

УДК 519.61+519.62

В.В. БОБКОВ

СПЕКТРАЛЬНО-МОНОТОННЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ МАТРИЧНОЙ ЭКСПОНЕНТЫ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ

A method of polynomial approximations to the matrix exponential is proposed. In case of real spectrum it guarantees monotone sequential approximation of the exponential matrix eigenvalues. The application to the numerical solution of stiff systems of differential equations and to the solution of linear algebraic equations is described.

В практике математического моделирования, ориентированной на использование современной вычислительной техники, естественно встает вопрос о наличии эффективных вычислительных модулей для численного решения математических задач, связанных с избранным классом исследуемых явлений. Серьезные трудности возникают, например, даже в случае классической задачи численного решения системы линейных алгебраических уравнений или задачи обращения невырожденной матрицы, скажем, в ситуации плохой обусловленности, а также при решении актуальной для практики задачи численного анализа жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (даже линейных) и связанной с предыдущими задачи приближения матричной экспоненты. Названные задачи характерны, в частности, для случая математического моделирования разного рода эволюционных процессов. Разработка соответствующих вычислительных алгоритмов, конечно, достойна внимания.

По определению [1, с. 194] матричная экспоненциальная функция задается рядом

$$e^{A\tau} = \sum_{k=0}^{\infty} A^k \tau^k / k!, \quad (1)$$

который в случае постоянной матрицы A сходится равномерно в любой конечной области изменения скалярной переменной τ . Далее будем предполагать, что вещественная матрица A не является де-

фектной [2, с. 54] и обладает вещественным спектром $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, занумерованным для определенности в порядке неубывания собственных значений. В важном для приложений случае $\tau > 0$, $\lambda_i < 0$, $i = 1, 2, \dots, n$, традиционное использование в качестве приближения матричной экспоненты конечной суммы ряда (1) обладает существенными недостатками. Например, на спектральном уровне соответствующее многочленное приближение

$$e^{\lambda_i \tau} \approx \sum_{k=0}^m \lambda_i^k \tau^k / k! = P_m(\lambda_i \tau) \quad (2)$$

не обладает свойством монотонного (с ростом m) характера приближений, что в случае больших по абсолютной величине значений $\lambda_i \tau$ может стать серьезным препятствием из-за реальной ограниченности разрядной сетки вычислительной техники. Кроме того, при этом с ростом τ может быть нарушено характерное для матрицы $e^{A\tau}$ свойство ее невырожденности и положительности спектра. В противовес неравенствам $0 < e^{\lambda_i \tau} < 1$ аналогичное и важное для устойчивой матрицы A свойство

$$0 < P_m(\lambda_i \tau) < 1 \quad (3)$$

может выполняться также лишь при малых значениях τ . И аналог естественного в случае $e^{A\tau}$ свойства спектральной упорядоченности (спектральной монотонности)

$$0 < P_m(\lambda_i \tau) < P_m(\lambda_j \tau) \quad \text{для } \lambda_i < \lambda_j \quad (4)$$

в (2) тоже может быть обеспечен лишь ценой уменьшения τ .

Первоочередной задачей станет построение для матричной экспоненты многочленных приближений, свободных, по крайней мере, от указанных недостатков. Для этого сначала преобразуем (1) к виду

$$e^{A\tau} = e^{-\mu\tau} e^{(I + \frac{1}{\mu}A)\mu\tau} = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(I + \frac{1}{\mu}A \right)^k, \quad (5)$$

где через I обозначена единичная матрица соответствующей A размерности, а

$$a_k = \frac{\mu^k \tau^k}{k!} e^{-\mu\tau}. \quad (6)$$

Выбором положительной константы $\mu \geq -\lambda_1$ (скажем, выбором $\mu \geq \|A\|$) для случая $\lambda_i < 0$ будет обеспечено выполнение важного (см. [3, с. 130]) для возводимой в степень матрицы $I + \frac{1}{\mu}A$ свойства

$$0 \leq 1 + \frac{1}{\mu} \lambda_i < 1, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (7)$$

Заметим, что знак равенства в (7) может иметь место лишь при $\mu = -\lambda_1$. Скалярные коэффициенты $a_k = a_k(\mu\tau)$ в (5) при любых фиксированных значениях $\mu\tau$ также обладают важным свойством

$$0 < a_k < 1, \quad (8)$$

при этом (см. (6))

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k = 1. \quad (9)$$

Кроме того, в силу (6) справедливо рекурсивное соотношение

$$a_k = \frac{\mu\tau}{k} a_{k-1}, \quad (10)$$

из которого при $k > \mu\tau$ следует монотонное с ростом k стремление a_k к нулю. Очевидно, что для многочленного приближения вида

$$E_m^*(A, \tau) = \sum_{k=0}^m a_k \left(I + \frac{1}{\mu}A \right)^k \quad (11)$$

к матричной экспоненте $e^{A\tau}$ на спектральном уровне при любом τ справедливы неравенства

$$0 < E_j^*(\lambda_i, \tau) \leq E_{j+1}^*(\lambda_i, \tau) \leq e^{\lambda_i \tau}, \quad j \geq 0. \quad (12)$$

Здесь, как и в (7), знак равенства имеет место лишь при $\mu = -\lambda_1$. Обратим внимание также на то, что верны и соотношения

$$\frac{\partial^j}{\partial \lambda^j} E_m^*(\lambda, \tau) = \tau^j E_{m-j}^*(\lambda, \tau) > 0, \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad (13)$$

где через λ обозначена спектральная переменная функции $e^{\lambda\tau}$. Это проверяется непосредственно (см. (6), (10) – (12)):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} E_m^*(\lambda, \tau) &= \sum_{k=1}^m a_k k \left(1 + \frac{1}{\mu} \lambda\right)^{k-1} \frac{1}{\mu} = \tau \sum_{k=1}^m a_{k-1} \left(1 + \frac{1}{\mu} \lambda\right)^{k-1} = \tau E_{m-1}^*(\lambda, \tau), \\ &\dots \\ \frac{\partial^m}{\partial \lambda^m} E_m^*(\lambda, \tau) &= \tau^m E_0^*(\lambda, \tau) = \tau^m e^{-\mu\tau}. \end{aligned}$$

Соотношения (13) хорошо согласуются со случаем соответствующих производных функции $e^{A\tau}$. Из (12), (13), в частности, следует, что для $E_m^*(A, \tau)$ при $m > 0$ (и любом τ) имеет место и аналог свойства (см. (4)) спектральной монотонности матричной экспоненты $e^{A\tau}$:

$$0 < E_m^*(\lambda_i, \tau) < E_m^*(\lambda_j, \tau) \quad \text{для } \lambda_i < \lambda_j. \quad (14)$$

В случае $\lambda_i < 0$, кроме того, при любом τ для $E_m^*(A, \tau)$ справедливы (см. (12)) и неравенства типа (3):

$$0 < E_m^*(\lambda_i, \tau) < 1, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (15)$$

Полезно иметь в виду также, что приближение $E_m^*(A, \tau)$ к матричной экспоненте $e^{A\tau}$ обладает следующим свойством аппроксимации спектральной функции $e^{A\tau}$:

$$\frac{\partial^k}{\partial \lambda^k} E_m^*(-\mu, \tau) = \tau^k e^{-\mu\tau}, \quad k = 0, 1, \dots, m. \quad (16)$$

Справедливость последних равенств с учетом (5), (6) проверяется непосредственно. Для случая же приближения $P_m(\lambda\tau)$ (см. (2)) столь высокий уровень совпадения с $e^{\lambda\tau}$ имеет место не при $\lambda = -\mu$, как в (16), а для $\lambda = 0$, чем и предопределяются отмеченные различия в свойствах приближений $P_m(A\tau)$ и $E_m^*(A, \tau)$. Однако, устранив описанным приемом построения $E_m^*(A, \tau)$ упомянутые несоответствия с $e^{A\tau}$ приближений вида $P_m(A\tau)$, мы наделили $E_m^*(A, \tau)$ отсутствующим в случае $P_m(A\tau)$ существенным недостатком (см. (8), (9)):

$$E_m^*(0, \tau) < 1. \quad (17)$$

Важное для функции $e^{\lambda\tau}$ свойство быть равной единице при $\lambda = 0$ применительно к $E_m^*(\lambda, \tau)$ выполняется лишь в пределе при $m \rightarrow \infty$.

С целью построения нового типа приближений $E_{m,j}(A, \tau)$ к $e^{A\tau}$, обладающих при любом τ в дополнение к уже отмеченным привлекательным свойствам $E_m^*(A, \tau)$ также и свойством (см. (17))

$$E_{m,j}(0, \tau) = 1, \quad (18)$$

изменим конструкцию $E_m^*(A, \tau)$, к примеру, следующим образом. Станем искать новые приближения в форме

$$E_{m,j}(A, \tau) = E_m^*(A, \tau) + a_{m,1} \left(1 + \frac{1}{\mu} A\right)^j, \quad 0 \leq j \leq m+1. \quad (19)$$

В силу требования вида (18) из соответствующего (19) спектрального представления находим, что

$$a_{m,1} = 1 - \sum_{k=0}^m a_k. \quad (20)$$

Из (20) с учетом (6) непосредственно следует, что

$$a_{m+1,1} = a_{m,1} - a_{m+1}, \quad a_{0,1} = 1 - a_0. \quad (21)$$

Очевидно, что при этом справедливы неравенства

$$0 < a_{m,1} < 1, \quad m \geq 0. \quad (22)$$

В силу (9), (20) – (22) скалярные коэффициенты $a_{m,1} = a_{m,1}(\mu\tau)$ с ростом m при любом τ монотонно убывают и стремятся к нулю.

Заметим, что в частном случае (19) при $j = m + 1$ соответствующее многочленное приближение для $e^{A\tau}$ было уже рассмотрено в [4]. Используемый в [4] способ его построения основан на следующих требованиях (взаимосогласовности операторов):

$$E_{m,m+1}(A, \tau) = I + S_m^*(A, \tau)A, \quad (23)$$

$$S_m^*(A, \tau) = \int_0^\tau E_m^*(A, \xi) d\xi. \quad (24)$$

Равенства (23), (24) являются многочленным аналогом очевидного тождественного соотношения для матричной экспоненциальной функции $e^{A\tau}$ (см. (1)):

$$e^{A\tau} = I + \int_0^\tau e^{A\xi} d\xi A. \quad (25)$$

Многочленное приближение $E_{m,m+1}(A, \tau)$ в дополнение к (18) сохраняет для (19) аналогичные (16) свойства аппроксимации:

$$\frac{\partial^k}{\partial \lambda^k} E_{m,m+1}(-\mu, \tau) = \tau^k e^{-\mu\tau}, \quad k = 0, 1, \dots, m. \quad (26)$$

В случае (19) при $j < m + 1$ соответствующие равенства типа (26) имеют место уже не для всех значений $k = 0, 1, \dots, m$. К примеру, при $j = m$ отсутствует последнее из них, а при $j = 0$ – первое. Отметим, в частности, что последние многочлены $E_{m,0}(A, \tau)$, $m \geq 0$, в паре с $E_m^*(A, \tau)$ обеспечивают очевидную двусторонность приближений спектра матрицы $e^{A\tau}$ с отклонением, не превосходящим величины $a_{m,1}$, монотонно стремящейся к нулю при $m \rightarrow \infty$ (для любого фиксированного значения τ). Очевидно также, что из (19) с учетом (11), (21) следуют равенства

$$E_{m,m+1}(A, \tau) = E_{m+1,m+1}(A, \tau), \quad m \geq 0. \quad (27)$$

Не останавливаясь здесь на подобного рода деталях, заметим лишь, что для многочленных приближений вида (19) остаются в силе многие из отмеченных в [4] (см. также [5]) привлекательных свойств многочленов $E_{m,m+1}(A, \tau)$, по крайней мере, в рамках выполнения первоочередной задачи, сформулированной во вводной части статьи.

Матричная экспоненциальная функция, как известно, часто встречается в прикладных задачах математики. В рамках проблемы численного моделирования эволюционных процессов достаточно указать хотя бы на широко известную формулу ([6, с. 127])

$$u(t + \tau) = e^{A\tau} y + \int_0^\tau e^{A\xi} a(t + \tau - \xi) d\xi \quad (28)$$

для решения линейных задач вида

$$u'(x) = Au(x) + a(x), \quad u(t) = y. \quad (29)$$

Построенные спектрально-монотонные аппроксимации для $e^{A\tau}$ могут быть полезными, конечно, и в более общем случае нелинейных задач

$$u'(x) = f(x, u(x)), \quad u(t) = y, \quad (30)$$

если при их численном решении используется, к примеру, процесс последовательных локальных приближений линейными задачами типа (29). В качестве начального приближения при этом может быть избрано (см., например, [7]) решение задачи (типа (29))

$$u'(x) = Au(x) + a, \quad u(t) = y, \quad (31)$$

где

$$A = f_u(t, y), \quad a = f(t, y) - Ay. \quad (32)$$

Задаваемое в этом случае (см. (28)) формулой

$$u(t + \tau) = e^{A\tau} y + \int_0^\tau e^{A\xi} d\xi a \quad (33)$$

решение задачи (31), (32) можно рассматривать в качестве метода первого порядка точности для задачи (30).

Если матрица A является невырожденной, приближение (33) может быть записано (см. (25)) в форме

$$u(t + \tau) = -A^{-1}a + e^{A\tau}(y + A^{-1}a). \quad (34)$$

Практическое использование (34) предполагает (даже при наличии хороших аппроксимаций $e^{A\tau}$) предварительное решение системы линейных алгебраических уравнений

$$Au + a = 0. \quad (35)$$

Найдя тем самым стационарное решение (положение равновесия) системы обыкновенных дифференциальных уравнений из (31)), мы сможем для функции $v(x) = u(x) + A^{-1}a$ записать задачу Коши вида

$$v'(x) = Av(x), \quad v(t) = y + A^{-1}a. \quad (36)$$

В силу (34) для численного решения задачи (36) можно воспользоваться простым соотношением $v(t + \tau) = e^{A\tau}v(t)$ с привлечением построенных приближений матричной экспоненты. Если же отказаться от этапа предварительного нахождения решения системы (35), то при построении приближений на основе формулы (33), в отличие от (34), метод может потерять важное свойство быть точным на стационарном решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений из (31). Условия сохранения такого свойства приведены, например, в [4]. Выполнение этих условий обеспечено, в частности, в методах (см. (23), (24)) вида

$$\hat{y}^{m+1} = E_{m,m+1}(A, \tau)y + \frac{1}{\mu} \sum_{k=0}^m a_{k,1} \left(I + \frac{1}{\mu} A \right)^k a, \quad m \geq 0, \quad (37)$$

для которых в [4] (см. также [5]) отмечены и другие привлекательные свойства согласованности с точным решением (см. (33)) задачи вида (31). Для решения последней задачи могут быть, конечно, избраны и другие численные методы, скажем, вида

$$\hat{y} = Ey + g \quad (38)$$

с отличными от $E_{m,m+1}(A, \tau)$ и $S_m^*(A, \tau)$ (см. (23), (24)) приближениями для $e^{A\tau}$ и $\int_0^\tau e^{A\xi} d\xi$, используемыми в случае (37).

Последовательное применение (38) приводит к представлениям

$$y^j = E^j y + (I + E + E^2 + \dots + E^{j-1})g = E^j y + (I - E^j)(I - E)^{-1}g, \quad j > 0, \quad (39)$$

связывающим $y^j \approx u(t + j\tau)$ с начальным значением $y = u(t)$. При $j = 2^k$ формулы (39) легко преобразовать (см., например, [8]) к виду

$$y^{2^k} = E_k y + g^k, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (40)$$

где

$$E_k = E_0^{2^k} = E_{k-1}^2, \quad E_0 = E, \quad (41)$$

$$g^k = \prod_{i=1}^k (I + E_{i-1})g^0 = g^{k-1} + E_{k-1}g^{k-1}, \quad g^0 = g. \quad (42)$$

С использованием формул (40) – (42) могут быть получены (при точном исполнении) те же значения векторов y^{2^k} , $k > 0$, что и в случае последовательного применения формулы (38) (см. также (39)) для $j = 2^k$, однако при этом удастся избежать нахождения значений y^j для $j \neq 2^i$, $i = 1, 2, \dots, k$.

Если метод вида (38) обеспечивает (что автоматически выполняется в случае (37)) стремление с ростом j матрицы E^j к нулевой, то при любом начальном значении y вектор y^j стремится (см. (39)) к $(I - E)^{-1}g$. Для выполнения требования

$$(I - E)^{-1}g = -A^{-1}a \quad (43)$$

при этом достаточно выбор E и g подчинить условиям вида

$$E = I + SA, \quad g = Sa \quad (44)$$

с любой неособенной матрицей S . В этом случае

$$g^k = g^{k-1} + E_{k-1} g^{k-1} \quad (45)$$

будет с ростом k стремиться к $-A^{-1}a$. Если нас интересует лишь решение системы (35), вообще нет необходимости находить векторы y^j , $j > 0$, а можно ограничиться рекурсивными формулами вида (45). Отметим, что формулы (40) – (42) хорошо ориентированы на численную реализацию с использованием современных многопроцессорных вычислительных систем.

Для метода (37) условия (44) и, следовательно, (43), конечно, выполняются (см. (23), (24)). С использованием формул (44) можно уже строить и более простые, чем (37), методы вида (38) численного решения как задач вида (31), так и вида (35), опираясь, скажем, на спектрально-монотонные приближения (19) для матричной экспоненты, в том числе и в простейших вариантах $E_{0,1}(A, \tau) = E_{1,1}(A, \tau)$ (см. (27)) или $E_{1,0}(A, \tau)$.

В настоящее время для численного решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений традиционно предпочитают использовать неявные методы. Для таких методов (например, в случае задачи (29)) приближения к матричной экспоненте $e^{A\tau}$ часто строят на пути обращения приближений к матрице $e^{-A\tau}$ вида (см. [1])

$$e^{-A\tau} \approx \sum_{k=0}^m (-1)^k A^k \tau^k / k!, \quad (46)$$

что при $\lambda_i < 0$, $i = 1, 2, \dots, n$, позволяет избежать ряда отмеченных недостатков приближений типа (2). Чтобы не обсуждать затрагиваемые вопросы для всего класса неявных методов, ограничимся здесь лишь примером неявного метода Эйлера, наиболее широко известного среди методов такого типа. Для этого метода справедливо следующее приближение матричной экспоненты (см. (46) при $m = 1$):

$$e^{A\tau} \approx (I - \tau A)^{-1}. \quad (47)$$

Формальный анализ спектра матрицы, приближающей $e^{A\tau}$ в (47), нередко приводит к неоправданному использованию термина «устойчивость метода» (см., например, [9, с. 353–354]), что может явиться поводом для его неосмотрительного применения и в ситуации, когда в спектре матрицы A есть положительные собственные значения λ_i , для которых $\tau\lambda_i > 2$. В таком случае утверждаемая устойчивость скорее ложная. Подробнее об этом сказано, например, в [10]. Кроме того, присущее неявному методу Эйлера, казалось бы, полезное свойство L -устойчивости (см. [11, с. 58]), вопреки ожиданиям, не дает этому методу особых преимуществ при его практическом использовании, так как монотонный (с ростом шага τ) характер поведения ошибок (в частности, ошибок приближения спектральной функции матрицы $e^{A\tau}$), оказывается (см., например, [5]), можно гарантировать здесь лишь при суровых ограничениях на величину τ .

В дополнение к отмеченному укажем и еще на один из недостатков этого метода, порождаемый способом его построения. В случае, например, задачи (31) при записи неявного метода Эйлера в форме (38) он принимает вид

$$\hat{y} = (I - \tau A)^{-1} y + \tau (I - \tau A)^{-1} a. \quad (48)$$

Непосредственно проверяется, что решение, задаваемое формулой (48), при точном его нахождении удовлетворяет и равенству

$$\hat{y} = y + \tau (I - \tau A)^{-1} (Ay + a), \quad (49)$$

полученному на пути мультипликативной корректировки явного метода Эйлера (с корректором $(I - \tau A)^{-1}$). В обозначениях (38) для методов (48), (49) при одинаковом

$$g = \tau (I - \tau A)^{-1} a \quad (50)$$

имеем соответственно

$$E = (I - \tau A)^{-1} \quad (51)$$

для неявного метода Эйлера и

$$E = I + \tau (I - \tau A)^{-1} A \quad (52)$$

в случае метода (49). Тем самым любое (одинаковое для (50), (52)) приближение матрицы $(I - \tau A)^{-1}$ (при $\lambda_i < 0$, $i = 1, 2, \dots, n$), обеспечивающее соответствующей (52) приближенной матрице $\tilde{E}^j$ свойство

стремления к нулевой при $j \rightarrow \infty$, в отличие от аналогичной ситуации в случае неявного метода Эйлера (см. (50), (51)), сохраняет аналог требования (43) (см. (44)). К примеру, даже при грубом приближении $(I - \tau A)^{-1} \approx \frac{1}{1 + \mu\tau} I$ в случае соответствующего (49) аналога получим явный метод

$$\hat{y} = y + \frac{\tau}{1 + \mu\tau} (Ay + a), \quad (53)$$

выводящий при любом τ на правильное положение равновесия системы из (31), так как в этом случае для собственных значений матрицы $E = I + \frac{\tau}{1 + \mu\tau} A$ (см. (53)) справедливы неравенства

$$0 < 1 + \frac{\tau\lambda_i}{1 + \mu\tau} < 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \text{ и при этом выполняются условия (44). В случае же аналога (48), в отли-}$$

чие от (53), получаем рекурсивное соотношение $\hat{y} = \frac{1}{1 + \mu\tau} y + \frac{\tau}{1 + \mu\tau} a$, выводящее (см. (43)) уже на вектор $(I - E)^{-1} g = a/\mu$, не являющийся, вообще говоря, решением системы (35).

Аналогичные (53) по своей простоте и свойствам явные методы вида (38) получаем также и для случая упомянутых ранее приближений $E = E_{0,1}(A, \tau) = E_{1,1}(A, \tau) = I + \frac{1 - e^{-\mu\tau}}{\mu} A$ или $E = E_{1,0}(A, \tau) = I + \tau e^{-\mu\tau} A$ к матричной экспоненте $e^{A\tau}$. В силу условий (44) при этом в качестве g получаем соответственно $g = \frac{1 - e^{-\mu\tau}}{\mu} a$ или $g = \tau e^{-\mu\tau} a$. С использованием (44) (как и условий взаимосогласованности операторов типа (23), (24)) на основании приближений вида (19) к матричной экспоненте $e^{A\tau}$ очевидным образом можно строить и другие методы численного решения рассматриваемых классов задач.

1. Беллман Р. Введение в теорию матриц. М., 1976.

2. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. М., 1984.

3. Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М., 1960.

4. Bobkov V.V. // Computational methods in applied mathematics. 2002. Vol. 2. № 4. P. 154.

5. Бобков В.В. // Вестн. БГУ. Сер. 1. 2007. № 2. С. 65.

6. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М., 1966.

7. Бобков В.В. // Вестн. БГУ. Сер. 1. 2008. № 2. С. 63.

8. Бобков В.В., Мандрик П.А., Репников В.И. // Дифференц. уравнения. 1993. Т. 29. № 4. С. 689.

9. Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. М., 1998.

10. Бобков В.В. // Вестн. БГУ. Сер. 1. 2006. № 1. С. 76.

11. Хайрер Э., Ваннер Е. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М., 1999.

Поступила в редакцию 09.06.11.

Владимир Васильевич Бобков – доктор физико-математических наук, профессор кафедры вычислительной математики. Опубликовал более 200 научных работ по численным методам математики, в том числе 10 книг (6 монографий и 4 учебных пособия с грифом Минвуза СССР или БССР). Лауреат Государственной премии в области науки и техники.