

УДК 519.612+531.01

ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ОБРАТНОГО ИТЕРАЦИОННОГО АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ С ПОЛОЖИТЕЛЬНО ОПРЕДЕЛЕННЫМИ МАТРИЦАМИ

В. Н. Иванов¹

Рассматривается задача решения уравнений движения механических систем относительно ускорений при их численном интегрировании. Задача сводится к решению положительно определенных систем линейных алгебраических уравнений с медленно меняющимися коэффициентами. Предложена новая модификация метода переменной метрики Пауэлла–Бройдена, основанного на симметричной формуле ранга один пересчета матрицы, обратной к матрице системы. Получены условия локальной и глобальной сходимости алгоритма в приложении к поставленной задаче и обсуждаются его основные свойства. Доказывается, что в случае точной арифметики метод сходится за конечное число итераций, которое не превосходит ранг матрицы возмущений линейной системы. На примерах интегрирования уравнений движения конкретных механических систем показана сравнительная эффективность метода. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (код проекта 11-01-96024-р_урал_a).

Ключевые слова: системы линейных алгебраических уравнений, итерационные методы, методы переменной метрики, механические системы, уравнения движения, численное интегрирование.

Введение. Рассматривается задача многократного решения плотно заполненных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) в случае возмущений матрицы системы. Задача возникает при решении уравнений движения механических систем относительно обобщенных ускорений при их численном интегрировании.

Пусть механическая система представляет собой связку абсолютно твердых тел. Будем считать, что связи голономны, склерономны и идеальны. Пусть $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)^T$ — n -мерный вектор-столбец обобщенных координат системы, $\dot{\mathbf{q}} = \dot{\mathbf{q}}(t)$ — вектор-столбец обобщенных скоростей, t — время, точка над вектором означает производную по времени, $\mathbf{v} \equiv (v_1, \dots, v_{6N})^T = B(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}}$ — вектор-столбец проекций обобщенных скоростей всех тел системы на оси абсолютной системы координат, N — число тел в системе, $B = B(\mathbf{q})$ — известная матрица размерности $6N \times n$ касательного локального базиса многообразия $\{\mathbf{q}\}$ обобщенных координат. Будем считать, что в окрестности точки \mathbf{q} механическая система не имеет особенностей. Тогда ее уравнения движения можно выписать в форме уравнений Лагранжа второго рода в обобщенных координатах [1, 2]:

$$A(\mathbf{q})\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{b}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t), \quad (1)$$

$A(\mathbf{q}) = B^T M B$ — симметричная, положительно определенная матрица, $M = \text{diag}(M_1, \dots, M_N)$ — блочно-диагональная матрица масс и моментов инерции тел, $\mathbf{b}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = \mathbf{Q} + \left(\partial T / \partial \mathbf{q} - (\partial(\partial T / \partial \dot{\mathbf{q}}) / \partial \mathbf{q}^T) \dot{\mathbf{q}} \right)$ — вектор-столбец правых частей уравнений, $T = \mathbf{v}^T M \mathbf{v}$ — кинетическая энергия, $\mathbf{Q} = (Q_1, \dots, Q_n)^T$ — вектор-столбец обобщенных сил.

Уравнения движения вида (1) представляют собой систему n обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, линейную относительно обобщенных ускорений $\ddot{\mathbf{q}}$. Матрица системы $A(\mathbf{q})$ обычно является плотно заполненной и в общем случае зависит от обобщенных координат, а значит, является переменной во времени. При численном интегрировании подобных систем дифференциальных уравнений с помощью классических методов (например, Рунге–Кутта или Адамса) на каждом шаге численного алгоритма необходимо, во-первых, вычислять матрицу системы как произведение трех матриц, а во-вторых, приводить уравнения движения к явному виду, т.е. разрешать относительно вектора $\ddot{\mathbf{q}}$. Это требует существенных вычислительных затрат, объем которых зависит от выбранного метода решения СЛАУ. Известно, что число операций умножения в алгоритмах, основанных на конечных методах решения СЛАУ с плотно заполненными матрицами (Гаусса, Холецкого и т.д.), возрастает по кубическому закону с ростом размерности задачи, т.е. числа степеней свободы механической системы. Это приводит к

¹ Пермский государственный университет, механико-математический факультет, ул. Букирева, 15, 614990, г. Пермь; доцент, e-mail: precol@psu.ru

тому, что численное моделирование динамики механических систем, состоящих из десятков и сотен тел, на основе точных уравнений динамики (1) требует значительных затрат времени работы ЭВМ. Итерационные алгоритмы (например, различные модификации метода сопряженных градиентов [3]) позволяют снизить общую трудоемкость численного моделирования при решении уравнений движения в текущий момент времени за счет использования решения, найденного в предыдущий момент времени промежутка интегрирования, в качестве начального приближения, а также за счет согласования точности вычисления ускорений и численного интегрирования. Обычно при малой величине шага интегрирования изменения элементов матрицы системы уравнений (1) малы, поэтому дальнейшего снижения трудозатрат можно добиться, если для решения использовать методы, основанные на итерационном уточнении малых возмущений в матрицах A или A^{-1} . К ним относятся методы переменной метрики, применяемые для решения оптимизационных задач [4, 5].

В настоящей статье рассматриваются основные свойства итерационного алгоритма, представляющего собой модификацию вычислительной процедуры метода переменной метрики Пауэлла–Бройдена, основанного на симметричной формуле ранга один (SR1) пересчета матрицы, обратной к матрице Гессе [6].

1. Постановка задачи. Примем в дальнейшем стандартные для систем линейных алгебраических уравнений обозначения. Правую часть системы уравнений (1) обозначим через n -мерный вектор-столбец \mathbf{b} , вектор-столбец обобщенных ускорений $\ddot{\mathbf{q}}$ переобозначим через n -мерный вектор-столбец неизвестных \mathbf{x} .

Тогда задачу решения уравнений движения (1) относительно старших производных в текущий момент времени $t_j = t_{j-1} + h$, где h — малый шаг численного интегрирования, с использованием информации о системе в предыдущий момент времени t_{j-1} можно в терминах СЛАУ переформулировать следующим образом.

Пусть задана система n линейных алгебраических уравнений

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \tag{2}$$

где $A = A_0 + \varepsilon F$, A_0, A, F — известные симметричные положительно определенные матрицы n -го порядка, $\mathbf{b} = \mathbf{b}_0 + \varepsilon \mathbf{f}_0 \in \mathbb{R}^n$ — известный вектор-столбец правых частей, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ — вектор-столбец неизвестных, ε — малый параметр, $\|F\| = O(\|A_0\|)$, $\|\mathbf{f}_0\| = O(\|\mathbf{b}_0\|)$. Кроме того, будем считать, что матрица A плотно заполнена, матрица возмущений εF непропорциональна матрице A_0 , т.е. не существует множителя $\mu \in \mathbb{R}$, такого, что $F = \mu A_0$.

Здесь и в дальнейшем под нормой матрицы понимается 2-норма в \mathbb{R}^n : $\|A\|^2 = \|A\|_2^2 = \sup_{\boldsymbol{\eta} \neq 0} \frac{\boldsymbol{\eta}^T (A^T A) \boldsymbol{\eta}}{\boldsymbol{\eta}^T \boldsymbol{\eta}}$.

Требуется найти приближенное решение $\mathbf{x}^* \approx A^{-1}\mathbf{b}$ системы уравнений (2), если известна обратная матрица $H_0 = A_0^{-1}$. Точность решения оценивается в среднеквадратическом смысле, т.е. считается, что в точке \mathbf{x}^* выполняется неравенство $(A\mathbf{x}^* - \mathbf{b})^T (A\mathbf{x}^* - \mathbf{b}) < \varepsilon_a^2$, где ε_a — допустимое абсолютное отклонение. Особенность поставленной задачи состоит в том, что в алгоритме нахождения вектора \mathbf{x}^* используется матрица H_0 в качестве начального приближения к обратной матрице A^{-1} .

2. Метод решения. Для наглядности сразу представим предлагаемый метод решения в виде итерационного алгоритма, а затем обсудим его свойства. Пусть $\mathbf{r} = A\mathbf{x} - \mathbf{b} = B^T(M(B\mathbf{x})) - \mathbf{b}$ — вектор невязки системы уравнений в точке \mathbf{x} ; \mathbf{s} — вектор, задающий направление, в котором происходит улучшение решения при перемещении из точки \mathbf{x} ; k — номер итерации.

Алгоритм:

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{1} : H_0 = A_0^{-1}, \quad \mathbf{x}_0 = 0, \quad \mathbf{r}_0 = -\mathbf{b}, \quad \mathbf{s}_0 = H_0\mathbf{b}, \quad \mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \mathbf{s}_0, \quad \mathbf{r}_1 = A\mathbf{x}_1 - \mathbf{b}, \quad \mathbf{y}_0 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0, \quad k = 1 \\
 & \mathbf{2} : \text{while } \mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k > \varepsilon_a^2 \\
 & \quad \mathbf{s}_k = \left(\frac{(H_{k-1}\mathbf{r}_k)^T \mathbf{r}_k}{(H_{k-1}\mathbf{r}_k)^T \mathbf{y}_{k-1}} - 1 \right) H_{k-1}\mathbf{r}_k, \quad H_k = H_{k-1} - \frac{(H_{k-1}\mathbf{r}_k)(H_{k-1}\mathbf{r}_k)^T}{(H_{k-1}\mathbf{r}_k)^T \mathbf{y}_{k-1}}, \\
 & \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k, \quad \mathbf{r}_{k+1} = A\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{b}, \quad \mathbf{y}_k = \mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k, \quad k = k + 1 \\
 & \text{end while} \\
 & \mathbf{3} : \mathbf{x}^* = \mathbf{x}_k, \quad A^{-1} = H_k
 \end{aligned} \tag{3}$$

Алгоритм (3) относится к методам переменной метрики [4, 5]. В результате его работы происходит не только определение решения — точки \mathbf{x}^* , но и восстановление обратной матрицы A^{-1} . По сравнению с методами сопряженных градиентов [3], это требует на каждой итерации дополнительно одного умножения матрицы на вектор $H_{k-1}\mathbf{r}_k$ и одного вычисления диадного произведения векторов $(H_{k-1}\mathbf{r}_k)(H_{k-1}\mathbf{r}_k)^T$.

Основное время работы алгоритма затрачивается именно на эти операции, поэтому алгоритм (3) как метод решения СЛАУ более трудоемок, чем методы сопряженных градиентов. Однако в задачах моделирования динамических систем предлагаемый алгоритм оказывается более эффективным. Это связано с тем, что при численном интегрировании приходится многократно решать систему уравнений движения относительно ускорений. Поэтому мы можем получаемую на текущем шаге интегрирования в результате работы алгоритма (3) оценку матрицы A^{-1} использовать на следующем шаге для улучшения начального направления поиска \mathbf{s}_0 и начального приближения \mathbf{x}_1 . В результате этого в применении к поставленной задаче алгоритм (3) сходится быстрее других итерационных алгоритмов, в которых не вычисляется обратная матрица к матрице системы. Вычислительные эксперименты на реальных динамических задачах показывают, что метод (3) позволяет сохранить квадратичный закон роста трудоемкости моделирования в зависимости от роста размерности задачи.

3. Основные свойства алгоритма. Во-первых, заметим, что решение системы линейных алгебраических уравнений (2) и нахождение точки минимума квадратичной функции

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{b} + a, \quad a = \text{const}, \quad (4)$$

с положительно определенной матрицей Гессе A являются эквивалентными задачами. Они имеют одинаковое решение $\mathbf{x}^* = A^{-1}\mathbf{b}$, при этом система уравнений (2) задает необходимые условия существования точки минимума функции (4), так как градиент функции $f(\mathbf{x})$ равен $\nabla f(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{r} = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$.

Во-вторых, между векторными переменными, входящими в алгоритм (3), легко установить следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_k &= \mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k) = A(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) = A\mathbf{s}_k, \\ \mathbf{s}_k &= \left(\frac{(H_{k-1}\mathbf{r}_k)^T \mathbf{r}_k}{(H_{k-1}\mathbf{r}_k)^T \mathbf{y}_{k-1}} - 1 \right) H_{k-1}\mathbf{r}_k = -H_k \mathbf{r}_k = -H_k \nabla f(\mathbf{x}_k), \\ H_k \mathbf{r}_{k+1} &= H_k \mathbf{r}_{k+1} + \mathbf{s}_k - \mathbf{s}_k = H_k \mathbf{y}_k - \mathbf{s}_k. \end{aligned} \quad (5)$$

Введем векторы $\mathbf{s}_k^* = \lambda_k^* \mathbf{s}_k$, где $\lambda_k^* \in \mathbb{R}$ — произвольные параметры, $k = 0, 1, 2, \dots$.

Используя соотношения (5) и меняя последовательность вычислений, формулы (3) можно привести к виду

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_k^* &= -\lambda_k^* H_k \mathbf{r}_k = -\lambda_k^* H_k \nabla f(\mathbf{x}_k), \\ \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k^*, \quad \mathbf{r}_{k+1} = A\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{b}, \quad \mathbf{y}_k = \mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k, \\ H_{k+1} &= H_k + \frac{(\mathbf{s}_k^* - H_k \mathbf{y}_k)(\mathbf{s}_k^* - H_k \mathbf{y}_k)^T}{(\mathbf{s}_k^* - H_k \mathbf{y}_k)^T \mathbf{y}_k}. \end{aligned} \quad (6)$$

Формулы (6) представляют собой хорошо известный метод переменной метрики минимизации квадратичной функции (4) или решения системы уравнений $\nabla f(\mathbf{x}) = 0$. В [4] он называется методом Пауэлла, в [7, 8] — методом Бройдена, в монографиях [5, 9, 10] — симметричной формулой ранга один (Symmetric Rank-one formula, или SR1). На наш взгляд, было бы логично называть его обратным итерационным методом Пауэлла–Бройдена, основанным на SR1-формуле пересчета приближений H_k к матрице A^{-1} .

Отметим основные свойства метода Пауэлла–Бройдена при минимизации выпуклых квадратичных функций.

1. Если $\lambda_k^* = \arg \min_{\lambda \in \mathbb{R}} f(\mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{s}_k)$, то все направления \mathbf{s}_k^* ($k = 0, 1, \dots, n-1$) A -сопряжены [4, 7]. Это гарантирует положительную определенность матриц H_k и сходимость SR1-формулы за конечное число итераций.

2. Для сходимости последовательности $\{H_k\}$ достаточно линейной независимости векторов \mathbf{s}_k^* . В этом случае последовательность $\{H_k\}$ сходится к A^{-1} не более чем за n шагов [11, 12]. Таким образом, метод Пауэлла–Бройдена, в отличие от многих других методов переменной метрики, не требует большой точности одномерных минимизаций при вычислении параметров λ_k^* и дает большую свободу выбора линейно независимых направлений \mathbf{s}_k . Изменяя алгоритм построения последовательностей векторов \mathbf{s}_k , можно получать различные модификации базовой схемы (6).

3. Если известна какая-нибудь подматрица порядка $n-r$ матрицы Гессе [12], то для минимизации положительно определенной квадратичной функции требуется только $r+1$ шаг алгоритма (6).

Эти свойства обеспечивают достаточно широкую и устойчивую популярность метода, несмотря на некоторые его недостатки (подробнее о них можно прочитать, например, в [4, 7–9]).

В настоящее время продолжают исследования, направленные на улучшение этого метода. Так, в работах [13–15] описываются свойства локальной и глобальной сходимости метода при решении различных задач. Ряд его модификаций предлагается в [16–20].

Рассматриваемая в настоящей статье модификация (3) метода Пауэлл–Бройдена (6) состоит в фиксации шага и изменении направлений спуска:

$$\lambda_k^* = 1, \quad \mathbf{s}_k = -\gamma H_{k-1} \mathbf{r}_k, \quad \gamma = 1 - \frac{(H_{k-1} \mathbf{r}_k)^\top \mathbf{r}_k}{(H_{k-1} \mathbf{r}_k)^\top \mathbf{y}_{k-1}}.$$

Модификация обеспечивает то преимущество, что на каждой итерации алгоритма (3) выполняется только две операции умножения матрицы на вектор. При использовании для решения СЛАУ алгоритма Пауэлл–Бройдена (6) на каждой итерации приходится три раза перемножать матрицу на вектор. На каждую такую матричную операцию затрачивается порядка n^2 операций умножения. Кроме того, дополнительные вычисления требуются, если длина шага λ_k^* находится в результате поиска одномерного минимума в направлении вектора \mathbf{s}_k . Несложно показать, что для квадратичной функции (4) решение задачи одномерной минимизации приводит к следующей формуле для длины шага: $\lambda_k^* = -\frac{\mathbf{s}_k^\top \mathbf{r}_k}{\mathbf{s}_k^\top A \mathbf{s}_k}$.

Перейдем к рассмотрению свойств алгоритма (3). В первую очередь покажем, что выбранная схема вычисления векторов \mathbf{s}_k обеспечивает их линейную независимость, а следовательно, алгоритм сходится за конечное число итераций. Для этого докажем четыре вспомогательные леммы.

Лемма 1. Матрицы H_{k+1} ($k = \overline{0, n-1}$), вычисляемые по формулам (3), удовлетворяют квазиньютоновским условиям

$$H_{k+1} \mathbf{y}_i = A^{-1} \mathbf{y}_i, \quad i = \overline{0, k}. \quad (7)$$

Доказательство. При $i = k$ ($\forall k = \overline{0, n-1}$) выполнение условия (7) можно проверить непосредственной подстановкой (3) в (7), учитывая соотношения (5):

$$H_{k+1} \mathbf{y}_k = H_k \mathbf{y}_k - \frac{(H_k \mathbf{r}_{k+1})(H_k \mathbf{r}_{k+1})^\top \mathbf{y}_k}{(H_k \mathbf{r}_{k+1})^\top \mathbf{y}_k} = H_k \mathbf{y}_k - H_k \mathbf{r}_{k+1} = H_k \mathbf{y}_k + \mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k = A^{-1} \mathbf{y}_k.$$

Доказательство проводим методом математической индукции. Пусть $H_k \mathbf{y}_i = A^{-1} \mathbf{y}_i$, $i = \overline{0, k-1}$. Тогда

$$(H_k \mathbf{r}_{k+1})^\top \mathbf{y}_i = (\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)^\top \mathbf{y}_i = \mathbf{s}_k^\top \mathbf{y}_i - \mathbf{y}_k^\top H_k \mathbf{y}_i = (A^{-1} \mathbf{y}_k)^\top \mathbf{y}_i - \mathbf{y}_k^\top A^{-1} \mathbf{y}_i = 0.$$

Следовательно, из (6) имеем $H_{k+1} \mathbf{y}_i = H_k \mathbf{y}_i = A^{-1} \mathbf{y}_i$, $i = \overline{0, k-1}$. Лемма доказана.

Лемма 2. Последовательность направлений поиска $\{\mathbf{s}_k\}$ удовлетворяет условиям

$$\mathbf{s}_{k+1} = \alpha_k (E - H_k A) \mathbf{s}_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

Доказательство. Из соотношений (5) и (7) следует, что $H_{k+1} A \mathbf{s}_k = H_{k+1} \mathbf{y}_k = A^{-1} \mathbf{y}_k = \mathbf{s}_k$. Тогда условия (8) доказывает следующая цепочка равенств:

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_{k+1} &= -H_{k+1} \mathbf{r}_{k+1} = -H_{k+1} (A \mathbf{s}_k + \mathbf{r}_k) = -H_{k+1} A \mathbf{s}_k - H_k \mathbf{r}_k - \frac{(\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)(\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)^\top \mathbf{r}_k}{(\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)^\top \mathbf{y}_k} = \\ &= -\mathbf{s}_k + \mathbf{s}_k + \alpha_k (\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k) = \alpha_k (E - H_k A) \mathbf{s}_k, \end{aligned}$$

где $\alpha_k = -\frac{(\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)^\top \mathbf{r}_k}{(\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)^\top \mathbf{y}_k}$. Лемма доказана.

Лемма 3. Векторы \mathbf{s}_k и \mathbf{s}_{k+1} ($k = 0, 1, 2, \dots$) линейно независимы.

Доказательство. Сначала покажем, что направление спуска \mathbf{s}_{k+1}^* , используемое при минимизации квадратичной функции (4) методом Пауэлл–Бройдена (6), можно представить в виде линейной комбинации векторов \mathbf{s}_k и \mathbf{s}_{k+1} . Пусть $\lambda_i^* = \arg \min_{\lambda \in R} f(\mathbf{x}_i + \lambda \mathbf{s}_i)$, $i = k, k+1$. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda_{k+1}^*} \mathbf{s}_{k+1}^* &= -H_{k+1} \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}^*) = -H_{k+1} (A \mathbf{s}_k^* + \nabla f(\mathbf{x}_k)) = -\mathbf{s}_k^* - H_k \mathbf{r}_k - \frac{(\mathbf{s}_k^* - H_k \mathbf{y}_k^*)(\mathbf{s}_k^* - H_k \mathbf{y}_k^*)^\top \mathbf{r}_k}{(\mathbf{s}_k^* - H_k \mathbf{y}_k^*)^\top \mathbf{y}_k^*} = \\ &= -\lambda_k^* \mathbf{s}_k + \mathbf{s}_k - \frac{(\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)(\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)^\top \mathbf{r}_k}{(\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)^\top \mathbf{y}_k} = (1 - \lambda_k^*) \mathbf{s}_k + \mathbf{s}_{k+1}. \end{aligned}$$

Однако вектор \mathbf{s}_{k+1}^* A -сопряжен с \mathbf{s}_k , поскольку

$$\mathbf{s}_k^T A \mathbf{s}_{k+1}^* = \frac{1}{\lambda_k^*} (\mathbf{s}_k^*)^T A H_{k+1} \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}^*) = \frac{1}{\lambda_k^*} (H_{k+1} A \mathbf{s}_k^*)^T \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}^*) = \frac{1}{\lambda_k^*} (\mathbf{s}_k^*)^T \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}^*) = 0.$$

Равенство нулю имеет место в силу того, что $\nabla f(\mathbf{x}_{k+1}^*) \perp \mathbf{s}_k^*$ в точке \mathbf{x}_{k+1}^* .

Сопряженные направления линейно независимы [3]. Следовательно, используя доказанное выше свойство, что вектор \mathbf{s}_{k+1}^* представим в виде линейной комбинации векторов \mathbf{s}_k и \mathbf{s}_{k+1} , приходим к заключению, что $E - H_k A \neq \lambda E$ и векторы \mathbf{s}_k и \mathbf{s}_{k+1} линейно независимы. Лемма доказана.

Лемма 4. Векторы \mathbf{s}_k , $k = \overline{2, n-1}$, удовлетворяют условиям A -сопряженности:

$$\mathbf{s}_i^T A \mathbf{s}_k = 0, \quad i = \overline{0, k-2}. \quad (9)$$

Доказательство. Равенства (9) доказываются последовательным применением соотношений (8) и (7):

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_i^T A \mathbf{s}_k &= \mathbf{y}_i^T \mathbf{s}_k = \alpha_{k-1} \mathbf{y}_i^T (E - H_{k-1} A) \mathbf{s}_{k-1} = \\ &= \alpha_{k-1} [(E - A H_{k-1}) \mathbf{y}_i]^T \mathbf{s}_{k-1} = \alpha_{k-1} (\mathbf{y}_i - A A^{-1} \mathbf{y}_i)^T \mathbf{s}_{k-1} = 0. \end{aligned}$$

Лемма доказана.

Из лемм 3 и 4 следует, что все направления поиска \mathbf{s}_k , $k = \overline{0, n-1}$, линейно независимы, а следовательно, в силу равенств (5) векторы \mathbf{y}_k , $k = \overline{0, n-1}$, также линейно независимы.

Из леммы 1 следует, что $H_n \mathbf{y}_i = A^{-1} \mathbf{y}_i$ для всех $i = \overline{0, n-1}$. Отсюда, в силу доказанной выше линейной независимости векторов $\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{n-1}$, следует, что $H_n = A^{-1}$. Таким образом, если все вычисления проводились точно, то последний шаг алгоритма (3) $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \mathbf{s}_n = \mathbf{x}_n - H_n \mathbf{r}_n = \mathbf{x}_n - A^{-1} \mathbf{r}_n$ приведет нас в точку \mathbf{x}^* , являющуюся решением системы уравнений (2).

Мы доказали, что в глобальном смысле рассматриваемый метод является конечно сходящимся. Однако для того, чтобы использовать его в качестве итерационного метода решения СЛАУ, необходимо обеспечить монотонность убывания последовательности погрешностей решения $\{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|\}$. В этом случае решение в среднеквадратическом смысле может быть получено меньше чем за $n+1$ шаг.

Найдем, при каких условиях метод обеспечивает монотонную сходимость последовательностей $\{H_k\}$ и $\{\mathbf{x}_k\}$ к H и \mathbf{x}^* соответственно. Введем обозначения: $A_k = H_k^{-1}$, $\Delta A_k = \varepsilon F_k = A - A_k$, где ε — малый параметр и εF_k — симметричная матрица возмущений ($\varepsilon F_0 = \varepsilon F$).

Обозначим через $\kappa(A_k) = \|A_k\| \|A_k^{-1}\| = \|A_k\| \|H_k\|$ число обусловленности матрицы A_k . Сделаем предварительные выкладки. Используя матричный ряд Тейлора [3] для матрицы $(E + \varepsilon A_k^{-1} F_k)^{-1}$, можно получить следующую последовательность равенств

$$\begin{aligned} H = A^{-1} &= \left(A_k (E + \varepsilon A_k^{-1} F_k) \right)^{-1} = (E + \varepsilon A_k^{-1} F_k)^{-1} A_k^{-1} = (E - \varepsilon H_k F_k + \varepsilon^2 (H_k F_k)^2 - \dots) H_k = \\ &= H_k - \varepsilon H_k F_k (H_k - \varepsilon H_k F_k H_k + \varepsilon^2 (H_k F_k)^2 H_k - \dots) = H_k - \varepsilon H_k F_k H. \end{aligned}$$

Таким образом, возмущения прямой и обратной матрицы связаны следующим матричным соотношением:

$$\Delta H_k = H - H_k = -\varepsilon H_k F_k H. \quad (10)$$

Найдем явную зависимость матрицы H_{k+1} от матрицы возмущений εF_k . Для этого заметим, что

$$H_k \mathbf{r}_{k+1} = H_k (\mathbf{r}_k + \mathbf{y}_k) = -\mathbf{s}_k + H_k A \mathbf{s}_k = (H_k A - E) \mathbf{s}_k = (H_k (A_k + \varepsilon F_k) - E) \mathbf{s}_k = \varepsilon H_k F_k \mathbf{s}_k.$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} (H_k \mathbf{r}_{k+1})^T \mathbf{y}_k &= \mathbf{y}_k^T (H_k \mathbf{r}_{k+1}) = \mathbf{y}_k^T H_k (\mathbf{r}_k + \mathbf{y}_k) = \mathbf{s}_k^T A (H_k A \mathbf{s}_k - \mathbf{s}_k) = \mathbf{s}_k^T (A H_k A - A) \mathbf{s}_k = \\ &= \mathbf{s}_k^T ((A_k + \varepsilon F_k) H_k (A_k + \varepsilon F_k) - (A_k + \varepsilon F_k)) \mathbf{s}_k = \mathbf{s}_k^T (\varepsilon F_k + \varepsilon^2 F_k H_k F_k) \mathbf{s}_k. \end{aligned}$$

Последние равенства имеют место в силу симметрии матриц A , H_k , A_k и F_k . Подставим полученные соотношения в формулу (3) для H_{k+1} . Окончательно придем к следующему выражению:

$$H_{k+1} = H_k - \varepsilon \frac{(H_k F_k \mathbf{s}_k)(H_k F_k \mathbf{s}_k)^T}{\mathbf{s}_k^T (F_k + \varepsilon F_k H_k F_k) \mathbf{s}_k}. \quad (11)$$

Теперь сформулируем и докажем достаточное условие монотонности убывания последовательности погрешностей решения $\{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|\}$.

Теорема. *Если*

$$\|\varepsilon F_0\| < \frac{1}{\kappa(A_0)} \|A_0\| = \frac{1}{\|H_0\|}, \tag{12}$$

то алгоритм (3) обеспечивает выполнение следующих свойств:

- 1) $\{H_k\}$ — последовательность положительно определенных матриц;
- 2) последовательности $\{\|\varepsilon F_k\|\}$, $\{\|H - H_k\|\}$ и $\{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|\}$ монотонно убывают.

Доказательство. Доказательство можно провести методом математической индукции. Сначала проверим справедливость теоремы при $k = 1$. Докажем положительную определенность матрицы H_1 . Нам необходимо показать, что для всех $\boldsymbol{\eta} \neq 0 \in \mathbb{R}^n$ справедливо неравенство

$$\boldsymbol{\eta}^T H_1 \boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}^T H_0 \boldsymbol{\eta} - \varepsilon \frac{\boldsymbol{\eta}^T (H_0 F_0 \mathbf{s}_0) (H_0 F_0 \mathbf{s}_0)^T \boldsymbol{\eta}}{\mathbf{s}_0^T (F_0 + \varepsilon F_0 H_0 F_0) \mathbf{s}_0} > 0. \tag{13}$$

В силу положительной определенности матриц H_0 и F_0 , матрица $F_0 + \varepsilon F_0 H_0 F_0$ положительно определена, так как с учетом (12) можно выписать следующую цепочку неравенств:

$$1 > \|H_0\| \|\varepsilon F_0\| \geq \|\varepsilon H_0 F_0\| = \sup_{\boldsymbol{\eta} \neq 0} \frac{\boldsymbol{\eta}^T (\varepsilon H_0 F_0) \boldsymbol{\eta}}{\boldsymbol{\eta}^T \boldsymbol{\eta}} \geq \frac{\boldsymbol{\eta}^T (\varepsilon H_0 F_0) \boldsymbol{\eta}}{\boldsymbol{\eta}^T \boldsymbol{\eta}} \quad \forall \boldsymbol{\eta} \neq 0 \in \mathbb{R}^n.$$

Отсюда следует, что $\boldsymbol{\eta}^T (E - \varepsilon H_0 F_0) \boldsymbol{\eta} > 0$ и $\boldsymbol{\eta}^T F_0 (E - \varepsilon H_0 F_0) \boldsymbol{\eta} > 0$. Следовательно, знаменатель в формуле (13) положителен, т.е. $\mathbf{s}_0^T (F_0 + \varepsilon F_0 H_0 F_0) \mathbf{s}_0 > 0$.

Тогда если $\varepsilon < 0$, то

$$\boldsymbol{\eta}^T H_1 \boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}^T H_0 \boldsymbol{\eta} + |\varepsilon| \frac{\mathbf{u}^2}{\mathbf{s}_0^T (F_0 + \varepsilon F_0 H_0 F_0) \mathbf{s}_0} > 0,$$

где $\mathbf{u}^2 = \mathbf{u}^T \mathbf{u}$ и $\mathbf{u} = \mathbf{s}_0^T F_0 H_0 \boldsymbol{\eta}$. Следовательно, в этом случае матрица H_1 положительно определена.

Пусть теперь $\varepsilon > 0$. Приведем неравенство (13) к общему знаменателю и исследуем знак выражения, получаемого в числителе:

$$f = \varepsilon (\boldsymbol{\eta}^T H_0 \boldsymbol{\eta}) \mathbf{s}_0^T F_0 H_0 F_0 \mathbf{s}_0 - \varepsilon \boldsymbol{\eta}^T (H_0 F_0 \mathbf{s}_0) (H_0 F_0 \mathbf{s}_0)^T \boldsymbol{\eta} + (\boldsymbol{\eta}^T H_0 \boldsymbol{\eta}) \mathbf{s}_0^T F_0 \mathbf{s}_0.$$

В силу симметрии и положительной определенности матрицы H_0 , ее можно разложить (с помощью сингулярного или ортогонального разложения) в произведение некоторых квадратных матриц n -го порядка [3]: $H_0 = V \Lambda V^T = (V \Lambda^{1/2}) (\Lambda^{1/2} V^T) = C C^T$. Тогда функцию f можно представить в виде

$$f = \varepsilon (C^T \boldsymbol{\eta})^2 (C^T F_0 \mathbf{s}_0)^2 - \varepsilon \left[(C^T \boldsymbol{\eta}) (C^T F_0 \mathbf{s}_0) \right]^2 + (\boldsymbol{\eta}^T H_0 \boldsymbol{\eta}) (\mathbf{s}_0^T F_0 \mathbf{s}_0).$$

Выражение $(C^T \boldsymbol{\eta})^2 (C^T P P^T \mathbf{s}_0)^2 - \left[(C^T \boldsymbol{\eta}) (C^T P P^T \mathbf{s}_0) \right]^2 \geq 0$ в силу справедливости для всех $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ неравенства Коши–Буняковского: $\mathbf{a}^2 \mathbf{b}^2 \geq (\mathbf{a}^T \mathbf{b})^2$. Таким образом, окончательно получаем следующую цепочку неравенств, доказывающих положительную определенность матрицы H_1 : $f \geq (\boldsymbol{\eta}^T H_0 \boldsymbol{\eta}) (\mathbf{s}_0^T F_0 \mathbf{s}_0) > 0$ для всех $\boldsymbol{\eta} \neq 0 \in \mathbb{R}^n$ и $\mathbf{s}_0 \neq 0$.

Теперь докажем, что $\|\varepsilon F_1\| < \|\varepsilon F_0\|$ и $\|H - H_1\| < \|H - H_0\|$. Из (11) и (10) следует, что

$$\varepsilon \frac{(H_0 F_0 \mathbf{s}_0) (H_0 F_0 \mathbf{s}_0)^T}{\mathbf{s}_0^T (F_0 + \varepsilon F_0 H_0 F_0) \mathbf{s}_0} = H_0 - H_1 = (H_0 - H) - (H_1 - H) = \varepsilon H_0 F_0 H - \varepsilon H_1 F_1 H. \tag{14}$$

Заметим, что матрица ранга 1, стоящая слева от первого равенства в формуле (14), является положительно определенной. Следовательно, матрица $H_0 F_0 H - H_1 F_1 H$ положительно определена. Кроме того, матрицы $H_0 F_0 H$ и $H_1 F_1 H$ являются положительно определенными. Этих условий достаточно, чтобы выполнялось требуемое неравенство для норм: $\|H_0 F_0 H\| > \|H_1 F_1 H\|$ или $\|H - H_0\| > \|H - H_1\|$.

Преобразуем равенство (14), подставив в него формулу (11) для H_1 :

$$\frac{(H_0 F_0 \mathbf{s}_0) (H_0 F_0 \mathbf{s}_0)^T}{\mathbf{s}_0^T (F_0 + \varepsilon F_0 H_0 F_0) \mathbf{s}_0} (E - \varepsilon F_1 H) = H_0 (F_0 - F_1) H.$$

Рассмотрим отдельно левую и правую части последнего равенства. В силу (10) следует, что выражение $(E - \varepsilon F_1 H)$ равно $A_1 H$ и поэтому является положительно определенной матрицей. Тогда матрица $F_0 - F_1$ также положительно определена как произведение положительно определенных матриц:

$$F_0 - F_1 = A_0 \frac{(H_0 F_0 \mathbf{s}_0)(H_0 F_0 \mathbf{s}_0)^T}{\mathbf{s}_0^T (F_0 + \varepsilon F_0 H_0 F_0) \mathbf{s}_0} (E - \varepsilon F_1 H) A.$$

Отсюда следует требуемое неравенство для норм: $\|\varepsilon F_1\| < \|\varepsilon F_0\|$. Теперь осталось показать, что $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\| < \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|$. Заметим, что

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^* &= \mathbf{x}_0 - H_0 \mathbf{r}_0 - \mathbf{x}^* = \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^* - H_0 (A \mathbf{x}_0 - \mathbf{b}) = \\ &= \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^* - H_0 (A \mathbf{x}_0 - A \mathbf{x}^*) = (E - H_0 A) (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*). \end{aligned}$$

Следовательно, $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\| < \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|$, если $\|E - H_0 A\| < 1$. Последнее неравенство выполняется в силу условия теоремы, поскольку

$$\|E - H_0 A\| = \|E - H_0 (A_0 + \varepsilon F_0)\| = \|H_0 \varepsilon F_0\| \leq \|H_0\| \|\varepsilon F_0\| < 1.$$

Утверждения теоремы доказаны при $k = 1$. Очевидно, что мы можем повторить все рассуждения при любом k , $1 \leq k \leq n$.

Таким образом, условие (12) является достаточным условием монотонной сходимости последовательностей норм $\{\|\varepsilon F_k\|\}$, $\{\|H - H_k\|\}$ и $\{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|\}$. Теорема доказана.

Установим еще один интересный факт. Оказывается, что если матрица возмущений εF имеет ранг меньше n , то описываемый итерационный метод сойдется меньше чем за n итераций.

Пусть матрица возмущений εF имеет ранг $r \leq n$; обозначим $\text{rank}(\varepsilon F) = r$. Из теории известно [5, 11], что любой метод переменной метрики может быть сформулирован как для обратной матрицы $H = A^{-1}$, так и для исходной матрицы системы $A = A_0 + \varepsilon F$. Алгоритм пересчета матрицы приближений A_k к матрице A можно получить из формул (6) заменой $H_k \rightarrow A_k$, $\mathbf{s}_k \rightarrow \mathbf{y}_k$, $\mathbf{y}_k \rightarrow \mathbf{s}_k$:

$$A_{k+1} = A_k + \frac{(\mathbf{y}_k - A_k \mathbf{s}_k)(\mathbf{y}_k - A_k \mathbf{s}_k)^T}{(\mathbf{y}_k - A_k \mathbf{s}_k)^T \mathbf{s}_k} = A_k + \frac{\mathbf{r}_{k+1} \mathbf{r}_{k+1}^T}{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{s}_k}. \quad (15)$$

Легко проверить подстановкой, что если $H_0 A_0 = A_0 H_0 = E$, то последовательности приближений удовлетворяют условию взаимной обратимости матриц H_{k+1} и A_{k+1} : $H_{k+1} A_{k+1} = A_{k+1} H_{k+1} = E$ и квазиньютоновским условиям (см. лемму 1 и формулы (5) и (7)):

$$H_{k+1} \mathbf{y}_i = \mathbf{s}_i = A^{-1} \mathbf{y}_i, \quad A_{k+1} \mathbf{s}_i = \mathbf{y}_i = A \mathbf{s}_i, \quad i = \overline{0, k}. \quad (16)$$

Подставляя (16) в (15), получим рекуррентные формулы $A_{k+1} = A_k + \delta A_k = A_0 + \sum_{i=0}^k \delta A_i$, где введены следующие обозначения:

$$\delta A_0 = \frac{\varepsilon F \mathbf{s}_0 (\varepsilon F \mathbf{s}_0)^T}{(\varepsilon F \mathbf{s}_0)^T \mathbf{s}_0}, \quad \delta A_i = \frac{(\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_i ((\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_i)^T}{((\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_i)^T \mathbf{s}_i}, \quad i = \overline{1, k}. \quad (17)$$

Покажем, что если $\text{rank}(\varepsilon F) = r$, то $A_r = A_0 + \sum_{i=0}^{r-1} \delta A_i = A_0 + \varepsilon F$, т.е. $\varepsilon F = \sum_{i=0}^{r-1} \delta A_i$. Для начала заметим, что если $r = 1$, то существует вектор $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$, такой, что матрица возмущений может быть представлена в виде диадного произведения $\varepsilon F = \mathbf{p} \mathbf{p}^T$, при этом $\mathbf{p}^T \mathbf{s}_0 \neq 0$, так как по построению $\mathbf{s}_0 = -H_0 \mathbf{r}_0 = -H_0 \varepsilon F \mathbf{x}_0$. Тогда

$$\delta A_0 = \frac{\mathbf{p} \mathbf{p}^T \mathbf{s}_0 (\mathbf{p} \mathbf{p}^T \mathbf{s}_0)^T}{(\mathbf{p} \mathbf{p}^T \mathbf{s}_0)^T \mathbf{s}_0} = \frac{(\mathbf{p}^T \mathbf{s}_0)^2 \mathbf{p} \mathbf{p}^T}{(\mathbf{p}^T \mathbf{s}_0)^2} = \mathbf{p} \mathbf{p}^T = \varepsilon F.$$

Следовательно, в этом случае $A_1 = A_0 + \varepsilon F = A$ и $H_1 = A_1^{-1} = H$ соответственно и итерационный метод (3) сойдется к точному решению за два шага: $\mathbf{x}^* = H \mathbf{b} = \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \mathbf{s}_1 = \mathbf{x}_1 - H_1 (A \mathbf{x}_1 - \mathbf{b})$.

Теперь докажем необходимую вспомогательную лемму.

Лемма 5. Пусть матрицы A и εF удовлетворяют всем условиям, сформулированным в постановке задачи, и $\text{rang}(\varepsilon F) = r$. Пусть $\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_{r-1}$ — векторы направлений спусков, генерируемых итерационной процедурой (3). Тогда

$$\mathbf{s}_k^T \left(\varepsilon F - \sum_{i=0}^{k-1} \delta A_i \right) \mathbf{s}_j = 0, \quad k = \overline{1, r-1}, \quad j = \overline{1, k-1}. \quad (18)$$

Доказательство. Докажем лемму методом математической индукции. При $k = 1$ непосредственно убеждаемся, подставляя формулы (17) в равенства (18), что

$$\mathbf{s}_1^T (\varepsilon F - \delta A_0) \mathbf{s}_0 = \mathbf{s}_1^T \varepsilon F \mathbf{s}_0 - \mathbf{s}_1^T \frac{\varepsilon F \mathbf{s}_0 (\varepsilon F \mathbf{s}_0)^T \mathbf{s}_0}{(\varepsilon F \mathbf{s}_0)^T \mathbf{s}_0} = \mathbf{s}_1^T \varepsilon F \mathbf{s}_0 - \mathbf{s}_1^T \varepsilon F \mathbf{s}_0 = 0.$$

Предположим, что равенства (18) справедливы для любого $i < k$: $\mathbf{s}_i^T (\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_j = 0$, $i = \overline{1, k-1}$, $j = \overline{0, i-1}$. Покажем, что из последнего условия следует, что равенства (18) выполняются и при $i = k > 1$. Во-первых,

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_k^T \left(\varepsilon F - \sum_{i=0}^{k-1} \delta A_i \right) \mathbf{s}_{k-1} &= \mathbf{s}_k^T \left(\varepsilon F - \sum_{i=0}^{k-2} \delta A_i \right) \mathbf{s}_{k-1} - \mathbf{s}_k^T \delta A_{k-1} \mathbf{s}_{k-1} = \\ &= \mathbf{s}_k^T \left(\varepsilon F - \sum_{i=0}^{k-2} \delta A_i \right) \mathbf{s}_{k-1} - \mathbf{s}_k^T \left(\varepsilon F - \sum_{i=0}^{k-2} \delta A_i \right) \mathbf{s}_{k-1} = 0. \end{aligned}$$

Во-вторых, при $j < k - 1$ имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_k^T \left(\varepsilon F - \sum_{i=0}^{k-1} \delta A_i \right) \mathbf{s}_j &= \mathbf{s}_k^T \left(\varepsilon F - \sum_{i=0}^{j-1} \delta A_i \right) \mathbf{s}_j - \mathbf{s}_k^T \delta A_j \mathbf{s}_j - \mathbf{s}_k^T \sum_{i=j+1}^{k-1} \delta A_i \mathbf{s}_j = -\mathbf{s}_k^T \sum_{i=j+1}^{k-1} \delta A_i \mathbf{s}_j = \\ &= -\mathbf{s}_k^T \sum_{i=j+1}^{k-1} \frac{(\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_i (\mathbf{s}_i^T (\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_j)}{((\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_i)^T \mathbf{s}_i} = 0. \end{aligned}$$

Лемма доказана.

Используя равенства (18), получим, что при любом $i = \overline{0, r-1}$ верна цепочка равенств

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{r-1} \delta A_k \mathbf{s}_i &= \sum_{k=0}^{i-1} \delta A_k \mathbf{s}_i + \delta A_i \mathbf{s}_i + 0 = \\ &= \sum_{k=0}^{i-1} \delta A_k \mathbf{s}_i + \frac{(\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_i (\mathbf{s}_i^T (\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_i)}{((\varepsilon F - \delta A_0 - \dots - \delta A_{i-1}) \mathbf{s}_i)^T \mathbf{s}_i} = \varepsilon F \mathbf{s}_i. \end{aligned} \quad (19)$$

Так как векторы $\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_{r-1}$ в соответствии с леммами 3 и 4 линейно независимы, а $\sum_{k=0}^{r-1} \delta A_k$ — сумма r

матриц ранга 1, то r систем уравнений (19) имеют единственное решение $\sum_{k=0}^{r-1} \delta A_k = \varepsilon F$. Отсюда следует, что

$$A_r = A_0 + \sum_{i=0}^{r-1} \delta A_i = A_0 + \varepsilon F, \quad H_r = A_r^{-1} = (A_0 + \varepsilon F)^{-1}, \quad \mathbf{x}^* = \mathbf{x}_{r+1} = H_r \mathbf{b} = \mathbf{x}_r + \mathbf{s}_r,$$

т.е. в случае, когда матрица возмущений имеет ранг r , итерационная процедура сойдется к точному решению за $r + 1$ шаг.

Заметим, что при численном решении уравнений движения механических систем вида (1) обычно на каждом шаге интегрирования эффективный ранг [3] матрицы возмущений εF много меньше ранга матрицы системы A . Поэтому следует ожидать, что приближенное решение системы уравнений (2) рассматриваемым итерационным методом в практических задачах будет достигаться за небольшое число итераций.

4. Согласование шага интегрирования уравнений движения с условием сходимости итерационного метода их решения. В уравнениях движения механических систем вида (1) матрица A , стоящая перед ускорениями, зависит только от обобщенных координат. Следовательно,

$$\|\varepsilon F\| = \|A'_q \Delta \mathbf{q} + O(\Delta \mathbf{q}^2)\| \leq \|A'_q\| \|\Delta \mathbf{q}\| + \|O(\Delta \mathbf{q}^2)\|,$$

где $\Delta \mathbf{q}$ — вектор приращений обобщенных координат на шаге интегрирования.

Элементы матрицы A в силу ее структуры близки к квадратичным функциям относительно обобщенных координат, поэтому существуют параметры c и a , при которых $\|\varepsilon F\| \leq \frac{\|A\|}{c + a\|\mathbf{q}\|} \|\Delta \mathbf{q}\| + \|O(\Delta \mathbf{q}^2)\|$.

Если шаг интегрирования h достаточно мал, то приращение обобщенных координат $\Delta \mathbf{q}$ линейно зависит от начальных на шаге значений скорости и ускорения: $\Delta \mathbf{q} = \ddot{\mathbf{q}}_0 \frac{h^2}{2} + \dot{\mathbf{q}}_0 h$.

Используя неравенство (12), получим, что величина шага интегрирования h должна быть согласована с числом обусловленности матрицы A :

$$\frac{1}{c + a\|\mathbf{q}_0\|} \left(\|\ddot{\mathbf{q}}_0\| \frac{h^2}{2} + \|\dot{\mathbf{q}}_0\| h \right) \leq O\left(\frac{1}{\kappa(A_0)}\right). \quad (20)$$

Чем больше число обусловленности $\kappa(A_0)$, тем меньше должен быть шаг интегрирования. В первом приближении, если модель механической системы в достаточной степени отмасштабирована, т.е. $\mathbf{q}(t)$, $\ddot{\mathbf{q}}(t) \sim O(1)$, можно предложить простую формулу оценки сверху величины шага интегрирования h :

$$h \leq \frac{1}{\max(1, \|\dot{\mathbf{q}}_0\|)} O\left(\frac{1}{\kappa(A_0)}\right). \quad (21)$$

Заметим, что неравенства (20) и (21) задают достаточные условия сходимости итерационного алгоритма (3) и не являются существенными ограничителями на область применимости предлагаемого метода. Во-первых, численные эксперименты показывают, что метод монотонно сходится и при менее жестких условиях на шаг интегрирования. Во-вторых, шаг численного интегрирования уравнений движения (1) зависит от числа обусловленности матрицы системы и обобщенных скоростей аналогичным образом. В третьих, в случае невыполнения условий сходимости метода (3) можно перейти к алгоритму (6), монотонная сходимость которого обеспечивается одномерной минимизацией нормы невязки решения на каждой итерации. Сочетание этих двух методов позволяет создавать эффективные процедуры приведения уравнений движения механических систем к явному виду на каждом шаге их численного интегрирования.

5. Пример. Сравнительную эффективность предлагаемого алгоритма решения уравнений движения механических систем относительно ускорений покажем на примере интегрирования уравнений, описывающих колебания многосвязного маятника, состоящего из N одинаковых абсолютно твердых стержней, закрепленных последовательно друг с другом двухкоординатными сферическими шарнирами. Данная механическая система имеет $2N$ степеней свободы. Уравнения движения представляют собой систему из $n = 2N$ линейных дифференциальных уравнений (1) относительно ускорений от обобщенных координат.

Система дифференциальных уравнений (1) решалась методом Адамса–Башфорта–Мултона с абсолютной погрешностью $\varepsilon_a = 10^{-10}$ и относительной погрешностью $\varepsilon_r = 10^{-4}$. Элементы матриц в уравнении (1) формировались численно на каждом шаге интегрирования методом составных тел [21]. Для решения системы относительно ускорений использовались метод Гаусса с выбором главного элемента и описанный в настоящей статье итерационный метод с абсолютной погрешностью $\varepsilon_a = 10^{-12}$ и относительной погрешностью $\varepsilon_r = 10^{-8}$.

Для соблюдения условий подобия расчетов при любом количестве звеньев механической системы сохранялись неизменными общая длина маятника и его суммарные масс-инерционные характеристики.

На рис. 1 и 2 приведены доли времени (в процентах), затрачиваемого внутренними процедурами численного моделирования колебаний указанной выше механической системы в зависимости от числа степеней свободы n .

На рис. 1 приведены результаты интегрирования в случае использования метода Гаусса при решении системы дифференциальных уравнений относительно ускорений, на рис. 2 — обратного итерационного алгоритма.

Из рис. 1 и 2 видно, что при интегрировании уравнений движения основное время тратится на формирование уравнений (вычисление коэффициентов матриц $A(\mathbf{q})$, $\mathbf{b}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$) и на решение системы уравнений относительно ускорений (вычисление вектора $\ddot{\mathbf{q}}$). При этом доля времени, затрачиваемого процедурами алгоритма, не связанными с вычислением вектора ускорений, не превышает 5% от общих временных затрат на интегрирование и убывает с увеличением порядка системы дифференциальных уравнений.

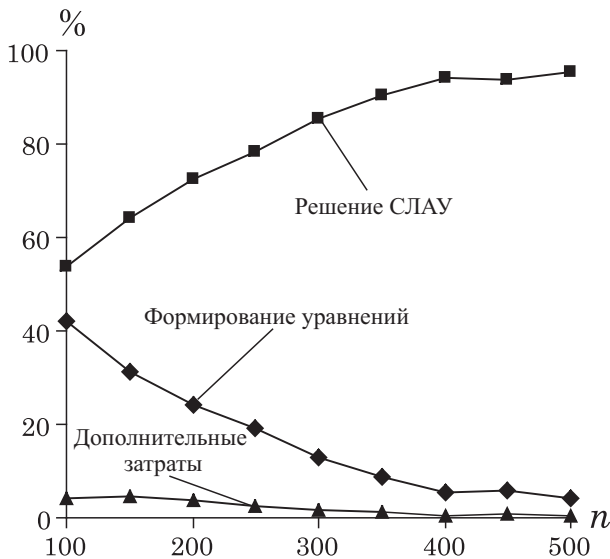


Рис. 1. Метод Гаусса

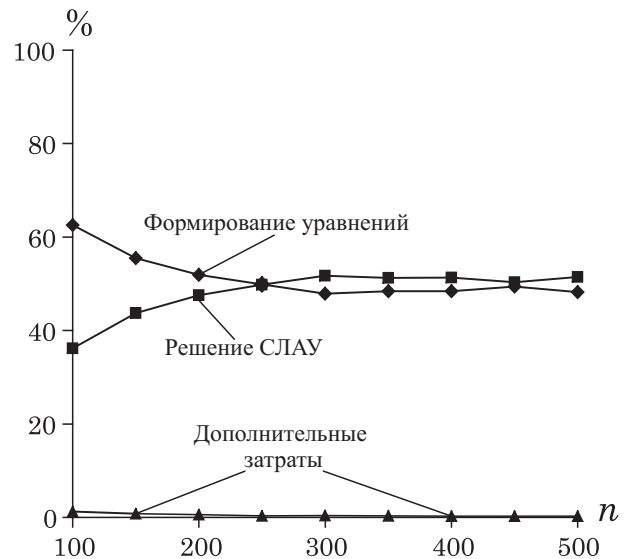


Рис. 2. Итерационный метод

Из рис. 1 и 2 также видно, что при использовании метода Гаусса доля времени на решение системы уравнений относительно ускорений увеличивается с увеличением порядка системы, в то время как при использовании итерационного метода доли временных затрат на формирование уравнений и их решение сопоставимы.

Для оценки эффективности двух рассматриваемых алгоритмов были определены порядки многочленов, описывающих зависимость времени, затрачиваемого на решение уравнений движения относительно ускорений, от числа степеней свободы и вычислены коэффициенты этих многочленов.

Вычислительный эксперимент подтверждает, что при использовании метода Гаусса сохраняется кубический закон роста времени расчета от порядка системы, соответствующий многочлен имеет вид $P_1(n) = 0.00001n^3 - 0.00438n^2 + 0.705n - 36.99$. При использовании итерационного алгоритма время расчета растет по квадратичному закону: $P_2(n) = 0.000088n^2 - 0.00014n - 0.54$. Это происходит из-за того, что при изменении числа степеней свободы сохраняется эффективный ранг матрицы возмущений на шаге интегрирования системы дифференциальных уравнений.

На рис. 3 показаны графики многочленов $P_1(n)$, $P_2(n)$ и временных затрат, полученных в ходе вычислительного эксперимента.

В таблице представлена зависимость среднего числа шагов по уточнению матрицы в итерационном методе от числа степеней свободы механической системы. Видно, что на каждом шаге интегрирования достаточно 2–3 итераций для уточнения матрицы, независимо от числа степеней свободы.

Число степеней свободы, n	100	200	300	400	500
Среднее число шагов итерационного метода	2.12	2.07	2.23	2.34	2.37

Представленные результаты показывают высокую сравнительную эффективность предлагаемого метода.

Выводы. В настоящей статье предложена новая модификация обратного итерационного метода Пауэлла–Бройдена, предназначенная для решения возмущенных СЛАУ с симметричной положительно определенной плотно заполненной матрицей. Метод используется для решения уравнений движения ме-

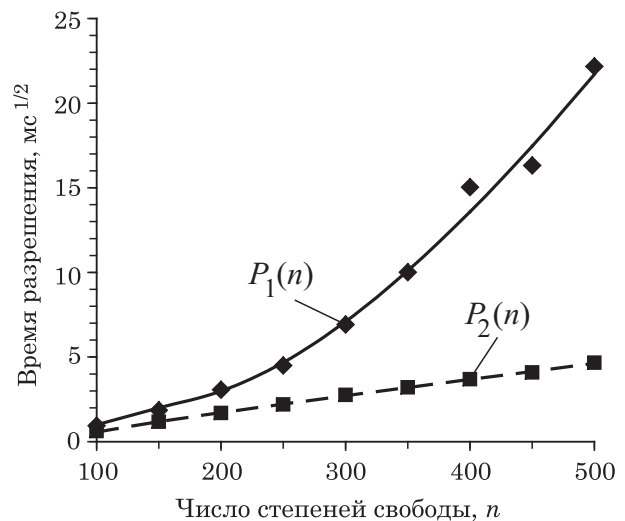


Рис. 3. Зависимости времени расчета от порядка СЛАУ

ханических систем относительно ускорений при их численном интегрировании.

Рассмотрены основные свойства алгоритма.

1. Показано, что все направления поиска решений — векторы s_k , кроме двух последних, являются A -сопряженными. Два последних направления на каждой итерации линейно независимы. Тем самым доказано, что метод глобально сходится за конечное число итераций и точное решение может быть найдено не более чем за $n + 1$ шаг.

2. Найдены условия, при которых метод локально сходится, т.е. последовательность приближений монотонно стремится к точному решению.

3. Показано, что если матрица возмущений имеет ранг $r < n$, то алгоритм (3) сходится за $r + 1$ шаг.

Таким образом, приближенное решение возмущенной системы линейных уравнений с точностью, требуемой для численного интегрирования уравнений движения механических систем, может быть найдено с помощью алгоритма (3) много меньше, чем за $n + 1$ шаг. На примере проиллюстрировано, что количество итераций остается небольшим и практически постоянным для широкого диапазона изменения числа степеней свободы механической системы.

Рассмотренный алгоритм показал хорошую эффективность при численном интегрировании уравнений движения механических систем с большим числом степеней свободы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Величенко В.В.* Матрично-геометрические методы в механике с приложениями к задачам робототехники. М.: Наука, 1988.
2. *Лилов Л.К.* Моделирование систем связанных тел. М.: Наука, 1993.
3. *Голуб Дж., Ван Лоун Ч.* Матричные вычисления. М.: Мир, 1999.
4. *Аоки М.* Введение в методы оптимизации. М.: Наука, 1977.
5. *Гилл Ф., Моррей У., Райт М.* Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985.
6. *Иванов В.Н.* Модификация алгоритма Пауэлла–Бройдена для решения систем линейных алгебраических уравнений // Вестник Пермского университета. Информационные системы и технологии. 2005. Вып. 4. 115–119.
7. *Поляк Б.Т.* Введение в оптимизацию. М.: Наука, 1983.
8. *Химмельблау Д.* Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975.
9. *Дэннис Дж., Шнабель Р.* Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. М.: Мир, 1988.
10. *Nocedal J., Wright S.J.* Numerical Optimization. Berlin: Springer, 2006.
11. *Минц М.* Математическое программирование. Теория и алгоритмы. М.: Наука, 1990.
12. *Фиажко А., Мак-Кормик Г.* Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной минимизации. М.: Мир, 1972.
13. *Conn A.R., Gould N.I.M., Toint Ph.L.* Convergence of quasi-Newton matrices generated by the symmetric rank-one update // Mathematical Programming. 1991. **50**, N 1. 177–195.
14. *Byrd R.H., Khalfan H.F., Schnabel R.B.* Analysis of a symmetric rank-one trust region method // SIAM J. on Optimization. 1996. **6**. 1025–1039.
15. *Khalfan H.F., Byrd R.H., Schnabel R.B.* A theoretical and experimental study of the symmetric rank-one update // SIAM J. on Optimization. 1993. **3**. 1–24.
16. *Farzin M., Malik Abu H., Wah J.L.* Multi-steps symmetric rank-one update for unconstrained optimization // World Applied Sci. J. 2009. **7**, N 5. 610–615.
17. *Farzin M., Malik Abu H., Wah J.L.* Memoryless modified symmetric rank-one method for large-scale unconstrained optimization // American J. of Applied Sciences. 2009. **6**, N 12. 2054–2059.
18. *Farzin M., Malik Abu H., Wah J.L.* Convergence of symmetric rank-one method based on modified quasi-Newton equation // J. of Math. Res. 2010. **2**, N 3. 97–102.
19. *Yueting Y., Chengxian X.* A switching algorithm based on modified quasi-Newton equation // Numer. Math. A J. of Chinese Universities. 2006. **15**, N 3. 257–267.
20. *Wah J.L., Malik Abu H.* Convergence of a positive definite symmetric rank-one method with restart // Advanced Modeling and Optimization. 2009. **11**, N 4. 423–433.
21. *Бячков А.Б., Иванов В.Н., Шимановский В.А.* Классификация форм уравнений динамики систем твердых тел со структурой дерева // Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика. 2009. Вып. 4. 109–116.

Поступила в редакцию
04.02.2012