

УДК 519.63

А. И. КРАВЧУК, П. И. МОНАСТЫРНЫЙ

О КОМПОЗИЦИИ УНИТАРНОЙ РАЗНОСТНОЙ ПРОГОНКИ И МЕТОДА НЕЯВНЫХ ИТЕРАЦИЙ

(Представлено академиком Н. А. Изобовым)

Белорусский государственный университет

Поступило 11.06.2003

1. Рассмотрим трехточечное сеточное уравнение с центральной матрицей эрмитова вида

$$B_k y_{k+1} + D_k y_k + C_k y_{k-1} = f_k, \quad k = \overline{1, n-1}, \tag{1}$$

и присоединенные к нему разделенные граничные условия:

$$G_0 y_0 + G_1 y_1 = g, \tag{2}$$

$$H_{n-1} y_{n-1} + H_n y_n = h, \tag{3}$$

где $D_k = D_k^*$ — заданная эрмитова (или симметрическая) матрица размерности $m \times m$, $B_k = E + B_k^{(1)}$, $C_k = E + C_k^{(1)}$, $B_k^{(1)}, C_k^{(1)}$ — матрицы той же размерности, G_s, H_{n-s} , $s = 0, 1$ — квадратные матрицы порядка m ; $f_k, g, h \in \mathfrak{R}^m$ — известные векторы, обычно $m \ll n$. Предполагается, что $\max(\|B_k^{(1)}\|, \|C_k^{(1)}\|) \leq \sigma$ для всех $k = \overline{1, n-1}$, $\sigma > 0$ — достаточно малое число, $\text{rang}[G_0 | G_1] = \text{rang}[H_{n-1} | H_n] = m$. Требуется найти векторы $y_k, k = \overline{0, n}$ — решение задачи (1)–(3).

При определенных, достаточно частных значениях параметров задачи (1)–(3) ее можно рассматривать [1, 2] как некоторую аппроксимацию граничных задач для уравнений эллиптического типа на плоскости и, где это возможно, использовать присущие параметрам в таких случаях частности и особенности в целях экономизации или улучшения вычислений [1–4]. Здесь мы не предполагаем ограничения на параметры задачи жестко связывать условиями их родства с соответствующими разностными моделями, и сеточную задачу (1)–(3) рассматриваем как самостоятельный объект, который может принадлежать в одних случаях теории и приложениям разностных схем [1, 2], в других — вычислительной линейной алгебре [5, 6].

В настоящей работе для численного решения сеточных задач вида (1)–(3) при ограничениях на входные данные, существенно более слабых, чем традиционные [1, 2] (не требуется, например, выполнение условий $\|D_k^{-1} B_k\| + \|D_k^{-1} C_k\| \leq 1$, как в методе прогонки, или $D_k \equiv D \geq 2E$, $B_k = C_k \equiv E$, как в методе редукции, ибо матрица D_k может быть и вырожденной), дается построение и обоснование метода КПНИ, основанного на композиции унитарной разностной прогонки [3] и метода неявных итераций [2, 4].

2. Запишем сеточную граничную задачу (1)–(3) в форме системы ЛАУ

$$\Phi(Y) \equiv HY + F = 0, \tag{4}$$

где

$$H = \begin{bmatrix} G_0 & G_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ C_1 & D_1 & B_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_2 & D_2 & B_2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & C_{n-2} & D_{n-2} & B_{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & C_{n-1} & D_{n-1} & B_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & H_{n-1} & H_{n-1} \end{bmatrix},$$

$$F = -(g, f_1, f_2, \dots, f_{n-1}, h)^T, \quad Y = (y_0, y_1, y_2, \dots, y_{n-1}, y_n)^T.$$

Введем в рассмотрение матрицу \hat{H} , вычисляемую по правилу

$$\hat{H} = H - \Delta H, \quad (5)$$

где ΔH — квадратная матрица порядка $s = (n+1)m$, все элементы которой на главной диагонали и вне ее нулевые, за исключением наддиагонали и поддиагонали, имеющих соответственно вид $D_{12} = \text{diag}[0, B_1^{(1)}, B_2^{(1)}, \dots, B_{n-2}^{(1)}, B_{n-1}^{(1)}]$ и $D_{21} = \text{diag}[C_1^{(1)}, C_2^{(1)}, \dots, C_{n-2}^{(1)}, C_{n-1}^{(1)}, 0]$.

Пусть $\hat{Y}^{(j)}$ — некоторое начальное приближение к решению Y^* уравнения (4). Рассмотрим для определения $(j+1)$ -й итерации $\hat{Y}^{(j+1)}$ редуцированную систему ЛАУ, содержащую известные векторы $\hat{Y}^{(j)}$ и матрицу \hat{H} :

$$\Phi(\hat{Y}^{(j)}) + \hat{H}(\hat{Y}^{(j+1)} - \hat{Y}^{(j)}) = 0. \quad (6)$$

Формула (6) позволяет вычислить поправку $Z^{(j)} = \hat{Y}^{(j+1)} - \hat{Y}^{(j)}$ и затем найти следующую итерацию $\hat{Y}^{(j+1)}$ по правилу $\hat{Y}^{(j+1)} = \hat{Y}^{(j)} + Z^{(j)}$. По своей сути эти итерации являются псевдоньютоновскими [7], так как верно приближенное равенство $\hat{H} = H \equiv \frac{\partial \Phi(Y)}{\partial Y}$. Обозначим

$Z^{(j)} = (z_0^{(j)}, z_1^{(j)}, z_2^{(j)}, \dots, z_{n-1}^{(j)}, z_n^{(j)})^T$, тогда сеточная граничная задача для определения $z_k^{(j)}$, $k = \overline{0, n}$, будет содержать приведенное сеточное уравнение

$$z_{k+1}^{(j)} + D_k z_k^{(j)} + z_{k-1}^{(j)} = -r_k^{(j)}, \quad k = \overline{1, n-1}, \quad (7)$$

и граничные условия

$$G_0 z_0^{(j)} + G_1 z_1^{(j)} = -r_0^{(j)}, \quad (8)$$

$$H_{n-1} z_{n-1}^{(j)} + H_n z_n^{(j)} = -r_n^{(j)}, \quad (9)$$

где

$$r_k^{(j)} = C_k \hat{y}_{k+1}^{(j)} + D_k \hat{y}_k^{(j)} + B_k \hat{y}_{k-1}^{(j)} - f_k,$$

$$r_0^{(j)} = G_0 \hat{y}_0^{(j)} + G_1 \hat{y}_1^{(j)} - g, \quad r_n^{(j)} = H_{n-1} \hat{y}_{n-1}^{(j)} + H_n \hat{y}_n^{(j)} - h.$$

Задача (7)–(9) по своей структуре (уравнение (7) — приведенное) и условиям на параметры (матрица D_k — эрмитова), определяющие ее, такова, что для ее численного решения может быть эффективно реализован метод унитарной разностной прогонки [3, 4].

Применительно к задаче (7)–(9) в этом методе [3] вначале находятся матрицы $u_k = (u_{ij}^{(k)})_1^m$, как решение разностной задачи Коши для уравнения

$$u_{k+1} = [D_k (E + u_k) - 2iu_k] [D_k (E + u_k) + 2iE]^{-1}, \quad k = \overline{1, n-1}, \quad (10)$$

с начальным условием

$$u_1 = (G_0 + iG_1)^{-1} (G_0 - iG_1). \quad (11)$$

Если $D_k = D_k^*$ и $G_1 G_0^* = G_0 G_1^*$, то все матрицы $u_k = (u_{ij}^{(k)})_1^m$, $k = \overline{1, n}$ унитарны [3] и, в частности, верны равенства

$$\sum_{j=1}^m |u_{ij}^{(k)}|^2 = 1, \quad i = \overline{1, m}, \quad k = \overline{1, n}.$$

Далее вычисляются сеточные вектор-функции $w_k^{(j)}$ и $v_k^{(j)}$ как решения соответствующих разностных задач Коши [3]:

$$\begin{aligned} w_{k+1}^{(j)} &= L_k w_k^{(j)} + S_k^{(j)}, \quad k = \overline{1, n-1}, \quad j = 1, 2, \dots, \\ w_1^{(j)} &= (G_0 + iG_1)^{-1} (-r_0^{(j)}), \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$L_k = R_k^{(1)} \frac{i}{2} (E - u_k^*) + \frac{i}{2} (E - u_{k+1}) \frac{1}{2} (u_k^* + E),$$

$$S_k^{(j)} = -\frac{i}{2} (E - u_{k+1}) (-r_k^{(j)}), \quad R_k^{(1)} = \frac{1}{2} (E + u_{k+1}) + \frac{i}{2} (E - u_{k+1}) D_k,$$

и

$$\begin{aligned} v_k^{(j)} &= [M_k^{(2)}]^{-1} v_{k+1}^{(j)} + [M_k^{(2)}]^{-1} (T_k^{(j)} - M_k^{(1)} w_k^{(j)}), \quad k = \overline{n-1, 1}, \quad j = 0, 1, \dots, \\ v_n^{(j)} &= \Delta_n^{-1} \left(-r_n^{(j)} - \left[\frac{1}{2} H_{n-1} (E + u_n^*) + \frac{i}{2} H_n (E - u_n^*) \right] w_n^{(j)} \right), \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\Delta_n = \frac{1}{2} H_n (E + u_n^*) - \frac{i}{2} H_{n-1} (E - u_n^*), \quad M_k^{(1)} = R_k^{(2)} \frac{i}{2} (E - u_k^*) - \frac{1}{2} (E + u_{k+1}) \frac{1}{2} (u_k^* + E),$$

$$M_k^{(2)} = R_k^{(2)} \frac{1}{2} (E + u_k^*) - \frac{1}{2} (E + u_{k+1}) \frac{1}{2} (u_k^* - E), \quad R_k^{(2)} = \frac{i}{2} (E - u_{k+1}) - \frac{1}{2} (E + u_{k+1}) D_k,$$

$$T_k^{(j)} = \frac{1}{2} (E + u_{k+1}) (-r_k^{(j)}).$$

Компоненты $z_0^{(j)}, z_1^{(j)}, \dots, z_n^{(j)}$ искомой поправки $Z^{(j)}$ для определения $\hat{Y}^{(j+1)}$ вычисляются по формулам:

$$z_{k-1}^{(j)} = \frac{1}{2} (E + u_k^*) w_k^{(j)} - \frac{i}{2} (E - u_k^*) v_k^{(j)}, \quad (14)$$

$$z_k^{(j)} = \frac{i}{2} (E - u_k^*) w_k^{(j)} + \frac{1}{2} (E + u_k^*) v_k^{(j)}, \quad k = \overline{1, n}. \quad (15)$$

Таким образом, суть метода КПНИ состоит в последовательном вычислении $u_k, w_k^{(j)}, v_k^{(j)}$ по рекуррентным формулам (7)–(13), поправок $z_{k-1}^{(j)}, z_k^{(j)}$ — по формулам (14), (15) и $(j+1)$ -й итерации $\hat{Y}^{(j+1)}$ по формуле $\hat{Y}^{(j+1)} = \hat{Y}^{(j)} + Z^{(j)}$.

З а м е ч а н и е 1. В методе КПНИ основной объем вычислений падает на определение матриц $u_k, k = \overline{1, n}$, как решения разностной задачи Коши (10, 11). Эти матрицы не зависят от шага j итераций и поэтому вычисляются только один раз при $j = 0$, что обеспечивает экономичность вычисления всех последующих итераций $\hat{Y}^{(j)}$ при $j = 1, 2, \dots$.

3. Выявим условия однозначной разрешимости редуцированной и исходной сеточной граничной задачи.

Вначале отметим, что в формулах (14), (15) матрица перехода от истинных значений поправок $z_{k-1}^{(j)}, z_k^{(j)}$ к вспомогательным сеточным вектор-функциям $w_k^{(j)}, v_k^{(j)}$ унитарна, поэтому в евклидовой норме верно тождество $\|w_k^{(j)}\|^2 + \|v_k^{(j)}\|^2 = \|z_{k-1}^{(j)}\|^2 + \|z_k^{(j)}\|^2$. Оно является важной характеристикой вычислительных свойств $w_k^{(j)}, v_k^{(j)}$, сопряженной со свойствами искомых поправок $z_{k-1}^{(j)}, z_k^{(j)}$.

Т е о р е м а 1. Пусть выполняются условия: 1) $D_k = D_k^*$, $k = \overline{1, n-1}$; 2) $G_1 G_0^* = G_0 G_1^*$. Если $\det \Delta_n \neq 0$, $\Delta_n = \frac{1}{2} H_n (E + u_n^*) - \frac{i}{2} H_{n-1} (E - u_n^*)$, то редуцированная сеточная граничная задача (7)–(9) по методу КПНИ однозначно разрешима, и в системе ЛАУ (6) матрица \hat{H} невырождена ($\det \hat{H} \neq 0$).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Рассмотрим соответствующую задаче (7)–(9) однородную задачу, положив $r_k^{(j)} \equiv 0$, $k = \overline{0, n}$. Все формулы для u_k , $w_k^{(j)}$ не имеют особенностей и однозначно разрешимы [3], при этом $w_k^{(j)} \equiv 0$, так как $w_1^{(j)} = 0$ и $S_k^{(j)} \equiv 0$. Начальное значение для $v_n^{(j)}$ определяется из системы ЛАУ

$$\Delta_n v_n^{(j)} = - \left(r_n^{(j)} + \left[\frac{1}{2} H_{n-1} (E + u_n^*) + \frac{i}{2} H_n (E - u_n^*) \right] w_n^{(j)} \right). \quad (16)$$

Поскольку в (16) $r_n^{(j)} = w_n^{(j)} = 0$ и $\det \Delta_n \neq 0$, то $v_n^{(j)} = 0$ и, значит, из (13) следует $v_k^{(j)} \equiv 0$, $k = \overline{1, n}$, так как $w_k^{(j)} \equiv 0$ и $T_k^{(j)} \equiv 0$. В этом случае по формулам (14), (15) получаем $z_k^{(j)} \equiv 0$, $k = \overline{0, n}$, следовательно, однородная сеточная граничная задача (7)–(9) имеет тривиальное и только тривиальное решение. Система ЛАУ (6) при $\Phi(\hat{Y}^{(j)}) = 0$ является алгебраическим эквивалентом однородной сеточной граничной задачи (7)–(9), и также имеет тривиальное и только тривиальное решение $Z^{(j)} = \hat{Y}^{(j+1)} - \hat{Y}^{(j)} \equiv 0$. Значит, неоднородная система ЛАУ (6) однозначно разрешима и $\det \hat{H} \neq 0$. Теорема доказана.

Исследуем условия однозначной разрешимости исходной сеточной граничной задачи (1)–(3).

Т е о р е м а 2. Пусть выполняются условия: α_1) $D_k = D_k^*$, $k = \overline{1, n-1}$; α_2) $G_1 G_0^* = G_0 G_1^*$; α_3) $\det \Delta_n \neq 0$. Если матрицы H и \hat{H} такие, что: β_1) $\|H - \hat{H}\| = \|\Delta H\| \leq \mu$, $\mu > 0$; β_2) $\|\hat{H}^{-1}\| = \lambda$, $\lambda > 0$; β_3) для чисел μ и λ выполняется неравенство $\mu\lambda < 1$, то матрица H невырождена, $\|H^{-1}\| \leq \frac{\lambda}{1 - \mu\lambda}$ и сеточная граничная задача (1)–(3) однозначно разрешима.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Система ЛАУ (4) является алгебраической записью задачи (1)–(3), поэтому доказательство теоремы сводится к существованию H^{-1} . В силу условий α_i), $i = \overline{1, 3}$ из теоремы 1 следует существование \hat{H}^{-1} . Учитывая условия β_i), $i = \overline{1, 3}$, и применяя обобщенную теорему Банаха [8] о возмущенном операторе, получим, что H^{-1} существует и $\|H^{-1}\| \leq \frac{\lambda}{1 - \mu\lambda}$. Следовательно, задача (1)–(3) однозначно разрешима. Теорема доказана.

4. Пусть поправки $z_k^{(j)}$, $k = \overline{0, n}$ определяются как решение задачи (7)–(9), а $(j+1)$ -е приближение $\hat{Y}^{(j+1)}$ к искомому решению Y^* задачи (1)–(3) вычисляется по формуле $\hat{Y}^{(j+1)} = \hat{Y}^{(j)} + Z^{(j)}$. Дадим оценку погрешности j -й итерации $\hat{Y}^{(j)}$ и выявим условия, при которых $\left\{ \hat{Y}^{(j)} \right\}_0^\infty$ сходится. Обозначим: $E^{(j)} = \hat{Y}^{(j)} - Y^*$, $E^{(j)} = \left(\epsilon_0^{(j)}, \epsilon_1^{(j)}, \dots, \epsilon_n^{(j)} \right)^T$.

Т е о р е м а 3. Пусть для сеточной граничной задачи (1)–(3) выполняются условия: $D_k = D_k^*$, $G_1 G_0^* = G_0 G_1^*$, $\det \Delta_n \neq 0$. Если нормы матриц $\Delta H = H - \hat{H}$ и \hat{H}^{-1} удовлетворяют неравенствам: $\|\Delta H\| = \|H - \hat{H}\| \leq \mu$, $\|\hat{H}^{-1}\| = \lambda$ и $\mu\lambda = q < 1$, то метод КПНИ сходится и для погрешности $E^{(j)}$ j -й итерации $\hat{Y}^{(j)}$ справедлива оценка $\|E^{(j)}\| \leq q^j \|E^{(0)}\|$, $j = 0, 1, \dots$

Доказательство. По теореме 2 матрица H имеет обратную и, следовательно, задача (1)—(3) однозначно разрешима. Поскольку $\Phi: \mathfrak{R}^s \rightarrow \mathfrak{R}^s$ линейный оператор, то все ньютоновские итерации $Y^{*(j+1)}$, определяемые по правилу

$$\Phi(\bar{Y}^{(j)}) + H \left(Y^{*(j+1)} - \bar{Y}^{(j)} \right) = 0 \quad (17)$$

при произвольном $\bar{Y}^{(j)} \in \mathfrak{R}^s$ совпадают с Y^* , $Y^{*(j+1)} \equiv Y^*$. Из (6), (17) получим

$$\bar{H}E^{(j+1)} = \Delta HE^{(j)}, \quad j = 0, 1, \dots \quad (18)$$

Используя оценки для $\|\bar{H}^{-1}\|$ и $\|\Delta H\|$, из (18) получим

$$\|E^{(j+1)}\| \leq \|\bar{H}^{-1}\| \cdot \|\Delta H\| \cdot \|E^{(j)}\| \leq \lambda \mu \|E^{(j)}\| = q \|E^{(j)}\|.$$

Значит, $\|E^{(j)}\| \leq q^j \|E^{(0)}\|$, $j = 0, 1, \dots$ и $\lim_{j \rightarrow \infty} \|E^{(j)}\| = 0$ или $\lim_{j \rightarrow \infty} \bar{Y}^{(j)} = Y^*$. Теорема доказана.

З а м е ч а н и е 2. Если привести (6) к канонической форме одношагового итерационного процесса, то для матрицы перехода S получим $S = E - \bar{H}^{-1}H$. Поскольку \bar{H}^{-1} существует и $\bar{H} = H - \Delta H$, то $S = E - (H - \Delta H)^{-1}H$, и при $\|\Delta H\| \rightarrow 0$ будет также $\|S\| \rightarrow 0$. Поэтому итерации $\bar{Y}^{(j)}$ в методе КПНИ при достаточно малых $\|\Delta H\|$, обладая геометрической сходимостью, по своей сути реально будут иметь повышенную точность, характерную для модификаций метода Ньютона [7].

Литература

1. Самарский А. А. Теория разностных схем. М., 1989.
2. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. М., 1978.
3. Монастырный П. И., Кремень Ю. А. // Докл. АН БССР. 1991. Т. 35, № 7. С. 589—593.
4. Монастырный П. И. // Докл. НАН Беларуси. 2000. Т. 44, № 1. С. 35—38.
5. Годунов С. К. Решение систем линейных уравнений. Новосибирск, 1980.
6. Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М.; Л., 1963.
7. Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М., 1975.
8. Канторович Л. В., Акилов Г. П. Функциональный анализ. М., 1977.

KRAVCHUK A. I., MONASTYRNY P. I.

ON COMPOSITION OF UNITARY DIFFERENCE FACTORIZATION AND METHOD OF IMPLICIT ITERATIONS

Summary

A method based on the composition of unitary difference factorization and method of implicit iterations are constructed and substantiated for the numerical solution of boundary general problems in case of the three-point net equations with central Hermitian matrix.