \quad i = \overline{1, n},$$

где h — некоторая константа, задающая шаг разбиения, причем $hn = b-a$. Отрезки $[x_{i-1}, x_i]$, $i = \overline{1, n}$, называются частичными сегментами.

Будем искать интеграл I в виде суммы интегралов по всем частичным сегментам:

$$I = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx. \tag{2}$$

Для вычисления интеграла на всем отрезке достаточно построить приближение интеграла на i-м частичном сегменте $[x_{i-1}, x_i]$ для $i = \overline{1, n}$.

Замечание. *Формулы приближенного вычисления определенного интеграла называют квадратурными формулами.*

Запишем формулу Симпсона для i-го частичного сегмента функции $f(x)$, $i = \overline{1, n}$:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \approx \frac{h}{6}\left(f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-\frac{1}{2}}) + f(x_i)\right), \tag{3}$$

где $x_{i-\frac{1}{2}} = \frac{x_i + x_{i-1}}{2}$ — полуцелая точка.

Утверждение. *Квадратурная формула Симпсона (3) является точной для любого полинома степени не выше трех.*

Доказательство. Приведем доказательство данного утверждения для i-го частичного сегмента, $i = \overline{1, n}$.
Пусть

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 = L_2(x) + a_3x^3, \quad a_3 \neq 0.$$

Квадратурная формула Симпсона (3) точна для $L_2(x)$, так как по построению задает приближение функций параболами, то есть полиномами второй степени. Покажем, что формула Симпсона точна для функции x^3. Для этого вычислим интеграл $\int_{x_{i-1}}^{x_i} x^3dx$ по формуле

Ньютона-Лейбница:

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} x^3 dx \approx \frac{x_i^4 - x_{i-1}^4}{4} = \frac{(x_i^2 - x_{i-1}^2)(x_i^2 + x_{i-1}^2)}{4} = \\ = \frac{(x_i - x_{i-1})(x_i + x_{i-1})(x_i^2 + x_{i-1}^2)}{4} = \frac{h}{4}(x_i + x_{i-1})(x_i^2 + x_{i-1}^2) \tag{4}$$

и по квадратурной формуле Симпсона:

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} x^3 dx = \frac{h}{6}(x_{i-1}^3 + 4x_{i-\frac{1}{2}}^3 + x_i^3) = \frac{h}{6}\left((x_{i-1} + x_i)(x_{i-1}^2 - x_i x_{i-1} + x_i^2) + 4\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)^3\right) =$$

$$= \frac{h}{6}\left((x_{i-1} + x_i)(x_{i-1}^2 - x_i x_{i-1} + x_i^2) + \frac{(x_i + x_{i-1})(x_i^2 + 2x_i x_{i-1} + x_{i-1}^2)}{2}\right) =$$

$$= \frac{h}{6}(x_i + x_{i-1})\left(\frac{2x_{i-1}^2 - 2x_i x_{i-1} + 2x_i^2 + x_i^2 + 2x_i x_{i-1} + x_{i-1}^2}{2}\right) =$$

$$= \frac{h}{12}(x_i + x_{i-1})3(x_{i-1}^2 + x_i^2) = \frac{h}{4}(x_i + x_{i-1})(x_i^2 + x_{i-1}^2).$$

Полученные выражения для интеграла от функции x^3 совпадают, значит, формула Симпсона точна для полиномов третьей степени. □

Перейдем к оценке погрешности квадратурной формулы Симпсона (3), для чего воспользуемся интерполяционным полиномом Эрмита $H_3(x)$, рассмотренным в предыдущем параграфе.

Если для оценки погрешности квадратурной формулы Симпсона мы воспользуемся выражением для погрешности интерполяционного полинома Лагранжа второй степени, то получим сильно завышенную оценку. Правильная оценка получается при использовании полинома Эрмита $H_3(x)$.

Зафиксируем узлы x_{i-1}, $x_{i-\frac{1}{2}}$ и x_i и построим по этим узлам интерполяционный полином Эрмита $H_{3,i}(x)$ для функции $f(x)$. Ранее в §5 было доказано, что такой полином существует, единственен и удовлетворяет следующим условиям:

$$H_{3,i}(x_{i-1}) = f(x_{i-1}),$$

$$H_{3,i}(x_{i-\frac{1}{2}}) = f(x_{i-\frac{1}{2}}),$$

$$H_{3,i}(x_i) = f(x_i),$$

$$H'_{3,i}(x_{i-\frac{1}{2}}) = f'(x_{i-\frac{1}{2}}).$$

Запишем погрешность для полинома $H_{3,i}(x)$:

$$\psi_{H_{3,i}}(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x - x_{i-1})(x - x_{i-\frac{1}{2}})^2(x - x_i), \quad \xi \in [x_{i-1}, x_i]. \tag{5}$$

Представим исходную функцию $f(x)$ в виде $f(x) = H_{3,i}(x) + \psi_{H_{3,i}(x)}$. Тогда

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} H_{3,i}(x)dx + \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \psi_{H_{3,i}}(x)dx. \tag{6}$$

Так как формула Симпсона (3) точна для полиномов третьей степени, то мы можем заменить интеграл $\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} H_{3,i}(x)dx$ на соответствующую ему правую часть формулы (3):

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} H_{3,i}(x)dx = \frac{h}{6}\left(H_{3,i}(x_{i-1}) + 4H_{3,i}(x_{i-\frac{1}{2}}) + H_{3,i}(x_i)\right).$$

Тогда

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \frac{h}{6}\left(H_{3,i}(x_{i-1}) + 4H_{3,i}(x_{i-\frac{1}{2}}) + H_{3,i}(x_i)\right) + \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \psi_{H_{3,i}}(x)dx =$$

$$= \frac{h}{6}\left(f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-\frac{1}{2}}) + f(x_i)\right) + \Psi_i(f).$$

Следовательно,

$$\Psi_i(f) = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx - \frac{h}{6}\left(f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-\frac{1}{2}}) + f(x_i)\right). \tag{7}$$

Таким образом мы получаем, что $\Psi_i(f) = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \psi_{H_{3,i}}(x)dx$ задает погрешность формулы Симпсона (3) на i-м частичном сегменте.

Оценим по модулю погрешность формулы Симпсона на i-м частичном сегменте исходя из формулы (5).

$$|\Psi_i(f)| \leqslant \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} |\psi_{H_{3,i}}(x)|dx \leqslant \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{M_{4,i}}{4!}(x - x_{i-1})(x - x_{i-\frac{1}{2}})^2(x_i - x)dx,$$

$$M_{4,i} = \sup_{x\in[x_{i-1},x_i]} \left|f^{(4)}(x)\right|.$$

Задача. *Показать, что*

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1})(x - x_{i-\frac{1}{2}})^2(x_i - x)dx = \frac{h^5}{120}.$$

Решение. Произведем замену в подынтегральном выражении: $x = x_{i-1} + th,\ t \in [0,1]$. Тогда $dx = hdt$ и $x - x_{i-1} = th,\ x_i - x = h(1-t),\ (x - x_{i-\frac{1}{2}})^2 = h^2\left(t - \frac{1}{2}\right)^2$, и мы получаем, что

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1})(x - x_{i-\frac{1}{2}})^2(x_i - x)dx =$$

$$= h^5 \int\limits_0^1 t\ \left(t - \frac{1}{2}\right)^2 (1-t)dt = h^5 \int\limits_0^1 \left(2t^3 - \frac{5}{4}t^2 - t^4 + \frac{1}{4}t\right)dt = \frac{h^5}{120}.$$

□

Таким образом, погрешность формулы Симпсона (3) на i-м частичном сегменте имеет пятый порядок точности:

$$|\Psi_i(f)| \leqslant \frac{M_{4,i}}{4!}\frac{h^5}{120}, \tag{8}$$

Оценим погрешность приближения интеграла (1) на всем отрезке $[a,b]$, учитывая представление этого интеграла в виде суммы ингералов по всем частичным сегментам (2) и воспользовавшись формулой Симпсона (3):

$$|\Psi(f)| = \left|\int_a^b f(x)dx - \sum_{i=1}^{n}\frac{h}{6}\left(f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-\frac{1}{2}}) + f(x_i)\right)\right| = \left|\sum_{i=1}^{n}\Psi_i(f)\right| \leqslant \sum_{i=1}^{n}|\Psi_i(f)|.$$

Мы выбирали разбиение отрезка $[a,b]$ так, что $nh = b-a$, поэтому с учетом оценки (8) получим, что

$$|\Psi(f)| \leqslant \left(\frac{h}{2}\right)^4 \frac{M_4(b-a)}{180},$$

$$M_4 = \sup_{x\in[x_0,x_n]}\left|f^{(4)}(x)\right|.$$

Следовательно, квадратурная формула Симпсона на всем отрезке $[a,b]$ имеет четвертый порядок точности.

§19 Наилучшее среднеквадратичное приближение функции

Рассмотрим гильбертово пространство L_2 — линейное пространство вещественных функций, интегрируемых с квадратом (см. [2], гл.IV, §2):

$$\int_a^b f^2(x)dx < \infty.$$

Введем скалярное произведение в пространстве L_2:

$$\forall f,g \in L_2 \quad (f,g) = \int_a^b f(x)g(x)dx.$$

Теперь введем норму в пространстве L_2:

$$\|f\|_{L_2} = \|f\| = \sqrt{(f,f)} = \left(\int_a^b f^2(x)dx\right)^{1/2}.$$

Определение. *Пусть дана система $(n+1)$ линейно независимых функций $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ в пространстве L_2. Функция $\varphi(x)$ вида*

$$\varphi(x) = c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + \ldots + c_n\varphi_n(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k\varphi_k(x), \text{ где } c_k \in \mathbb{R}, k = \overline{0,n},$$

называется обобщенным многочленом по системе $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$.

Так как коэффициенты обобщенного многочлена задаются произвольным образом, то, варьируя их значения, можно получить бесконечно много различных обобщенных многочленов.

Определение. *Пусть $f(x) \in L_2$ и дана система из $(n+1)$ линейно независимых функций*

$$\varphi_i(x) \in L_2, \quad i = \overline{0,n}.$$

Обобщенный многочлен $\overline{\varphi}(x)$, имеющий минимальное отклонение по норме от функции $f(x)$:

$$\|f(x) - \overline{\varphi}(x)\| = \min_{\varphi(x)} \|f(x) - \varphi(x)\| = \min_{\varphi(x)} \left(\int_a^b (f(x) - \varphi(x))^2 \, dx \right)^{1/2},$$

называется наилучшим среднеквадратичным приближением функции $f(x)$ по системе функций $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$.

Утверждение. *Наилучшее среднеквадратичное приближение функции $f(x)$ по системе функций $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ существует и единственно.*

Доказательство. Вначале рассмотрим доказательство для частного случая: выберем систему функций, состоящую из одной функции $\varphi_0(x) \in L_2$. Тогда обобщенный многочлен имеет вид

$$\varphi(x) = c_0 \varphi_0(x).$$

Рассмотрим задачу для функции $f(x)$: среди всех обобщенных многочленов найдем тот, который минимизирует функционал

$$F(c_0) = \int_a^b (f(x) - c_0\varphi_0(x))^2 dx.$$

Преобразуем это выражение:

$$F(c_0) = \int_a^b f^2(x)dx - 2c_0 \int_a^b f(x)\varphi_0(x)dx + c_0^2 \int_a^b \varphi_0^2(x)dx = (f,f) - 2c_0(f,\varphi_0) + c_0^2(\varphi_0,\varphi_0).$$

Мы получили квадратичную функцию относительно c_0. Найдем ее экстремум:

$$F'(c_0) = 0,$$

$$c_0(\varphi_0,\varphi_0) = (f,\varphi_0).$$

Тогда коэффициент $\overline{c_0}$, доставляющий минимум функционалу $F(c_0)$, равен:

$$\overline{c_0} = \frac{(f,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)} = \frac{\int_a^b f(x)\varphi_0(x)dx}{\int_a^b \varphi_0^2(x)dx}. \tag{1}$$

Получим наилучшее среднеквадратичное приближение $\overline{\varphi}(x)$ для функции $f(x)$:

$$\overline{\varphi}(x) = \overline{c_0}\varphi_0(x) = \frac{(f,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}\varphi_0. \tag{2}$$

Заметим, что при $\varphi_0(x) = 1$, из выражений (1) и (2) можно получить выражение для среднего значения интеграла:

$$\overline{\varphi}(x) = \frac{\int_a^b f(x)dx}{(b-a)},$$

которое и является наилучшим среднеквадратичным приближением в этом случае.

Разумеется, увеличивая число n базисных функций $\varphi_i(x)$, мы вправе ожидать увеличения точности приближения. Покажем, как строится наилучшее среднеквадратичное приближение в случае произвольного n. Пусть $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ — система линейно независимых функций, $\varphi_i(x) \in L_2[a,b]$. Обозначим обобщенный многочлен через

$$\varphi(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k\varphi_k(x), \quad \text{где } c_k \in \mathbb{R}$$

и рассмотрим функционал

$$F(c_0, c_1, \ldots, c_n) = \int_a^b (f(x) - \varphi(x))^2 dx = \int_a^b (f(x) - \sum_{k=0}^{n} c_k\varphi_k(x))^2 dx.$$

Преобразуем это равенство:

$$F(c_0, c_1, \ldots, c_n) = \int_a^b f^2(x)dx - 2\sum_{k=0}^{n} c_k \int_a^b f(x)\varphi_k(x)dx + \sum_{k=0}^{n} c_k \sum_{l=0}^{n} c_l \int_a^b \varphi_k(x)\varphi_l(x)dx =$$

$$= (f,f) - 2\sum_{k=0}^{n} c_k(f,\varphi_k) + \sum_{k=0}^{n} c_k \sum_{l=0}^{n} c_l(\varphi_k,\varphi_l).$$

Минимум функционала $F(c_0, c_1, \ldots, c_n)$ достигается в точке, в которой все частные производные первого порядка обращаются в ноль:

$$\frac{\partial F(c_0, \ldots, c_n)}{\partial c_k} = 0, \quad k = \overline{0,n}.$$

Получаем систему уравнений относительно коэффициентов $c_l, l = \overline{0,n}$:

$$\sum_{l=0}^{n} c_l(\varphi_k,\varphi_l) = (f,\varphi_k), \quad k = \overline{0,n}.$$

Запишем эту систему более подробно:

$$\begin{cases} c_0(\varphi_0,\varphi_0) + c_1(\varphi_0,\varphi_1) + \ldots + c_n(\varphi_0,\varphi_n) = (f,\varphi_0) \\ c_0(\varphi_1,\varphi_0) + c_1(\varphi_1,\varphi_1) + \ldots + c_n(\varphi_1,\varphi_n) = (f,\varphi_1) \\ \ldots \\ c_0(\varphi_n,\varphi_0) + c_1(\varphi_n,\varphi_1) + \ldots + c_n(\varphi_n,\varphi_n) = (f,\varphi_n). \end{cases} \tag{3}$$

Выпишем матрицу коэффициентов системы:

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \ldots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \ldots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \ldots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{pmatrix} = G(\varphi_0, \ldots, \varphi_n).$$

Полученная матрица является матрицей Грама системы функций $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$. Так как $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ — система линейно независимых функций, то определитель матрицы Грама положителен:

$$|G(\varphi_0, \ldots, \varphi_n)| > 0.$$

Следовательно система линейных уравнений (3) имеет единственное решение $(\overline{c_0}, \overline{c_1}, \ldots, \overline{c_n})^T$. Тогда наилучшее среднеквадратичное приближение для функции $f(x)$ существует и определено единственным образом:

$$\overline{\varphi}(x) = \sum_{i=0}^{n} \overline{c_i}\varphi_i(x).$$

□

Замечание 1. *Можно заметить, что чем больше базисных функций мы вводим, тем точнее среднеквадратичное приближение заданной функции. В пределе мы переходим в базис всего пространства и получаем точное разложение заданной функции по базису. Однако следует помнить, что при увеличении числа базисных функций увеличивается и размер соответствующей матрицы Грама, а определитель этой матрицы приближается к нулю. Это создает определенные проблемы при решении задач на практике, связанные с увеличением влияния ошибок округления.*

Замечание 2. *Заметим, что если исходная система функций $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ — ортогональная, то матрица Грама этой системы — диагональная, что значительно упрощает нахождение среднеквадратичного приближения заданной функции.*

Замечание 3. *Если $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ — ортонормированная система функций в пространстве L_2, то соответствующая этой системе матрица Грама является единичной, и решение системы (3) имеет вид*

$$\overline{c}_k = (f, \varphi_k), \quad k = \overline{0, n}, \tag{4}$$

где $\overline{c}_k$ — коэффициенты обобщенного многочлена, реализующего наилучшее среднеквадратичное приближение функции $f(x)$. Коэффициенты такого вида называются коэффициентами Фурье функции $f(x)$.

Замечание 4. *Рассмотрим систему линейно независимых функций*

$$\varphi_k(x) = x^k, \quad k = \overline{0, n}.$$

Введем в пространстве скалярное произведение следующим образом:

$$\int_\alpha^\beta \rho(x)\varphi_k(x)\varphi_l(x)dx = (\varphi_k, \varphi_l),$$

где $\rho(x) > 0$ — весовая функция. Если определенным образом выбирать границы α и β и весовую функцию, то можно построить систему ортогональных полиномов (например, полиномы Якоби, Лежандра, Чебышева).

Утверждение. *Если $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ — ортонормированная система функций, то для этой системы функций выполняется неравенство Бесселя:*

$$\sum_{k=0}^{n} c_k^2 \leqslant \|f\|^2,$$

где c_k — коэффициенты обобщенного многочлена, реализующего наилучшее среднеквадратичное приближение функции $f(x)$.

Доказательство. Действительно, если система функций $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ ортонормирована, то выполнено замечание 3. Обозначим $\overline{c}_k = c_k$ и вычислим отклонение от наилучшего среднеквадратичного приближения:

$$\int_a^b (f(x) - \sum_{k=0}^n c_k\varphi_k(x))^2 dx = (f,f) - 2\sum_{k=0}^n c_k(f,\varphi_k) + \sum_{k=0}^n c_k^2 = (f,f) - \sum_{k=0}^n c_k^2 \geqslant 0.$$

Следовательно неравенство Бесселя выполнено. □

Замечание 5. *Если $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^\infty$ — ортонормированный базис, то выполняется равенство Парсеваля:*

$$\sum_{k=0}^\infty c_k^2 = \|f\|^2.$$

Замечание 6. *В процессе построения наилучшего среднеквадратичного приближения возникает следующий ряд вопросов:*

1. *Как решать системы линейных уравнений высокого порядка?*
2. *Как вычислять интегралы для поиска скалярных произведений функций для построения системы (3)?*
3. *Как производить суммирование с коэффициентами Фурье?*

На первый из этих вопросов мы ответили в главе I, второго коснулись в §6, рассмотрение остальных вопросов выходит за рамки нашего курса.

§20 Наилучшее среднеквадратичное приближение функций, заданных таблично

Пусть H — линейное пространство функций, заданных таблично, то есть элементы $f \in H$ — функции, заданные в узлах $a \leqslant x_0 < x_1 < \ldots < x_N \leqslant b$, $N \in \mathbb{N}$:

$$f(x_i) = f_i, \quad i = \overline{0,N}.$$

Введем скалярное произведение в пространстве H:

$$\forall f,g \in H \quad (f,g) = \sum_{i=0}^N f_i g_i.$$

Введем соответствующую норму — эта норма является аналогом среднеквадратичной нормы в пространстве функций, определенных на всем отрезке $[a,b]$:

$$\forall f \in H \quad \|f\| = \sqrt{(f,f)} = \left(\sum_{i=0}^N f_i^2\right)^{1/2}.$$

В предыдущем параграфе предполагалось, что функция $f(x)$ задана аналитически. Здесь функция задана таблично, то есть известны только ее значения $f_i = f(x_i)$ в конечном числе точек x_i, $i = \overline{0,N}$.

Мы хотим приблизить функцию $f(x)$ некоторой функцией, заданной аналитически. Один из способов приближения мы уже знаем — это интерполяция по данным значениям

$f_0, f_1, \ldots, f_N$. Однако при больших N такой способ приближения трудоемок и может даже дать неверное представление о поведении функции. Одним из распространенных способов приближения функций, заданных таблично, является способ, основанный на минимизации среднеквадратичной погрешности.

Как и в предыдущем параграфе, предположим, что задана система базисных функций $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ (например, $\varphi_i(x) = x^i,\ i = \overline{0,n}$). Можем считать, что функции $\varphi_i(x)$ заданы только в точках $x_j,\ j = \overline{0,N}$. Задача состоит в подборе коэффициентов c_k, для которых величина отклонения

$$\left\| f - \sum_{k=0}^{n} c_k \varphi_k \right\| = \left(\sum_{i=0}^{N} \left(f_i - \sum_{k=0}^{n} c_k \varphi_k(x_i) \right)^2 \right)^{1/2}$$

являлась бы минимальной. Эта задача является дискретным аналогом задачи о минимизации функционала $F(c_0, c_1, \ldots, c_n)$, рассмотренной в предыдущем параграфе, и решается аналогичным образом.

Введем функционал

$$F(c_0, c_1, \ldots, c_n) = \left\| f - \sum_{k=0}^{n} c_k \varphi_k \right\|^2.$$

Этот функционал имеет тот же вид, что и аналогичный функционал для функций гильбертового пространства, рассмотренный в предыдущем параграфе.

Запишем систему линейных уравнений для поиска коэффициентов $\{c_k\}_{k=0}^n$, на которых функционал $F(c_0, c_1, \ldots, c_n)$ достигает своего минимума:

$$\frac{\partial F}{\partial c_k} = 0, \quad k = \overline{0,n},$$

$$\sum_{l=0}^{n} c_l(\varphi_k, \varphi_l) = (f, \varphi_k), \quad k = \overline{0,n}.$$

Вид полученной системы аналогичен виду системы, которую мы рассматривали в предыдущем параграфе, следовательно, для рассматриваемой системы сохраняется свойство существования и единственности решения — $\{c_k\}_{k=0}^n$.

Значит, для построения наилучшего среднеквадратичного приближения функции с помощью некоторой системы функций достаточно знать значения этой функции лишь в некоторых точках интересующего отрезка.

Глава III

Численное решение нелинейных уравнений и систем нелинейных уравнений

§21 Способы локалзации корней нелинейного уравнения

Рассмотрим задачу поиска корней нелинейного уравнения: нелинейные уравнения, вообще говоря, не имеют аналитического решения, поэтому для поиска решения используют вычислительные методы, хотя такое решение является лишь приближенным.

Заметим, что принципиальное отличие численных методов решения нелинейных уравнений от численных методов решения систем линейных уравнений состоит в необходимости специально выбирать для конкретного итерационного метода начальное приближение, так как от этого выбора зависит сходимость рассматриваемых итерационных методов решения нелинейных уравнений.

Постановка задачи. *Рассмотрим функцию* $f(x),\ x \in \mathbb{R}$, *и уравнение*

$$f(x) = 0. \tag{1}$$

Пусть x^* *— вещественный корень уравнения, и определена его окрестность радиуса* a*, не содержащая других корней уравнения:*

$$U_a(x^*) = \{x : |x - x^*| < a\},$$

причем заданная функция $f(x)$ *определена на этой окрестности. Будем считать, что начальное приближение* $x^0 \in U_a(x^*)$ *задано. Тогда для нахождения численного решения уравнения в рассматриваемой окрестности необходимо построить последовательность* $\{x^n\}$*, сходящуюся к корню* x^* *уравнения* (1)*:*

$$\lim_{n\to\infty} f(x^n) = f(x^*) = 0.$$

Численное решение нелинейных уравнений можно разбить на два этапа:

1. Локализация корня, т.е. определение окрестности $U_a(x^*)$.
2. Задание итерационного процесса — построение последовательности $\{x^n\}$, сходящейся к корню уравнения.

Пусть $f(x)$ — непрерывная функция, заданная на отрезке $[a, b]$. Рассмотрим два приема локализации вещественного корня (известно, что уравнение (1) может иметь и комплексные корни, но в данном курсе мы не будем ими заниматься).

Первый прием

Пусть задано разбиение сегмента $[a, b]$:

$$a \leqslant x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n \leqslant b,$$

и если для некоторого $i = \overline{1, n}$ выполняется условие

$$f(x_{i-1})f(x_i) < 0, \tag{2}$$

то на интервале (x_{i-1}, x_i) существует по крайней мере один корень уравнения (1) или число корней на этом интервале нечетно. Если же выполняется условие

$$f(x_{i-1})f(x_i) > 0, \quad i = \overline{1, n},$$

то на каждом из интервалов (x_{i-1}, x_i) либо нет корней уравнения (1), либо их число четно.

В случае выполнения условия (2) интервал (x_{i-1}, x_i) вновь разбивается на частичные интервалы, и для частичных интервалов повторяется описанная выше процедура, которая в итоге позволит найти промежуток меньшей длины, содержащий корень.

Второй прием

Более регулярным способом отделения действительных корней является метод бисекции (деления пополам).

Предположим, что на интервале (a, b) расположен лишь один корень x_* уравнения (1). Тогда $f(a)$ и $f(b)$ имеют различные знаки. Пусть для определенности $f(a) > 0$, $f(b) < 0$.

Положим

$$x_0 = \frac{a + b}{2}$$

и рассмотрим значения функции $f(x)$ в этой точке.

Если $f(x_0) < 0$, то значение искомого корня x_* лежит в интервале (a, x_0), если же $f(x_0) > 0$, то $x_* \in (x_0, b)$. Далее из этих двух интервалов (a, x_0) и (x_0, b) выбираем тот, на границе которого функция $f(x)$ имеет различные знаки.

Затем находим точку x_1 — середину выбранного интервала, вычисляем $f(x_1)$ и повторяем указанный выше алгоритм.

В результате получаем последовательность интервалов, содержащих искомый корень x_*, причем каждый последующий интервал имеет длину в 2 раза меньшую, чем предыдущий. Процесс заканчивается, когда длина вновь полученного интервала станет меньше заданного числа $\varepsilon > 0$.

Замечание. *Как правило рассматриваемая функция $f(x)$ имеет больше одного корня, и задача состоит в поиске всех корней уравнения (1) на области определения функции $f(x)$. Тогда можно поступать следующим образом: пусть мы нашли один из корней $x = x^*$ этого уравнения, причем этот корень имеет единичную кратность. Тогда для поиска других корней рассматриваемого уравнения осуществим переход к функции $g(x)$ вида*

$$g(x) = \frac{f(x)}{x - x^*}.$$

Очевидно, что уравнение $g(x) = 0$ имеет на единицу меньше корней, чем уравнение (1), и все корни этого уравнения являются также корнями уравнения (1). Поэтому после решения данного уравнения получаем корни исходного уравнения, отличные от уже найденных. Таким образом мы сможем найти по крайней мере все некратные корни уравнения (1).

Круг вопросов, которые мы рассматриваем в связи с решением одного нелинейного уравнения, переносится и на поиск решения системы нелинейных уравнений. Рассмотрим нелинейную систему уравнений

$$f_i(x_1, x_2, \ldots, x_m) = 0, \quad i = \overline{1, m}. \tag{3}$$

Введем векторы $x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T$, $f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)^T$. Тогда система уравнений (3) запишется в векторной форме, как

$$f(x) = \theta.$$

Последнее уравнение удобно рассматривать как операторное уравнение в m-мерном пространстве $\mathbb{R}^m$. При этом отображение

$$f\colon \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m$$

представляет собой нелинейное отображение пространства $\mathbb{R}^m$ в себя, и рассуждения о методах решения нелинейных систем проводится аналогично одномерному случаю.

§22 Метод простой итерации

Рассмотрим функцию $f(x)$, $x \in \mathbb{R}$ и уравнение

$$f(x) = 0. \tag{1}$$

Пусть x^* — вещественный корень этого уравнения, и определена его окрестность радиуса a, не содержащая других корней рассматриваемого уравнения:

$$U_a(x^*) = \{x : |x - x^*| < a\},$$

причем заданная функция $f(x)$ определена на этой окрестности.

Будем считать, что начальное приближение $x^0 \in U_a(x^*)$ задано. Рассмотрим итерационные методы, задаваемые общей формулой

$$x^{n+1} = S(x^n), \quad n \in \mathbb{Z}_+ \tag{2}$$

с некоторой функцией $S(x)$, определенной на $U_a(x^*)$. Пусть функция $S(x)$ имеет вид

$$S(x) = x + r(x)f(x), \; S(x^*) = x^*, \tag{3}$$

где $r(x)$ — функция, не обращающаяся в ноль в окрестности $U_a(x^*)$, то есть $sgn(r(x)) \neq 0$, $x \in U_a(x^*)$.

Определение. *Итерационный метод, описываемый формулой (2) с функцией $S(x)$ вида (3), называется методом простой итерации.*

Определение. *Функция $S(x)$ удовлетворяет условию Липшица при $x \in U_a(x^*)$ с константой $q > 0$, если для любых точек $x_1, x_2 \in U_a(x^*)$ выполнено неравенство*

$$|S(x_1) - S(x_2)| \leqslant q|x_1 - x_2|.$$

Утверждение. *Пусть функция $S(x)$ удовлетворяет условию Липшица с константой $q \in (0, 1)$ в некоторой окрестности $U_a(x^*)$, и пусть задано начальное приближение $x_0 \in U_a(x^*)$. Тогда метод простой итерации (2) сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q.*

Доказательство. Докажем с помощью метода математической индукции, что $x^k \in U_a(x^*)$ при $k \in \mathbb{Z}_+$.

Справедливость утверждения $x^0 \in U_a(x^*)$ следует из условия. Пусть требуемое условие верно при $k = n$. Рассмотрим $(n+1)$-ю итерацию:

$$x^{n+1} = S(x^n)$$

и оценим $|x^{n+1} - x^*|$, учитывая, что функция $S(x)$ удовлетворяет условию Липшица:

$$|x^{n+1} - x^*| = |S(x^n) - S(x^*)| \leqslant q|x^n - x^*|. \tag{4}$$

Из условия $q \in (0,1)$ следует неравенство

$$|x^{n+1} - x^*| \leqslant q|x^n - x^*| < a.$$

Таким образом, $x^{n+1} \in U_a(x^*)$.

Докажем сходимость метода простой итерации. Используя оценку (4) как рекуррентную, получим:

$$|x^n - x^*| \leqslant q^n|x^0 - x^*|. \tag{5}$$

Из условия $q \in (0,1)$ следует, что

$$\lim_{n\to\infty} q^n = 0.$$

Тогда из неравенства (5) получим

$$\lim_{n\to\infty} |x^n - x^*| = 0.$$

Следовательно, метод простой итерации сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q. □

Замечание. *Если функция $S(x)$ непрерывно дифференцируема, то в качестве q можно взять максимальное значение $|S'(x)|$, и сходимость будет иметь место, если*

$$q = \max_{x\in U_a(x^*)} \left|S'(x)\right| < 1.$$

Рассмотрим итерационный метод, записанный равенством:

$$\frac{x^{n+1} - x^n}{\tau} + f(x^n) = 0, \quad \tau \in \mathbb{R}_+,\ n \in \mathbb{Z}_+,\ x^0 \in U_a(x^*). \tag{6}$$

Выразим из этого равенства x^{n+1}:

$$x^{n+1} = x^n - \tau f(x^n).$$

Этот метод является методом простой итерации вида (2) с функцией $S(x)$, имеющий вид

$$S(x) = x - \tau f(x).$$

Получим оценку параметра τ, которая будет гарантировать сходимость метода простой итерации вида (6), то есть обеспечивать выполнение условий замечания к доказанному выше утверждению.

Пусть окрестность $U_a(x^*)$ выбрана таким образом, чтобы в ней выполнялось условие $|S'(x)| < 1$. В предположении об ограниченности функции $f'(x)$ вычислим точную верхнюю грань M ее модуля:

$$M = \sup_{x\in U_a(x^*)} \left|f'(x)\right|.$$

Продифференцируем функцию $S(x)$:

$$S'(x) = 1 - \tau f'(x).$$

Пусть для определенности $f'(x) > 0,\ x \in U_a(x^*)$. Потребовав, чтобы выполнялось условие $|S'(x)| < 1$, получим оценку для τ:

$$|1 - \tau M| < 1, \quad 0 < \tau < \frac{2}{M}.$$

Таким образом, если для поиска корня x^* применяется итерационный метод, записанный в виде (6) и $f'(x) > 0,\ x \in U_a(x^*)$, то значение параметра τ следует выбирать из интервала $\left(0, \frac{2}{M}\right)$.

Метод Эйткена ускорения сходимости итерационного метода

Предположим, что существует число A, не зависящее от n и такое, что

$$x^n - x^* \approx Aq^n, \quad n \in \mathbb{Z}_+, \quad A \in \mathbb{R}.$$

Запишем оценки для трех последовательных итераций:

$$x^{n-1} - x^* \approx Aq^{n-1}, \quad x^n - x^* \approx Aq^n, \quad x^{n+1} - x^* \approx Aq^{n+1}, \tag{7}$$

Выразим Aq^{n+1} через итерации $x^{n-1},\ x^n,\ x^{n+1}$. Для этого рассмотрим приближенные равенства

$$(x^{n+1} - x^n)^2 = A^2 q^{2n}(q-1)^2,$$
$$x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1} = Aq^{n-1}(q-1)^2,$$

получающиеся из выражений (7). Разделим первое равенство на второе:

$$\frac{(x^{n+1} - x^n)^2}{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}} = Aq^{n+1}.$$

Подставим полученное выражение для Aq^{n+1} в оценку (7) для корня x^* и $(n+1)$-й итерации x^{n+1} и получим представление для корня x^*:

$$x^* \approx x^{n+1} - \frac{(x^{n+1} - x^n)^2}{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}.$$

Метод Эйткена позволяет ускорить сходимость метода простой итерации. Идея метода заключается в том, что после вычисления $x^{n-1},\ x^n,\ x^{n+1}$ производится пересчет по формуле

$$x'_{n+1} = x^{n+1} - \frac{(x^{n+1} - x^n)^2}{(x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1})},$$

и значение x'_{n+1} берется в качестве нового приближения.

§23 Метод Ньютона и метод секущих

Рассмотрим функцию $f(x),\ x \in \mathbb{R}$ и уравнение

$$f(x) = 0. \tag{1}$$

Пусть x^* — вещественный корень этого уравнения, и определена его окрестность радиуса a, не содержащая других корней уравнения:

$$U_a(x^*) = \{x : |x - x^*| < a\},$$

причем заданная функция $f(x)$ определена на этой окрестности.

Будем считать, что начальное приближение $x^0 \in U_a(x^*)$ задано. Пусть в $U_a(x^*)$ существует и не обращается в ноль непрерывная первая производная функции $f(x)$:

$$f'(x) \neq 0, \quad x \in U_a(x^*).$$

Разложим $f(x^*)$ по формуле Тейлора в малой окрестности точки $x \in U_a(x^*)$:

$$f(x^*) = f(x) + (x^* - x)f'(x) + \dots$$

и отбросим в этом разложении величины, имеющие второй и выше порядок малости по $(x^* - x)$.
Заменив x^* на x^{n+1} и x на x^n, получим уравнение

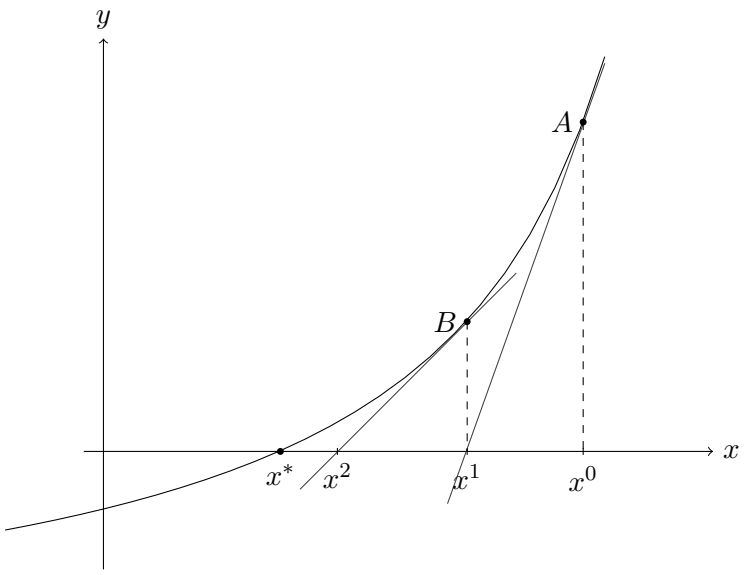
$$f(x^n) + (x^{n+1} - x^n)f'(x^n) = 0, \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Учитывая, что $f'(x^n) \neq 0$, и разрешив последнее уравнение относительно x^{n+1}, имеем:

$$x^{n+1} = x^n - \frac{f(x^n)}{f'(x^n)}, \quad n \in \mathbb{Z}_+. \tag{2}$$

Определение. *Итерационный процесс поиска корня уравнения* (1)*, задаваемый формулой* (2)*, называется итерационным методом Ньютона.*

Дадим геометрическую интерпретацию метода Ньютона. Рассмотрим точку $A\,(x^0, f(x^0))$. Определим первую итерацию x^1 рассматриваемого процесса как абсциссу точки пересечения с осью Ox касательной к функции $f(x)$ в точке A. Аналогично получаем значение x^2 как точку пересечения с осью Ox касательной к функции $f(x)$ в точке $B\,(x^1, f(x^1))$. Продолжая таким образом, на n-м шаге получаем значение x^n, приближающее корень x^* уравнения (1) с заданной точностью.



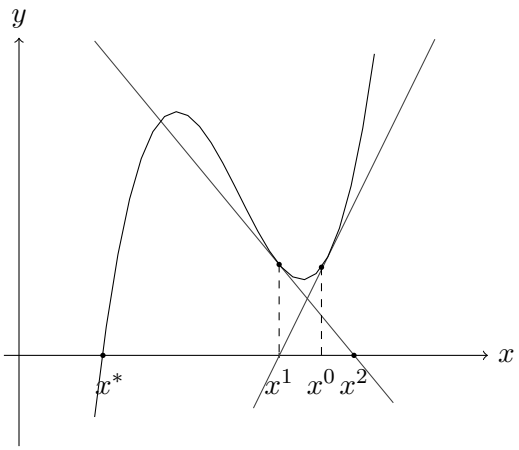
Выпишем уравнение касательной к функции $f(x)$ в точке x^n:

$$y - f(x^n) = f'(x^n)(x - x^n).$$

Очевидно, что значение x^{n+1}, найденное по формуле (2), представляет собой абсциссу точки пересечения с осью x касательной к кривой $y = f(x)$, проведенной через точку $(x^n, f(x^n))$.

Замечание. *Итерационный метод Ньютона часто называют методом касательных.*

Если не выполнено условие неравенства нулю производной функции $f(x)$ в области $U_a(x^*)$, то метод Ньютона может расходиться. На графике показан пример такого случая.



Замечание 1. *Метод Ньютона является вычислительно сложным, поскольку на каждой итерации проводится вычисление значений производной функции $f(x)$, что является, вообще говоря, неустойчивым процессом.*

Замечание 2. *При решении задач на практике часто рассматривается модифицированный метод Ньютона, задаваемый формулой*

$$x^{n+1} = x^n - \frac{f(x^n)}{f'(x^0)}, \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Преимущество этого метода перед классическим методом заключается в том, что в нем не требуется вычислять значения функции $f'(x)$ на каждой итерации. Однако при этом модифицированный метод Ньютона сходится медленнее классического метода Ньютона. Вопросы сходимости метода Ньютона излагаются в §4.

Метод Ньютона для нелинейных систем уравнений

Рассмотрим систему из двух нелинейных уравнений:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = 0 \\ f_2(x_1, x_2) = 0 \end{cases}. \tag{3}$$

Пусть точка (x_1^*, x_2^*) — решение этой системы. Разложим значение функции $f_1(x_1^*, x_2^*)$ по формуле Тейлора в малой окрестности точки (x_1, x_2), лежащей в окрестности решения:

$$f_1(x_1^*, x_2^*) = f_1(x_1, x_2) + (x_1^* - x_1)\frac{\partial f_1(x_1, x_2)}{\partial x_1} + (x_2^* - x_2)\frac{\partial f_1(x_1, x_2)}{\partial x_2} + \dots$$

Заменим в этом разложении x_i на x_i^n, x_i^* на x_i^{n+1}, $i = 1, 2$ и учтем, что (x_1^*, x_2^*) — решение первого уравнения системы (3):

$$f_1(x_1^n, x_2^n) + (x_1^{n+1} - x_1^n)\frac{\partial f_1(x_1^n, x_2^n)}{\partial x_1^n} + (x_2^{n+1} - x_2^n)\frac{\partial f_1(x_1^n, x_2^n)}{\partial x_2^n} = 0. \tag{4}$$

Аналогичным образом, разложив функцию $f_2(x_1^*, x_2^*)$ по формуле Тейлора и произведя такую же замену переменных, получим

$$f_2(x_1^n, x_2^n) + (x_1^{n+1} - x_1^n)\frac{\partial f_2(x_1^n, x_2^n)}{\partial x_1^n} + (x_2^{n+1} - x_2^n)\frac{\partial f_2(x_1^n, x_2^n)}{\partial x_2^n} = 0. \tag{5}$$

Введем векторы

$$f = (f_1, f_2)^T, \ x = (x_1, x_2)^T$$

и матрицу Якоби системы (3) — матрицу из частных производных функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$:

$$J(x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \dfrac{\partial f_1}{\partial x_2}(x) \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial x_1}(x) & \dfrac{\partial f_2}{\partial x_2}(x) \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Перепишем уравнения (4) и (5) в матричном виде:

$$f(x^n) + J(x^n)(x^{n+1} - x^n) = \theta. \tag{7}$$

Пусть матрица Якоби невырождена. Выразим $(n+1)$-ю итерацию через n-ю:

$$x^{n+1} = x^n - J^{-1}(x^n)f(x^n), \quad n \in \mathbb{Z}_+. \tag{8}$$

Заметим, что нахождение матрицы J не является простой процедурой, так как вычисление производных является, вообще говоря, неустойчивым процессом.

Замечание. *При поиске значения каждой следующей итерации x^{n+1} можно сначала решить линейную систему:*

$$J(x^n)v^n = -f(x^n), \quad n \in \mathbb{Z}_+,$$

где $v^n = x^{n+1} - x^n$. Теперь значение x^{n+1} получается из найденного v^n: $x^{n+1} = x^n + v^n$.

Теперь перейдем к рассмотрению системы из $m > 2$ нелинейных уравнений

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_m) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_m) = 0 \\ \ldots \\ f_m(x_1, x_2, \ldots, x_m) = 0 \end{cases}. \tag{9}$$

Введем векторы

$$f = (f_1, f_2, \ldots, f_m)^T, \ x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T$$

и матрицу Якоби системы (9):

$$J = (f_{ij}), \ f_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}, \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Запишем схему итерационного метода Ньютона, используя матрицу Якоби:

$$x^{n+1} = x^n - J^{-1}(x^n)f(x^n), \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Заметим, что вычислять матрицу J на каждом шаге достаточно трудоемко.

Замечание. *Аналогично одномерному случаю можно рассматривать модифицированный метод Ньютона для решения нелинейных систем:*

$$x^{n+1} = x^n - J^{-1}(x^0)f(x^n), \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Реализация модифицированного метода Ньютона проще классического варианта, но скорость сходимости при данном подходе меньше.

Метод секущих

Определение. *Итерационный метод решения уравнения (1) называется одношаговым, если для нахождения $n+1$-й итерации корня x^{n+1} используется только n-я итерация x^n. Если для нахождения x^{n+1} используется не только x^n, но и предыдущие ей другие итерации, то метод называется многошаговым.*

Ранее мы рассматривали одношаговые методы решения нелинейных уравнений — метод простых итераций и итерационный метод Ньютона. Рассмотрим многошаговый итерационный метод — метод секущих.

Запишем итерационный метод Ньютона для решения уравнения (1):

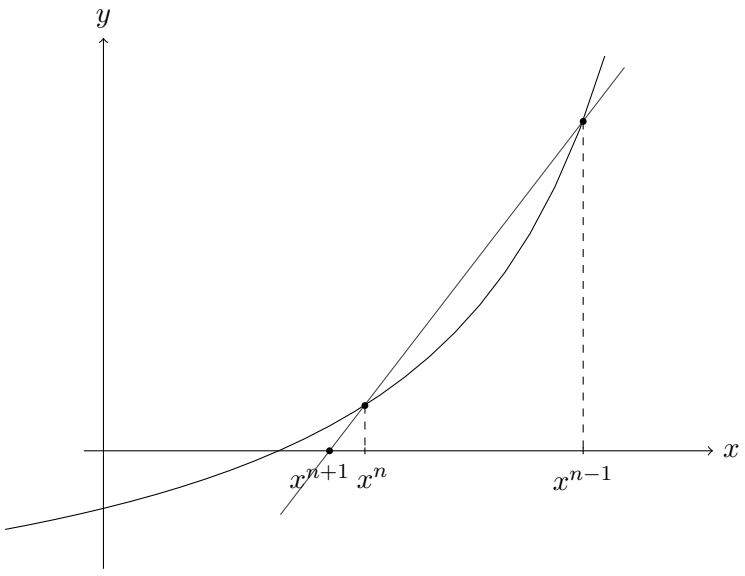
$$x^{n+1} = x^n - \frac{f(x^n)}{f'(x^n)}, \quad n \in \mathbb{Z}_+, \ x^0 \in U_a(x^*). \tag{10}$$

Заменим производную $f'(x^n)$ на соответствующий дискретный аналог $\frac{f(x^n)-f(x^{n-1})}{x^n-x^{n-1}}$ и подставим это отношение в уравнение (10).
Получим итерационный метод

$$x^{n+1} = x^n - \frac{(x^n - x^{n-1})f(x^n)}{f(x^n) - f(x^{n-1})}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad x^0, x^1 \text{ заданы.} \tag{11}$$

Определение. *Итерационный процесс (11) задает двухшаговый метод решения нелинейных уравнений, называемый методом секущих.*

Рассмотрим геометрическую интерпретацию метода секущих.



Через точки $(x^{n-1}, f(x^{n-1}))$, $(x^n, f(x^n))$ проводится секущая. За новое значение x^{n+1} принимается абсцисса точки пересечения секущей и оси Ox. Иначе говоря, на отрезке $[x^{n-1}, x^n]$ функция $f(x)$ интерполируется полиномом первой степени, и за очередное приближение x^{n+1} принимается корень этого полинома.

§24 Сходимость метода Ньютона. Оценка скорости сходимости

Рассмотрим функцию $f(x),\ x \in \mathbb{R}$ и уравнение

$$f(x) = 0. \tag{1}$$

Пусть x^* — вещественный корень этого уравнения, и определена его окрестность радиуса a, не содержащая других корней уравнения:

$$U_a(x^*) = \{x : |x - x^*| < a\},$$

причем заданная функция $f(x)$ определена на этой окрестности.

Будем считать, что начальное приближение $x^0 \in U_a(x^*)$ задано. Запишем формулу итерационного метода Ньютона решения уравнения (1):

$$x^{n+1} = x^n - \frac{f(x^n)}{f'(x^n)},\quad n \in \mathbb{Z}_+,\ x^0 \in U_a(x^*).$$

Будем рассматривать итерационный метод Ньютона как метод простой итерации с функцией

$$S(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

При изучении сходимости метода простой итерации было замечено, что, если $|S'(x)| < 1$ при $x \in U_a(x^*)$, то он сходится. Предполагая, что функция $f(x)$ дифференцируема достаточное число раз, продифференцируем функцию $S(x)$:

$$S'(x) = 1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} = \frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}.$$

Так как x^* — корень уравнения (1), то $f(x^*) = 0$, и, следовательно, $S'(x^*) = 0$, и по непрерывности функции $S'(x)$ имеем $|S'(x)| < 1$, следовательно метод сходится.

Введем погрешность приближенного решения:

$$z^n = x^n - x^*.$$

Покажем, что связь между z^n и z^{n+1} квадратичная. Рассмотрим выражение для z^{n+1}:

$$z^{n+1} = x^{n+1} - x^* = S(z^n + x^*) - S(x^*). \tag{2}$$

Разложим $S(z^n + x^*)$ по формуле Тейлора и учтем, что $S'(x^*) = 0$:

$$z^{n+1} = S(x^*) + S'(x^*)z^n + \frac{1}{2}S''(\tilde{x}^n)\,(z^n)^2 - S(x^*) = \frac{1}{2}S''(\tilde{x}^n)(z^n)^2, \tag{3}$$

$$\tilde{x}^n = x^n + \theta z^n,\ \theta \in \mathbb{R},\ |\theta| < 1.$$

Пусть функция $f(x)$ трижды непрерывно дифференцируема в окрестности $U_a(x^*)$. Тогда

$$S''(x) = \left(\frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}\right)'.$$

Пусть существует постоянная $M > 0$ такая, что для любого $x \in U_a(x^*)$ выполняется неравенство

$$M \geqslant \frac{1}{2}\left|S''(x)\right|. \tag{4}$$

Из этого неравенства и уравнения (3) следует оценка

$$|z^{n+1}| \leqslant M|(z^n)^2|. \tag{5}$$

Домножим это неравенство на M и обозначим $v^n = M|z^n|$. Тогда получим, что

$$v^{n+1} \leqslant (v^n)^2.$$

Отсюда следует, что $v^n \leqslant (v^0)^{2^n}$, значит,

$$M|z^n| \leqslant \left(M\left|z^0\right|\right)^{2^n},$$

$$|z^n| \leqslant \frac{1}{M}\left(M\left|z^0\right|\right)^{2^n}.$$

Введем обозначение $q = M|z_0|$. Если $0 < q < 1$, то последовательность $\{z^n\}_{n=0}^{\infty}$ стремится к нулю:

$$z^n \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0,$$

и итерационный метод Ньютона сходится. Условие на q $(0 < q < 1)$ будет выполнено, если $0 < |z^0| < \frac{1}{M}$, то есть $|x^0 - x^*| < \frac{1}{M}$.

Таким образом, мы доказали следующую теорему.

Теорема 1. *Пусть существует такая константа $M > 0$, для которой выполнена оценка*

$$\frac{1}{2}\left|S''(x)\right| \leqslant M, \quad x \in U_a(x^*).$$

Тогда если начальное приближение x^0 выбрать в соответствии с условием

$$|x^0 - x^*| < \frac{1}{M},$$

то итерационный метод Ньютона сходится, и имеет место оценка:

$$|x^n - x^*| \leqslant \frac{1}{M}\left(M|x^0 - x^*|\right)^{2^n}.$$

Замечание 1. *Если итерационный метод Ньютона сходится, то достаточно быстро. При наличии оценки вида (5) говорят о квадратичной сходимости метода.*

Замечание 2. *Из условий теоремы следует, что начальное приближение нужно выбирать достаточно близко к точному решению рассматриваемого уравнения.*

Замечание 3. *Другие рассмотренные нами методы (модифицированный метод Ньютона и метод секущих) обладают, по крайней мере, линейной сходимостью. Это следует из того, что если их записать в виде $x^{n+1} = S(x^n)$, то $S(x^*) = x^*$ и $S'(x^*) \neq 0$. Например, для модифицированного метода Ньютона $S'(x^*) = 1 - \frac{f'(x^*)}{f'(x^0)}$, и чем ближе взять x^0 к x^*, тем быстрее будет сходимость.*

Глава IV

Разностные методы решения задач математической физики

§25 Первая краевая задача для уравнения теплопроводности

Эта глава посвящена решению задач математической физики с помощью численных методов. Численные методы позволяют находить приближенное решение широкого класса дифференциальных задач, в то время как аналитические подходы разработаны лишь для некоторых классов задач и, как правило, используют целый ряд допущений. К примеру, мы будем рассматривать уравнение теплопроводности, которое является аналитически неразрешимым, если область задания уравнения определена произвольным образом, или уравнение содержит переменные коэффициенты. Разностные схемы позволят нам находить решение уравнения теплопроводности и в таких сложных случаях.

Постановка задачи. *Рассмотрим классическую формулировку первой краевой задачи для уравнения теплопроводности в области* $G = \{(x,t) \,:\, x \in (0,1),\ t \in (0,T]\}$ *для некоторого* $T > 0$. *Для простоты возьмем коэффициент при второй производной искомой функции в правой части уравнения равным единице.*

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + f(x,t), \quad (x,t) \in G. \tag{1}$$

Выпишем краевые условия первого рода:

$$\begin{cases} u(0,t) = \mu_1(t) \\ u(1,t) = \mu_2(t), \end{cases} \quad t \in [0,T], \tag{2}$$

и начальное условие:

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in [0,1]. \tag{3}$$

Заметим, что мы рассматриваем только те задачи, для которых существует классическое решение. Это означает:

1. *Решение обладает достаточной гладкостью, то есть функция* $u(x,t)$ *непрерывна в замкнутой области* $\overline{G} = \{(x,t) \,:\, x \in [0,1],\ t \in [0,T]\}$, *непрерывно дифференцируема один раз по* t *и два раза по* x *внутри области* G.

2. $u(x,t)$ *удовлетворяет внутри области* G *уравнению* (1), *на границе — условию* (2) *и условию* (3) *в начальный момент времени.*

Кроме того, условия на границе (2) *и в начальный момент времени должны быть согласованы:* $\mu_1(0) = u_0(0)$ *и* $\mu_2(0) = u_0(1)$.

Из курса «Уравнения математической физики» (см. также [11]) известно, что в такой постановке существует единственное решение $u(x,t)$, которое непрерывно зависит от правой части уравнения $f(x,t)$, начального условия $u_0(x)$ и краевых условий (2).

Чтобы решить эту задачу численно, поставим ей в соответствие разностную схему, то есть дискретный аналог рассматриваемого уравнения и дополнительных условий. Таким образом мы сведем непрерывную задачу к конечной системе линейных уравнений, которые уже можно решать с использованием вычислительных машин.

Сначала введем в рассматриваемой области G равномерную по переменным x и t сетку.

Определение. *Сеткой в заданной области называется совокупность конечного числа точек, принадлежащих данной области. Эти точки называются узлами сетки.*

В частности, равномерная сетка размера $(N-1) \times M$, $N, M \in \mathbb{N}$ в рассматриваемой области G вводится так:

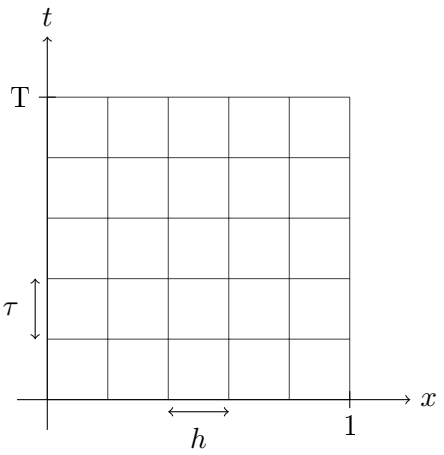
$$\omega_h = \left\{ x_i = ih,\ i = \overline{1,(N-1)} \right\},\quad \omega_\tau = \left\{ t_j = j\tau,\ j = \overline{1,M} \right\},$$

$$h = \frac{1}{N} > 0,\ \tau = \frac{T}{M} > 0.$$

Величину h назовем шагом по переменной x, величину τ — шагом по времени.
Тогда множество точек

$$\omega_{\tau h} = \omega_\tau \times \omega_h \subset G$$

задает равномерную сетку с шагом h по переменной x и шагом τ по времени в области G. Эта сетка изображена на рисунке.



Аналогичным образом введем равномерную сетку размера $(N+1) \times (M+1)$ на замыкании области G с теми же размерами шагов h и τ по переменной x и по переменной t соответственно. Эту сетку задает множество точек

$$\overline{\omega}_{\tau h} = \overline{\omega}_\tau \times \overline{\omega}_h \subset \overline{G} = \{(x,t)\ :\ x \in [0,1],\ t \in [0,T]\},$$

где

$$\overline{\omega}_h = \left\{ x_i = ih,\ i = \overline{0,N} \right\},\quad \overline{\omega}_\tau = \left\{ t_j = j\tau,\ j = \overline{0,M} \right\}.$$

В дальнейшем везде, где мы рассматриваем уравнение теплопроводности, будем использовать введенные сетки, если не указано иное.

Замечание. *В общем случае сетки могут иметь более сложную структуру, например, использовать переменный шаг, который зависит от расположения конкретной пары узлов, или для многомерной области иметь более сложную структуру расположения узлов относительно друг друга (в рассматриваемом примере равномерная сетка является прямоугольной). В последнее время часто используются сетки, автоматически подстраивающиеся под решение конкретной задачи.*

Определение. *Совокупность всех узлов в фиксированный момент времени t_n называется слоем. Слой, для которого $t_n = 0$, в котором задано начальное приближение, будем называть нулевым слоем.*

§26 Явная разностная схема. Погрешность, сходимость, устойчивость

Рассмотрим уравнение теплопроводности с краевыми условиями первого рода:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + f(x,t), \quad (x,t) \in G = \{(x,t) \ : \ x \in (0,1), \ t \in (0,T]\}, \tag{1}$$

$$\begin{cases} u(0,t) = \mu_1(t) \\ u(1,t) = \mu_2(t), \end{cases} \quad t \in [0,T], \tag{2}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in [0,1] \tag{3}$$

и построим для него разностную схему.

Воспользуемся сетками $\omega_{\tau h}$ и $\overline{\omega}_{\tau h}$, введенными в первом параграфе данной главы на множествах G и $\overline{G}$ соответственно.

Определение. *Сеточной функцией называется функция дискретного аргумента на заданной сетке, то есть такая функция определена только в узлах данной сетки.*

Поставим в соответствие непрерывным функциям $u(x,t)$ и $f(x,t)$ их дискретные аналоги. Введем обозначения для $(x_i, t_n) \in \omega_{\tau h}$:

$$f_i^n = f(x_i, t_n), u_i^n = u(x_i, t_n).$$

Обозначим численное решение задачи через

$$y(x_i, t_n) = y_i^n, \quad (x_i, t_n) \in \overline{\omega}_{\tau h}.$$

Здесь $y(x_i, t_n)$ является сеточной функцией, заданной на сетке $\overline{\omega}_{\tau h}$.

Поставим в соответствие производным функции $u(x,t)$ их дискретные аналоги для функции $y(x_i, t_n)$:

$$\frac{\partial u(x_i,t_n)}{\partial t} \approx \frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau},$$

$$\frac{\partial^2 u(x_i,t_n)}{\partial x^2} \approx \frac{y_{i-1}^n - 2y_i^n + y_{i+1}^n}{h^2}.$$

В результате получаем дискретный аналог уравнения (1):

$$\frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau} = \frac{y_{i-1}^n - 2y_i^n + y_{i+1}^n}{h^2} + f(x_i, t_n), \quad (x_i, t_n) \in \omega_{\tau h}. \tag{4}$$

Запишем дискретные аналоги краевых условий первого рода (2) и начального условия (3):

$$\begin{cases} y_0^{n+1} = \mu_1(t_{n+1}) \\ y_N^{n+1} = \mu_2(t_{n+1}), \end{cases} \quad t_{n+1} \in \overline{\omega}_\tau, \tag{5}$$

$$y_i^0 = u_0(x_i), \quad x_i \in \overline{\omega}_h. \tag{6}$$

Определение. *Дискретным аналогом задачи* (1) – (3), *или ее разностной схемой, называется система линейных уравнений* (4) – (6).

Замечание 1. *В первой краевой задаче численные значения решения* y_0^{n+1} *и* y_N^{n+1} *равны значениям функций* $\mu_1(t)$ *и* $\mu_2(t)$ *соответственно при* $t = t_{n+1}$ *(хотя это и не обязательно). В случае краевых условий иного типа, аппроксимация краевых условий должна быть согласована по порядку погрешности с порядком аппроксимации уравнения. Определение аппроксимации и порядка погрешности аппроксимации будет дано ниже.*

Замечание 2. *Заметим, что в уравнении* (4) *значения функции* $f(x,t)$ *не обязательно брать именно в узлах рассматриваемой сетки, можно использовать значения этой функции с некоторой «поправкой». Что именно имеется в виду под «поправкой», будет рассмотрено далее, а также будет показано, что выбор значений функции* $f(x,t)$ *для разностной схемы, использующих такую «поправку», позволит получить более высокий порядок погрешности аппроксимации, а стало быть и более точное решение исходного уравнения.*

Замечание 3. *Качество и скорость решения численной задачи* (4) – (6) *во многом зависит от выбора числа узлов сетки* $\omega_{\tau h}$*: чем меньше узлов в сетке, тем меньше уравнений содержится в системе, тем проще и быстрее ее решать, но и приближение решения исходной задачи в этом случае будет более грубым.*

При изучении разностных схем возникают следующие вопросы:

1. Погрешность аппроксимации на решении (невязка).

   Каждой задаче может быть сопоставлено бесконечное число разностных схем, оценка погрешности аппроксимации позволяет их сравнивать. Разностная схема должна аппроксимировать исходную дифференциальную задачу. Если же аппроксимация отсутствует, то не будет сходимости решения численной задачи к решению исходной задачи, и рассмотрение такой разностной схемы не имеет смысла.

2. Существование и единственность решения разностной задачи.

   Построенная разностная задача должна быть корректной, то есть должно существовать единственное решение. В ряде случаев доказательство существования и единственности решения является нетривиальной задачей.

3. Алгоритм нахождения разностного решения.

   В разностных схемах матрица системы линейных уравнений как правило содержит большое число нулей. Для таких систем существуют более эффективные алгоритмы решения, чем универсальный метод Гаусса, например, для систем с трехдиагональной матрицей разумно использовать метод прогонки.

4. Сходимость разностной схемы.

   Необходимо изучить условия, при которых решение данной разностной схемы сходится к точному решению исходной задачи с наперед заданной точностью.

5. Устойчивость разностной схемы.

   Устойчивость в данном контексте является чисто внутренним свойством разностных схем: разностная схема называется устойчивой в норме $\|\cdot\|$, если выполнена априорная оценка

   $$\|y\| \leqslant M\|f\|,$$

   где $M > 0$ — константа, не зависящая от шагов сетки.

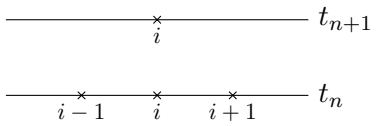
Для построения разностной схемы, обладающей хорошими свойствами, необходимо изучить весь круг перечисленных проблем.

Замечание. *Вопросы сходимости и устойчивости разностной схемы являются ключевыми, однако обычно достаточно рассмотреть только один из этих двух вопросов: в конце курса будет доказано, что из устойчивости разностной схемы следует ее сходимость к решению исходной задачи при условии, что разностная схема аппроксимирует исходную задачу.*

Определение. *Совокупность узлов, которые участвуют в записи разностной схемы, называют шаблоном.*

Вернемся к изучению явной разностной схемы (4) – (6).

В рассматриваемой разностной схеме использован четырехточечный шаблон, схематично изображенный на рисунке.



Для построенной разностной схемы решение на $(n+1)$-м слое находится явно, поэтому и рассматриваемая разностная схема называется явной:

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \frac{\tau}{h^2}(y_{i-1}^n - 2y_i^n + y_{i+1}^n) + \tau f_i^n, \quad i = \overline{1,(N-1)},$$

$$\begin{cases} y_0^{n+1} = \mu_1(t_{n+1}) \\ y_N^{n+1} = \mu_2(t_{n+1}), \end{cases} \quad t_{n+1} \in \overline{\omega}_\tau,$$

$$y_i^0 = u_0(x_i), \quad i = \overline{0,N}.$$

Представленные явные формулы позволяют утверждать, что решение разностной схемы(4) – (6) существует и единственно, значит, мы получили положительный ответ на вопрос 2.

Перейдем к исследованию оставшихся вопросов. Как мы уже упоминали в главе «Интерполирование и приближение функций», существует два подхода к измерению близости точного решения задачи (1) – (3) (непрерывной функции) и численного решения задачи (4) – (6) (сеточной функции):

1. Спроектировать непрерывную функцию $u(x,t)$ на дискретное пространство и измерять близость функций $u(x,t)$ и y_i^n в норме дискретного пространства.

2. С помощью интерполирования восполнить функцию y_i^n до непрерывной и сравнивать рассматриваемые функции в пространстве непрерывных функций.

В этом курсе будем пользоваться первым подходом. Под проекцией функции $v(x,t)$ непрерывных аргумнтов (x,t) будем понимать сеточную функцию $v_i^n = v(x_i,t_n)$, определенную в узлах сетки $\overline{\omega}_{\tau h}$. Обзоначим через u_i^n точное значение решения $u(t,x)$ дифференциальной задачи (1)–(3) в узле (x_i,t_n).

Определение. *Сеточная функция вида*

$$z_i^n = z(x_i,t_n) = y_i^n - u_i^n, \quad (x_i,t_n) \in \overline{\omega}_{\tau h} \tag{7}$$

называется погрешностью решения разностной схемы (4) –(6).

Выразим $y_i^n = z_i^n + u_i^n$ и подставим это выражение в разностную схему. Получим систему уравнений для z_i^n, аналогичную разностной схеме, но с нулевыми краевыми условиями и нулевой начальной функцией:

$$\frac{z_i^{n+1} - z_i^n}{\tau} = \frac{z_{i-1}^n - 2z_i^n + z_{i+1}^n}{h^2} + \psi_i^n, \quad (x_i,t_n) \in \omega_{\tau h}, \tag{8}$$

$$z_0^{n+1} = z_N^{n+1} = 0, \quad t_{n+1} \in \overline{\omega}_\tau, \tag{9}$$

$$z_i^0 = 0, \quad x_i \in \overline{\omega}_h. \tag{10}$$

Здесь

$$\psi_i^n = \frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{h^2} - \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} + f_i^n, \tag{11}$$

Определение. *Сеточная функция, задаваемая равенством* (11) *называется погрешностью аппроксимации разностной схемы* (4) –(6) *на решении исходной задачи.*

Задача. *Доказать, что* $\psi_i^n = \mathrm{O}\big(\tau + h^2\big)$.

Решение. Здесь и далее $(x_i,t_n) \in \overline{\omega}_{\tau h}$, $i = \overline{0,N}$, $n = \overline{0,M}$. Далее всюду при использовании формулы Тейлора будем предполагать, что разлагаемая функция обладает нужной гладкостью, то есть имеет непрерывные производные до соответствующего по ходу разложения порядка.Разложим $u(x_i,t_{n+1})$ в узле (x_i,t_n) по формуле Тейлора:

$$u(x_i,t_{n+1}) = u_i^{n+1} = u(x_i,t_n) + u_t'(x_i,t_n)\tau + O(\tau^2).$$

Разложим $u(x_{i+1},t_n)$ в узле (x_i,t_n) по формуле Тейлора:

$$u(x_{i+1},t_n) = u_{i+1}^n = u(x_i,t_n) + u_x'(x_i,t_n)h + \frac{1}{2}u_{xx}''(x_i,t_n)h^2 + \frac{1}{6}u_{xxx}'''(x_i,t_n)h^3 + O(h^4).$$

Разложим $u(x_{i-1},t_n)$ в узле (x_i,t_n) по формуле Тейлора :

$$u(x_{i-1},t_n) = u_{i-1}^n = u(x_i,t_n) - u_x'(x_i,t_n)h + \frac{1}{2}u_{xx}''(x_i,t_n)h^2 - \frac{1}{6}u_{xxx}'''(x_i,t_n)h^3 + O(h^4).$$

Полученные разложения подставим в формулу (11) и после приведения подобных слагаемых получим оценку $\psi_i^n = \mathrm{O}\big(\tau + h^2\big)$. □

Введем норму в пространстве сеточных функций на n-м слое, $n = \overline{0,M}$:

$$\|z^n\|_C = \max_{0 \leqslant i \leqslant N} |z_i^n|.$$

Мы рассматриваем решение разностной задачи по слоям, поэтому нет необходимости вводить норму как максимум модуля для всех слоев.

Теорема. *Пусть решение $u(x,t)$ задачи (1) – (3) обладает достаточной гладкостью (четыре раза дифференцируема по x и два раза по t). Тогда для сходимости решения разностной схемы (4) – (6) к решению исходной задачи (1) – (3) в норме $\|\cdot\|_C$ необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие:*

$$\gamma = \frac{\tau}{h^2} \leqslant 0.5.$$

При этом условии, выполняется оценка:

$$\left\|z^{n+1} - u^{n+1}\right\|_C \leqslant M_1\left(\tau + h^2\right), n = 0, 1, \ldots$$

где $M_1 > 0$ — константа, не зависящая от τ и h.

Доказательство. Докажем, что выполнения условий теоремы достаточно для сходимости разностной схемы к решению исходной задачи.Запишем выражение для z_i^{n+1} в виде

$$z_i^{n+1} = (1 - 2\gamma)\, z_i^n + \gamma\left(z_{i-1}^n + z_{i+1}^n\right) + \tau\psi_i^n$$

и оценим левую часть равенства по модулю с учетом условия $1 - 2\gamma \geqslant 0$. Тогда получим

$$\left|z_i^{n+1}\right| \leqslant (1 - 2\gamma)\left|z_i^n\right| + \gamma\left(\left|z_{i-1}^n\right| + \left|z_{i+1}^n\right|\right) + \tau\left|\psi_i^n\right|.$$

Перейдем в правой части неравенства от модулей слагаемых к нормам соответствующих векторов. При таком переходе правая часть неравенства может только увеличиться:

$$\left|z_i^{n+1}\right| \leqslant (1 - 2\gamma)\left\|z^n\right\|_C + 2\gamma\|z^n\|_C + \tau\|\psi^n\|_C.$$

Полученное неравенство верно для всех $i = \overline{0, N}$, а значит, оно выполнено и для максимального из $\left|z_i^{n+1}\right|$. Следовательно, можно заменить левую часть неравенства на норму $\left\|z^{n+1}\right\|_C$, и, с учетом приведения подобных слагаемых, получить

$$\|z^{n+1}\|_C \leqslant \|z^n\|_C + \tau\|\psi^n\|_C.$$

Получили рекуррентную оценку для нормы $\left\|z^{n+1}\right\|_C$. Из этой оценки вытекает неравенство:

$$\left\|z^{n+1}\right\|_C \leqslant \left\|z^0\right\|_C + \tau\sum_{k=0}^{n}\left\|\psi^k\right\|_C.$$

Как показано выше из предположений о гладкости $u(x,t)$ следует оценка

$$\left\|\psi^k\right\|_C \leqslant M\left(\tau + h^2\right),$$

где $M > 0$ — константа, не зависящая от τ и h. Учитывая, что

$$\left\|z^0\right\|_C = 0,$$

$$\sum_{k=0}^{n}\tau = t_{n+1} \leqslant T,$$

получим окончательную оценку:

$$\left\|z^{n+1}\right\|_C \leqslant M_1\left(\tau + h^2\right), \quad M_1 = TM. \tag{12}$$

Здесь константа M_1 не зависит от τ и h.
Из данной оценки следует, что при $\tau \to 0,\ h \to 0$

$$\|z^{n+1}\|_C = \|y^{n+1} - u^{n+1}\|_C \to 0.$$

Следовательно, решение разностной схемы сходится к решению исходной задачи. Наличие оценки (12) означает, что разностная схема (4)–(6) имеет первый порядок точности по τ и второй — по h.

Перед тем, как доказать необходимость, введем понятие устойчивости разностной схемы. Для разностной схемы (4)–(6) с нулевыми краевыми условиями, получим задачу, совпадающую с (8)–(10). После проведения оценок, аналогичных показанным выше, получим

$$\|y^{n+1}\|_C \leqslant \|u_0\|_C + \sum_{k=0}^{n} \tau \|f^k\|_C.$$

Полученное равенство можно записать в виде:

$$\|y^{n+1}\|_C \leqslant \|u_0\|_C + M_1 \|f^n\|_C,$$

где константа $M_1 = T$ не зависит от τ и h.

Эта априорная оценка означает устойчивость решения разностной схемы по начальным условиям и правой части уравнения.

Перейдем к доказательству необходимости. Рассмотрим однородное уравнение относительно y_i^n:

$$\frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau} = \frac{y_{i-1}^n - 2y_i^n + y_{i+1}^n}{h^2},$$

где $n = \overline{0, (M-1)},\ i = \overline{1, (N-1)}$.

Покажем, что при нарушении условия теоремы появятся неограниченные возрастающие гармоники — функции вида

$$y_j^n = q^n e^{ijh\varphi}, \quad \text{где } i^2 = -1,\ \varphi,\ h \in \mathbb{R},\ q \in \mathbb{C}. \tag{13}$$

Подставим выражение (13) в рассматриваемое относительно y_i^n однородное уравнение и выразим q:

$$q = 1 + \gamma \left(e^{ih\varphi} - 2 + e^{-ih\varphi} \right) = 1 + 2\gamma \left(\cos h\varphi - 1 \right) = 1 - 4\gamma \sin^2 \frac{h\varphi}{2}.$$

Предположим, что $\gamma > 0.5$. Тогда найдутся φ (например $\varphi = \frac{\pi}{h}$) такие, что

$$1 - 4\gamma \sin^2 \frac{h\varphi}{2} < -1,$$

и $|q| > 1$. Тем самым, y_i^n неограниченно возрастает при $n \to \infty$, и о сходимости говорить не приходится.

Следовательно, если условие теоремы нарушено, то решение разностной схемы не будет сходиться к решению исходной задачи. □

Замечание 4. *Разностные схемы могут сходиться условно (и быть условно устойчивыми) и абсолютно. Условная сходимость определяется наличием ограничений на шаги сетки любого характера, для абсолютной сходимости требуется, чтобы такие ограничения отсутствовали. В примеденной выше теореме условие сходимости имеет вид* $\frac{\tau}{h^2} \leqslant 0.5$. *Следовательно, явная разностная схема является условно сходящейся.*

Замечание 5. *Важно помнить, что сходимость и устойчивость разностной схемы доказывается в конкретной норме. В данном параграфе доказана сходимость и устойчивость решений разностной схемы (4)–(6) в норме $\|\cdot\|_C$, которая является достаточно сильной нормой, а значит, обеспечивает более точную оценку, по сравнению, например, со среднеквадратичной нормой.*

§27 Чисто неявная разностная схема (схема с опережением). Погрешность, устойчивость, сходимость

Рассмотрим уравнение теплопроводности с краевыми условиями первого рода:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + f(x,t), \quad (x,t) \in G = \{(x,t) \ : \ x \in (0,1), \ t \in (0,T]\}, \tag{1}$$

$$\begin{cases} u(0,t) = \mu_1(t) \\ u(1,t) = \mu_2(t), \end{cases} \quad t \in [0,T], \tag{2}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in [0,1]. \tag{3}$$

Воспользуемся сетками $\omega_{\tau h}$ и $\overline{\omega}_{\tau h}$, введенными в первом параграфе данной главы, на множествах G и $\overline{G}$ соответственно.

Поставим в соответствие задаче (1)–(3) следующую разностную схему:

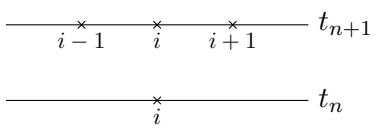
$$\frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau} = \frac{y_{i-1}^{n+1} - 2y_i^{n+1} + y_{i+1}^{n+1}}{h^2} + f(x_i, t_{n+1}), \quad (x_i,t_n), (x_i,t_{n+1}) \in \omega_{\tau h}, \tag{4}$$

$$\begin{cases} y_0^{n+1} = \mu_1(t_{n+1}) \\ y_N^{n+1} = \mu_2(t_{n+1}), \end{cases} \quad t_{n+1} \in \overline{\omega}_\tau, \tag{5}$$

$$y_i^0 = u_0(x_i), \quad x_i \in \overline{\omega}_h, \tag{6}$$

где $y_i^n = y(x_i,t_n)$ — искомое численное решение в точке $(x_i,t_n) \in \overline{\omega}_{\tau h}$.

В рассматриваемой разностной схеме использован четырехточечный шаблон вида



Как видим, разностная схема является неявной, а именно, для получения решения на $(n+1)$-м слое необходимо решить трехточечное уравнение. В связи с этим возникает вопрос о разрешимости разностной задачи. Покажем, что эта задача имеет единственное решение, и укажем алгоритм его нахождения. Выразим y_i^{n+1} из уравнения (4):

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \gamma\left(y_{i-1}^{n+1} - 2y_i^{n+1} + y_{i+1}^{n+1}\right) + \tau f_i^{n+1},$$

где $\gamma = \frac{\tau}{h^2}$, $(x_i,t_n), (x_i,t_{n+1}) \in \omega_{\tau h}$.

Перенесем слагаемые, относящиеся к $(n+1)$-у слою, в левую часть уравнения и получим следующую систему уравнений относительно неизвестных $\{y_i^{n+1}\}_{i=1}^{N-1}$:

$$\begin{cases} -\gamma y_{i-1}^{n+1} + (1+2\gamma)\, y_i^{n+1} - \gamma y_{i+1}^{n+1} = y_i^n + \tau f_i^{n+1}, \quad i = \overline{1,(N-1)}, \\ y_0^{n+1} = \mu_1^{n+1}, \quad y_N^{n+1} = \mu_2^{n+1}. \end{cases}$$

Эта система имеет трехдиагональную матрицу порядка $(N-1)$:

$$A = \begin{pmatrix} 1+2\gamma & -\gamma & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -\gamma & 1+2\gamma & -\gamma & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1+2\gamma & -\gamma \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\gamma & 1+2\gamma \end{pmatrix},$$

обладающую строгим диагональным преобладанием:

$$a_{ii} > \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} |a_{ij}|, \quad i = \overline{1,(N-1)}.$$

Матрицы со строгим диагональным преобладанием обладают свойством невырожденности, поэтому $|A| \neq 0$, и решение задачи (4)–(6) при каждом фиксированном N существует и единственно. Так как матрица A — трехдиагональная, разумно использовать метод прогонки для нахождения решения системы. Этот метод является разновидностью метода Гаусса, адаптированной для матриц специального вида, и, в отличие от классического метода Гаусса, требует числа действий $\mathrm{O}(N)$. Кроме того, так как рассматриваемая матрица обладает строгим диагональным преобладанием, метод прогонки будет устойчивым, а значит, ошибки округления нарастать не будут.

Введем сеточную функцию погрешности решения разностной схемы, равную разности приближенного и точного решений:

$$z_i^n = z(x_i, t_n) = y_i^n - u_i^n,$$

где $u_i^n = u(x_i, t_n), (x_i, t_n) \in \overline{\omega}_{\tau h}$.
Выразив из последнего соотношения y_i^n и подставив это выражение в разностную схему, с учетом линейности уравнения (4) получим уравнение для z_i^n с нулевыми краевыми и начальным условиями:

$$\frac{z_i^{n+1} - z_i^n}{\tau} = \frac{z_{i-1}^{n+1} - 2z_i^{n+1} + z_{i+1}^{n+1}}{h^2} + \psi_i^n, \quad (x_i, t_n), (x_i, t_{n+1}) \in \omega_{h\tau}, \tag{7}$$

$$\begin{cases} z_0^{n+1} = 0 \\ z_N^{n+1} = 0, \end{cases} \quad t_{n+1} \in \overline{\omega}_\tau, \tag{8}$$

$$z_i^0 = 0, \quad x_i \in \overline{\omega}_h, \tag{9}$$

где ψ_i^n — погрешность аппроксимации на решении:

$$\psi_i^n = \psi(x_i, t_n) = -\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} + \frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{h^2} + f(x_i, t_{n+1}). \tag{10}$$

Задача. *Доказать, что*

$$\psi_i^n = \mathrm{O}\big(\tau + h^2\big). \tag{11}$$

Для оценки погрешности z_i^n воспользуемся нормой $\|\cdot\|_C$ в пространстве сеточных функций на слое, которую мы ввели в предыдущем параграфе.

Теорема. *Пусть функция $u(x,t)$ имеет достаточную гладкость (четыре раза дифференцируема по x и два раза по t). Тогда чисто неявная разностная схема сходится к решению исходной задачи в норме $\|\cdot\|_C$ с первым порядком точности по τ и вторым порядком точности по h.*

Доказательство. Пусть $x_{i_0} \in \overline{\omega}_h$ — узел, на котором достигается максимум погрешности на $(n+1)$-м слое:

$$\left|z_{i_0}^{n+1}\right| = \max_{0 \leqslant i \leqslant N} \left|z_i^{n+1}\right| = \left\|z^{n+1}\right\|_C .$$

Для доказательства теоремы воспользуемся, фактически, принципом максимума. Запишем уравнение (7) относительно узла x_{i_0}:

$$(1+2\gamma)\, z_{i_0}^{n+1} = z_{i_0}^n + \gamma\left(z_{i_0-1}^{n+1} + z_{i_0+1}^{n+1}\right) + \tau\psi_{i_0}^n, \quad \gamma = \frac{\tau}{h^2} > 0.$$

Оценим левую и правую части равенства по модулю с учетом того, что $(1+2\gamma) > 0$:

$$(1+2\gamma)\left|z_{i_0}^{n+1}\right| \leqslant \left|z_{i_0}^n\right| + \gamma\left(\left|z_{i_0-1}^{n+1}\right| + \left|z_{i_0+1}^{n+1}\right|\right) + \tau\left|\psi_{i_0}^n\right| .$$

Перейдем в правой части неравенства от модулей слагаемых к нормам соответствующих функций. При таком переходе правая часть неравенства может только увеличиться:

$$(1+2\gamma)\left|z_{i_0}^{n+1}\right| \leqslant \left\|z^n\right\|_C + 2\gamma\left\|z^{n+1}\right\|_C + \tau\left\|\psi^n\right\|_C.$$

Так как по предположению $\left|z_{i_0}^{n+1}\right| = \left\|z^{n+1}\right\|_C$, то полученное неравенство имеет вид

$$(1+2\gamma)\left\|z^{n+1}\right\|_C \leqslant \left\|z^n\right\|_C + 2\gamma\left\|z^{n+1}\right\|_C + \tau\left\|\psi^n\right\|_C.$$

Отсюда следует, что

$$\left\|z^{n+1}\right\|_C \leqslant \left\|z^n\right\|_C + \tau\left\|\psi^n\right\|_C.$$

Из этого неравенства вытекает:

$$\left\|z^{n+1}\right\|_C \leqslant \left\|z^0\right\|_C + \sum_{k=0}^{n} \tau\left\|\psi^k\right\|_C.$$

Учитывая, что начальная погрешность равна нулю, получаем оценку

$$\left\|z^{n+1}\right\|_C \leqslant \sum_{k=0}^{n} \tau\left\|\psi^k\right\|_C.$$

Из (11) следует, что

$$\left\|\psi^k\right\|_C \leqslant M\left(\tau + h^2\right),$$

где $M > 0$ — константа, не зависящая от τ и h, и

$$\sum_{k=0}^{n} \tau = t_{n+1} \leqslant T.$$

Таким образом получим окончательную оценку:

$$\left\|z^{n+1}\right\|_C \leqslant M_1\left(\tau + h^2\right), \tag{12}$$

где $M_1 = TM > 0$ — константа, не зависящая от τ и h. Устремив τ и h к нулю, получим:

$$\lim_{\substack{\tau \to 0 \\ h \to 0}} \left\|y^{n+1} - u^{n+1}\right\|_C = 0.$$

Равенство предела разности нулю означает, что решение разностной схемы сходится к решению исходной задачи. □

Наличие оценки (12) означает, что схема имеет первый порядок точности по τ и второй — по h. Чисто неявная схема является абсолютно сходящейся разностной схемой, так как оценка (12) была получена без всяких ограничений на τ и h.

Замечание. *Если в разностной задаче (4) – (6) взять нулевые краевые условия*

$$y_0^{n+1} = y_N^{n+1} = 0,$$

то для y_i^n можно вывести оценку, аналогичную полученной выше:

$$\|y^{n+1}\|_C \leqslant \|u_0\|_C + \tau \sum_{k=0}^{N} \|f^k\|_C.$$

Эта оценка означает, что решение разностной схемы устойчиво по начальному условию и по правой части уравнения.

§28 Симметричная разностная схема. Задача на собственные значения. Сходимость, устойчивость в норме $L_2(\overline{\omega_h})$

Рассмотрим уравнение теплопроводности с краевыми условиями первого рода:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + f(x,t), \quad (x,t) \in G = \{(x,t) \ : \ x \in (0,1), \ t \in (0,T]\}, \tag{1}$$

$$\begin{cases} u(0,t) = \mu_1(t) \\ u(1,t) = \mu_2(t), \end{cases} \quad t \in [0,T], \tag{2}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in [0,1]. \tag{3}$$

Воспользуемся сетками $\omega_{\tau h}$ и $\overline{\omega}_{\tau h}$, введенными в первом параграфе данной главы на множествах G и $\overline{G}$ соответственно.

Введем вторую разностную производную для дискретной функции $y_i^n = y(x_i, t_n)$, определенной на множестве $\overline{\omega}_{\tau h}$:

$$y_{\overline{x}x,i}^n = \frac{y_{i-1}^n - 2y_i^n + y_{i+1}^n}{h^2}.$$

Эта производная является дискретным аналогом второй производной по x функции $u(x,t)$.

Поставим в соответствие уравнению (1) его дискретный аналог в виде

$$\frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau} = \frac{y_{\overline{x}x,i}^{n+1} + y_{\overline{x}x,i}^n}{2} + f(x_i, t_{n+\frac{1}{2}}), \tag{4}$$

где $(x_i, t_{n+\frac{1}{2}}) = \left(x_i, t_n + \frac{\tau}{2}\right) \in \omega_{\tau h}$.

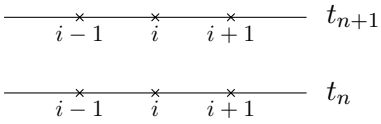
Определение. *Слой $t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + \frac{\tau}{2}$ называется полуцелым слоем.*

Добавим краевые и начальное условия:

$$\begin{cases} y_0^{n+1} = \mu_1(t_{n+1}) \\ y_N^{n+1} = \mu_2(t_{n+1}), \end{cases} \quad t_{n+1} \in \overline{\omega}_\tau, \tag{5}$$

$$y_i^0 = u_0(x_i), \quad x_i \in \overline{\omega}_h. \tag{6}$$

В рассматриваемой разностной схеме использован шеститочечный шаблон вида



Заметим, что данная схема, с точки зрения нахождения численного решения, похожа на ту, которую мы рассматривали в предыдущем параграфе, в частности, матрица системы, соответствующей этой схеме, является трехдиагональной со строгим диагональным преобладанием. Это значит, что решение разностной схемы (4)–(6) такой задачи существует, единственно и находится с помощью метода прогонки.

Введем погрешность решения разностной схемы:

$$z_i^n = z(x_i, t_n) = y_i^n - u_i^n,$$

где $u_i^n = u(x_i, t_n)$, $(x_i, t_n) \in \overline{\omega}_{\tau h}$.
Выразив y_i^n из этого выражения и подставив его в уравнение (4), получим задачу относительно z_i^n:

$$\frac{z_i^{n+1} - z_i^n}{\tau} = \frac{z_{\overline{x}x,i}^{n+1} + z_{\overline{x}x,i}^n}{2} + \psi_i^n, \quad (x_i, t_n), (x_i, t_{n+1}) \in \omega_{\tau h}, \tag{7}$$

$$\begin{cases} z_0^{n+1} = 0 \\ z_N^{n+1} = 0, \end{cases} \quad t_{n+1} \in \overline{\omega}_\tau, \tag{8}$$

$$z_i^0 = 0, \quad x_i \in \overline{\omega}_h, \tag{9}$$

где ψ_i^n — погрешность аппроксимации на решении исходной задачи (1)–(3):

$$\psi_i^n = \psi(x_i, t_n) = -\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} + \frac{u_{\overline{x}x,i}^{n+1} + u_{\overline{x}x,i}^n}{2} + f(x_i, t_{n+\frac{1}{2}}), \quad (x_i, t_n), (x_i, t_{n+1}) \in \omega_{\tau h}. \tag{10}$$

Задача. *Доказать, что*

$$\psi_i^n = \mathrm{O}\big(\tau^2 + h^2\big). \tag{11}$$

Переходим к изучению вопросов сходимости и устойчивости разностной задачи (4)–(6).

Рассмотрим вещественное пространство H_{N-1} сеточных функций w, заданных на одномерной сетке ω_h, содержащей $(N-1)$ узел и обращающихся в нуль на границе ($w_0 = w_N = 0$).

Значение функции $w \in H_{N-1}$ в i-м узле сетки, $i = \overline{1, (N-1)}$, обозначим через w_i. Заметим, что

$$\dim H_{N-1} = N - 1.$$

Введем скалярное произведение и норму в пространстве H_{N-1}:

$$(z, v) = \sum_{i=1}^{N-1} z_i v_i h, \quad \|z\|_{L_2(\omega_h)} = \left(\sum_{i=1}^{N-1} z_i^2 h \right)^{\frac{1}{2}}, \quad z, v \in H_{N-1}.. \tag{12}$$

Заметим, что если взять значения сеточной функции z_i^n, рассматриваемой на сетке $\omega_{\tau h}$, принадлежащие одному слою, пусть n-у, то эти значения образуют функцию z^n, принадлежащую пространству H_{N-1}. Тогда, если будет верна оценка

$$\left\| z^{n+1} \right\|_{L_2(\omega_h)} \leqslant M \left(\tau^2 + h^2 \right),$$

где константа M не зависит от τ и h, то это будет означать сходимость рассматриваемой разностной схемы к решению исходной задачи в норме $L_2(\omega_h)$ со вторым порядком точности по τ и h.

Наряду с вещественным пространством H_{N-1} будем рассматривать гильбертово пространство L_2 — линейное пространство функций, интегрируемых с квадратом на интервале $(0,1)$:

$$\int\limits_0^1 f^2(x)dx < \infty.$$

Введем скалярное произведение и норму в пространстве L_2:

$$(f,g) = \int\limits_0^1 f(x)g(x)dx, \quad \|f\|_{L_2} = \left(\int\limits_0^1 f^2(x)dx\right)^{\frac{1}{2}}, \quad f(x), g(x) \in L_2.$$

Задача на собственные значения

Рассмотрим задачу на собственные значения (задачу Штурма-Лиувилля) для функции $u(x) \in L_2$, обладающей достаточной гладкостью:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2u}{dx^2} + \lambda u(x) = 0, \quad x \in (0,1), \\ u(0) = u(1) = 0, \end{cases} \tag{13}$$

причем $u(x) \not\equiv 0$.

Решениями данной задачи являются собственные значения λ_k и собственные функции $u_k(x)$:

$$\lambda_k = \pi^2 k^2, \quad k \in \mathbb{N},$$

$$0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \ldots < \lambda_n < \ldots,$$

$$u_k(x) = c\sin(\pi k x), \quad c = const \neq 0.$$

Одним из свойств собственных функций задачи Штурма-Лиувилля является тот факт, что эти функции образуют ортогональный базис пространства L_2.

Положим $c = \sqrt{2}$ и получим:

$$u_k(x) = \sqrt{2}\sin(\pi k x).$$

Тогда функции $\{u_k(x)\}_{k=1}^{\infty}$ образуют ортонормированный базис в пространстве L_2:

$$(u_k, u_l) = \delta_{kl}.$$

Значит, произвольную функцию $f(x) \in L_2$ можно разложить по базису $\{u_k(x)\}_{k=1}^{\infty}$:

$$f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} f_k u_k(x),$$

где коэффициенты $f_k = (f, u_k)$ называются коэффициентами Фурье. Тогда справедливо равенство Парсеваля:

$$\|f\|_{L_2}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} f_k^2.$$

Рассмотрим теперь разностный аналог задачи Штурма-Лиувилля для сеточной функции $y \in H_{N-1}$:

$$\begin{cases} y_{\bar{x}x,i} + \lambda y(x_i) = 0, \quad x_i \in w_h, \quad i = \overline{1,(N-1)}, \\ y_0 = y_N = 0, \end{cases} \tag{14}$$

причем $y(x) \not\equiv 0$. Будем искать собственные функции в виде

$$y(x_i) = \sin(\alpha x_i), \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad i = \overline{1,(N-1)}.$$

Распишем уравнение (14) подробнее:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + \lambda y_i = 0$$

и перенесем слагаемые, содержащие y_i, в правую часть:

$$y_{i+1} + y_{i-1} = \left(2 - h^2\lambda\right) y_i, \quad i = \overline{1,(N-1)}.$$

Очевидно, что

$$y_{i+1} + y_{i-1} = y(x_i + h) + y(x_i - h) = \sin\alpha(x_i + h) + \sin\alpha(x_i - h) = 2\sin(\alpha x_i)\cos(\alpha h).$$

Следовательно,

$$2\sin(\alpha x_i)\cos(\alpha h) = (2 - h^2\lambda)\sin\alpha x_i.$$

$\sin(\alpha x_i) \neq 0$, так как собственные функции не могут быть нулевыми, значит

$$\frac{\lambda h^2}{2} = 1 - \cos\alpha h = 2\sin^2\left(\frac{\alpha h}{2}\right).$$

Отсюда следует, что

$$\lambda = \frac{4}{h^2}\sin^2\left(\frac{\alpha h}{2}\right).$$

Для того, чтобы найти α, воспользуемся краевым условием для y:

$$y_N = \sin\alpha = 0,$$

откуда следует, что $\alpha_k = \pi k, \ k \in \mathbb{N}$. Тогда собственные значения λ_k равны

$$\lambda_k = \frac{4}{h^2}\sin^2\left(\frac{\pi k h}{2}\right), \quad k = \overline{1,(N-1)},$$

а соответствующие им собственные функции имеют вид

$$y_k = C\sin(\pi k x_i), \quad k \in \overline{1,(N-1)}.$$

Система функций $y_k(x_i)$, $k = \overline{1,(N-1)}$ ортогональна, а если положить $C = \sqrt{2}$, то совокупность сеточных функций $y_k(x_i) = \sqrt{2}\sin(\pi k x_i)$ образует ортонормированный (в смысле скалярного произведения (12)) базис пространства H_{N-1}. Следовательно, любая сеточная функция $f(x_i)$, $i = \overline{1,(N-1)}$, однозначно разложима по базису $\{y_k\}_1^{N-1}$, то есть

$$f(x_i) = \sum_{k=1}^{N-1} c_k y_k(x_i),$$

где $c_k = (f, y_k)$, $k = \overline{1,(N-1)}$ — коэффициенты Фурье. Имеет место равенство Парсеваля:

$$\|f\|^2_{L_2(\omega_h)} = \sum_{k=1}^{N-1} c_k^2. \tag{15}$$

Воспользуемся рассмотренной задачей Штурма-Лиувилля для доказательства следующей теоремы.

Теорема. *Пусть функция $u(x,t)$, являющаяся решением задачи для уравнения теплопроводности (1)–(3), имеет достаточную гладкость. Тогда симметричная разностная схема (4)–(6) сходится к решению исходной задачи со вторым порядком по τ и вторым порядком по h в $L_2(\omega_h)$-норме пространства сеточных функций.*

Доказательство. Обратимся к рассмотрению задачи (7)–(9) для погрешности решения разностной схемы z_i^n:

$$\frac{z_i^{n+1}-z_i^n}{\tau}=\frac{z_{\overline{x}x,i}^{n+1}+z_{\overline{x}x,i}^n}{2}+\psi_i^n,\quad (x_i,t_n),(x_i,t_{n+1})\in\omega_{\tau h},\tag{16}$$

$$\begin{cases} z_0^{n+1}=0 \\ z_N^{n+1}=0, \end{cases}\quad t_{n+1}\in\overline{\omega}_\tau,\tag{17}$$

$$z_i^0=0,\quad x_i\in\overline{\omega}_h,\tag{18}$$

где ψ_i^n — погрешность аппроксимации на решении задачи (1)–(3), $\psi_i^n=\mathrm{O}\big(\tau^2+h^2\big)$:

$$\psi_i^n=\psi(x_i,t_n)=-\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\tau}+\frac{u_{\overline{x}x,i}^{n+1}+u_{\overline{x}x,i}^n}{2}+f(x_i,t_{n+\frac12}),\quad (x_i,t_n),(x_i,t_{n+1})\in\omega_{\tau h}.\tag{19}$$

Будем искать погрешность z_i^n в виде

$$z_i^n=\sum_{k=1}^{N-1}c_k(t_n)\mu_k(x_i),\quad x_i\in\overline{w}_h,\tag{20}$$

где $c_k(t_n), k=\overline{1,(N-1)}$ — дискретные функции только аргумента t_n, а $\mu_k,\ k=\overline{1,(N-1)}$ — собственные функции задачи, зависящие только от $x_i\in\omega_h$:

$$\mu_{\overline{x}x,i}+\lambda\mu(x_i)=0,\quad i=\overline{1,(N-1)},\tag{21}$$

$$\mu_0=\mu_N=0.$$

Задача (21) была рассмотрена выше.

Функции μ_k имеют вид

$$\mu_k(x_i)=\sqrt{2}\sin(\pi k x_i),\quad i,k=\overline{1,(N-1)}$$

и образуют ортонормированный базис в H_{N-1}. Этим функциям соответствуют собственные значения λ_k, равные

$$\lambda_k=\frac{4}{h^2}\sin^2\left(\frac{\pi k h}{2}\right),\quad k=\overline{1,(N-1)},$$

Так как функции $\{\mu_k\}_{k=1}^{N-1}$ образуют ортонормированный базис пространства H_{N-1}, то любой элемент пространства H_{N-1} можно разложить по этим функциям, следовательно, представление (20) корректно.

Разложим по базисным функциям погрешность аппроксимации ψ_i^n на решении:

$$\psi_i^n=\sum_{k=1}^{N-1}\psi^{(k)}(t_n)\mu_k(x_i),\tag{22}$$

где $\psi^{(k)}(t_n)$ — дискретные функции только аргумента t_n.
Подставим выражения (20) и (22) в уравнение (7):

$$\frac{\sum_{k=1}^{N-1}(c_k(t_{n+1})-c_k(t_n))}{\tau}\mu_k(x_i)=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N-1}(c_k(t_{n+1})+c_k(t_n))\,(\mu_k)_{\overline{x}x,i}+\sum_{k=1}^{N-1}\psi^{(k)}(t_n)\mu_k(x_i).$$

Принимая во внимание уравнение (21), получаем

$$\sum_{k=1}^{N-1}\left(\frac{c_k(t_{n+1})-c_k(t_n)}{\tau}+\frac{\lambda_k}{2}(c_k(t_{n+1})+c_k(t_n))\right)\mu_k(x_i)=\sum_{k=1}^{N-1}\psi^{(k)}(t_n)\mu_k(x_i).$$

Так как $\{\mu_k\}_{k=1}^{N-1}$ — система линейно независимых функций, то полученное равенство выполняется тогда и только тогда, когда коэффициенты при соответствующих функциях $\mu_k(x_i),\ k=\overline{1,(N-1)}$ равны:

$$\frac{c_k(t_{n+1})-c_k(t_n)}{\tau}+\frac{\lambda_k}{2}(c_k(t_{n+1})+c_k(t_n))=\psi^{(k)}(t_n),\quad k=\overline{1,(N-1)}.$$

Разрешим это уравнение относительно $(n+1)$-го слоя, домножив обе части на $\tau\neq 0$ и сгруппировав слагаемые с $c_k(t_{n+1})$ и $c_k(t_n)$:

$$(1+0.5\tau\lambda_k)\,c_k(t_{n+1})=(1-0.5\tau\lambda_k)\,c_k(t_n)+\tau\psi^{(k)}(t_n).$$

Учитывая, что $(1+0.5\tau\lambda_k)\neq 0$, получаем

$$c_k(t_{n+1})=\frac{1-0.5\tau\lambda_k}{1+0.5\tau\lambda_k}c_k(t_n)+\frac{\tau}{1+0.5\tau\lambda_k}\psi^{(k)}(t_n). \tag{23}$$

Обозначим $q_k=\dfrac{1-0.5\tau\lambda_k}{1+0.5\tau\lambda_k}$.

Задача. *Показать, что*

$$|q_k|=\left|\frac{1-0.5\tau\lambda_k}{1+0.5\tau\lambda_k}\right|\leqslant 1.$$

Решение. Нужно показать, что $-1\leqslant q_k\leqslant 1$ или

$$-1\leqslant\frac{1-0.5\tau\lambda_k}{1+0.5\tau\lambda_k}\leqslant 1.$$

Неравенство

$$\frac{1-0.5\tau\lambda_k}{1+0.5\tau\lambda_k}\leqslant 1$$

очевидно в силу того, что $\tau>0$, $\lambda_k>0$. Рассмотрим теперь неравенство

$$\frac{1-0.5\tau\lambda_k}{1+0.5\tau\lambda_k}\geqslant -1$$

или

$$-1-0.5\tau\lambda_k\leqslant 1-0.5\tau\lambda_k,$$

которое, как легко заметить, выполнено всегда. □

Подставим выражение (23) в разложение (20):

$$z_i^{n+1} = \sum_{k=1}^{N-1} c_k(t_{n+1})\mu_k(x_i) = \sum_{k=1}^{N-1} q_k c_k(t_n)\mu_k(x_i) + \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\tau}{1+0.5\tau\lambda_k}\psi^{(k)}(t_n)\mu_k(x_i).$$

Обозначим первую сумму через V, а вторую через W. Применим неравенство треугольника для оценки нормы погрешности z^{n+1} через нормы этих величин:

$$\left\|z^{n+1}\right\|_{L_2(\omega_h)} \leqslant \left\|V\right\|_{L_2(\omega_h)} + \left\|W\right\|_{L_2(\omega_h)}. \tag{24}$$

Оценим квадрат нормы V, воспользовавшись результатом рассмотренной выше задачи $|q| \leqslant 1$ и равенством Парсеваля:

$$\left\|V\right\|^2_{L_2(\omega_h)} = \sum_{k=1}^{N-1} q_k^2 c_k^2(t_n) \leqslant \sum_{k=1}^{N-1} c_k^2(t_n) = \left\|z^n\right\|^2_{L_2(\omega_h)}.$$

Аналогичным образом поступим с W с учетом того, что $1 + 0.5\tau\lambda_k > 1$:

$$\left\|W\right\|^2_{L_2(\omega_h)} = \sum_{k=1}^{N-1} \left(\frac{\tau}{1+0.5\tau\lambda_k}\right)^2 \left(\psi^{(k)}(t_n)\right)^2 \leqslant \tau^2 \sum_{k=1}^{N-1} \left(\psi^{(k)}(t_n)\right)^2 = \tau^2 \left\|\psi^n\right\|^2_{L_2(\omega_h)}.$$

Тогда неравенство (24) примет вид

$$\left\|z^{n+1}\right\|_{L_2(\omega_h)} \leqslant \left\|z^n\right\|_{L_2(\omega_h)} + \tau\left\|\psi^n\right\|_{L_2(\omega_h)}.$$

Рассматривая полученную оценку как рекуррентную, легко получим:

$$\left\|z^{n+1}\right\|_{L_2(\omega_h)} \leqslant \left\|z^0\right\|_{L_2(\omega_h)} + \sum_{j=1}^{n} \tau\left\|\psi(t_j)\right\|_{L_2(\omega_h)}. \tag{25}$$

Учитывая, что $\left\|z^0\right\|_{L_2(\omega_h)} = 0$, а также используя оценку нормы погрешности аппроксимации, которая следует из оценки (11),

$$\left\|\psi(t_j)\right\|_{L_2(\omega_h)} \leqslant M\left(\tau^2 + h^2\right),$$

и равенство

$$\sum_{k=0}^{n} \tau = t_{n+1} \leqslant T,$$

получаем окончательную оценку:

$$\left\|z^{n+1}\right\|_{L_2(\omega_h)} \leqslant M_1\left(\tau^2 + h^2\right),$$

где $M_1 = TM$ не зависит от τ и h. □

Замечание. *Если в разностной задаче (4) – (6) взять нулевые краевые условия*

$$y_0^{n+1} = y_N^{n+1} = 0,$$

то для y_i^n можно вывести априорную оценку, аналогичную полученной выше оценке (25):

$$\left\|y^{n+1}\right\|_{L_2(\omega_h)} \leqslant \left\|u_0\right\|_{L_2(\omega_h)} + \tau\sum_{j=0}^{n}\left\|f(t_j)\right\|_{L_2(\omega_h)}.$$

Эта оценка означает, что решение разностной схемы устойчиво в норме $L_2(\omega_h)$ по начальному условию u_0 и правой части уравнения.

§29 Разностные схемы с весами. Погрешность аппроксимации на решении

Рассмотрим уравнение теплопроводности с краевыми условиями первого рода:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + f(x,t), \quad (x,t) \in G = \{(x,t) \mid x \in (0,1),\ t \in (0,T]\}, \tag{1}$$

$$\begin{cases} u(0,t) = \mu_1(t) \\ u(1,t) = \mu_2(t), \end{cases} \quad t \in [0,T], \tag{2}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in [0,1]. \tag{3}$$

Воспользуемся сетками $\omega_{\tau h}$ и $\overline{\omega}_{\tau h}$, введенными в первом параграфе данной главы, на множествах G и $\overline{G}$ соответственно.

Поставим в соответствие задаче (1) – (3) семейство разностных схем (зависящих от параметра σ):

$$\frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau} = \sigma y_{\overline{x}x,i}^{n+1} + (1-\sigma)\, y_{\overline{x}x,i}^n + \varphi_i^n, \quad (x_i, t_n) \in \omega_{h\tau}, \tag{4}$$

где φ_i^n - некоторая аппроксимация правой части, необязательно точное значение функции $f(x,t)$ в соответствующем узле, $\sigma \in \mathbb{R}$ — весовой множитель.

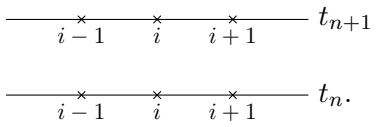
Замечание 1. *На практике обычно рассматривают параметр $\sigma \in [0,1]$, но данное условие не является обязательным.*

Добавим краевые и начальное условия:

$$\begin{cases} y_0^{n+1} = \mu_1(t_{n+1}) \\ y_N^{n+1} = \mu_2(t_{n+1}), \end{cases} \quad t_{n+1} \in \overline{\omega}_\tau, \tag{5}$$

$$y_i^0 = u_0(x_i), \quad x_i \in \overline{\omega}_h. \tag{6}$$

В рассматриваемой разностной схеме использован шеститочечный шаблон вида



При определенных значениях параметра σ получим разностные схемы, которые рассматривались в предыдущих параграфах:

1. При $\sigma = 0$, $\varphi_i^n = f_i^n$ получаем явную разностную схему.
2. При $\sigma = 1$, $\varphi_i^n = f(x_i, t_{n+1})$ получаем чисто неявную разностную схему.
3. При $\sigma = 0.5$, $\varphi_i^n = f(x_i, t_{n+\frac{1}{2}})$ получаем симметричную разностную схему.

Замечание. *Среди всех разностных схем семейства (4) явной является только схема с $\sigma = 0$, все остальные — неявные.*

Введем погрешность решения разностной схемы:

$$z_i^n = z(x_i, t_n) = y_i^n - u_i^n,$$

где $u_i^n = u(x_i, t_n)$, $(x_i, t_n) \in \overline{\omega}_{\tau h}$.

Выразив y_i^n из этого выражения и подставив его в уравнение (4), получим задачу относительно z_i^n:

$$\frac{z_i^{n+1} - z_i^n}{\tau} = \sigma z_{\overline{x}x,i}^{n+1} + (1-\sigma) z_{\overline{x}x,i}^n + \psi_i^n, \quad (x_i, t_n), (x_i, t_{n+1}) \in \omega_{\tau h}, \tag{7}$$

$$\begin{cases} z_0^{n+1} = 0 \\ z_N^{n+1} = 0, \end{cases} \quad t_{n+1} \in \overline{\omega}_\tau, \tag{8}$$

$$z_i^0 = 0, \quad x_i \in \overline{\omega}_h, \tag{9}$$

где ψ_i^n — погрешность аппроксимации на решении задачи (1)–(3):

$$\psi_i^n = \sigma u_{\overline{x}x,i}^{n+1} + (1-\sigma) u_{\overline{x}x,i}^n - \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} + \varphi_i^n. \tag{10}$$

Далее считаем, что $i = \overline{1, N-1}, n = \overline{1, M-1}$.

Пусть решение $u(x,t)$ задачи (1)–(3) имеет достаточную гладкость (функция $u(x,t)$ шесть раз дифференцируема по x и три раза дифференцируема по t). Обозначим $u_t' = \dot{u} = \frac{\partial u}{\partial t}$, $u_x' = u' = \frac{\partial u}{\partial x}$. Разложим значения $u_{i+1} = u(x_{i+1}, t)$ и $u_{i-1} = u(x_{i-1}, t)$ в ряд Тейлора в точке (x_i, t):

$$u_{i+1} = u_i + h u_i' + \frac{h^2}{2} u_i'' + \frac{h^3}{6} u_i''' + \frac{h^4}{24} u_i^{(4)} + \dots,$$

$$u_{i-1} = u_i - h u_i' + \frac{h^2}{2} u_i'' - \frac{h^3}{6} u_i''' + \frac{h^4}{24} u_i^{(4)} + \dots$$

Разложим в ряд Тейлора в точке $(x_i, t_{n+\frac{1}{2}})$ значения функции $u(x_i, t)$ на $(n+1)$-м и n-м слоях:

$$u_i^{n+1} = u_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\tau}{2} \dot{u}_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\tau^2}{8} \ddot{u}_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\tau^3}{48} \dddot{u}_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \dots,$$

$$u_i^n = u_i(t_{n+\frac{1}{2}}) - \frac{\tau}{2} \dot{u}_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\tau^2}{8} \ddot{u}_i(t_{n+\frac{1}{2}}) - \frac{\tau^3}{48} \dddot{u}_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \dots,$$

Воспользовавшись записанными выше разложениями, получим следующее выражение для второй дискретной производной:

$$u_{\overline{x}x,i} = \frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i}{h^2} = u_i'' + \frac{h^2}{12} u_i^{(4)} + \mathrm{O}\big(h^4\big). \tag{11}$$

Вычтем выражение для u_i^n из выражения для u_i^{n+1}, разделим результат на $\tau \neq 0$ и получим:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} = \dot{u}_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathrm{O}\big(\tau^2\big). \tag{12}$$

Подставим выражения (11) и (12) в уравнение (10):

$$\begin{aligned} \psi_i^n = \sigma \left(u_i'' + \frac{\tau}{2} \dot{u}_i'' + \frac{h^2}{12} u_i^{(4)} + \mathrm{O}\big(\tau h^2\big) \right) + \\ + (1-\sigma) \left(u_i'' - \frac{\tau}{2} \dot{u}_i'' + \frac{h^2}{12} u_i^{(4)} + \mathrm{O}\big(\tau h^2\big) \right) - \dot{u}_i + \varphi_i^n + \mathrm{O}\big(\tau^2 + h^4\big). \end{aligned} \tag{13}$$

Воспользуемся неравенством, связывающим среднее арифметическое и среднее геометрическое чисел τ^2 и h^4:

$$\tau h^2 \leqslant \frac{\tau^2 + h^4}{2}.$$

Следовательно, $\mathrm{O}\big(\tau h^2\big) = \mathrm{O}\big(\tau^2 + h^4\big)$.

Сгруппируем слагаемые в уравнении (13) следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi_i^n = u_i'' - \dot{u}_i + \varphi_i^n + \tau(\sigma - 0.5)\dot{u}_i'' + \frac{h^2}{12}u_i^{(4)} + \mathrm{O}\big(\tau^2 + h^4\big) = \\ = \underbrace{u_i'' - \dot{u}_i + f_i(t_{n+\frac{1}{2}})}_{0} + \varphi_i^n - f_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \tau(\sigma - 0.5)\dot{u}_i'' + \frac{h^2}{12}u_i^{(4)} + \mathrm{O}\big(\tau^2 + h^4\big). \end{aligned} \tag{14}$$

Для получения четвертого порядка по h для погрешности аппроксимации на решении необходимо исключить из уравнения (14) члены порядка h^2, то есть слагаемое $\dfrac{h^2}{12}u_i^{(4)}$. Рассмотрим уравнение (1):

$$u_i'' = \dot{u}_i - f_i.$$

Продифференцируем это равенство два раза по x и получим выражение для $u_i^{(4)}$:

$$u_i^{(4)} = \dot{u}_i'' - f_i''.$$

Подставим это выражение в равенство (14):

$$\psi_i^n = \varphi_i^n - f_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \left((\sigma - 0.5)\tau + \frac{h^2}{12}\right)\dot{u}_i'' - \frac{h^2}{12}f_i''(t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathrm{O}\big(\tau^2 + h^4\big).$$

Выберем σ так, чтобы коэффициент $\left((\sigma - 0.5)\tau + \dfrac{h^2}{12}\right)$ обратился в нуль:

$$\sigma_* = \frac{1}{2} - \frac{h^2}{12\tau}.$$

Теперь если положить

$$\sigma = \sigma_*, \quad \varphi_i^n = f_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{h^2}{12}f_i''(t_{n+\frac{1}{2}}),$$

то погрешность аппроксимации на решении задачи (1) – (3) будет иметь порядок $\mathrm{O}\big(\tau^2 + h^4\big)$.

Определение. *Разностная схема* (4) – (6) *при*

$$\sigma = \frac{1}{2} - \frac{h^2}{12\tau}, \quad \varphi_i^n = f_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{h^2}{12}f_i''(t_{n+\frac{1}{2}})$$

называется разностной схемой повышенного порядка точности.

Замечание. *Если*

$$\begin{aligned} &\sigma = 0, \quad \varphi_i^n = f_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathrm{O}\big(h^2\big), \ \textit{то}\ \psi_i^n = \mathrm{O}\big(\tau + h^2\big), \\ &\sigma = 1, \quad \varphi_i^n = f_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathrm{O}\big(h^2\big), \ \textit{то}\ \psi_i^n = \mathrm{O}\big(\tau + h^2\big), \\ &\sigma = 0.5, \quad \varphi_i^n = f_i(t_{n+\frac{1}{2}}) + \mathrm{O}\big(\tau^2 + h^2\big), \ \textit{то}\ \psi_i^n = \mathrm{O}\big(\tau^2 + h^2\big). \end{aligned}$$

При всех остальных σ погрешность аппроксимации ψ_i^n имеет порядок $\mathrm{O}\big(\tau + h^2\big)$.

§30 Разностная схема для уравнения Пуассона. Первая краевая задача

Рассмотрим первую краевую задачу для уравнения Пуассона:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} = f(x_1, x_2), \ (x_1, x_2) \in G, \\ u(x_1, x_2)|_\Gamma = \mu(x_1, x_2), \end{cases} \tag{1}$$

где G — прямоугольная область:

$$G = \{(x_1, x_2): \ x_1 \in \mathbb{R}, \ 0 < x_1 < l_1; \ x_2 \in \mathbb{R}, \ 0 < x_2 < l_2\},$$

а Γ — граница этой области.

Решением первой краевой задачи называется функция $u(x_1, x_2)$, удовлетворяющая системе уравнений (1), для которой выполнены следующие условия:

$$u(x_1, x_2) \in C\left(\overline{G}\right), \ \overline{G} = G \cup \Gamma, \quad u(x_1, x_2) \in C^2(G).$$

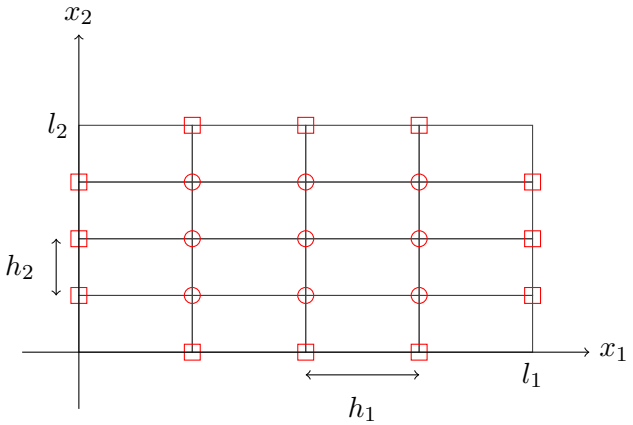
Введем на области G сетку с шагами $h_1 = \frac{l_1}{N_1}$ и $h_2 = \frac{l_2}{N_2}$, где $N_1, N_2 \in \mathbb{N}$ (узлы этой сетки обозначены на рисунке окружностями):

$$\omega_h = \left\{ \left(x_1^{(i)}, x_2^{(j)}\right) : x_1^{(i)} = ih_1, \ x_2^{(j)} = jh_2 \right\}, \quad i = \overline{1, (N_1 - 1)}, \ j = \overline{1, (N_2 - 1)}.$$

Добавим к этой сетке узлы на границе Γ (обозначены на рисунке квадратами) и обозначим

$$\Gamma_h = \{x_{0,j}\}_{j=1}^{N_2-1} \cup \{x_{N_1,j}\}_{j=1}^{N_2-1} \cup \{x_{i,0}\}_{i=1}^{N_1-1} \cup \{x_{i,N_2}\}_{i=1}^{N_1-1}.$$

Обозначим $\overline{\omega}_h = \omega_h \cup \Gamma_h$.



Пусть $y_{i,j}(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})$ — сеточная функция, определенная на сетке ω_h. Определим для этой функции разностные производные второго порядка по x_1 и по x_2 в узле $x_{ij} \in \omega_h$:

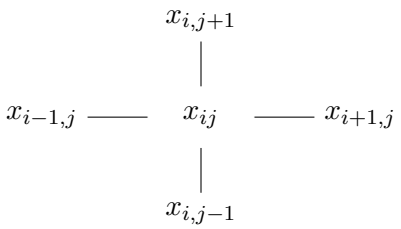
$$y_{\overline{x}_1 x_1, ij} = \frac{y_{i+1,j} - 2y_{i,j} + y_{i-1,j}}{h_1^2},$$

$$y_{\overline{x}_2 x_2, ij} = \frac{y_{i,j+1} - 2y_{i,j} + y_{i,j-1}}{h_2^2}$$

и поставим в соответствие задаче (1) разностную схему

$$\begin{cases} y_{\overline{x}_1 x_1, ij} + y_{\overline{x}_2 x_2, ij} = f_{ij}, \quad x_{ij} = \left(x_1^{(i)}, x_2^{(j)}\right) \in \omega_h, \\ y_{ij}|_{\Gamma_h} = \mu_{ij}, \end{cases} \tag{2}$$

где f_{ij}, μ_{ij} — значения функций $f(x_1, x_2)$ и $\mu(x_1, x_2)$ в узлах $x_{ij} \in \omega_h$. Этой разностной схеме соответствует пятиточечный шаблон типа «крест»:



Введем погрешность решения численной задачи:

$$z_{ij} = y_{ij} - u\left(x_1^{(i)}, x_2^{(j)}\right) = y_{ij} - u_{ij}.$$

Погрешность z_{ij} удовлетворяет следующей разностной схеме:

$$\begin{cases} z_{\overline{x}_1 x_1, ij} + z_{\overline{x}_2 x_2, ij} = -\psi_{ij}, \quad x_{ij} = \left(x_1^{(i)}, x_2^{(j)}\right) \in \omega_h, \\ z_{ij}|_{\Gamma_h} = 0. \end{cases}$$

где ψ_{ij} — погрешность аппроксимации на решении исходного уравнения (1):

$$\psi_{ij} = -f_{ij} + u_{\overline{x}_1 x_1, ij} + u_{\overline{x}_2 x_2, ij}.$$

Задача. *Показать, что справедлива следующая оценка погрешности аппроксимации на решении исходной задачи (1):*

$$\psi_{ij} = \mathrm{O}\big(h_1^2 + h_2^2\big).$$

§31 Разрешимость разностной задачи. Сходимость разностной задачи Дирихле

Продолжаем рассматривать задачу Дирихле

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} = f(x_1, x_2), \ (x_1, x_2) \in G, \\ u(x_1, x_2)|_{\Gamma} = \mu(x_1, x_2) \end{cases} \tag{1}$$

Запишем разностную схему (2) из §30 в виде:

$$\begin{cases} \dfrac{y_{i-1,j} - 2y_{ij} + y_{i+1,j}}{h_1^2} + \dfrac{y_{i,j-1} - 2y_{ij} + y_{i,j+1}}{h_2^2} = f_{ij}, \quad i = \overline{1, (N_1 - 1)}, \ j = \overline{1, (N_2 - 1)}, \\ y_{ij}|_{\Gamma_h} = \mu_{ij}. \end{cases}$$

Напомним, что f_{ij}, μ_{ij} — значения непрерывных функций $f(x_1, x_2)$ и $\mu(x_1, x_2)$ в узлах сетки ω_h. Разрешим эту схему относительно центрального узла x_{ij}:

$$\begin{cases} \left(\dfrac{2}{h_1^2} + \dfrac{2}{h_2^2}\right) y_{ij} = \dfrac{y_{i-1,j} + y_{i+1,j}}{h_1^2} + \dfrac{y_{i,j-1} + y_{i,j+1}}{h_2^2} - f_{ij}, \quad i = \overline{1, (N_1 - 1)}, \ j = \overline{1, (N_2 - 1)}, \\ y_{ij}|_{\Gamma_h} = \mu_{ij}. \end{cases} \tag{2}$$

Для того чтобы эта система имела решение при любых значениях функций $f(x_1, x_2)$ и $\mu(x_1, x_2)$, необходимо и достаточно, чтобы однородная система линейных уравнений имела только тривиальное решение.

Пусть H_{N_1-1,N_2-1} — пространство сеточных функций, определенных на сетке ω_h и обращающихся в нуль на границе Γ_h. Введем норму в этом пространстве:

$$\|v\|_C = \max_{\substack{1\leqslant i\leqslant N_1-1\\ 1\leqslant j\leqslant N_2-1}} |v_{ij}|,\ v \in H_{N_1-1,N_2-1}.$$

Теорема 1. *Однородная система линейных уравнений*

$$\begin{cases} \left(\dfrac{2}{h_1^2}+\dfrac{2}{h_2^2}\right) v_{ij} = \dfrac{v_{i-1,j}+v_{i+1,j}}{h_1^2} + \dfrac{v_{i,j-1}+v_{i,j+1}}{h_2^2}, \quad i=\overline{1,(N_1-1)},\ j=\overline{1,(N_2-1)}, \\ v_{ij}|_{\Gamma_h} = 0 \end{cases}$$

имеет единственное решение, и оно является тривиальным:

$$v_{ij} = 0,\ x_{ij} \in \overline{\omega}_h.$$

Доказательство. Будем проводить доказательство методом от противного. Пусть существует узел $x_{ij} \in \omega_h$, в котором достигается ненулевое значение функции: $v_{ij} \neq 0$. Тогда найдется узел x_{i_0,j_0}, для которого выполнены два условия:

A) $v_{i_0,j_0} = \|v\|_C = \max\limits_{\substack{1\leqslant i\leqslant N_1-1\\ 1\leqslant j\leqslant N_2-1}} |v_{ij}|$.

B) Хотя бы для одного из оставшихся узлов (i_0, j_0) шаблона выполнено

$$|v_{ij}| < |v_{i_0,j_0}|, \quad i \in \{i_0-1,\, i_0+1\},\ j \in \{j_0-1,\, j_0+1\}.$$

Такой узел существует, поскольку в противном случае значения во всех узлах совпадут и будут равны нулю, так как функция обращается в нуль на границе Γ_h.

Рассмотрим уравнение системы в узле x_{i_0,j_0}:

$$\left(\frac{2}{h_1^2}+\frac{2}{h_2^2}\right) v_{i_0,j_0} = \frac{v_{i_0-1,j_0}+v_{i_0+1,j_0}}{h_1^2} + \frac{v_{i_0,j_0-1}+v_{i_0,j_0+1}}{h_2^2}$$

и оценим по модулю:

$$\left(\frac{2}{h_1^2}+\frac{2}{h_2^2}\right) |v_{i_0,j_0}| \leqslant \frac{|v_{i_0-1,j_0}|+|v_{i_0+1,j_0}|}{h_1^2} + \frac{|v_{i_0,j_0-1}|+|v_{i_0,j_0+1}|}{h_2^2}.$$

Значения функции v из правой части неравенства не превосходят $|v_{i_0,j_0}|$ в силу условия A) и, кроме того, в силу условия B) хотя бы одно из значений функции строго меньше v_{i_0,j_0}. Таким образом, справедлива оценка

$$\left(\frac{2}{h_1^2}+\frac{2}{h_2^2}\right) |v_{i_0,j_0}| < \left(\frac{2}{h_1^2}+\frac{2}{h_2^2}\right) \|v\|_C.$$

Заменив $|v_{i_0,j_0}|$ на $\|v\|_C$, получим противоречие: $\|v\|_C < \|v\|_C$. Следовательно, предположение о существовании хотя бы одного ненулевого значения функции v неверно, и $v \equiv 0$. $\square$

Следствие. *Разностная задача*

$$\begin{cases} y_{\overline{x}_1 x_1,ij} + y_{\overline{x}_2 x_2,ij} = f_{ij}, \quad x_{ij} = \left(x_1^{(i)}, x_2^{(j)}\right) \in \omega_h, \\ y_{ij}|_{\Gamma_h} = \mu_{ij} \end{cases}$$

имеет единственное решение при любых значениях f_{ij} и μ_{ij}, $x_{ij} \in \omega_h$.

Введем разностный оператор

$$L_h v_{ij} = \left(\frac{2}{h_1^2} + \frac{2}{h_2^2}\right) v_{ij} - \frac{v_{i-1,j} + v_{i+1,j}}{h_1^2} - \frac{v_{i,j-1} + v_{i,j+1}}{h_2^2}, \quad x_{ij} \in \omega_h$$

и запишем разностную схему для погрешности $z_{ij} = y_{ij} - u_{ij}$ решения задачи (2) с помощью этого оператора:

$$\begin{cases} L_h z_{ij} = \psi_{ij}, \ x_{ij} \in \omega_h, \\ z_{ij}|_{\Gamma_h} = 0, \end{cases} \tag{3}$$

где ψ_{ij} погрешность аппроксимации на решении задачи (1)

$$\psi_{ij} = -f_{ij} + u_{\overline{x}_1 x_1, ij} + u_{\overline{x}_2 x_2, ij}.$$

Рассмотрим вопрос сходимости разностной схемы. Сходимость означает наличие оценки

$$\|z\|_C \leqslant M\left(h_1^2 + h_2^2\right),$$

где M — константа, не зависящая от h_1 и h_2. Такая оценка означает, что разностная схема имеет второй порядок точности по h_1 и h_2.

Лемма (принцип максимума)**.** *Пусть для сеточной функции v, определенной на сетке ω_h, выполнены неравенства*

$$v_{ij} \geqslant 0, \ x_{ij} \in \Gamma_h,$$

$$L_h v_{ij} \geqslant 0, \ x_{ij} \in \omega_h.$$

Тогда справедливо следующее неравенство:

$$v_{ij} \geqslant 0, \ x_{ij} \in \overline{\omega}_h.$$

Доказательство. Проведем доказательство методом от противного. Пусть существует узел $x_{ij} \in \omega_h$, в котором функция v отрицательна: $v_{ij} < 0$. Тогда найдется узел x_{i_0,j_0}, для которого выполнены два условия:

A) $v_{i_0,j_0} = \min\limits_{\substack{1 \leqslant i \leqslant N_1 - 1 \\ 1 \leqslant j \leqslant N_2 - 1}} v_{ij}$.

B) Хотя бы для одного из оставшихся узлов шаблона выполнено условие

$$v_{ij} > v_{i_0,j_0}, \quad i \in \{i_0 - 1, i_0 + 1\}, \ j \in \{j_0 - 1, j_0 + 1\}.$$

Такой узел существует, так как в противном случае $v \equiv 0$ и лемма доказана. Рассмотрим действие оператора L_h на значение функции v_{i_0,j_0}:

$$L_h v_{i_0,j_0} = \frac{v_{i_0,j_0} - v_{i_0-1,j_0}}{h_1^2} + \frac{v_{i_0,j_0} - v_{i_0+1,j_0}}{h_1^2} + \frac{v_{i_0,j_0} - v_{i_0,j_0-1}}{h_2^2} + \frac{v_{i_0,j_0} - v_{i_0,j_0+1}}{h_2^2}.$$

Все слагаемые в правой части этого равенства неположительны, и, кроме того, хотя бы одно из слагаемых в силу условия B) отрицательно. Таким образом,

$$L_h v_{i_0,j_0} < 0.$$

Это неравенство противоречит условию леммы, следовательно, предположение о существовании хотя бы одного узла, в котором функция v отрицательна, неверно. □

Следствие. *Рассмотрим две разностные задачи*

$$L_h y_{ij} = \varphi_{ij},\ x_{ij} \in \omega_h,\ y_{ij}|_{\Gamma_h} \text{— заданы},$$

$$L_h Y_{ij} = \Phi_{ij},\ x_{ij} \in \omega_h,\ Y_{ij}|_{\Gamma_h} \text{— заданы}.$$

Если выполнены неравенства

$$|y_{ij}| \leqslant Y_{ij},\ x_{ij} \in \Gamma_h,$$

$$|\varphi_{ij}| \leqslant \Phi_{ij},\ x_{ij} \in \omega_h,$$

то справедливо следующее неравенство:

$$|y_{ij}| \leqslant Y_{ij},\ x_{ij} \in \overline{\omega}_h.$$

Доказательство. Рассмотрим сеточные функции v и w, определенные на сетке $\overline{\omega}_h$:

$$v_{ij} = Y_{ij} - y_{ij},$$

$$w_{ij} = Y_{ij} + y_{ij}.$$

По условию: $v_{ij}|_{\Gamma_h} \geqslant 0,\ \omega_{ij}|_{\Gamma_h} \geqslant 0$ и $|\varphi_{ij}| \leqslant \Phi_{ij}$. Тогда получим :

$$L_h v_{ij} = \Phi_{ij} - \varphi_{ij} \geqslant 0,\ x_{ij} \in \omega_h,\ v_{ij}|_{\Gamma_h} \geqslant 0,$$

$$v_{ij} \geqslant 0,\ x_{ij} \in \overline{\omega}_h.$$

$$L_h w_{ij} \geqslant 0,\ x_{ij} \in \omega_h,\ w_{ij}|_{\Gamma_h} \geqslant 0,$$

$$w_{ij} \geqslant 0,\ x_{ij} \in \overline{\omega}_h.$$

Из неотрицательности функций v и w следует искомая оценка для модуля функции y. □

Для дальнейшего потребуется сеточная функция $Y_{ij} = K(l_1^2 + l_2^2 - (x_1^{(i)})^2 - (x_2^{(j)})^2)$, где l_1, l_2 — длины сторон прямоугольника G, $K > 0$ — постоянная, которая будет выбрана ниже. Ясно, что $Y_{ij} \geqslant 0$ во всех точках сетки $\overline{\omega}_h$, в том числе и на границе.

Задача. *Показать, что Y_{ij} удовлетворяет разностной задаче*

$$L_h Y_{ij} = 4K, \quad x_{ij} \in \omega_h, Y_{ij} \geqslant 0, x_{ij} \in \Gamma_h. \tag{4}$$

Разностную задачу (2) запишем в виде:

$$L_h y_{ij} = -f_{ij}, \quad x_{ij} \in \omega_h, y_{ij} = \mu_{ij}, x_{i,j} \in \Gamma_h \tag{5}$$

Исследуем сходимость решения разностной задачи (5) к решению исходной задачи (1).

Теорема 2. *Пусть решение задачи (1) четыре раза непрерывно дифференцируемо в $\overline{G}$. Тогда решение разностной задачи (5) сходится к решению исходной задачи в сеточной норме C, и имеет место оценка*

$$\left\| y_{ij} - u\left(x_1^{(i)}, x_2^{(j)}\right) \right\|_C \leqslant M\left(h_1^2 + h_2^2\right),$$

где $M > 0$ — константа, не зависящая от h_1 и h_2.

Доказательство. Рассмотрим две задачи: задачу для погрешности разностной схемы (3) и для мажоранты Y_{ij} (4). Положим $4K = \|\psi\|_C$. Тогда задачи (3), (4) будут удовлетворять всем условиям доказанного выше следствия. Поэтому во всех точках сетки $\overline{\omega}_h$ выполняется неравенство

$$|z_{ij}| \leqslant Y_{ij}$$

Из вида функции Y_{ij}, которая называется мажорантой, следует, что

$$0 \leqslant Y_{ij} \leqslant K(l_1^2 + l_2^2) = \frac{l_1^2 + l_2^2}{4}\|\psi\|_C.$$

Тем самым доказана оценка

$$\|Z\|_C \leqslant \frac{l_1^2 + l_2^2}{4}\|\psi\|_C.$$

Так как $\|\psi\|_C \leqslant M_1(h_1^2 + h_2^2)$, где $M_1 > 0$ и не зависит от h_1 и h_2, то окончательно имеем

$$\|y_{ij} - u(x_1^{(i)}, x_2^{(j)})\|_C \leqslant M(h_1^2 + h_2^2),$$

где $M = M_1\frac{l_1^2+l_2^2}{4}$ — положительная постоянная, не зависящая от h_1 и h_2. □

§32 Методы решения разностной задачи Дирихле

Рассмотрим разностную задачу Дирихле:

$$\begin{cases} \left(\dfrac{2}{h_1^2} + \dfrac{2}{h_2^2}\right) y_{ij} = \dfrac{y_{i-1,j} + y_{i+1,j}}{h_1^2} + \dfrac{y_{i,j-1} + y_{i,j+1}}{h_2^2} - f_{ij}, \quad i = \overline{1,(N_1-1)},\ j = \overline{1,(N_2-1)}, \\ y_{ij}|_{\Gamma_h} = \mu_{ij}. \end{cases} \tag{1}$$

Для нахождения решения этой разностной схемы нужно решить СЛАУ с матрицей порядка $(N_1-1)\times(N_2-1)$. Заметим, что матрица системы разрежена, то есть среди элементов этой матрицы содержится большое число нулей. Очевидно, что использование классического метода Гаусса для решения такой системы не будет оптимальным. Существуют значительно более эффективные как прямые, так и итерационные методы решения системы (1) (см. [4]). Рассмотрим несколько итерационных методов, решающих поставленную задачу: методы Якоби, Зейделя и попеременно-треугольный итерационный метод.

Метод Якоби

Итерационный процесс задается схемой

$$\begin{cases} \left(\dfrac{2}{h_1^2} + \dfrac{2}{h_2^2}\right) y_{ij}^{(s+1)} = \dfrac{y_{i-1,j}^{(s)} + y_{i+1,j}^{(s)}}{h_1^2} + \dfrac{y_{i,j-1}^{(s)} + y_{i,j+1}^{(s)}}{h_2^2} - f_{ij}, \quad i = \overline{1,(N_1-1)},\ j = \overline{1,(N_2-1)}, \\ y_{ij}^{(s+1)}\Big|_{\Gamma_h} = \mu_{ij}, \end{cases}$$

где $s \in \mathbb{Z}_+$, $y_{ij}^{(0)}$ — задано.

В методе Зейделя итерации определяются по правилу:

$$\left(\frac{2}{h_1^2} + \frac{2}{h_2^2}\right) y_{ij}^{(s+1)} = \frac{1}{h_1^2}\left(y_{i-1,j}^{(s+1)} + y_{i+1,j}^{(s)}\right) + \frac{1}{h_2^2}\left(y_{i,j+1}^{(s)} + y_{i,j-1}^{(s+1)}\right) - f_{ij}, i = \overline{1,N_1-1}, j = \overline{1,N_2-1}, s = 0,1,2,\ldots$$

Несмотря на то, что метод Зейделя формально является неявным, нетрудно предложить алгоритм вычисления решения на $s+1$-й итерации по явным формулам. Порядок счета здесь следующий. Сначала находятся значения $y_{1,j}^{(s+1)}, j = \overline{1, N_2-1}$, используя $y_{ij}^{(s)}$ и граничные значения μ_{ij}. Затем, используя $y_{1,j}^{(s+1)}$, находят $y_{2,j}^{(s+1)}, j = \overline{1, N_2-1}$ и т.д. Это означает, что вычисление значений $y_{i,j}^{(s+1)}$ на новой итерации осуществляется последовательно от левого нижнего угла (точки $x_{1,1}$) до правого верхнего угла (точки x_{N_1-1,N_2-1}).

Эффективным методом решения системы разностных уравнений (1) является попеременно-треугольный итерационный метод. Запишем систему (1) в матричной форме

$$Ay = \varphi$$

с симметричной положительно определенной матрицей A и представим матрицу A в виде суммы

$$A = R_1 + R_2,$$

где R_1 — нижняя треугольная, а R_2 — верхняя треугольная матрица. На главных диагоналях R_1 и R_2 стоят элементы $0.5a_{ii}$, где a_{ii} — элементы A, стоящие на главной диагонали.

Попеременно-треугольный итерационный метод имеет вид

$$(E+\omega R_1)(E+\omega R_2)\frac{y^{(s+1)}-y^{(s)}}{\tau} + Ay^{(s)} = \varphi,$$

где E — единичная матрица, ω и τ — числовые параметры. Метод сходится при $\omega > \frac{\tau}{4} > 0$. В случае системы (1) матрицы R_1 и R_2 определяются соотношениями

$$(R_1 y)_{ij} = \frac{y_{ij}-y_{i-1,j}}{h_1^2} + \frac{y_{ij}-y_{i,j-1}}{h_2^2},$$

$$(R_2 y)_{ij} = \frac{y_{ij}-y_{i+1,j}}{h_1^2} + \frac{y_{ij}-y_{i,j+1}}{h_2^2}.$$

Алгоритм нахождения $y^{(s+1)}$ сводится к последовательному решению двух уравнений

$$(E+\omega R_1)W^{(s)} = \varphi - Ay^{(s)},$$

$$(E+\omega R_2)\frac{y^{(s+1)}-y^{(s)}}{\tau} = W^{(s)},$$

каждое из которых решается путем обращения треугольных матриц.

Замечание. *В параграфе 8 главы 1 было показано, что попеременно-треугольный итерационный метод решения систем линейных алгебраических уравнений требует для достижения заданной точности $\varepsilon > 0$, числа итераций $\boldsymbol{n}_{\mathbf{o}}(\varepsilon)$ на порядок меньше, чем методы Якоби, Зейделя, простой итерации. В силу этого он широко применяется для решения практических задач.*

§33 Основные понятия теории разностных схем: аппроксимация, устойчивость, сходимость

Пусть дана исходная дифференциальная задача. Не конкретизируя вид этой задачи, запишем ее в форме операторного уравнения.

$$L(u(x)) = f(x), \quad x \in G, \tag{1}$$

где G – область изменения независимых переменных x (аргумент x может быть многомерным), $f(x)$ — заданная функция, L – линейный дифференциальный оператор. Предполагается, что начальные и граничные условия учитываются видом оператора L и правой частью $f(x)$. Будем считать, что исходная задача корректно поставлена. Это означает, что ее решение существует, оно единственно и непрерывно зависит от правой части $f(x)$.

Для построения разностной схемы, прежде всего в области G вводится разностная сетка G_h — конечное множество точек, принадлежащих G. Точки $x \in G_h$ называются узлами сетки. Параметр h (шаг сетки) характеризует плотность заполнения области G точками G_h. Будем считать h вектором, для которого определена норма $|h|$. Фактически имеют дело с последовательностью сеток, число узлов которых $N = N(h)$ увеличивается с уменьшением $|h|$. Обычно число узлов $N = N(h)$ сетки G_h неограниченно возрастает при $|h| \to 0$. Конкретные примеры разностных сеток были приведены в предыдущих параграфах.

После того, как введена сетка G_h, функции непрерывного аргумента x, определенные для $x \in G$, заменяют сеточными функциями, т.е. функциями, определенными только в точках сетки G_h. Правую часть $f(x)$ уравнения (1) заменяют приближенно некоторой сеточной функцией $\varphi_h(x), x \in G_h$, а дифференциальный оператор L — линейным разностным оператором L_h. В результате вместо дифференциального уравнения (1) получают систему разностных уравнений

$$L_h y_h(x) = \varphi_h(x), \quad x \in G_h, \tag{2}$$

которая называется разностной схемой.

Для изучения устойчивости и сходимости разностной задачи (2) нужно ввести пространство сеточных функций. Будем считать, что решение $u(x)$ задачи (1) принадлежнит линейному нормированному пространству B_0, а решение $y_h(x)$ разностной схемы (2) принадлежит конечномерному линейному нормированному пространству B_h. Нормы в пространствах B_0 и B_h будем обозначать, соответственно, через $\|\cdot\|_0$ и $\|\cdot\|_h$.

Существенным при введении конкретных норм является вопрос о связи этих норм в пространствах B_0 и B_h.

Введем оператор проектирования $P_h : B_0 \to B_h$, т.е. линейный оператор, сопоставляющий каждому элементу $u \in B_0$ некоторый элемент $u_h \in B_h$. Будем обозначать через u_h проекцию элемента u

$$P_h u = u_h, u \in B_0, u_h \in B_h. \tag{3}$$

Будем предполагать в дальнейшем, что нормы $\|\cdot\|_0$ и $\|\cdot\|_h$ согласованы в том смысле, что для любого элемента $u \in B_0$ существует

$$\lim_{|h|\to 0} \|u_h\|_h = \|u\|_0. \tag{4}$$

Пример. Пусть G — отрезок $0 \leqslant x \leqslant 1$ и

$$G_h = \{x_i = ih, \quad i = \overline{0, N}, \quad hN = 1\}.$$

В качестве B_0 возьмем пространство непрерывных функций $u(x)$ с нормой

$$\|u\|_0 = \max_{x\in G} |u(x)|.$$

Оператор проектирования P_h можно определить правилом

$$(P_h u)(x_i) = u(x_i), x_i \in G_h,$$

т.е. $u_h(x_i) = u(x_i), x_i \in G_h$ — в качестве проекции функции $u(x)$ берется ее значение в данной точке сетки. Пространство B_h представляет собой линейное пространство векторов $y = (y_1, y_2, \ldots, y_N)$ с нормой

$$\|y\|_h = \max_{0\leqslant i\leqslant N} |y_i|.$$

Эти две нормы согласованы.

Приведем пример других согласованных норм.

Пример. В пространстве B_h введем норму по правилу

$$\|y\|_h = \left(\sum_{i=0}^{N} |y_i|^2 h \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Эта норма согласована с нормой

$$\|u\|_0 = \left(\int_0^1 |u|^2(x)dx \right)^{\frac{1}{2}},$$

заданной в пространстве B_0.

Приведем пример несогласованных норм.

Пример. Так норма

$$\|y\|_h = \left(\sum_{i=0}^{N} |y_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

не является согласованной ни с какой нормой в пространстве B_0, так как, например, при $u(x) \equiv 1, x \in G$ имеем

$$\|u_h\|_h = \left(\sum_{i=0}^{N} 1 \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt[2]{N+1} \to \infty,$$

при $h \to 0$ $(Nh = 1)$.

В качестве оператора проектирования можно взять оператор среднего значения, а именно

$$(P_h u)(x_i) = \frac{1}{h} \int_{x_i - 0.5h}^{x_i + 0.5h} u(x)dx, i = \overline{1, N-1},$$

$$(P_h u)(x_0) = \frac{1}{0.5h} \int_0^{0.5h} u(x)dx, (P_h(u))(x_N) = \frac{1}{0.5h} \int_{1-0.5h}^{1} u(x)dx.$$

Введем основные понятия теории разностных схем.

Пусть $u(x)$ — решение исходной задачи (1), $u_h(x) = P_h u(x)$ — проекция этого решения на пространство сеточных функций B_h, y_h — решение разностной задачи (2).

Определение. *Сеточная функция*

$$z_h(x) = y_h(x) - u_h(x), x \in G_h,$$

называется погрешностью разностной схемы (2).

Подставим выражение $y_h(x) = z_h(x) + u_h(x)$ в уравнение (2) и, используя линейность оператора L_h, получим

$$L_h z_h(x) + L_h u_h(x) = \varphi_h(x).$$

Отсюда следует

$$L_h z_h(x) = \psi_h(x), x \in G_h, \tag{5}$$

где

$$\psi_h(x) = \varphi_h(x) - L_h u_h(x). \tag{6}$$

Определение. *Сеточная функция $\psi_h(x)$, определенная по формуле (6), называется погрешностью аппроксимации (или невязкой) разностной задачи (2) на решении исходной дифференциальной задачи (1).*

Таким образом, для погрешности разностной схемы $z_h(x)$ получаем задачу (5) той же структуры, что и разностная задача (2), но с правой частью, представляющей собой погрешность аппроксимации на решении.

Спроектируем исходное уравнение (1) на пространство B_h, т.е. запишем сеточное уравнение

$$P_h(Lu) = P_h f.$$

Представим погрешность аппроксимации $\psi_h(x)$ в виде суммы

$$\psi_h(x) = \psi_h^{(1)}(x) + \psi_h^{(2)}(x),$$

где $\psi_h^{(1)}(x) = P_h(Lu)(x) - L_h u_h(x), \psi_h^{(2)}(x) = \varphi_h(x) - f_h(x), f_h(x) = P_h f$. Функция $\psi_h^{(1)}(x)$ называется погрешностью аппроксимации дифференциального оператора L разностным оператором L_h. Функция $\psi_h^{(2)}(x)$ называется погрешностью аппроксимации правой части.

Определение. *Говорят, что разностная схема (2) аппроксимирует исходную задачу (1), если $\|\psi_h\|_h \to 0$ при $|h| \to 0$.*

Определение. *Разностная схема (2) имеет k-й порядок аппроксимации, если существуют положительные константы M_1 и k не зависящие от h и такие, что при всех достаточно малых h выполняется оценка*

$$\|\psi_h\|_h \leqslant M_1 |h|^k.$$

Введем понятие корректности разностной схемы.

Определение. *Разностная схема (2) называется корректной, если при всех достаточно малых h:*

1. *ее решение $y_h(x) \in B_h$ существует и единственно при любых правых частях $\psi_h \in B_h$,*
2. *существует постоянная $M_2 > 0$, не зависящая от h и такая, что при любых правых частях φ_h для решения задачи (2) справедлива оценка:*

$$\|y_h\|_h \leqslant M_2 \|\varphi_h\|_h. \tag{7}$$

Существенным отличием от определения корректности дифференциальной задачи является условие независимости константы M_2 от шагов сетки. Требование 1) в определении корректности означает существование оператора L_h^{-1}, обратного к оператору L_h, а требование 2) — равномерную по h ограниченность оператора L_h^{-1}.

Свойство разностной схемы, выраженное неравенством (7), означает непрерывную и равномерную по h зависимость ее решения от правой части. Это свойство называют устойчивостью разностной схемы.

Определение. *Решение разностной задачи (2) сходится к решению исходной задачи (1), (или, более коротко, разностная схема сходится), если*

$$\lim_{h \to 0} \|z_h\|_h = \lim_{h \to 0} \|y_h - u_h\|_h = 0.$$

Определение. *Говорят, что разностная схема имеет k-й порядок точности, если существует постоянная $M_3 > 0$, не зависящая от h и постоянная $k > 0$ такие, что*

$$\|z_h\|_h \leqslant M_3|h|^k.$$

Покажем, что из аппроксимации и устойчивости разностной схемы следует ее сходимость.

Теорема 1. *(Филиппова). Предположим, что исходная задача (1) поставлена корректно. Пусть разностная схема (2) аппроксимирует исходную задачу (1) и является корректной. Тогда решение разностной задачи (2) сходится к решению исходной задачи (1), причем порядок точности разностной схемы совпадает с порядком аппроксимации.*

Доказательство. Рассмотрим задачу для погрешности (5). Так как уравнение (5) отличается от уравнения (2) только правой частью, из требования устойчивости следует, что для $z_h(x)$ справедлива оценка

$$\|z_h\|_h \leqslant M_2\|\psi_h\|_h.$$

Правая часть этого неравенства стремится к нулю при $|h| \to 0$, а так как M_2 не зависит от h и, по условию теоремы, разностная схема аппроксимирует исходную задачу. Следовательно $\|z_h\|_h \to 0$ при $|h| \to 0$, т.е. схема сходится.

Так как схема имеет k-й порядок аппроксимации, то

$$\|\psi_h\|_h \leqslant M_1|h|^k$$

и $\|z_h\|_h \leqslant M_3|h|^k, M_3 = M_1M_2$, что означает, что схема (2) имеет k-й порядок точности. □

Доказанная теорема позволяет разделить исследование сходимости разностной схемы на два этапа: исследование погрешности аппроксимации на решении и получение оценок вида (7), т.е. исследование устойчивости. Как правило, второй этап более трудный, чем первый.

Замечание. *При доказательстве теоремы Филиппова условие согласованности норм (4) не использовалось. Это условие нужно для того, чтобы гарантировать единственность предельной функции. Теорема утверждает, что последовательность y_h сходится к точному решению $u \in B_0$ в том смысле, что $\|y_h - u_h\|_h \to 0$, при $|h| \to 0$. Но из теоремы не следует, что не может существовать такая функция $v \in B_0$ (не являющаяся решение задачи (1)), для которой также выполнено условие $\|y_h - v_h\|_h \to 0$, при $|h| \to 0$.*

Требование согласованности норм (4) устраняет эту неоднозначность. В самом деле,

$$\|u_h - v_h\|_h = \|(y_h - v_h) + (u_h - y_h)\|_h \leqslant \|y_h - v_h\|_h + \|u_h - y_h\|_h. \tag{8}$$

Так как $\|y_h - v_h\|_h \to 0, \|u_h - y_h\|_h \to 0$, то из (8) следует, что $\|u_h - v_h\|_h \to 0$, при $|h| \to 0$.

Но тогда из (4) получим

$$\lim_{h\to 0} \|u_h - v_h\|_h = \|u - v\|_0 = 0,$$

и, следовательно, $u \equiv v$.

Глава V

Методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений и систем ОДУ

§34 Постановка задачи Коши и примеры численных методов решения задачи Коши

В этой главе рассматривается задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{d\boldsymbol{u}}{dt} = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t)), \quad t > 0, \\ \boldsymbol{u}(0) = u_0, \end{cases} \tag{1}$$

где $\boldsymbol{u}(t) = (u_1(t), u_2(t), \ldots, u_m(t))^T$, $\boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t)) = (f_1(t, \boldsymbol{u}(t)), \ldots, f_m(t, \boldsymbol{u}(t))^T$.

Напомним теорему, гарантирующую существование и единственность решения задачи (1) в окрестности начальных данных.

Обозначим

$$|\boldsymbol{u}(t)| = \sqrt{u_1^2(t) + u_2^2(t) + \ldots + u_m^2(t)}.$$

Предположим, что функция $\boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t))$ непрерывна в параллелепипеде

$$R = \{|t| \leqslant a, |\boldsymbol{u}(t) - \boldsymbol{u}(0)| \leqslant b,\ a, b \in \mathbb{R}\}$$

и удовлетворяет в R условию Липшица по второму аргументу, то есть

$$\|\boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}) - \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{v})\| \leqslant L\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}\|,$$

для всех $(t, \boldsymbol{u})$, $(t, \boldsymbol{v}) \in \mathbb{R}$.

При выполнении этих условий существует единственное решение $\boldsymbol{u}(t)$ задачи (1), определенное и непрерывное на некотором отрезке.

Доказательство этой теоремы основано на методе Пикара, который состоит в том, что дифференциальную задачу (1) заменяют эквивалентным интегральным уравнением

$$\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{u}(0) + \int\limits_0^t \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{u}(x))dx$$

и для этого интегрального уравнения доказывается сходимость последовательных приближений $\boldsymbol{u}_n(t)$, построенных по правилу

$$\boldsymbol{u}_{n+1}(t) = \boldsymbol{u}(0) + \int_0^t \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{u}_n(x))dx. \tag{2}$$

Если функция $\boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u})$ такова, что интеграл в правой части уравнения (2) легко вычисляется, то метод Пикара, безусловно, можно использовать для отыскания приближенного решения задачи (1). Однако найти этот интеграл в явном виде, как правило, не удается.

В дальнейшем при построении и исследовании численных методов будем предполагать, что искомое решение задачи (1) $\boldsymbol{u}(t)$ существует, единственно и обладает требуемыми свойствами гладкости.

В настоящее время наибольшее распространение получили две группы численных методов решения задачи Коши:

1. Методы Рунге–Кутта;
2. Многошаговые разностные методы, наиболее известными из которых являются методы Адамса.

Приведем примеры таких методов, предполагая для простоты изложения, что система (1) состоит всего из одного уравнения. Рассмотрим следующую задачу Коши:

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = f(t, u(t)), \quad t > 0, \\ u(0) = u_0, \end{cases} \tag{3}$$

Введем сетку по времени с постоянным шагом $\tau > 0$, то есть множество точек

$$\omega_\tau = \{t_n = n\tau,\ n \in \mathbb{Z}_+\},$$

и обозначим $u_n = u(t_n)$, $f_n = f(t_n, u_n)$. В дальнейшем точное решение задачи (1) будем обозначать буквой u, а приближенное решение — буквой y.

Пример 1. Пожалуй, наиболее простым методом решения задачи (3) является разностная схема (метод) Эйлера. Несмотря на всю простоту схемы, метод Эйлера часто используется на практике.

Метод Эйлера представляет собой разностное уравнение:

$$\begin{cases} \dfrac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = f(t_n, y_n), \quad t_n \in w_\tau \\ y_0 = u_0, \quad n \in \mathbb{Z}_+. \end{cases} \tag{4}$$

Эта схема является явной, так как значение численного решения в каждой следующей точке $t_{n+1}, n \in \mathbb{Z}_+$ находится по явной формуле:

$$y_{n+1} = y_n + \tau f_n, \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Введем погрешность разностной схемы (4):

$$z_n = y_n - u_n, n \in \mathbb{Z}_+.$$

Если мы получим оценку $\|z_n\| \leqslant M\tau$, где константа M не зависит от τ, то будем говорить, что решение разностной схемы Эйлера сходится к решению исходного уравнения (3) с первым порядком точности по τ.

По определению, погрешностью аппроксимации разностной схемы (4) на решении исходной задачи (3) (или невязкой) называется сеточная функция:

$$\psi_n = -\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} + f(t_n, u_n). \tag{5}$$

Разложим u_{n+1} в ряд Тейлора в узле t_n:

$$u_{n+1} = u_n + \tau u'_n + \mathrm{O}(\tau^2).$$

Тогда

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = u'_n + \mathrm{O}(\tau).$$

Подставляя последнее выражение в равенство (5) получим:

$$\psi_n = -u'_n + f(t_n, u_n) + \mathrm{O}(\tau).$$

Воспользовавшись тем, что $-u'_n + f(t_n, u_n) = 0$, так как выполнено исходное уравнение (3), окончательно получаем:

$$\psi_n = \mathrm{O}(\tau).$$

Эта оценка означает, что разностная схема (4) аппроксимирует исходную задачу с первым порядком по τ. В дальнейшем покажем, что рассмотренная разностная схема будет сходиться к решению задачи (3) с первым порядком по τ.

Пример 2. Рассмотрим теперь двухэтапную разностную схему Рунге–Кутта (схему «предиктор–корректор»). В данной разностной схеме вводятся дополнительные точки, так называемые полуцелые слои:

$$t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + 0.5\tau, n \in \mathbb{Z}_+.$$

Нахождение численного решения данной разностной схемы в каждой следующей точке t_{n+1} производится в два этапа:

$$t_n \longrightarrow t_{n+\frac{1}{2}} \longrightarrow t_{n+1}.$$

Выполним первый этап («предиктор») по схеме Эйлера:

$$\frac{y_{n+\frac{1}{2}} - y_n}{0.5\tau} = f(t_n, y_n). \tag{6}$$

Рассмотрим второй этап («корректор»):

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = f(t_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}), \tag{7}$$

где $y_0 = u_0$, $n \in \mathbb{Z}_+$. Из уравнения (7) с учетом (6) следует

$$y_{n+1} = y_n + \tau f(t_{n+\frac{1}{2}}, y_n + 0.5\tau f(t_n, y_n)). \tag{8}$$

Далее будет показано, что эта двухэтапная разностная схема имеет второй порядок точности по τ.

Пример 3. Двухшаговая разностная схема.

В приведенных выше примерах были рассмотрены одношаговые методы, в которых для вычисления нового значения y_{n+1} было использовано одно предыдущее значение y_n. При этом в методе Рунге–Кутта значения функции $f(t, u)$ вычислялись не только в точках

сетки ω_τ, но и во внутренних точках отрезка $[t_n, t_{n+1}]$. Многошаговые разностные методы позволяют вычислить y_{n+1}, используя значения решения $y_n, y_{n-1}, \ldots, y_{n-m}$ и правой части $f_n, f_{n-1}, \ldots, f_{n-m}$ в нескольких предыдущих точках $t_n, t_{n-1}, \ldots, t_{n-m}$ сетки ω_τ. Значения правой части в промежуточных точках не используются.

Приведем пример многошагового метода. Для аппроксимации уравнения (1) в точке $t = t_{n+1}$ будем использовать три точки сетки, $t_{n-1} = (n-1)\tau$, $t_n = n\tau$, $t_{n+1} = (n+1)\tau$, а правую часть уравнения будем вычислять только в точках t_{n-1}, t_n.

Итак, рассмотрим разностное уравнение

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = \sigma_1 f_{n-1} + \sigma_2 f_n \tag{9}$$

и подберем коэффициенты σ_1 и σ_2 так, чтобы погрешность аппроксимации на решении (1)

$$\psi_{n+1} = -\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} + \sigma_1 f_{n-1} + \sigma_2 f_n \tag{10}$$

была величиной $\mathrm{O}(\tau^2)$. Разложим функции, входящие в выражение для ψ_{n+1} по формуле Тейлора в окрестности точки t_{n+1}:

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} = u'_{n+1} - \frac{\tau}{2} u''_{n+1} + \mathrm{O}(\tau^2),$$

$$\begin{aligned} f(t_n, u_n) = f(t_{n+1} - \tau, u(t_{n+1} - \tau)) = f(t_{n+1} - \tau, u_{n+1} - \tau \frac{\partial u_n}{\partial t} + \mathrm{O}(\tau^2)) = \\ = f_{n+1} - \tau \frac{\partial f_{n+1}}{\partial t} - \tau \frac{\partial u_n}{\partial t} \frac{\partial f_{n+1}}{\partial u} + \mathrm{O}(\tau^2) = f_{n+1} - \tau \frac{\partial f_{n+1}}{\partial t} - \tau f_{n+1} \frac{\partial f_{n+1}}{\partial u} + \mathrm{O}(\tau^2) = \\ = f_{n+1} - \tau u''_{n+1} + \mathrm{O}(\tau^2), \end{aligned}$$

$$f(t_{n-1}, u_{n-1}) = f_{n+1} - 2\tau u''_{n+1} + \mathrm{O}(\tau^2).$$

Подставляя эти разложения в выражение для погрешности аппроксимации (9), получим

$$\psi_{n+1} = -u'_{n+1} + (\sigma_1 + \sigma_2) f_{n+1} + \tau u''_{n+1}(0.5 - \sigma_2 - 2\sigma_1) + \mathrm{O}(\tau^2).$$

Для того, чтобы ψ_{n+1} была величиной $\mathrm{O}(\tau^2)$, достаточно потребовать

$$\sigma_1 + \sigma_2 = 1, \quad 0.5 - \sigma_2 - 2\sigma_1 = 0.$$

Второе равенство будет выполнено если, например, положить $\sigma_1 = -0.5$, $\sigma_2 = 1.5$. Таким образом, приходим к следующей двухшаговой разностной схеме, имеющей второй порядок погрешности аппроксимации

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = \frac{3}{2} f_n - \frac{1}{2} f_{n-1}, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{11}$$

Чтобы начать счет по схеме (11), надо знать два начальных значения, y_0 и y_1. Ясно, что $y_0 = u(0)$.

Величину y_1 можно вычислить с помощью какого-либо одношагового метода. Можно также использовать разложение

$$u(\tau) = u(0) + \tau \frac{\partial u(0)}{\partial t} + \ldots = u(0) + \tau f(0, u(0)) + \ldots$$

и положить $y_1 = u_0 + \tau f_0$.

Оценка погрешности общего двухэтапного метода Рунге–Кутта.

Рассмотрим общий вид двухэтапного метода Рунге–Кутта для уравнения (3):

$$\begin{cases} \dfrac{y_{n+1}-y_n}{\tau} = \sigma_1 K_1 + \sigma_2 K_2, \quad n \in \mathbb{Z}_+ \\ y_0 = u_0, \\ K_1 = f(t_n, y_n), \quad K_2 = f(t_n + a_2\tau, y_n + b_{21}\tau f(t_n, y_n)), \end{cases} \tag{12}$$

где $\sigma_1, \sigma_2, a_2, b_{21} \in \mathbb{R}$ — некоторые числа, от выбора которых зависит как погрешность аппроксимации, так и точность численного решения.

Подставим значения K_1 и K_2 в первое уравнение системы (12):

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau} = \sigma_1 f(t_n, y_n) + \sigma_2 f(t_n + a_2\tau, y_n + b_{21}\tau f(t_n, y_n)).$$

Рассмотрим погрешность аппроксимации разностной схемы (12) на решении задачи (3):

$$\psi_n = -\frac{u_{n+1}-u_n}{\tau} + \sigma_1 f(t_n, u_n) + \sigma_2 f\left(t_n + a_2\tau, u_n + b_{21}\tau f(t_n, u_n)\right). \tag{13}$$

Разложим u_{n+1} в ряд Тейлора в окрестности точки t_n:

$$\frac{u_{n+1}-u_n}{\tau} = u'_n + \frac{\tau}{2}u''_n + \mathrm{O}(\tau^2).$$

Далее разложим $f(t_n + a_2\tau, u_n + b_{21}\tau f_n)$ в окрестности точки (t_n, u_n):

$$f(t_n + a_2\tau, u_n + b_{21}\tau f(t_n, u_n)) = f(t_n, u_n) + a_2\tau\frac{\partial f_n}{\partial t} + b_{21}\tau f_n\frac{\partial f_n}{\partial u} + \mathrm{O}(\tau^2).$$

Заметим, что в силу уравнения (3)

$$u'' = \frac{d}{dt}\left(\frac{du}{dt}\right) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} + f\frac{\partial f}{\partial u}.$$

Тогда погрешность аппроксимации ψ_n принимает вид:

$$\begin{aligned} \psi_n = &- u'_n - 0.5\tau\left(\frac{\partial f_n}{\partial t} + f_n\frac{\partial f_n}{\partial u}\right) + \mathrm{O}(\tau^2) + \sigma_1 f(t_n, u_n) + \\ &+\sigma_2\left(f(t_n, u_n) + \tau a_2\frac{\partial f_n}{\partial t} + \tau b_{21} f_n\frac{\partial f_n}{\partial u}\right) + \mathrm{O}(\tau^2). \end{aligned}$$

Сгруппируем слагаемые следующим образом:

$$\psi_n = -u'_n + (\sigma_1 + \sigma_2)f(t_n, u_n) + \tau\left((a_2\sigma_2 - 0.5)\frac{\partial f_n}{\partial t} + (b_{21}\sigma_2 - 0.5)f_n\frac{\partial f_n}{\partial u}\right) + \mathrm{O}(\tau^2).$$

Чтобы получить оценку погрешности аппроксимации ψ_n со вторым порядком по τ, необходимо избавиться от слагаемых, содержащих τ в первой степени. Для этого потребуем выполнение следующих условий:

1. $\sigma_1 + \sigma_2 = 1$ (это условие называется условием аппроксимации).
2. $\sigma_2 a_2 = \sigma_2 b_{21} = 0.5$.

Тогда погрешность аппроксимации этого метода имеет второй порядок малости по τ:

$$\psi_n = \mathrm{O}(\tau^2).$$

Замечание. *В случае выполнения только первого условия погрешность аппроксимации имеет первый порядок по* τ.

В записи общего метода Рунге–Кутта используется несколько параметров, что обеспечивает широту класса описываемых этим методом разностных схем. Однако в двухэтапном методе Рунге–Кутта не имеет смысла пользоваться двумя параметрами σ_1 и σ_2, так наилучшая оценка погрешности метода достигается при $\sigma_1 + \sigma_2 = 1$, поэтому, как правило, в двухэтапном методе Рунге–Кутта выбирают один параметр $\sigma = \sigma_2$, тогда $\sigma_1 = 1 - \sigma$. Если положить $a = a_2 = b_{12}$, то двухэтапный метод Рунге–Кутта запишется, как однопараметрическое по σ семейство разностных схем вида:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = (1 - \sigma)K_1 + \sigma K_2,$$

где $K_1 = f(t_n, y_n), \quad K_2 = f(t_n + a\tau, y_n + a\tau f(t_n, y_n))$.

Пример. Рассмотрим примеры разностных схем, являющихся частными случаями общего двухэтапного метода Рунге–Кутта.

1. При $\sigma = 1, \quad a = a_2 = 0.5, \quad b = b_{21} = 0.5$ мы получим схему Рунге–Кутта «предиктор–корректор» (8), которую мы уже рассматривали. Погрешность этой схемы равна $\mathrm{O}(\tau^2)$.

2. Если положить $\sigma = 0.5, \quad a = 1, \quad b = 1$, то мы получим симметричную разностную схему:
$$\begin{cases} \dfrac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = 0.5\left(f(t_n, y_n) + f(t_n + \tau, y_n + \tau f_n)\right), \quad n \in \mathbb{Z}_+ \\ y_0 = u_0. \end{cases} \tag{14}$$
Эта разностная схема является очень эффективной, имеет второй порядок точности по τ и часто используется на практике.

Оценка точности на примере двухэтапного метода Рунге–Кутта.

Выпишем еще раз разностную схему, описывающую общий двухэтапный метод Рунге–Кутта:

$$\begin{cases} \dfrac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = (1 - \sigma)f(t_n, y_n) + \sigma f(t_n + a\tau, y_n + a\tau f(t_n, y_n)), \quad n \in \mathbb{Z}_+ \\ y_0 = u_0. \end{cases} \tag{15}$$

Введем погрешность разностной схемы (15):

$$z_n = y_n - u_n, n \in \mathbb{Z}.$$

Подставим выражение для погрешности в разностную схему (15) и получим задачу для нахождения функции z_n:

$$\begin{cases} \dfrac{z_{n+1} - z_n}{\tau} = (1 - \sigma)f_n + \sigma f(t_n + a\tau, y_n + a\tau f_n) - \dfrac{u_{n+1} - u_n}{\tau}, \quad n \in \mathbb{Z}_+ \\ z_0 = 0, \end{cases} \tag{16}$$

где $f_n = f(t_n, y_n), y_n = z_n + u_n$.

Для доказательства сходимости решения разностной схемы (15) к решению исходной задачи Коши (3) достаточно показать, что

$$\lim_{n \to \infty} |z_n| = 0.$$

Покажем, что $|z_n| \leqslant M|\psi_n|$, $n \in \mathbb{Z}_+$, где константа M не зависит от шага τ, ψ_n — погрешность аппроксимации на решении исходной задачи (3):

$$\psi_n = -\frac{u_{n+1}-u_n}{\tau} + (1-\sigma)f(t_n,u_n) + \sigma f(t_n + a\tau, u_n + a\tau f(t_n,u_n)).$$

Перепишем задачу (16) в эквивалентном виде, сформировав погрешность аппроксимации путем добавления недостающих слагаемых:

$$\begin{aligned}\frac{z_{n+1}-z_n}{\tau} = -\frac{u_{n+1}-u_n}{\tau} + (1-\sigma)f(t_n,u_n) + \sigma f(t_n + a\tau, u_n + a\sigma f(t_n,u_n)) + \\ +(1-\sigma)(f(t_n,y_n) - f(t_n,u_n)) + \\ +\sigma\big(f(t_n + a\tau, y_n + a\tau f(t_n,y_n)) - f(t_n + a\tau, u_n + a\tau f(t_n,u_n))\big) = \\ = \psi_n + \varphi_n^{(1)} + \varphi_n^{(2)},\end{aligned} \tag{17}$$

где

$$\varphi_n^{(1)} = (1-\sigma)(f(t_n,y_n) - f(t_n,u_n)),$$
$$\varphi_n^{(2)} = \sigma\big(f(t_n + a\tau, y_n + a\tau f(t_n,y_n)) - f(t_n + a\tau, u_n + a\tau f(t_n,u_n))\big).$$

Пусть функция $f(t,u)$ удовлетворяет условию Липшица по второму аргументу с константой $L > 0$:

$$|f(t,v) - f(t,u)| \leqslant L|u-v|, \quad (t,u),(t,v) \in G.$$

Замечание. *Требование липшицевости функции $f(t,u)$ естественно, так как является условием того, что решение исходной задачи (3) существует и единственно.*

Как правило, на практике выбирают $0 \leqslant \sigma \leqslant 1$, $a \geqslant 0$. Воспользуемся этими условиями и оценим выражения $\varphi_n^{(1)}$ и $\varphi_n^{(2)}$:

$$|\varphi_n^{(1)}| = (1-\sigma)|f(t_n,y_n) - f(t_n,u_n)| \leqslant (1-\sigma)L|y_n - u_n| = (1-\sigma)L|z_n|,$$

$$\begin{aligned}|\varphi_n^{(2)}| \leqslant \sigma L|y_n + a\tau f(t_n,y_n) - u_n - a\tau f(t_n,u_n)| \leqslant \\ \leqslant \sigma L\big(|y_n - u_n| + a\tau|f(t_n,y_n) - f(t_n,u_n)|\big) \leqslant \sigma L(|z_n| + a\tau L|z_n|) = \sigma L(1 + a\tau L)|z_n|.\end{aligned}$$

Пусть $\sigma a \leqslant 0.5$. Оценим сумму $|\varphi_n^{(1)}| + |\varphi_n^{(2)}|$:

$$|\varphi_n^{(1)}| + |\varphi_n^{(2)}| \leqslant (1-\sigma)L|z_n| + \sigma L(1 + a\tau L)|z_n| = L|z_n| + \sigma a\tau L^2|z_n| \leqslant L(1 + 0.5\tau L)|z_n|.$$

Приступим к получению оценки точности. Запишем равенство (17) в виде $z_{n+1} = z_n + \tau\psi_n + \tau\varphi_n^{(1)} + \tau\varphi_n^{(2)}$. Далее, очевидно, справедлива оценка:

$$|z_{n+1}| \leqslant |z_n| + \tau|\psi_n| + \tau(|\varphi_n^{(1)}| + |\varphi_n^{(2)}|) \leqslant (1 + \tau L + 0.5\tau^2L^2)|z_n| + \tau|\psi_n|.$$

Заметим, что слагаемые в сумме $(1+\tau L+0.5\tau^2L^2)$ являются первыми членами разложения функции $e^{\tau L}$ по формуле Тейлора по переменной τ в окрестности нуля. Следовательно,

$$(1 + \tau L + 0.5\tau^2L^2) \leqslant e^{\tau L}.$$

Тогда

$$|z_{n+1}| \leqslant e^{\tau L}|z_n| + \tau|\psi_n|.$$

Введем обозначение $\rho = e^{\tau L}$. Тогда

$$|z_{n+1}| \leqslant \rho|z_n| + \tau|\psi_n|, \quad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Раскроем полученное рекуррентное соотношение:

$$|z_{n+1}| \leqslant \rho^{n+1}|z_0| + \tau \sum_{j=0}^{n} \rho^{n-j}|\psi_j|.$$

Так как $z_0 = 0$, то получаем:

$$|z_{n+1}| \leqslant \max_{0 \leqslant j \leqslant n} |\psi_j| t_n e^{t_n L}.$$

Учтем, что $t_n \leqslant T$, тогда:

$$|z_{n+1}| \leqslant M \max_{0 \leqslant j \leqslant n} |\psi_j|,$$

где константа $M = Te^{TL} > 0$ не зависит от τ. Заметим, что

$$\lim_{\tau \to 0} |z_{n+1}| = 0,$$

так как $|\psi_j| \leqslant M_1(\tau^2)$ по доказанному выше. Тогда при достаточно малых τ получаем:

$$|z_{n+1}| = \mathrm{O}(\tau^2).$$

Это означает, что рассматриваемый общий двухэтапный метод Рунге–Кутта при выполнении соответствующих условий имеет квадратичную точность по τ, совпадающую с оценкой погрешности аппроксимации на решении исходного уравнения (3).

§35 Общий m-этапный метод Рунге–Кутта

Рассмотрим задачу Коши для нелинейного обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка:

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = f(t, u(t)), \quad t > 0 \\ u(0) = u_0, \end{cases} \tag{1}$$

где функции $u(t)$ и $f(t, u)$ обладают достаточной гладкостью в соответствующих областях. Считаем, решение $u(t)$ существует и единственно.

Введем равномерную сетку в области $t \geqslant 0$ с шагом $\tau > 0$:

$$\omega_\tau = \{t_n = n\tau,\ \tau > 0,\ n \in \mathbb{Z}_+\}.$$

Рассмотрим сеточную функцию $y_n = y(t_n)$, заданную на сетке ω_τ. Пусть значения этой функции в узлах сетки y_n приближают значения $u_n = u(t_n)$. Обозначим $f_n = f(t_n, y_n)$.

Общая идея m-этапного метода Рунге–Кутта заключается в том, что для вычисления значения приближенного решения в каждой следующей точке t_{n+1} вводятся m дополнительных этапов. Промежуточные значения на каждом шаге $n \in \mathbb{Z}_+$ вычисляются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_n, y_n), \\ K_2 &= f(t_n + a_2\tau, y_n + b_{21}\tau K_1), \\ K_3 &= f(t_n + a_3\tau, y_n + b_{31}\tau K_1 + b_{32}\tau K_2), \\ &\dots \\ K_m &= f(t_n + a_m\tau, y_n + b_{m1}\tau K_1 + b_{m2}\tau K_2 + \ldots + b_{mm-1}\tau K_{m-1}). \end{aligned}$$

При этом разностная схема для исходной задачи (1) имеет вид

$$\begin{cases} \dfrac{y_{n+1}-y_n}{\tau} = \sigma_1 K_1 + \sigma_2 K_2 + \ldots + \sigma_m K_m \\ y_0 = u_0, \quad n \in \mathbb{Z}_+, \end{cases} \tag{2}$$

где $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_m \in \mathbb{R}$.

Будем также считать, что выполнено следующее условие аппроксимации, без которого рассмотрение метода не имеет смысла:

$$\sum_{i=1}^{m} \sigma_i = 1.$$

Замечание. *Заметим, что формулы m-этапного метода Рунге–Кутта достаточно громоздки. Это является одной из причин того, что на практике редко используются методы Рунге–Кутта для $m > 4$.*

Приведем примеры трех- и четырех- этапных методов Рунге–Кутта, имеющих третий и четвертый порядок точности соответственно.

Пример 1. $m = 3$:

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau} = \frac{1}{6}(K_1 + 4K_2 + K_3),$$

где

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_n, y_n), \\ K_2 &= f(t_n + 0.5\tau, y_n + 0.5\tau K_1), \\ K_3 &= f(t_n + \tau, y_n - \tau K_1 + 2\tau K_2). \end{aligned}$$

Данная схема имеет третий порядок точности по τ.

Пример 2. $m = 4$:

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau} = \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4),$$

где

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_n, y_n), \\ K_2 &= f(t_n + 0.5\tau, y_n + 0.5\tau K_1), \\ K_3 &= f(t_n + 0.5\tau, y_n + 0.5\tau K_2), \\ K_4 &= f(t_n + \tau, y_n + \tau K_3). \end{aligned}$$

Данная схема имеет четвертый порядок точности по τ.

§36 Многошаговые разностные методы

Рассмотрим задачу Коши для нелинейного обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка:

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = f(t, u(t)), \quad t > 0, \\ u(0) = u_0, \end{cases} \tag{1}$$

где функции $u(t)$ и $f(t, u)$ обладают достаточной гладкостью. Считаем, что решение $u(t)$ существует и единственно.

Введем равномерную сетку в области $t \geqslant 0$ с шагом $\tau > 0$:

$$\omega_\tau = \{t_n = n\tau,\ \tau > 0,\ n \in \mathbb{Z}_+\}.$$

Рассмотрим сеточную функцию $y_n = y(t_n)$, заданную на сетке ω_τ. Пусть значения этой функции в узлах сетки y_n приближают значения $u_n = u(t_n)$. Обозначим $f_n = f(t_n, y_n)$.

Определение. *Линейным m-шаговым разностным методом решения задачи (1) называется разностная схема вида*

$$\sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{\tau} y_{n-k} = \sum_{k=0}^{m} b_k f_{n-k}, \tag{2}$$

где $m \in \mathbb{N}$, $\tau > 0$ – шаг сетки ω_τ, $a_k, b_k \in \mathbb{R}$, $k = \overline{0,m}$, причем $a_0 \neq 0, b_m \neq 0$.

Замечание. *Уравнение (2) следует рассматривать как рекуррентное соотношение, выражающее новое значение $y_n = y(t_n)$ через найденные ранее значения $y_{n-1}, y_{n-2}, \ldots, y_{n-m}$. Уравнение (2) определено для $n = m, m+1, \ldots$ и требует для начала расчета задания m начальных значений $y_0, y_1, \ldots, y_{m-1}$. Значение $y_0 = u(0)$ определяется исходной задачей (1), а величины $y_1, \ldots, y_{m-1}$ можно вычислить с помощью других методов, например, с помощью рассмотренного выше метода Рунге–Кутта. В дальнейшем будем предполагать, что величины $y_0, y_1, \ldots, y_{m-1}$ уже заданы.*

Если в разностной схеме (2) $b_0 = 0$, то рассматриваемый метод называется явным, и искомое значение y_n выражается явным образом через предыдущие:

$$\frac{a_0}{\tau} y_n = \sum_{k=1}^{m} b_k f_{n-k} - \sum_{k=1}^{m} \frac{a_k}{\tau} y_{n-k}.$$

Если $b_0 \neq 0$, то метод называется неявным, и для нахождения y_n приходится решать нелинейное уравнение

$$\frac{a_0}{\tau} y_n - b_0 f(t_n, y_n) = F(y_{n-1}, \ldots, y_{n-m}),$$

где

$$F(y_{n-1}, \ldots, y_{n-m}) = \sum_{k=1}^{m} (b_k f_{n-k} - \frac{a_k}{\tau} y_{n-k}).$$

Обычно это уравнение решают итерационным методом Ньютона, выбирая начальное приближение равным y_{n-1} (этот метод мы рассматривали в §23 главы §20).

Заметим, что коэффициенты уравнения (2) определены с точностью до множителя. Для определенности будем считать, что выполнено условие

$$\sum_{k=0}^{m} b_k = 1.$$

Это означает, что правая часть разностного уравнения (2) аппроксимирует правую часть дифференциального уравнения (1).

Определение. *Погрешностью аппроксимации разностной схемы (2) на решении исходной задачи (1) называется сеточная функция*

$$\psi_n = -\sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{\tau} u_{n-k} + \sum_{k=0}^{m} b_k f(t_{n-k}, u_{n-k}), \tag{3}$$

заданная на сетке ω_τ, где $u_n = u(t_n)$ — решение исходной задачи (1).

Выясним вопрос о порядке погрешности аппроксимации при $\tau \to 0$ в зависимости от выбора коэффициентов $a_k, b_k,\ k = \overline{0,m}$. Будем предполагать в дальнейшем, что все рассматриваемые функции обладают необходимой гладкостью. Разложим u_{n-k} по формуле Тейлора в точке t_n:

$$u_{n-k} = u(t_n - k\tau) = \sum_{l=0}^{p} \frac{(-k\tau)^l}{l!} u^{(l)}(t_n) + \mathrm{O}\big(\tau^{p+1}\big).$$

Разложим правую часть исходного дифференциального уравнения в этой же точке:

$$f_{n-k} = f(t_n - k\tau) = u'(n - k\tau) = \sum_{l=0}^{p-1} \frac{(-k\tau)^l}{l!} u^{(l+1)}(t_n) + \mathrm{O}\big(\tau^{p}\big).$$

Подставим эти разложения в выражение (3) и получим

$$\psi_n = -\sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{\tau} \sum_{l=0}^{p} \frac{(-k\tau)^l}{l!} u^{(l)}(t_n) + \sum_{k=0}^{m} b_k \sum_{l=0}^{p-1} \frac{(-k\tau)^l}{l!} u^{(l+1)}(t_n) + \mathrm{O}\big(\tau^{p}\big).$$

Передвинем на единицу индекс суммирования l во второй группе слагаемых, а также домножим и поделим на l выражение, стоящее под знаком суммирования:

$$\psi_n = -\sum_{l=0}^{p} \sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{\tau} \frac{(-k\tau)^l}{l!} u^{(l)}(t_n) + \sum_{l=1}^{p} \sum_{k=0}^{m} b_k l \frac{(-k\tau)^{l-1}}{l(l-1)!} u^{(l)}(t_n) + \mathrm{O}\big(\tau^{p}\big).$$

Объединив две суммы под общим знаком суммирования (для этого необходимо выписать отдельно нулевое слагаемое первой суммы), получим

$$\psi_n = -\sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{\tau} u(t_n) + \sum_{l=1}^{p} \left(-\sum_{k=1}^{m} \frac{a_k}{\tau} \frac{(-k\tau)^l}{l!} u^{(l)}(t_n) + \sum_{k=1}^{m} l b_k \frac{(-k\tau)^{l-1}}{l!} u^{(l)}(t_n) \right) + \mathrm{O}\big(\tau^{p}\big).$$

После очевидных преобразований получаем:

$$\psi_n = -\sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{\tau} u(t_n) + \sum_{l=1}^{p} \sum_{k=0}^{m} \frac{(-k\tau)^{l-1}}{l!} u^{(l)}(t_n)(k a_k + l b_k) + \mathrm{O}\big(\tau^{p}\big).$$

Отсюда видно, что погрешность аппроксимации (3) имеет порядок p, если выполнены следующие условия:

$$\sum_{k=0}^{m} a_k = 0,$$

$$\sum_{k=0}^{m} k^{l-1}(k a_k + l b_k) = 0, \quad l = 1, 2, \ldots, p.$$

Вместе с условием нормировки

$$\sum_{k=0}^{m} b_k = 1$$

эти условия образуют систему из $(p+2)$-х линейных алгебраических уравнений относительно $2(m+1)$ неизвестных $a_0, a_1, \ldots, a_m, b_0, b_1, \ldots, b_m$.

Полученную систему можно несколько упросить. Рассмотрим последние условия при $l = 1$:

$$\sum_{k=0}^{m}(ka_k + b_k) = 0,$$

$$\sum_{k=0}^{m} ka_k = -\sum_{k=0}^{m} b_k = -1,$$

то есть

$$\sum_{k=0}^{m} ka_k = -1.$$

Окончательно получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \sum\limits_{k=1}^{m} ka_k = -1, \\ \sum\limits_{k=0}^{m} k^{l-1}(ka_k + lb_k) = 0, \quad l = \overline{2,p}, \end{cases} \tag{4}$$

в которой коэффициенты a_0, b_0 вычисляются по формулам

$$a_0 = -\sum_{k=1}^{m} a_k, \quad b_0 = 1 - \sum_{k=1}^{m} b_k.$$

Таким образом, мы уменьшили число уравнений в системе до p и число неизвестных до $2m$. Чтобы система не была переопределенной (в таких системах число уравнений больше числа неизвестных) необходимо выполнение условия $p \leqslant 2m$.

Таким образом наибольший возможный порядок аппроксимации неявных m-шаговых разностных методов равен $2m$, явных — $(2m-1)$, так как в явных методах $b_0 = 0$, и число неизвестных в системе (4) меньше на единицу по сравнению с системой, записанной для неявного метода.

Замечание 1. *Если убрать последние n уравнений системы (4), $n = \overline{1,(p-1)}$, то получим условия, обеспечивающие порядок погрешность аппроксимации $\mathrm{O}\big(\tau^{p-n}\big)$.*

Замечание 2. *В практике вычислений наибольшее распространение получили методы Адамса, которые представляют собой частный случай многошаговых методов (2), когда производная $u'(t)$ в исходном уравнении аппроксимируется по двум крайним точкам t_{n-1} и t_n, то есть $a_0 = 1,\ a_1 = -1,\ a_k = 0,\ k = \overline{2,m}$:*

$$\frac{y_n - y_{n-1}}{\tau} = \sum_{k=0}^{m} b_k f_{n-k}.$$

Замечание 3. *Разностные схемы вида (2), обладающие наивысшими порядками аппроксимации на решении исходного уравнения, неустойчивы и не могут быть использованы на практике. Максимальный порядок аппроксимации устойчивого неявного m-шагового метода не превосходит $(m+1)$, если m нечетно, и не превосходит $(m+2)$, если m четно. Порядок аппроксимации устойчивых явных схем не превосходит m. Подробнее понятие устойчивости m-шагового разностного метода мы рассмотрим в следующем параграфе.*

В завершение рассмотрим достоинства и недостатки многошаговых разностных методов по сравнению с методом Рунге–Кутта.

Достоинства:

1. Формулы многошаговых методов значительно проще.
2. Многошаговые методы позволяют достигать большей точности.

Недостатки:

1. В многошаговых методах необходимо хранить в памяти большее число элементов — значения нескольких предыдущих шагов вместо одного.
2. Многошаговые методы требуют наличия «разгонного этапа», то есть значений нескольких первых шагов, которые нельзя вычислить по многошаговым формулам. Как мы уже упоминали, эти значения обычно вычисляют с помощью метода Рунге–Кутта.

§37 Понятие устойчивости разностного метода

Известно, что на практике вычисления проводятся приближенно, то есть при задании исходных данных и в процессе самих вычислений допускаются погрешности. Численный метод называется устойчивым, если погрешности, допущенные на каком-то этапе вычислений, не оказывают существенного влияния на результат. Разумеется, такого описательного определения недостаточно для исследования устойчивости конкретных алгоритмов. Существуют математически строгие и более узкие определения устойчивости, некоторые из них будут приведены в следующих параграфах. Сейчас ограничимся тем, что рассмотрим несколько характерных примеров.

Явление неустойчивости часто возникает в процессе решения разностных уравнений. Так, если решать уравнение

$$y_{n+1} = qy_n,$$

где $n \in \mathbb{Z}_+$, $q \in \mathbb{C}$ — некоторая константа, а y_0 — задано, то при $|q| > 1$ погрешность будет возрастать при переходе от шага n к шагу $(n+1)$. Действительно, пусть вместо y_n в результате ошибок округления получено значение

$$\widetilde{y}_n = y_n + \delta_n.$$

Тогда при вычислении y_{n+1} получим значение

$$\widetilde{y}_{n+1} = q\widetilde{y}_n = qy_n + q\delta_n = y_{n+1} + q\delta_n,$$

то есть погрешность $\delta_{n+1} = q\delta_n$ на новом шаге увеличится. В этом случае метод неустойчив, и при проведении расчетов на ЭВМ при достаточно большом n может произойти переполнение разрядной сетки. Если же $|q| \leqslant 1$, то погрешность, допущенная на каком-либо шаге вычислений, не будет возрастать на следующих шагах.

Процесс численного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений также может оказаться неустойчивым. Поясним это на примере простого уравнения

$$\begin{cases} \dfrac{du(t)}{dt} + \lambda u(t) = 0, \quad \lambda > 0,\ t > 0, \\ u(0) = u_0. \end{cases} \tag{1}$$

Его решение $u(t) = u_0 e^{-\lambda t}$ монотонно убывает с ростом t. В частности, для решения этого уравнения справедливо следующее неравенство:

$$|u(t)| \leqslant |u_0|, \quad t > 0, \tag{2}$$

означающее непрерывную зависимость (иначе говоря, устойчивость) решения уравнения (1) от начальных данных.

Естественно требовать, чтобы и для разностных схем, аппроксимирующих уравнение (1), выполнялись оценки, аналогичные (2). Однако такие оценки для разностных схем выполняются далеко не всегда.

Пример 1. Рассмотрим, например, явную разностную схему Эйлера для решения задачи (1):

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau}+\lambda y_n=0, \lambda>0,$$

где $\tau>0$, $n\in\mathbb{Z}_+$, $y_0=u_0$, и перепишем ее в виде

$$y_{n+1}=qy_n, \quad n\in\mathbb{Z}_+,$$

где $q=1-\tau\lambda$.
Тогда оценка

$$|y_{n+1}|\leqslant|y_n|, \quad n\in\mathbb{Z}_+$$

будет выполняться тогда и только тогда, когда $|q|\leqslant 1$, то есть при $\tau\leqslant\dfrac{2}{\lambda}$. В этом случае схема называется условно устойчивой, а само неравенство $\tau\leqslant\dfrac{2}{\lambda}$ называется условием устойчивости. Если оно нарушено, то $|q|>1$, и погрешности, допущенные в процессе вычислений, будут возрастать с ростом n. Таким образом, требование устойчивости явной схемы Эйлера вынуждает проводить счет с достаточно малым шагом по времени. Например, если $\lambda=2000$, то $\tau<0.001$ и чтобы провести счет до $t=1$ необходимо сделать 1000 шагов по времени.

Пример 2. Приведем пример абсолютно устойчивой разностной схемы. Для уравнения

$$u'(t)=f(t,u(t)), \tag{3}$$

рассмотрим неявную схему Эйлера

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau}=f(t_{n+1},y_{n+1}),$$

где $n\in\mathbb{Z}_+$, $y_0=u_0$.

Эта схема называется неявной потому, что для нахождения y_{n+1} приходится решать уравнение

$$y_{n+1}-\tau f(t_{n+1},y_{n+1})=y_n.$$

Это уравнение можно решить, например, с помощью метода Ньютона, описанного в §23 главы §20. Для уравнения (1) неявная схема Эйлера принимает вид

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau}+\lambda y_{n+1}=0, \lambda>0,$$

откуда получаем

$$y_{n+1}=qy_n, \quad q=(1+\tau\lambda)^{-1},$$

причем $|q|<1$ при любых $\tau>0$.

Приведенные выше примеры являются типичными, потому что, как правило, явные схемы устойчивы лишь при достаточно малых шагах τ, а среди неявных схем существуют абсолютно устойчивые.

Исследуем на устойчивость двухшаговый разностный метод, построенный в примере 3

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau}=\frac{3}{2}f_n-\frac{1}{2}f_{n-1}. \tag{4}$$

Метод является явным, поэтому следует ожидать, что он будет условно устойчивым. Покажем, что это действительно так. В применении к модельному уравнению

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \lambda u(t) = 0, \quad \lambda > 0 \text{ (постоянная)}, \ t > 0, \ u(0) = u_0 \tag{5}$$

метод (4) принимает вид

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} + \lambda(\frac{3}{2} f_n - \frac{1}{2} f_{n-1}) = 0, \quad n = 1, 2, \ldots,$$

т.е. представляет собой разностное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами

$$y_{n+1} + a y_n + b y_{n-1} = 0, \tag{6}$$

где

$$a = -1 + \frac{3}{2}\mu, \ b = -0.5\mu, \ \mu = \tau\lambda.$$

Разностное уравнение (6) имеет частные решения вида

$$y_n = q_1^n, \ y_n = q_2^n, \quad n = 0, 1, \ldots, \tag{7}$$

где q_1, q_2 — корни характеристического уравнения

$$q^2 + aq + b = 0. \tag{8}$$

По аналогии с разностным уравнением первого порядка $y_{n+1} = q y_n$ считают, что разностное уравнение второго порядка (6) устойчиво, если оба корня не превосходят по модулю единицу, т.е. $|q_{1,2}| \le 1$.

При этом условии линейно независимые частные решения (7) ограничены при $n \to \infty$. Если же хотя бы один из корней, q_1 или q_2 уравнения (8) больше единицы по модулю, то разностное уравнение (6) считается неустойчивым.

При оценке корней уравнения (8) не обязательно искать их в явном виде. Здесь может оказаться удобной следующая

Лемма 1. *Оба корня уравнения (6) с действительными коэффициентами a, b лежат внутри или на границе единичного круга $|q| \le 1$ тогда и только тогда, когда выполнены условия*

$$1 + a + b \ge 0, \ 1 - a + b \ge 0, \ b \le 1. \tag{9}$$

Доказательство. Рассмотрим сначала случай, когда $a^2 - 4b < 0$, т.е. уравнение (8) имеет два комплексно сопряжённых корня. Тогда $|q_1| = |q_2|$, $q_1 q_2 = b$ и $|q_1|^2 = |q_2|^2 = b$.

Перепишем неравенства (9) в виде

$$|a| - 1 \le b \le 1. \tag{10}$$

Следовательно, если выполнены условия (9), то $b \le 1$, $|q_1|^2 = |q_2|^2 \le 1$. Обратно, из условия $|q_1|^2 = |q_2|^2 \le 1$ следует $b \le 1$.

Кроме того $4b > a^2$, т.е. $b > 0$ и $|a| < 2\sqrt{b} \le 1 + b$, следовательно, выполнены неравенства (9).

В случае $a^2 - 4b \ge 0$ оба корня уравнения (8)

$$q_{1,2} = 0.5(-a \pm \sqrt{a^2 - 4b}) \tag{11}$$

действительны. Из условий (10) получаем

$$|a| \le 1 + b \le 2,\ a^2 - 4b \le (1-b)^2,\ \sqrt{a^2-4b} \le 1 - b,\ -a + \sqrt{a^2-4b} \le -a + 1 - b \le 2,$$

т.е. $|q_1| = 0.5|-a - \sqrt{a^2-4b}| \le 1$.

Далее, $-a - \sqrt{a^2-4b} \le -a \le 2$, т.е. $|q_2| = 0.5|-a - \sqrt{a^2-4b} \le 1$.

Обратно, если $|q_{1,2}| \le 1$, то из (11) получаем неравенства

$$-(2-a) \le \sqrt{a^2-4b} \le 2 + a,\ -(2+a) \le \sqrt{a^2-4b} \le 2 - a,$$

которые эквивалентны неравенствам

$$-(2-a) \le \sqrt{a^2-4b} \le 2 - a,\ -(2+a) \le \sqrt{a^2-4b} \le 2 + a.$$

Отсюда получаем $|a| \le 2$, $\sqrt{a^2-4b} \le 2 + a$, $\sqrt{a^2-4b} \le 2 - a$.

Возведя последние два неравенства в квадрат, приходим к первым двум неравенствам (9).

Неравенство $b \le 1$ следует из условия $a^2 \ge 4b$ и доказанного выше неравенства $|a| \le 2$.

Лемма 1 доказана. □

Возвращаясь к схеме (4), видим, что нам надо проверить условия (9), где

$$a = -1 + \frac{3}{2}\mu,\ b = -0.5\mu,\ \mu = \tau\lambda.$$

Отсюда следует $1+a+b = \mu > 0$, $1-a+b = 2(1-\mu)$, а это означает, что схема устойчива при условии $\mu \le 1$ т.е. $\tau \le \frac{1}{\lambda}$. Следовательно, рассмотренная двухшаговая разностная схема (4) условно устойчива.

Общий m-шаговый линейный разностный метод

Перейдем теперь от частных примеров к общему m-шаговому методу

$$\sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{\tau} y_{n-k} = \sum_{k=0}^{m} b_k f_{n-k}, \tag{12}$$

где $\tau > 0$, $y_0, y_1, \ldots, y_{m-1}$ — заданы. Будем считать, что коэффициенты $a_k,\ b_k,\ k = \overline{1,n}$ не зависят от τ.

Пример. В применении к уравнению (1) метод (12) принимает вид:

$$\sum_{k=0}^{m} (a_k + \tau\lambda b_k)\, y_{n-k} = 0. \tag{13}$$

Решение этого разностного уравнения с постоянными коэффициентами будем искать в виде

$$y_j = q^j, \quad j \in \mathbb{Z}_+.$$

Подставив эту форму решения в уравнение (13) и сократив на q^{n-m}, придем к уравнению

$$F_m(q,\tau) = \sum_{k=0}^{m} (a_k + \tau\lambda b_k)\, q^{m-k} = 0. \tag{14}$$

Определение. *Уравнение вида* (14) *называется характеристическим уравнением разностной схемы* (13).

Можно было бы искать условия, при которых все корни уравнения (14) лежат внутри или на границе единичного круга. Однако это оказывается достаточно сложным даже для квадратного уравнения. Поэтому в случае общего m-шагового разностного метода (12) поступают по-другому.

Предположим, что шаг τ достаточно мал. Тогда корни уравнения (14) будут близки к корням уравнения

$$F_m(q, 0) = 0,$$

то есть уравнения

$$\sum_{k=0}^{m} a_k q^{m-k} = 0, \tag{15}$$

которое также называется характеристическим. Заметим, что последнее уравнение определяется только способом аппроксимации производной $u'(t)$ и не зависит от того, каким способом аппроксимируется правая часть исходного уравнения (3).

При анализе m-шаговых разностных схем для нелинейного уравнения (3) обычно ограничиваются рассмотрением упрощенного характеристического уравнения (15).

Определение. *Говорят, что схема (12) удовлетворяет условию (α), если все корни характеристического уравнения (15) лежат внутри или на границе единичного круга комплексной плоскости, причем на границе единичного круга нет кратных корней.*

Таким образом, выполнение условия (α) соответствует устойчивости разностного метода для уравнения $u'(t) = 0$. Однако часто схему и для общего уравнения (3) называют устойчивой, если она удовлетворяет условию (α). Такая терминологическая неточность оправдана тем, что из условия (α) следует сходимость решения разностной задачи (12) к решению исходной дифференциальной задачи (3). Приведем без доказательства следующую теорему (см. [2]).

Теорема. *Пусть разностная схема удовлетворяет условию (α) и $|f'_u| \leqslant L$ на отрезке $0 \leqslant t \leqslant T$. Тогда при $0 \leqslant t_n = n\tau \leqslant T$ и всех достаточно малых τ выполняется оценка*

$$|y_n - u(t_n)| \leqslant M \left(\sum_{j=m}^{n} \tau |\psi_j| + \max_{0 \leqslant i \leqslant m-1} |y_i - u(t_i)| \right),$$

где $|y_i - u(t_i)|$ — погрешности в задании начальных данных, $i = \overline{0, (m-1)}$, M — константа, зависящая от L, T и не зависящая от τ, ψ_j — погрешность аппроксимации на решении исходного уравнения (3):

$$\psi_j = -\sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{\tau} u(t_{n-k}) + \sum_{k=0}^{m} b_k f_{n-k}.$$

Таким образом, исследование сходимости метода (12) сводится к анализу погрешности аппроксимации и проверке условия (α).

Замечание 1. *Методы Адамса*

$$\frac{y_n - y_{n-1}}{\tau} = \sum_{k=0}^{m} b_k f_{n-k}$$

всегда удовлетворяют условию (α), так как для них $a_0 = -a_1 = 1$, то есть $q = q_1 = 1$, что следует из уравнения

$$q^n - q^{n-1} = 0.$$

Замечание 2. *При указанном подходе, в отличие от рассмотренных примеров, не различаются абсолютно устойчивые и условно устойчивые разностные схемы, так как параметр τ заранее считается достаточно малым.*

Замечание 3. *Мы уже упоминали в §36 данной главы, что наивысший достижимый порядок аппроксимации неявных m-шаговых методов равен $2m$, а явных — $(2m-1)$. Однако оказывается, что методы наивысшего порядка неустойчивы в том смысле, что они не удовлетворяют условию (α). А именно, если m нечетно, то никакой устойчивый метод не превосходит порядка $p = m+1$. Если m четно, то никакой устойчивый метод не превосходит порядка $p = m+2$ (p — порядок аппроксимации). Для явных схем наивысший порядок аппроксимации устойчивых методов $p = m$.*

Пример. Нетрудно привести пример схем, не удовлетворяющих условию (α). Так, явная двухшаговая схема

$$\frac{y_n + 4y_{n-1} - 5y_{n-2}}{6\tau} = \frac{2f_{n-1} + f_{n-2}}{3}$$

имеет третий порядок погрешности аппроксимации $\psi = \mathrm{O}(\tau^3)$ (чтобы убедиться в этом, достаточно проверить условия p-ого порядка аппроксимации, полученные в §36 текущей главы). Характеристическое уравнение (15) для этой схемы

$$q^2 + 4q - 5 = 0$$

имеет корни $q_1 = -5,\ q_2 = 1$, и, тем самым, условие (α) нарушено.

§38 Жесткие системы обыкновенных дифференциальных уравнений

Многие из рассмотренных выше методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений переносятся без изменений на системы дифференциальных уравнений. Однако в случае численного решения системы уравнений могут возникнуть дополнительные трудности, связанные с разномасштабностью процессов, описываемых данной системой. Поясним это на примере системы, состоящей из двух независимых уравнений

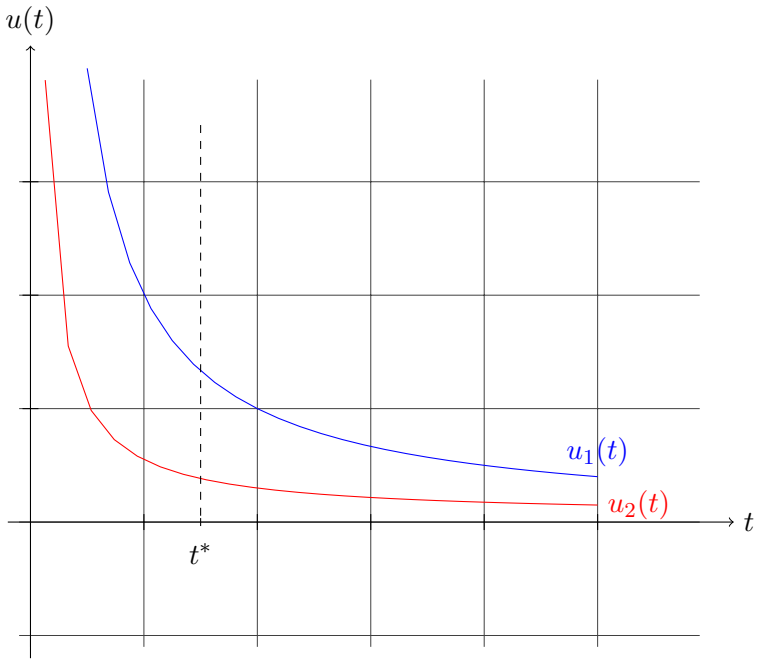
$$\begin{cases} \dfrac{du_1(t)}{dt} + a_1 u_1(t) = 0, \quad t > 0 \\ u_1(0) = u_{01}, \\ \dfrac{du_2(t)}{dt} + a_2 u_2(t) = 0, \quad t > 0 \\ u_2(0) = u_{02}, \end{cases} \tag{1}$$

где $a_1,\ a_2$ — положительные постоянные.

Система (1) имеет решение

$$u_1(t) = u_{01} e^{-a_1 t},$$
$$u_2(t) = u_{02} e^{-a_2 t},$$

монотонно убывающее с ростом t. Предположим, что a_2 гораздо больше, чем a_1. Тогда вторая компонента $u_2(t)$ затухает гораздо быстрее, чем первая и, начиная с некоторого момента времени t^*, поведение решения почти полностью определяется первой компонентой $u_1(t)$. Однако оказывается, что при решении системы (1) явным разностным методом шаг интегрирования τ определяется, как правило, компонентой $u_2(t) = u_{02} e^{-a_2 t}$, которая не существенна с точки зрения поведения решения системы.



Например, явный метод Эйлера

$$\frac{u_1^{n+1} - u_1^n}{\tau} + a_1 u_1^n = 0,$$

$$\frac{u_2^{n+1} - u_2^n}{\tau} + a_2 u_2^n = 0,$$

где $u_i^n = u_i(t_n)$, $i = 1, 2$, будет устойчив, если шаг τ удовлетворяет одновременно двум неравенствам

$$\tau a_1 \leqslant 2,$$

$$\tau a_2 \leqslant 2.$$

Поскольку $a_2 > a_1$, условие устойчивости накладывает следующее ограничение на шаг интегрирования:

$$\tau \leqslant \frac{2}{a_2}.$$

Приведенный пример может показаться искусственным, так как ясно, что каждое из уравнений системы (1) следует решать независимо от другого со своим шагом интегрирования $\tau_j \leqslant \dfrac{2}{a_j}$, $j = 1, 2$. Однако аналогичные трудности возникают и при решении любых систем обыкновенных дифференциальных уравнений, если матрица этой системы имеет большой разброс собственных чисел.

Определение. *Система линейных обыкновенных дифференциальных уравнений вида*

$$\begin{cases} \dfrac{d\boldsymbol{u}(t)}{dt} = A\boldsymbol{u}(t), \quad t > 0 \\ \boldsymbol{u}(0) = u_0, \end{cases}$$

где $\boldsymbol{u}(t) = (u_1(t), u_2(t), \ldots, u_m(t))^T$, *и* A $(m \times m)$ *— заданная матрица постоянных, вообще говоря, комплексных коэффициентов, называется жесткой, если:*

1. *Действительные части всех собственных значений* λ_k, $k = \overline{1,m}$ *матрицы* A *отрицательные.*

2. *Выполняется неравенство*

$$\frac{\max\limits_{1\leqslant k\leqslant m}|Re\lambda_k|}{\min\limits_{1\leqslant k\leqslant m}|Re\lambda_k|} \gg 1.$$

Так же, как и в приведенном выше примере, нетрудно прийти к следующему выводу. Решение жесткой системы уравнений содержит как быстроубывающие, так и медленноубывающие составляющие. Начиная с некоторого $t > 0$, решение почти полностью определяется медленноубывающей составляющей, однако при использовании явных разностных схем быстроубывающая составляющая влияет отрицательно на устойчивость, вынуждая брать шаг интегрирования τ слишком маленьким.

Выход из этой парадоксальной ситуации был найден в применении неявных абсолютно устойчивых разностных методов для интегрирования жестких систем уравнений.

Например, систему (1) можно решать с помощью неявной схемы Эйлера

$$\frac{u_1^{n+1}-u_1^n}{\tau} + a_1 u_1^{n+1} = 0,$$

$$\frac{u_2^{n+1}-u_2^n}{\tau} + a_2 u_2^{n+1} = 0,$$

которая устойчива при всех $\tau > 0$. Поэтому шаг интегрирования τ здесь можно выбирать, руководствуясь лишь соображениями точности, а не устойчивости.

Понятие жесткости можно обобщить и на случай нелинейных систем. Рассмотрим систему нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{d\boldsymbol{u}(t)}{dt} = \boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{u}(t)), \quad t > 0, \\ \boldsymbol{u}(0) = u_0, \end{cases} \tag{2}$$

где

$$\boldsymbol{u}(t) = (u_1(t), u_2(t), \ldots, u_m(t))^T,$$

$$\boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{u}(t)) = (f_1(t,\boldsymbol{u}(t)), f_2(t,\boldsymbol{u}(t)), \ldots, f_m(t,\boldsymbol{u}(t)))^T.$$

Зафиксируем какое-либо решение $\boldsymbol{v}(t)$ системы (2) и запишем разность $\boldsymbol{z}(t) = \boldsymbol{u}(t) - \boldsymbol{v}(t)$ между произвольным решением системы (2) и данным решением $\boldsymbol{v}(t)$. Эта разность удовлетворяет системе уравнений

$$\frac{dz_k(t)}{dt} = f_k(t,\boldsymbol{v}(t)+\boldsymbol{z}(t)) - f_k(t,\boldsymbol{v}(t)), \quad k = \overline{1,m}. \tag{3}$$

Проведем разложение по формуле Тейлора правой части этой системы, предполагая, что возмущение $\boldsymbol{z}(t)$ в определенном смысле мало. Так как

$$f_k(t,\boldsymbol{u}(t)) = f_k(t,u_1(t),u_2(t),\ldots,u_m(t)),$$

имеем

$$f_k(t,\boldsymbol{v}(t)+\boldsymbol{z}(t)) - f_k(t,\boldsymbol{v}(t)) = \frac{\partial f_k(t,\boldsymbol{v}(t))}{\partial u_1} z_1(t) +$$

$$+\frac{\partial f_k(t,\boldsymbol{v}(t))}{\partial u_2} z_2(t) + \ldots + \frac{\partial f_k(t,\boldsymbol{v}(t))}{\partial u_m} z_m(t) + \mathrm{O}\big(|\boldsymbol{z}(t)|\big),$$

где через $\mathrm{O}\big(|z|\big)$ обозначены величины более высокого, чем первый, порядка малости по z. В результате этого разложения система (3) запишется в виде

$$\frac{d\boldsymbol{z}(t)}{dt} = \frac{\partial \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{v}(t))}{\partial \boldsymbol{u}} \boldsymbol{z}(t) + \mathrm{O}\big(|\boldsymbol{z}(t)|\big), \tag{4}$$

где через $\dfrac{\partial \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{v}(t))}{\partial \boldsymbol{u}}$ обозначена матрица с элементами

$$a_{ij}(t, \boldsymbol{v}(t)) = \frac{\partial f_i(t, \boldsymbol{v}(t))}{\partial u_j}, \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Обрывая разложение в правой части (4), получим так называемую систему уравнений первого приближения

$$\frac{d\boldsymbol{w}(t)}{dt} = \frac{\partial \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{v}(t))}{\partial \boldsymbol{u}} \boldsymbol{w}(t). \tag{5}$$

Эта система линейных дифференциальных уравнений относительно $\boldsymbol{w}(t)$, так как $\boldsymbol{v}(t)$ задано. Теперь уже можно дать определение жесткости системы нелинейных дифференциальных уравнений. Это определение связано как с данным фиксированным решением $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{t})$ так и с длиной отрезка интегрирования. Пусть $\lambda_k(t),\ k = \overline{1, m}$ — собственные значения матрицы

$$J(t) = \frac{\partial \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{v}(t))}{\partial \boldsymbol{u}}.$$

Введем число жесткости

$$S(t) = \frac{\max\limits_{1 \leqslant k \leqslant m} |Re\lambda_{\boldsymbol{k}}(t)|}{\min\limits_{1 \leqslant k \leqslant m} |Re\lambda_{\boldsymbol{k}}(t)|}.$$

Определение. *Система (2) называется жесткой на решении $\boldsymbol{v}(t)$ и на данном интервале $0 < t < T$ если*

1. $Re\lambda_k(t) < 0,\ k = \overline{1, m}.$
2. *Число жесткости $S(t)$ велико на рассматриваемом интервале $0 < t < T$:*

$$\frac{\max\limits_{1 \leqslant k \leqslant m} |Re\lambda_{\boldsymbol{k}}(t)|}{\min\limits_{1 \leqslant k \leqslant m} |Re\lambda_{\boldsymbol{k}}(t)|} \gg 1.$$

Заметим, что первое требование означает асимптотическую устойчивость по Ляпунову решения $\boldsymbol{v}(t)$.

§39 Дальнейшие определения устойчивости

При исследовании разностных схем для жестких систем уравнений обычно рассматривают модельное уравнение

$$\frac{d\boldsymbol{u}(t)}{dt} = \lambda \boldsymbol{u}(t), \tag{1}$$

где λ — произвольное комплексное число. Свойства различных разностных схем изучают и сравнивают на примере этого уравнения.

Для того, чтобы уравнение (1) действительно моделировало в некотором смысле исходную систему

$$\frac{d\boldsymbol{u}(t)}{dt} = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(t)),$$

необходимо рассматривать его при значениях λ, являющихся собственными значениями матрицы

$$J = \frac{\partial \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{v}(t))}{\partial \boldsymbol{u}}.$$

Кроме обычного определения устойчивости (все корни характеристического уравнения не превосходят по модулю единицу) при рассмотрении жестких систем используют и другие, более узкие определения устойчивости. Мы рассмотрим два таких определения.

Определение. *Областью устойчивости разностного метода называется множество точек комплексной плоскости $\mu = \tau\lambda$, для которых данный метод, примененный к уравнению (1), устойчив.*

Рассмотрим, например, явную схему Эйлера:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = f(t_n, y_n).$$

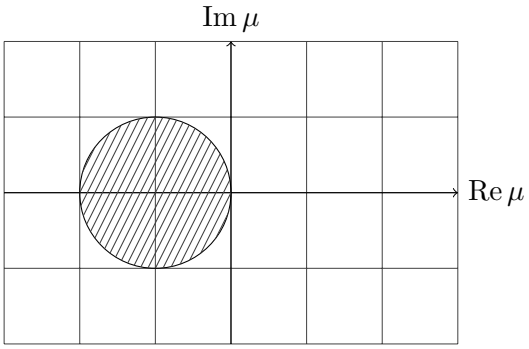
В применении к уравнению (1) эта схема примет вид

$$y_{n+1} = (1 + \mu)\, y_n, \ \mu = \tau\lambda.$$

Условие устойчивости $|1 + \mu| \leqslant 1$ для комплексного числа $\mu = \mu_0 + i\mu_1$ означает, что

$$(\mu_0 + 1)^2 + \mu_1^2 \leqslant 1.$$

Таким образом, область устойчивости данного метода представляет собой круг единичного радиуса с центром в точке $(-1, 0)$.



Рассмотрим теперь неявную схему Эйлера

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = f(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

В применении к уравнению (1) эта схема примет вид

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} = \lambda y_{n+1}.$$

Перепишем это уравнение в виде

$$y_{n+1} = \frac{1}{1 - \mu} y_n.$$

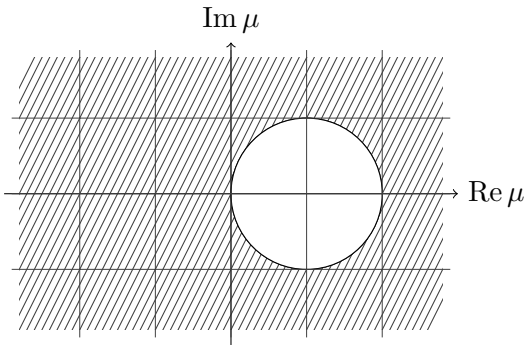
Область устойчивости метода определяется условием

$$\left| \frac{1}{1 - \mu} \right| \leqslant 1,$$

которое эквивалентно неравенству

$$|1-\mu| \geqslant 1$$

и представляет собой внешность круга единичного радиуса с центром в точке $(1,0)$.



Определение. *Разностный метод называется A-устойчивым, если область его устойчивости содержит полуплоскость, задаваемую условием*

$$\operatorname{Re}\mu < 0.$$

Отметим, что уравнение (1) асимптотически устойчиво при $\operatorname{Re}\lambda < 0$. Поэтому всякий A-устойчивый метод является абсолютно устойчивым (устойчивым при любом $\tau > 0$), если устойчиво решение исходного дифференциального уравнения. Нетрудно видеть, что неявный метод Эйлера является A-устойчивым, а явный метод Эйлера не является A-устойчивым.

Рассмотрим схему второго порядка аппроксимации:

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau} = \frac{f(t_{n+1},y_{n+1})+f(t_n,y_n)}{2}. \tag{2}$$

В применении к уравнению (1) эта схема примет вид

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\tau} = \frac{\lambda}{2}(y_{n+1}+y_n).$$

Отсюда находим

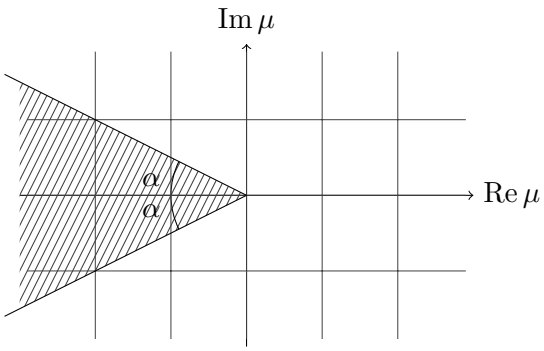
$$y_{n+1} = qy_n,$$

где $q = \frac{1+0.5\mu}{1-0.5\mu}$. Неравенство $|q| \leqslant 1$ выполнено при $\operatorname{Re}\mu \leqslant 0$. Следовательно метод (2) является A-устойчивым.

При решении жестких систем уравнений было бы желательно пользоваться именно A-устойчивыми разностными методами, так как условия их устойчивости не накладывают ограничений на шаг τ. Однако класс A-устойчивых методов весьма узок. Известно, что не существует явных линейных многошаговых A-устойчивых методов. Среди неявных линейных многошаговых методов нет A-устойчивых методов, имеющих порядок аппроксимации выше второго. Таким образом, схема (2) является одной из лучших A-устойчивых схем. В связи с тем, что класс A-устойчивых разностных схем весьма узок, было введено несколько определений устойчивости, являющихся менее ограничительными, чем определение A-устойчивости.

Определение. *Разностный метод называется $A(\alpha)$-устойчивым, если область его устойчивости содержит угол левой полуплоскости:*

$$|\arg(-\mu)| < \alpha,\ \ \mu = \tau\lambda, \alpha > 0.$$



В частности, $A\left(\frac{\pi}{2}\right)$-устойчивость совпадает с A-устойчивостью.

Известно, что ни для какого α не существует явного $A(\alpha)$-устойчивого линейного многошагового метода. Построены $A(\alpha)$-устойчивые неявные методы третьего и четвертого порядка аппроксимации. К ним относятся чисто неявные многошаговые разностные схемы, у которых правая часть $\boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{u})$ вычисляется только при новом значении $t=t_{n+m}$, а производная $\boldsymbol{u}'(t)$ аппроксимируется по нескольким предыдущим точкам и точке $t=t_{n+m}$. Например, схема

$$\frac{25y_{n+4}-48y_{n+3}+36y_{n+2}-16y_{n+1}+3y_n}{12\tau}=f(t_{n+4},y_{n+4})$$

имеет четвертый порядок аппроксимации и $A(\alpha)$-устойчива при некотором $\alpha>0$.

§40 Разностные методы решения краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка

Интегро-интерполяционный метод (метод баланса) построения разностных схем

Рассмотрим первую краевую задачу для дифференциального уравнения второго порядка. Требуется найти непрерывную на отрезке $0\leqslant x\leqslant 1$ функцию $u(x)$, удовлетворяющую уравнению

$$\frac{d}{dx}\left(k(x)\frac{du}{dx}\right)-q(x)u(x)+f(x)=0,\quad x\in(0,1) \tag{1}$$

и краевым условиям первого рода при $x=0$, $x=1$

$$u(0)=\mu_1,\ u(1)=\mu_2, \tag{2}$$

где μ_1,μ_2 — числа.

Будем предполагать, что $k(x)$, $q(x)$, $f(x)$ — заданные достаточно гладкие функции, удовлетворяющие условиям

$$k(x)\geqslant c_1>0,\ q(x)\geqslant 0,\quad c_1=const.$$

При сформулированных условиях решение задачи (1)–(2) существует и единственно.

Введем сетку

$$\omega_h=\{x_i=ih,\ i=\overline{0,N},\ hN=1\}.$$

Обозначим

$$x_{i-\frac{1}{2}}=x_i-0.5h,\ x_{i+\frac{1}{2}}=x_i+0.5h,$$

$$\omega(x) = k(x)\frac{du}{dx}(x),$$

$$\omega_{i\pm\frac{1}{2}} = \omega(x_{i\pm\frac{1}{2}})$$

и проинтегрируем уравнение (1) по x на отрезке $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$. В результате получим уравнение

$$\omega_{i+\frac{1}{2}} - \omega_{i-\frac{1}{2}} - \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q(x)u(x)dx + \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x)dx = 0, \tag{3}$$

которое представляет собой уравнение баланса тепла на отрезке $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$. Далее заменим

$$\int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q(x)u(x)dx \approx u_i \int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q(x)dx$$

и введем обозначения

$$d_i = \frac{1}{h}\int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q(x)dx,\ \varphi_i = \frac{1}{h}\int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x)dx. \tag{4}$$

В результате вместо уравнения (3) получим уравнение

$$\frac{\omega_{i+\frac{1}{2}} - \omega_{i-\frac{1}{2}}}{h} - d_i u_i + \varphi_i = 0. \tag{5}$$

Выразим далее $\omega_{i\pm\frac{1}{2}}$ через значение $u(x)$ в узлах сетки. Для этого проинтегрируем равенство

$$u'(x) = \frac{\omega(x)}{k(x)}$$

на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$. Имеем

$$u_i - u_{i-1} = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{\omega(x)}{k(x)}dx \approx \omega_{i-\frac{1}{2}} \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)},$$

Обозначая

$$a_i = \left(\frac{1}{h}\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)}\right)^{-1}, \tag{6}$$

получаем

$$\omega_{i-\frac{1}{2}} = a_i\frac{u_i - u_{i-1}}{h} = a_i u_{\overline{x},i}, \quad \omega_{i+\frac{1}{2}} = a_i u_{x,i}.$$

Здесь и далее используются общепризнанные в теории разностных схем обозначения $u_{x,i} = \frac{u_{i+1}-u_i}{h}, u_{\overline{x},i} = \frac{u_i - u_{i-1}}{h}$ ([1], стр.259).

Подставляя эти выражения в уравнение (5) получаем

$$\frac{1}{h}(a_{i+1}u_{x,i} - a_i u_{\overline{x},i}) - d_i u_i + \varphi_i = 0$$

или

$$(au_{\overline{x}})_{x,i} - d_i u_i + \varphi_i = 0. \tag{7}$$

Это уравнение по построению является разностным аналогом дифференциального уравнения (1). Оно записывается для $i = \overline{1,(N-1)}$ и дополняется краевыми условиями:

$$u_0 = \mu_1, u_N = \mu_2. \tag{8}$$

В дальнейшем, как обычно, решение разностной задачи (7) – (8) будем обозначать буквой y, так что $y_i = y(x_i), x_i \in \omega_h$. Тогда задача (7) – (8) записывается в виде

$$\begin{cases} (ay_{\overline{x}})_{x,i} - d_i y_i + \varphi_i = 0, \quad i = \overline{1,(N-1)} \\ y_0 = \mu_1, y_N = \mu_2. \end{cases} \tag{9}$$

Систему уравнений (9) можно записать в виде трехточечного уравнения

$$A_i y_{i-1} - C_i y_i + B_i y_{i+1} = -F_i, \quad i = \overline{1,(N-1)}, y_0 = \mu_1, y_N = \mu_2. \tag{10}$$

где $A_i = a_i, B_i = a_{i+1}, C_i = a_1 + a_{i+1} + h^2 d_i, F_i = h^2 \varphi_i$. В силу диагонального преобладания матрицы системы (10), задача (10) имеет, и притом единственное, решение, которое обычно находится методом прогонки.

Достаточные условия второго порядка аппроксимации

Рассмотрим разностную схему (9) и найдем условия, которым должны удовлетворять коэффициенты a_i, d_i и правая часть φ_i, чтобы она имела второй порядок аппроксимации. Для погрешности $z_i = y_i - u_i$, как обычно, получаем задачу

$$(az_{\overline{x}})_{x,i} - d_i z_i = -\psi_i, \ z_0 = z_N = 0, \quad i = \overline{1,(N-1)}, \tag{11}$$

где

$$\psi_i = (au_{\overline{x}})_{x,i} - d_i u_i + \varphi_i = \frac{1}{h}\left(a_{i+1}\frac{u_{i+1}-u_i}{h} - a_i\frac{u_i - u_{i-1}}{h}\right) - d_i u_i + \varphi_i \tag{12}$$

— погрешность аппроксимации разностной схемы (9) на решении задачи (1).

Считая $u(x)$ достаточное число раз непрерывно дифференцируемой, разложим в точке x_i по формуле Тейлора:

$$u_{i+1} = u_i + hu_i' + \frac{h^2}{2}u_i'' + \frac{h^3}{6}u_i''' + \frac{h^4}{24}u_i^{IV} + \mathrm{O}(h^5),$$

$$u_{i-1} = u_i - hu_i' + \frac{h^2}{2}u_i'' - \frac{h^3}{6}u_i''' + \frac{h^4}{24}u_i^{IV} + \mathrm{O}(h^5),$$

$$u_{x,i} = \frac{u_{i+1}-u_i}{h} = u_i' + \frac{h}{2}u_i'' + \frac{h^2}{6}u_i''' + \frac{h^3}{24}u_i^{IV} + \mathrm{O}(h^4),$$

$$u_{\overline{x},i} = \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = u_i' - \frac{h}{2}u_i'' + \frac{h^2}{6}u_i''' - \frac{h^3}{24}u_i^{IV} + \mathrm{O}(h^4).$$

Подставим $u_{x,i}, u_{\overline{x},i}$ в (12):

$$\psi_i = \frac{1}{h}\left(a_{i+1}\left(u_i' + \frac{h}{2}u_i'' + \frac{h^2}{6}u_i''' + \mathrm{O}(h^3)\right) - a_i\left(u_i' - \frac{h}{2}u_i'' + \frac{h^2}{6}u_i''' + \mathrm{O}(h^3)\right)\right) - d_i u_i + \varphi_i =$$

$$= \frac{a_{i+1}-a_i}{h}u_i' + \frac{a_{i+1}+a_i}{2}u_i'' + h\frac{a_{i+1}-a_i}{6}u_i''' - d_i u_i + \varphi_i + \mathrm{O}(h^2).$$

Учитывая, что $0 = ((ku')' - qu + f)_i = k_i'u_i' + k_iu_i'' - q_iu_i + f_i$, перепишем ψ_i в виде

$$\psi_i = \frac{a_{i+1}-a_i}{h}u_i' + \frac{a_{i+1}+a_i}{2}u_i'' + \frac{a_{i+1}-a_i}{6}hu_i''' - d_iu_i + \varphi_i - \left(k_i'u_i' + k_iu_i'' - q_iu_i + f_i\right) =$$

$$= \left(\frac{a_{i+1}-a_i}{h} - k_i'\right)u_i' + \left(\frac{a_{i+1}+a_i}{h} - k_i\right)u_i'' - (d_i - q_i)u_i + (\varphi_i - f_i) + \mathrm{O}\big(h^2\big).$$

Отсюда видно, что если будут выполнены условия (это и есть достаточные условия):

$$\frac{a_{i+1}-a_i}{h} = k_i' + \mathrm{O}\big(h^2\big),\ \frac{a_{i+1}+a_i}{2} = k_i + \mathrm{O}\big(h^2\big),\ d_i = q_i + \mathrm{O}\big(h^2\big),\ \varphi_i = f_i + \mathrm{O}\big(h^2\big), \quad (13)$$

то $\psi_i = \mathrm{O}\big(h^2\big)$. Из первых двух соотношений вытекает

$$a_i = k_i - \frac{h}{2}k_i' + \mathrm{O}\big(h^2\big) = k_{i-\frac{1}{2}} + \mathrm{O}\big(h^2\big),$$

$$a_{i+1} = k_i + \frac{h}{2}k_i' + \mathrm{O}\big(h^2\big) = k_{i+\frac{1}{2}} + \mathrm{O}\big(h^2\big).$$

Нетрудно видеть, что коэффициенты

$$a_i = k_{i-\frac{1}{2}},\ a_i = \frac{k_{i-1}+k_i}{2},\ \frac{1}{a_i} = \frac{1}{h}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\frac{dx}{k(x)}$$

удовлетворяют этим условиям. Так, например, при $a_i = k_{i-\frac{1}{2}}$ имеем

$$a_i = k_{i-\frac{1}{2}} = k_i - \frac{h}{2}k_i' + \frac{h^2}{8}k_i'' + \mathrm{O}\big(h^3\big),$$

$$a_{i+1} = k_{i+\frac{1}{2}} = k_i + \frac{h}{2}k_i' + \frac{h^2}{8}k_i'' + \mathrm{O}\big(h^3\big),$$

и, следовательно,

$$\frac{a_{i+1}-a_i}{h} = k_i' + \mathrm{O}\big(h^2\big),\ \frac{a_{i+1}+a_i}{2} = k_i + \frac{h^2}{4}k_i'' + \mathrm{O}\big(h^3\big) = k_i + \mathrm{O}\big(h^2\big).$$

Принцип максимума

Для оценки решения задачи (10) можно воспользоваться так называемым принципом максимума.

Запишем первую краевую задачу в виде

$$\begin{cases} L[y_i] = -A_iy_{i-1} + C_iy_i - B_iy_{i+1} = F_i, \quad i = \overline{1,(N-1)}, \\ y_0 = \mu_1, y_N = \mu_2. \end{cases} \quad (14)$$

Теорема 1. *Пусть выполнены неравенства*

$$A_i > 0,\ B_i > 0, C_i - A_i - B_i \geqslant 0, \quad i = \overline{1,(N-1)} \quad (15)$$

и пусть $L[y_i] \leqslant 0 (L[y_i] \geqslant 0),\ i = \overline{1,(N-1)}$. *Тогда если* $y_i \neq const$, *то* y_i *не может принимать наибольшего положительного (наименьшего отрицательного) значения во внутренних узлах, т.е. при* $i = \overline{1,(N-1)}$.

Доказательство. От противного предположим, что в узле $i = i_*$ функция y_i достигает наибольшего положительного значения $y_{i_*} = \max\limits_{1 \leqslant i \leqslant N-1} y_i = M_0 > 0$. Так как $y_i \neq const$, то найдется такая точка i_0, в которой $y_{i_0} = y_{i_*} = M_0 > 0$, а в одной из соседних точек, например, в точке $i = i_0 - 1$ выполнено $y_{i_0-1} < M_0$.

Запишем $L[y_i] = (C_i - A_i - B_i)y_i + A_i(y_i - y_{i-1}) - B_i(y_{i+1} - y_i)$. В точке $i = i_0$ получим

$$L[y_{i_0}] = (C_{i_0} - A_{i_0} - B_{i_0})y_{i_0} + A_{i_0}(y_{i_0} - y_{i_0-1}) - B_{i_0}(y_{i_0+1} - y_{i_0}).$$

Отсюда в силу условий (15) имеем:

$$L[y_{i_0}] \geqslant A_{i_0}(y_{i_0} - y_{i_0-1}) + B_{i_0}(y_{i_0} - y_{i_0+1}) > 0,$$

так как $y_{i_0} \geqslant y_{i_0+1}$, $y_{i_0} > y_{i_0-1}$. Это противоречит условию теоремы $L[y_i] \leqslant 0$, $i = \overline{1,(N-1)}$, в том числе и для $i = i_0$.

Первое утверждение теоремы доказано. Вторая часть теоремы доказывается аналогично (достаточно заменить y_i на $-y_i$ и воспользоваться доказанными выше утверждениями). □

Следствие 1. *Пусть выполнены условия* (15) *и* $L(y_i) \geqslant 0$, $i = \overline{1,(N-1)}$ *и пусть* $y_0 \geqslant 0$, $y_N \geqslant 0$. *Тогда* $y_i \geqslant 0$, $i = \overline{0,N}$. *Если выполнены условия* (15) *и* $L(y_i) \leqslant 0$, $i = \overline{1,(N-1)}$, $y_0 \leqslant 0$, $y_N \leqslant 0$, *то* $y_i \leqslant 0$, $i = \overline{0,N}$.

В самом деле, пусть $L(y_i) \geqslant 0$, а $y_i < 0$ хотя бы в одной точке $i = i_*$, $0 < i_* < N$. Тогда y_i должна достигать наименьшего отрицательного значения во внутренней точке $i = i_0$, $0 < i_0 < N$, что невозможно в силу доказанной теоремы.

Следствие 2. *Пусть выполнены условия* (15). *Тогда единственным решением задачи*

$$L(y_i) = 0, \quad i = \overline{1,(N-1)}, \ y_0 = y_N = 0 \tag{16}$$

является функция $y_i = 0$, $i = \overline{0,N}$ *и, следовательно, задача* (14) *однозначно разрешима при любых* μ_1, μ_2 *и* F_i.

В самом деле, предполагая, что решение задачи (16) хотя бы в одной точке $i = i_*$ $y_{i*} \neq 0$, придем к противоречию с принципом максимума: если $y_{i*} > 0$, то y_i достигает наибольшего положительного значения (при y_{i*} наименьшего отрицательного значения) в некоторой точке i_0, $0 < i_0 < N$, что невозможно.

Теорема 2. *(теорема сравнения) Пусть* y_i *— решение задачи*

$$L(y_i) = F_i, \quad i = \overline{1,(N-1)},$$

$$y_0 = \mu_1, \quad y_N = \mu_2,$$

а $\overline{y_i}$ *— решение задачи*

$$L(\overline{y_i}) = \overline{F_i}, \quad i = \overline{1,(N-1)},$$

$$\overline{y_0} = \overline{\mu_1}, \quad \overline{N} = \overline{\mu_2},$$

и пусть выполнены условия

$$|F_i| \leqslant \overline{F_i}, \quad i = \overline{1,(N-1)}, \quad |\mu_1| \leqslant \overline{\mu_1}, \quad |\mu_2| \leqslant \overline{\mu_2}.$$

Тогда $|y_i| \leqslant \overline{y_i}$, $i = \overline{0,N}$.

Доказательство. В силу следствия 1 имеем $\overline{y_i} \geqslant 0,\ i = \overline{0, N}$, так как

$$L(\overline{y_i}) \geqslant 0, \quad i = \overline{1, (N-1)}, \ \ \overline{y_0} \geqslant 0, \ \ \overline{y_N} \geqslant 0$$

Функции $u_i = \overline{y_i} - y_i$ и $v_i = \overline{y_i} + y_i$ удовлетворяют уравнению (14) с правыми частями $\overline{F_i} - F_i \geqslant 0$, $\overline{F_i} + F_i \geqslant 0$ и граничным условиям $u_0 = \overline{\mu_1} - \mu_1 \geqslant 0,\ u_N = \overline{\mu_2} - \mu_2 \geqslant 0,\ v_0 = \overline{\mu_1} + \mu_1 \geqslant 0,\ v_N = \overline{\mu_2} + \mu_2 \geqslant 0$, соответственно. Согласно следствию 1 имеем $u_i \geqslant 0$ и $v_i \geqslant 0, i = \overline{0, N}$ или $-\overline{y_i} \leqslant y_i \leqslant \overline{y_i}$, то есть $|y_i| \leqslant \overline{y_i}$, что и требовалось доказать. □

Функцию $\overline{y_i}$ будем называть мажорантой для решения задачи (14). Если удается построить мажоранту $\overline{y_i}$, то тем самым удается получить оценку для решения задачи (14)

$$\|y\|_C \leqslant \|\overline{y}\|_C.$$

Следствие 3. *Для решения однородного уравнения*

$$L(y_i) = 0, \quad i = \overline{1, (N-1)},\ y_0 = \mu_1,\ y_N = \mu_2$$

справедлива оценка

$$\|y\|_C = \max_{1 \leqslant i \leqslant N} |y_i| \leqslant \max(|\mu_1|, |\mu_2|). \tag{17}$$

Доказательство. Рассмотрим вспомогательную задачу

$$L(\overline{y_i}) = 0, \quad 0 < i < N,\ \overline{y_0} = \overline{y_N} = \overline{\mu},$$

где $\overline{\mu} = \max(|\mu_1|, |\mu_2|)$. В силу теоремы сравнения $\|y\|_C \leqslant \|\overline{y}\|_C$, а из теоремы 1 следует, что $\|\overline{y}\|_C \leqslant \overline{\mu}$, так как $\overline{y_i} \geqslant 0$ может достигать наибольшего положительного значения только на границе при $i = 0$ или $i = N$. Следствие доказано. □

Теорема 3. *Пусть выполнены условия*

$$|A_i| > 0,\ |B_i| > 0,\ \overline{D}_i = |C_i| - |A_i| - |B_i| > 0,\ i = \overline{1, (N-1)} \tag{18}$$

Тогда для решения задачи

$$L(y_i) = F_i,\ i = \overline{1, (N-1)},\ y_0 = y_N = 0, \tag{19}$$

справедлива оценка

$$\|y\|_C \leqslant \left\| \frac{F}{\overline{D}} \right\|_C.$$

Доказательство. Для доказательства этой теоремы запишем уравнение (14) в виде:

$$C_i y_i = A_i y_{i-1} + B_i y_{i+1} + F_i. \tag{20}$$

Пусть $|y_i|$ достигает своего наибольшего значения $|y_{i_0}| > 0$ при $i = i_0,\ 0 < i_0 < N$, так что $|y_{i_0}| \geqslant y_i,\ i = \overline{0, N}$. Тогда из уравнения (20) при $i = i_0$ следует

$$|C_{i_0} y_{i_0}| = |C_{i_0}||y_{i_0}| \leqslant |A_{i_0}||y_{i_0-1}| + |B_{i_0}||y_{i_0+1}| + F_{i_0} \leqslant (|A_{i_0}| + |B_{i_0}|)\,|y_{i_0}| + |F_{i_0}|.$$

Отсюда получаем:

$$(|C_{i_0}| - |A_{i_0}| + |B_{i_0}|)|y_{i_0}| = \overline{D}_{i_0}|y_{i_0}| \leqslant |F_{i_0}|.$$

Следовательно,

$$\|y_i\|_C = |y_{i_0}| = \max_{1 \leqslant i \leqslant N-1} |y_i| \leqslant \frac{|F_{i_0}|}{\overline{D}_{i_0}} \leqslant \left\| \frac{F}{\overline{D}} \right\|_C,$$

что и требовалось доказать. □

Теорема 3 позволяет получить оценку решения разностной схемы (10) при $y_0 = 0, y_N = 0$. Запишем ее в виде

$$\boldsymbol{L}(y_i) = F_i, \text{ где } \boldsymbol{L}(y_i) = -A_i y_{i-1} + C_i y_i - B_i y_{i+1}, A_i = a_i, B_i = a_{i+1}, C_i = a_i + a_{i+1} + h^2 d_i, \\ F_i = h^2 \varphi_i, i = \overline{1, N-1}, y_0 = 0, y_N = 0. \tag{21}$$

Следствие 4. *Пусть* $q(x) \geqslant b_1 > 0$. *Тогда для решения задачи* (21) *справедлива оценка:*

$$\|y\|_C \leqslant \frac{1}{b_1} \|\varphi\|_C.$$

В самом деле, $\overline{D}_i = h^2 |d_i|$. *Следовательно,* $\dfrac{|F_i|}{\overline{D}_i} = \dfrac{h^2 |\varphi_i|}{h^2 |d_i|} \leqslant \dfrac{1}{b_1} |\varphi_i|$. *Отсюда* $\|y\|_C \leqslant \dfrac{1}{b_1} \|\varphi\|_C$.

Литература

1. А. А. Самарский, А. В. Гулин. *Численные методы.*
   М.: Наука, 1989.

2. Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. *Численные методы.*
   М.: Наука, 1987.

3. А. А. Самарский. *Теория разностных схем.* 3-е изд.
   М.: Наука, 1989.

4. А. А. Самарский, Е. С. Николаев. *Методы решения сеточных уравнений.*
   М.: Наука, 1978.

5. И. С. Березин, Н. П. Жидков. *Методы вычислений.*
   М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1959.

6. Н. Н. Калиткин. *Численные методы.* 2-е изд.
   СПБ.: БХВ-Петербург, 2011.

7. В. А. Ильин, Г. Д. Ким. *Линейная алгебра и аналитическая геометрия.*
   М.: Изд-во МГУ, 1998.

8. Д. П. Костомаров, А. П. Фаворский. *Вводные лекции по численным методам.*
   М.: Логос, 2004.

9. В. В. Воеводин. *Вычислительные основы линейной алгебры.*
   М.: Наука, 1977.

10. Дж. Х. Уилкинсон. *Алгебраическая проблема собственных значений.*
    М.: Наука, 1970.

11. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. *Уравнения математической физики.*
    М.: Наука, 1970.

Приложение А

Материалы для данного раздела были взяты из открытых источников (Интернет).

1. Александр Андреевич Самарский (1919–2008) — основоположник отечественного математического моделирования, крупнейший специалист в области вычислительной математики, математической физики, теории разностных схем, численного моделирования сложных нелинейных систем. Создатель теории операторно-разностных схем, общей теории устойчивости разностных схем.

2. Огюстен Луи Коши (1789–1857) — великий французский математик и механик, член Парижской академии наук, Лондонского королевского общества, Петербургской академии наук и других академий. Разработал фундамент математического анализа, внёс огромный вклад в анализ, алгебру, математическую физику и многие другие области математики; один из основоположников механики сплошных сред.

3. Леопольд Кронекер (1823–1891) — немецкий математик. Брат известного физиолога Гуго Кронекера (1830–1914). Иностранный член-корреспондент Петербургской Академии наук (1872), член Берлинской АН (1861), профессор университета в Берлине. Основные труды по алгебре и теории чисел, где он продолжил работы своего учителя Э. Куммера по теории квадратичных форм и теории групп. Большое значение имеют его исследования по арифметической теории алгебраических величин.

4. Иоганн Карл Фридрих Гаусс (1777–1855) — немецкий математик, механик, физик, астроном и геодезист. Считается одним из величайших математиков всех времён, «королём математиков». Лауреат медали Копли (1838), иностранный член Шведской (1821) и Российской (1824) Академий наук, английского Королевского общества.

5. Габриэль Крамер (1704–1752) — швейцарский математик, ученик и друг Иоганна Бернулли, один из создателей линейной алгебры.

6. Андре-Луи Холецкий (1875–1918) — французский военный геодезист.

7. Карл Густав Якоб Якоби (1804–1851) — немецкий математик и механик. Внёс огромный вклад в комплексный анализ, линейную алгебру, динамику и другие разделы математики и механики. Младший брат российского академика, физика Бориса Семёновича Якоби. Член Берлинской академии наук (1836), Лондонского королевского общества (1833), член-корреспондент Парижской академии наук (1830), иностранный член-корреспондент Петербургской Академии наук (1830, с 1833 года — её почётный член), член Венской (1848) и член-корреспондент Мадридской академии (1848).

8. Филипп Людвиг фон Зейдель (1821–1896) — немецкий математик и астроном. Один из пионеров фотометрии звёзд, автор итерационного метода решения системы линейных уравнений.

9. Нильс Хенрик Абель (1802–1829) — норвежский математик. Исследователь алгебраических проблем, эллиптических функций.

10. Эварист Галуа (1811–1832) — французский математик, основатель современной высшей алгебры. Радикальный революционер-республиканец, он был застрелен на дуэли в возрасте двадцати лет.

11. Мари Энмон Камиль Жордан (1838–1922) — французский математик, известный благодаря своим фундаментальным работам в теории групп и «Курсу анализа». Основные результаты Жордана: теорема Жордана о кривой, топологический результат из комплексного анализа; жорданова нормальная форма в линейной алгебре; в математическом анализе мера Жордана используется для построения интеграла Римана; в теории групп теорема Жордана — Гёльдера о композиционном ряде является одним из основных результатов. Также Жордан занимался теорией Галуа. Он исследовал группы Матьё, привёл первые примеры спорадических групп.

12. Льюис Фрай Ричардсон (1881–1953) — английский математик, физик, метеоролог, психолог и пацифист, впервые применивший современные математические методы прогнозирования погоды и приложения подобных методов для изучения причин возникновения войн и их предотвращения. Он отмечен также за его новаторскую работу по фракталам и за метод решения систем линейных уравнений, известных как модифицированные итерации Ричардсона.

13. Виктор Яковлевич Буняковский(1804–1889) — русский математик, член Петербургской АН (1830) и её вице-президент (1864–1889). Наряду с М. В. Остроградским и П. Л. Чебышевым сыграл значительную роль в повышении научного уровня преподавания математики: обширный «Лексикон чистой и прикладной математики» (1839), учебники по арифметике для средней школы (1844, 1849). Работы Б. относятся к отдельной вопросам анализа, теории неравенств, к теории чисел и теории вероятностей. Состоял главным экспертом правительства по вопросам статистики и страхования.

14. Фридрих Вильгельм Бессель (1784–1846) — немецкий математик и астроном, ученик Карла Фридриха Гаусса. Первооткрыватель годичного параллакса звёзд, исследователь размеров земного эллипсоида.

15. Герман Ханкель (1839–1873) — немецкий математик; известен работами в области основания арифметики, комплексного анализа, кватернионов, интегральных преобразований, линейной алгебры, а также по истории античной и средневековой математики.

16. Александр Теофил Вандермонд (1735–1796) — французский музыкант и математик, член Парижской академии наук. Известен главным образом благодаря работам по высшей алгебре, особенно по теории детерминантов.

17. Жозеф Луи Лагранж (1736–1813) — французский математик, астроном и механик итальянского происхождения. Наряду с Эйлером — крупнейший математик XVIII века. Особенно прославился исключительным мастерством в области обобщения и синтеза накопленного научного материала. Автор классического трактата «Аналитическая механика», в котором установил фундаментальный «принцип возможных перемещений» и завершил математизацию механики. Внёс огромный вклад в математический анализ, теорию чисел, в теорию вероятностей и численные методы, создал вариационное исчисление.

18. Брук Тейлор (1685–1731) — английский математик, член Лондонского королевского общества. Наиболее известен тем, что его именем названа общая формула разложения функции в степенной ряд. Тейлор положил начало математическому изучению задачи о колебании струны. Ему принадлежат заслуги в разработке теории конечных разностей. Тейлор также автор работ о перспективе, центре качания, полете снарядов, взаимодействии магнитов, капиллярности, сцеплении между жидкостями и твёрдыми телами.

19. Сэр Исаак Ньютон (1643–1727) — английский физик, математик, механик и астроном, один из создателей классической физики. Автор фундаментального труда «Математические начала натуральной философии», в котором он изложил закон всемирного тяготения и три закона механики, ставшие основой классической механики. Разработал дифференциальное и интегральное исчисления, теорию цвета, заложил основы современной физической оптики, создал многие другие математические и физические теории.

20. Шарль Эрмит (1822–1901) — французский математик, признанный лидер математиков Франции во второй половине XIX века. Член Парижской академии наук с 1856 года, член-корреспондент (1857) и почётный член (1895) Петербургской академии наук, иностранный член Лондонского королевского общества (1873). Награждён орденом Почётного легиона (1892).

21. Мишель Ролль (1652–1719) — французский математик, член Парижской АН (с 1685). В «Трактате по алгебре» (1690) развил метод отделения действительных корней алгебраических уравнений, основанный на частном случае теоремы Ролля. Автор исследований, относящихся к решению в целых числах неопределённых линейных уравнений с двумя неизвестными. В начале XVIII века выступил с критикой исчисления бесконечно малых Г. Лейбница, вызвавшей оживлённую дискуссию.

22. Томас Симпсон (1710–1761) — английский математик. Вывел формулу приближённого интегрирования. Другие работы Симпсона посвящены элементарной геометрии, тригонометрии, анализу и теории вероятностей.

23. Георг Фридрих Бернхард Риман (1826–1866) — немецкий математик, механик и физик. За свою короткую жизнь (всего 10 лет трудов) он преобразовал сразу несколько разделов математики. «Мы склонны видеть в Римане, может быть, величайшего математика середины XIX века, непосредственного преемника Гаусса», — отмечал академик П. С. Александров.

24. Готфрид Вильгельм Лейбниц (1646–1716) — немецкий философ, логик, математик, механик, физик, юрист, историк, дипломат, изобретатель и языковед. Основатель и первый президент Берлинской Академии наук, иностранный член Французской Академии наук. Важнейшие научные достижения: Лейбниц, независимо от Ньютона, создал математический анализ — дифференциальное и интегральное исчисления, основанные на бесконечно малых; Лейбниц создал комбинаторику как науку; только он во всей истории математики одинаково свободно работал как с непрерывным, так и с дискретным; заложил основы математической логики; описал двоичную систему счисления с цифрами 0 и 1, на которой основана современная компьютерная техника; в механике ввёл понятие «живой силы» (прообраз современного понятия кинетической энергии) и сформулировал закон сохранения энергии; в психологии выдвинул понятие бессознательно «малых перцепций» и развил учение о бессознательной психической жизни.

25. Давид Гильберт (1862–1943) — немецкий математик-универсал, внёс значительный вклад в развитие многих областей математики. В 1910–1920-е годы (после смерти Анри Пуанкаре) был признанным мировым лидером математиков. Гильберт разработал широкий спектр фундаментальных идей во многих областях математики, в том числе теорию инвариантов и аксиоматику евклидовой геометрии. Он сформулировал теорию гильбертовых пространств, одной из основ современного функционального анализа.

26. Йорген Педерсен Грам (1850–1916) — датский актуарий и математик. Известен своими работами по применению методов наименьших квадратов, исследованиями простых чисел. Его имя носит процесс ортонормирования векторов Грама-Шмидта, теорема Грама и матрица Грама. Грам был первым математиком, создавшим систематическую теорию асимметричного распределения случайных величин, показав, что нормальный закон распределения ошибок Гаусса является частным случаем более общего класса распределений случайных величин.

27. Адриен Мари Лежандр (1752–1833), французский математик, член Парижской АН (1783). Лежандр обосновал и развил теорию геодезических измерений и первым открыл и применил в вычислениях метод наименьших квадратов. В области математического анализа им введены многочлены Лежандра, преобразование Лежандра и исследованы Эйлеровы интегралы I и II рода. Лежандр доказал приводимость эллиптических интегралов к каноническим формам, нашёл их разложения в ряды, составил таблицы их значений. Дал первое последовательное и полное изложение современной ему теории чисел. В вариационном исчислении установил признак существования экстремума. Написал известный учебник геометрии, в котором он безуспешно пытался доказать постулат о параллельных.

28. Пафнутий Львович Чебышев (1821–1894) — русский математик и механик, основоположник петербургской математической школы, академик Петербургской академии наук с 1859 года; «величайший, наряду с Н. И. Лобачевским, русский математик XIX века». Иностранный член Парижской академии наук (1874), член Лондонского королевского общества (1877), Берлинской академии наук (1871), Болонской академии наук (1873), Шведской академии наук (1893) и других академий и научных обществ.

29. Жан Батист Жозеф Фурье (1768–1830) — французский математик и физик, иностранный почетный член Петербургской АН (1829). Автор трудов по алгебре, дифференциальным уравнениям и математической физике. Его «Аналитическая теория тепла» (1822) явилась отправным пунктом в создании теории тригонометрических рядов Фурье.

30. Рудольф Отто Сигизмунд Липшиц (1832–1903) — немецкий математик. Был учеником Дирихле. Профессор Боннского университета с 1864. Основные работы в области математического анализа, теории дифференциальных уравнений, теоретической механики и алгебры. Его учеником был Ф. Клейн.

31. Джон Кранк (1916–2006) — английский математик. Занимался математической физикой, наиболее известен за свою работу в области численных методов решения дифференциальных уравнений в частных производных.

32. Филлис Никольсон (1917–1968) — английский математик. Наиболее известна за свою работу над схемой Кранка-Никольсона совместно с Джоном Кранком.

33. Шарль Франсуа Штурм (1803–1855) — французский математик. Удостоен премии по математике за работы по сжимаемости жидкостей. В 1836 году был избран членом Парижской академии наук. С 1840 года — профессор Политехнической школы. Работы: Мемуар о решении численных уравнений (1829), Курс анализа (1857), Курс механики (1861). Совместно с Лиувиллем создал теорию решения некоторых видов интегральных уравнений.

34. Жозеф Лиувилль (1809–1882) — французский математик. Систематически исследовал разрешимость ряда задач, дал строгое определение понятию элементарной функции и квадратуры. В частности, исследовал возможность интегрирования заданной функции, алгебраической или трансцендентной, в элементарных функциях, и разрешимость в квадратурах линейного уравнения 2-го порядка. Доказал, что специальное уравнение Риккати интегрируется в квадратурах только в тех случаях, которые были даны еще Бернулли. В честь Лиувилля были названы поверхность Лиувилля и сеть Лиувилля, дробный интеграл Лиувилля, а также несколько математических теорем.

35. Марк-Антуан Парсеваль (1755–1836) — французский математик. Сформулировал теорему Парсеваля.

36. Симеон Дени Пуассон (1781–1840) — выдающийся французский ученый, которого по праву считают одним из создателей современной математической физики. Его имя часто встречается в учебниках по математическому анализу и электромагнетизму, теории вероятностей и акустики, квантовой механики и теории упругости. В истории науки Пуассон стоит в одном ряду с его выдающимися современниками — Лапласом, Лагранжем, Фурье, Коши, Ампером, Гей-Люссаком, Френелем.

37. Иоганн Петер Густав Лежён Дирихле (1805–1859) — немецкий математик, внёсший существенный вклад в математический анализ, теорию функций и теорию чисел. Член Берлинской и многих других академий наук, в том числе Петербургской (1837).

38. Алексей Федорович Филиппов (1923–2006) — российский и советский математик, автор широко известного сборника задач по обыкновенным дифференциальным уравнениям (первое издание — 1961 года). Награждён премией им. М. В. Ломоносова (1993) за блестящее лекторское мастерство и создание учебника «Сборник задач по дифференциальным уравнениям», который многократно переиздавался. Удостоен почётного звания «Заслуженный профессор МГУ» (1996). Область научных интересов: дифференциальные уравнения, теория дифракции, дифференциальные уравнения с разрывной правой частью, дифференциальные включения, оптимальное управление, конечно-разностные уравнения, численные методы решения дифференциальных уравнений. К основным научным достижениям А. Ф. Филиппова относятся: введение понятия устойчивости разностной схемы (совместно с В. С. Рябеньким) и доказательство фундаментального факта, что из аппроксимации и устойчивости следует сходимость (теорема Филиппова-Рябенького); книга В. С. Рябенького и А. Ф. Филиппова «Об устойчивости разностных уравнений» (1956) является первой в мире монографией об устойчивости разностных схем; лемма Филиппова о существовании измеримого селектора многозначного отображения и основанная на ней теорема существования оптимального управления для широкого класса задач в теории управляемых систем; применение аппарата дифференциальных включений для исследования дифференциальных уравнений с разрывной правой частью и оптимального управления.

39. Шарль Эмиль Пикар (1856–1941) — французский математик, специализировавшийся в области математического анализа. Член Парижской академии наук с 1889 года.

В 1910 году избран президентом Парижской академии. С 1917 года — непременный секретарь академической Секции математических наук. Член Французской академии с 1924 года (кресло № 1). Иностранный член-корреспондент Петербургской академии наук (1895), почётный член Академии наук СССР (1925). Член Лондонского Королевского общества (1909). В 1908 году руководил IV-м Международным конгрессом математиков в Риме, а в 1920 году — VI-м конгрессом в Страсбурге.

40. Карл Давид Тольме Рунге (1856–1927) — немецкий математик, физик и спектроскопист. Совместно с Г. Кайзером исследовал спектры, интенсивность спектральных линий, различие между искровыми и дуговыми спектрами, установил серии линий для многих элементов, в частности для щелочных и щелочноземельных, открыл ряд закономерностей в их спектрах. Совместно с М. Куттой разработал методы численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений — методы Рунге–Кутты. Исследовал поведение полиномиальной интерполяции при повышении степени полиномов — Феномен Рунге. В области функционального анализа исследовал аппроксимируемость голоморфных функций — теорема Рунге. Известна его работа в области векторного анализа — Вектор Лапласа–Рунге–Ленца.

41. Мартин Вильгельм Кутта (1867–1944) —немецкий математик. Является соавтором известного семейства методов приближённого интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений (методов Рунге–Кутты). Также известен благодаря аэродинамической поверхности Жуковского–Кутты и аэродинамическому условию Кутты, теорема Жуковского в зарубежной литературе называется теоремой Кутты–Жуковского.

42. Джон Куч Адамс (1819–1892) — британский математик и астроном, иностранный член-корреспондент Петербургской академии наук, член Лондонского королевского общества. Работы Адамса относятся к области небесной механики и математики. Анализируя отклонения в движении Урана, он пришел к выводу, что они обусловлены возмущающим действием неизвестной планеты, рассчитал элементы ее эллиптической орбиты, массу и гелиоцентрическую долготу. Адамсу принадлежит также ряд работ по теории движения Луны. Он уточнил ее положение, получил новое значение векового ускорения. Рассчитал орбиту метеорного потока Леонид с учетом возмущения, вносимого планетами; показал, что этот поток имеет кометную орбиту. Математические работы Адамса связаны с решением задач небесной механики и посвящены численному интегрированию дифференциальных уравнений движения. Разработанный им метод до сих пор является одним из основных в этой области.

43. Леонард Эйлер (1707–1783) — швейцарский, немецкий и российский математик и механик, внёсший фундаментальный вклад в развитие этих наук (а также физики, астрономии и ряда прикладных наук). Эйлер — автор более чем 850 работ (включая два десятка фундаментальных монографий) по математическому анализу, дифференциальной геометрии, теории чисел, приближённым вычислениям, небесной механике, математической физике, оптике, баллистике, кораблестроению, теории музыки и другим областям. Он глубоко изучал медицину, химию, ботанику, воздухоплавание, теорию музыки, множество европейских и древних языков. Академик Петербургской, Берлинской, Туринской, Лиссабонской и Базельской академий наук, иностранный член Парижской академии наук. Внёс существенный вклад в становление российской науки. Первые русские академики-математики (С. К. Котельников) и астрономы (С. Я. Румовский) были учениками Эйлера.

44. Алексей Владимирович Гулин (1942–2015) — советский и российский учёный-математик, заслуженный профессор Московского университета (2001), почётный работник выс-

шего профессионального образования Российской Федерации (2005). Работы связаны с исследованием численных методов решения задач математической физики и, в особенности, с теорией устойчивости разностных схем, автор более 130 научных работ. Область научных интересов А.В. Гулина была связана с исследованием численных методов решения задач математической физики и, в особенности, с теорией устойчивости разностных схем. А.В. Гулин читал общий курс «Введение в численные методы» и спецкурсы. Разработанный им курс численных методов был положен в основу других курсов для студентов различных специализаций и теперь широко используется в процессе обучения на факультете ВМК.

45. Николай Сергеевич Бахвалов (1934–2005) — советский и российский математик. Член-корреспондент Академии наук СССР (1981), академик Российской академии наук (1991). Академик Международной академии наук Высшей школы. Лауреат Государственной премии СССР (1985). Награждён орденом «Знак Почёта» (1980), орденом Почёта (2005). Удостоен звания «Заслуженный деятель науки Российской Федерации» в 1994 году. Область научных интересов: вычислительная и прикладная математика, численные методы, оптимизация алгоритмов, теория функций, математические проблемы механики неоднородных сред, в частности композитных материалов, задачи волновой физики.

46. Николай Петрович Жидков (1918–1993) — советский и российский учёный, специалист по вычислительной математике. Кандидат физико-математических наук, доцент механико-математического факультета МГУ и факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ. Автор известных и многократно переиздававшихся учебников «Методы вычислений» (совместно с И. С. Березиным) и «Численные методы» (совместно с Н. С. Бахваловым и Г. М. Кобельковым). Область научных интересов: численные методы, оптимизация, распознавание образов, математические методы в кристаллографии. Принимал участие в решении важнейших прикладных задач космонавтики, ядерной физики, гидродинамики, структурного анализа кристаллов.

47. Георгий Михайлович Кобельков (род. 1947) — специалист в области численных методов решения задач математической физики. Лауреат премии Отделения математики АН СССР 1989 г. Лауреат премии им. М. В. Ломоносова (1998), премии им. М. В. Ломоносова за педагогическую деятельность (2010).

48. Евгений Сергеевич Николаев (род. 1944) — ведущий научный сотрудник, зав. лабораторией разностных методов. Область научных интересов: разработка и реализация численных методов решения задач математической физики и линейной алгебры. Лауреат Премии Совета Министров СССР (1986). Награжден медалью «В память 850-летия Москвы» (1997), Юбилейными знаками «225 лет МГУ» (1980), «250 лет МГУ им. М.В. Ломоносова» (2005), тремя серебряными медалями ВДНХ СССР. Ветеран труда (2005).

49. Иван Семенович Березин (1920–1982) — советский математик, профессор. Награждён двумя орденами Трудового Красного Знамени (1971, 1980), орденом «Знак Почета» (1961). Область научных интересов: дифференциальные уравнения с частными производными, численные методы. Будучи руководителем вычислительного центра МГУ со дня его основания в течение 15 лет, способствовал формированию научных направлений и превращению ВЦ в одну из ведущих научно-исследовательских организаций СССР в области развития численных методов и применения ЭВМ. Один из организаторов факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ. В течение

многих лет читал основной курс «Методы вычислений» на факультетах механико-математическом и вычислительной математики и кибернетики; вёл семинарские занятия по курсу обыкновенных дифференциальных уравнений, руководил спецсеминарами по методам решения экстремальных задач, по методам оптимизации и их применению в структурном анализе. Автор двухтомного учебника «Методы вычислений», созданного в соавторстве с Н. П. Жидковым и переведённого на ряд языков.

50. Николай Николаевич Калиткин (род. 1935) — российский математик, член-корреспондент РАН с 1991, доктор физико-математических наук (1977), сотрудник Института математического моделирования РАН. Лауреат Государственной премии СССР (1969). Главные направления научной деятельности — квантовая механика, математическое моделирование теплофизических свойств веществ, построение иерархии квантовомеханических моделей вещества.

51. Владимир Александрович Ильин (1928–2014) — советский и российский математик. Член-корреспондент АН СССР (1987), действительный член РАН (1991; академик АН СССР с 1990). Академик Международной академии наук высшей школы (1994). Награждён орденами Трудового Красного Знамени (1980), Дружбы народов (1988), Почёта (1999), «За заслуги перед Отечеством» IV степени (2004), «За заслуги перед Отечеством» III степени (2013). Лауреат Государственной премии СССР (1980), лауреат двух Ломоносовских премий МГУ (за научную работу (1980), за педагогическую деятельность (1992)), лауреат премии Министерства высшего и среднего специального образования СССР «За лучшую научную работу» (1988), лауреат премии Президента Российской Федерации в области образования (2005). Область специализации — информатика, вычислительная математика и математическая физика. Внёс заметный вклад в теорию дифференциальных уравнений, спектральную теорию дифференциальных операторов и математическое моделирование.

52. Галина Динховна Ким (род. 1935) — советский и российский математик, автор более 50 научных работ и ряда учебников. Лауреат премии Президента РФ в области образования (2005), Ломоносовской премии МГУ за научную работу (1974). Награждена медалями «Ветеран труда» (1984), «В память 850-летия Москвы» (1997); медалью ВДНХ за комплекс работ по созданию математического обеспечения ЭВМ (1970). Заслуженный преподаватель Московского университета (1997). Область научных интересов: вычислительные методы линейной алгебры, статистический анализ ошибок округления.

53. Дмитрий Павлович Костомаров (1929–2014) — советский и российский математик, академик РАН, лауреат Государственной премии СССР (1981), заслуженный деятель науки России (1980), декан факультета вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова (1990–1999), автор трудов по математическому моделированию. Областью научных интересов Д.П. Костомарова были вычислительная математика, информатика, математическое моделирование в физике плазмы, электродинамике, ядерной физике.

54. Антон Павлович Фаворский (1940–2013) — советский и российский математик, лауреат премии Ленинского комсомола в области науки и техники (1972), награждён медалями «За трудовое отличие» (1987), «В память 850-летия Москвы» (1997), заслуженный профессор Московского университета (2004), автор более 120 научных работ. Область научных интересов: математическое моделирование, вычислительные методы.

55. Валентин Васильевич Воеводин (1934–2007) — советский и российский математик. Награждён орденом «Знак Почёта» (1976), юбилейной медалью «За доблестный труд» (1970), золотыми и серебряными медалями ВДНХ СССР. Является лауреатом Ломоносовской премии МГУ (1974), премии отделения математики АН СССР (1987), премии Правительства РФ в области образования (2003). Область научных интересов: линейная алгебра, разработка численных методов, ошибки округления и устойчивость, информационная структура алгоритмов, математические модели в вычислительных процессах, программное обеспечение для вычислений.

56. Джеймс Харди Уилкинсон (1919–1986) — британский учёный в области вычислительной математики и компьютерных наук. Занимался исследованиями баллистики, открыл множество важных алгоритмов в области вычислительной математики.

57. Андрей Николаевич Тихонов (1906–1993) — советский математик и геофизик, академик Академии наук СССР, дважды Герой Социалистического Труда. Основатель факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ. Автор широко применяемого вычислительного метода, получившего название «регуляризация Тихонова». Ввёл понятие произведения топологических пространств, позднее названное «тихоновским произведением», доказал теоремы о бикомпактности произведения бикомпактных пространств и о существовании неподвижной точки при непрерывных отображениях в топологических пространствах. Им было введено понятие тихоновского куба. Получил фундаментальные результаты в области математической физики, теоретической геофизики, моделирования физико-химических процессов. Доказал теоремы единственности для уравнения теплопроводности, исследовал функциональные уравнения типа Вольтерры. Выполнил фундаментальные исследования по разработке теории и методике применения электромагнитных полей для изучения внутреннего строения земной коры. Является основоположником крупного направления в асимптотическом анализе — теории дифференциальных уравнений с малым параметром при старшей производной. Под руководством Тихонова созданы алгоритмы решения многих прикладных задач. В 1956–1963 годах совместно с Александром Самарским развита теория однородных разностных схем. В рамках работ над проблемами поиска полезных ископаемых создал концепцию обратных и некорректных задач, и разработал методы регуляризации, тем самым стал основателем крупного научного направления, получившего мировое признание.