УДК 519.612

В. С. Абрамчук*, канд. фіз.-мат. наук,
І. В. Абрамчук,** старший викладач

*Вінницький державний педагогічний університет
імені М. Коцюбинського, м. Вінниця,
**Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця.

ЕФЕКТИВНІ МЕТОДИ ЧИСЕЛЬНОГО МОДЕЛЮВАННЯ НА ОСНОВІ ВИБОРУ БАЗИСНИХ ЕЛЕМЕНТІВ

Запропоновані чисельні та наближені методи розв'язування крайових задач. Чисельні методи розв'язування лінійних крайових задач ґрунтуються на упорядкуванні матриці різницевого рівняння на максимально укрупнені ортогональні підсистеми. Наближені методи ґрунтуються на апроксимації розв'язку функціями на основі ростків многочлена Тейлора.

Ключові слова: *різницеве еліптичне рівняння, методи мінімальних нев'язок, похибок у просторах* AE, $A^T E$, *ростки многочлена Тейлора, метод зважених нев'язок, обернені задачі для динамічних систем.*

Вступ. Різницева апроксимація багатовимірних диференціальних еліптичних рівнянь, що описують задачі динаміки в'язкої рідини і тепломасоперенесення, приводить до необхідності розв'язування систем лінійних алгебричних рівнянь з матрицями великих порядків, сильно розрідженими і погано обумовленими. Коректні способи апроксимації диференціальних операторів зберігають властивість еліптичності крайової задачі для різницевих схем [1–4].

Для розв'язування різницевих рівнянь постійно розробляються нові алгоритми [1–4]. Тому існує проблема вибору найбільш ефективних методів, що одночасно володіють високою швидкістю збіжності, обчислювальною стійкістю, простотою реалізації алгоритмів і мінімальними потребами комп'ютерних ресурсів. Зростання числа нових методів і способів їх алгоритмічної реалізації приводить до необхідності порівняння їх ефективності при розв'язуванні різницевих еліптичних рівнянь.

1. Постановка проблеми. Обґрунтувати, що кольорове упорядкування змінних у відповідності до фарбування вузлів сітки дискретизації лінійного диференціального еліптичного оператора у просторі $\mathbb{R}^n$, $n \geq 2,3$, мінімальним числом фарб так, щоб кожен вузол шаблону був іншого кольору, приводить до максимально укрупнених ортогональних підсистем матриці різницевого рівняння.

Постановка задачі.

1. Узагальнити методи мінімальних нев’язок, похибок, відповідно, у просторах AE, $A^T E$ для розв’язування еліптичних різницевих рівнянь, $E=\{\vec{e}_i\}_{i=1}^{N}$.
2. Розробити алгоритми, що об’єднують ітераційний процес з методами проекцій на підпростори з ортогональними базисами.
3. Розробити теорію наближень на основі ростків многочлена Тейлора.

Нехай необхідно, наприклад, розв’язати стаціонарне конвективно-дифузійне рівняння [3]

$$\sum_{i=1}^{s}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho v_i u\right)=\sum_{i=1}^{s}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\gamma\frac{\partial u}{\partial x_i}\right)+V_p u+V_c\,,\ \left(x_1,...,x_s\right)\in D \tag{1}$$

з крайовою умовою Діріхле

$$u\left(\vec{x}\right)=q\,,\ \vec{x}\in\Gamma_D. \tag{2}$$

У роботі [10] запропонований спосіб фарбування вузлів рівномірної сітки у просторах $\mathbb{R}^2$, $\mathbb{R}^3$ мінімальним числом фарб так, щоб кожен вузол шаблону «хрест» був іншого кольору: $z=\left(3(i-1)+j\right)\ (\mathrm{mod}\,5)$ для сіток (i,j) простору $\mathbb{R}^2$, $z=\left(4(i-1)+2\left(k-1\right)+j\right)\ (\mathrm{mod}\,7)$ для сіток (i,j,k) простору $\mathbb{R}^3$, z — колір. У відповідності до фарбування сіток упорядкуємо змінні. Незалежно від коефіцієнтів диференціального оператора (1) крайових умов (2), кроку h рівномірної сітки, конфігурації області D, дістанемо m ортогональних підсистем у просторах AE, $A^T E$ ($m=5$ для сіток у просторі $\mathbb{R}^2$, $m=7$ у просторі $\mathbb{R}^3$).

Метод мінімальних нев’язок. Виберемо базиси підпросторів $U_p=span\left\{A\vec{e}_j\right\}_{i\in I_p}$, де I_p — множина індексів змінних одного кольору, $p=\left\{1,...,m\right\}$. Розкладемо вектор $\vec{b}$ різницевого рівняння $A\vec{x}=\vec{b}$ у базисі AE: $\vec{b}=\sum\limits_{p=1}^{m}\sum\limits_{j\in I_p}x_j A\vec{e}_j$.

Нехай $\vec{x}^{(0)}$ довільне наближення. Для всіх $k=0,1,...$ покладемо $\vec{u}_p^{(k+1)}=\vec{u}_p^{(k)}+\overrightarrow{\delta u}^{(k+1)}$, $p\in[1:m]$, $\vec{x}=\left(\vec{u}_1,...,\vec{u}_m\right)^T$, дістанемо нев’язки $\vec{\rho}_p=-\vec{r}^{(k)}-\sum\limits_{j\in I_p}\delta u_j^{(k+1)}A\vec{e}_j$, $p\in[1:m]$.

Мінімізуючи норми векторів нев’язок $\vec{\rho}_p$, $p\in[1:m]$, знайдемо похибки наближень

$$\delta u_j^{(k+1)} = -\left(\vec{r}^{(k)},\ A\vec{e}_j\right)^2 \Big/ \left\|A\vec{e}_j\right\|_2^2 = -\left(A^T\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_j\right)^2 \Big/ \left\|A\vec{e}_j\right\|_2^2,\ j \in I_p .$$

Отже, виконуючи паралельно проекції вектора нев'язки на підпростори U_p, дістанемо уточнення векторів $\vec{u}_1^{(k)},..., \vec{u}_m^{(k)}$. Виберемо найкраще наближення з умови

$$\min_{p\in[1:m]} \left\|\vec{\rho}_p^{(k+1)}\right\|_2 : \quad \left\|\vec{\rho}_p^{(k+1)}\right\|_2^2 = \left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2 - \sum_{j\in I_p} \left(A^T\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_j\right)^2 \Big/ \left\|A\vec{e}_j\right\|_2^2,$$

що еквівалентно знаходженню $\max\limits_{p\in[1:m]} = \sum\limits_{j\in I_p} \left(A^T\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_j\right)^2 \Big/ \left\|A\vec{e}_j\right\|_2^2$.

Алгоритм методу мінімальних нев'язок.

Для довільного $\vec{x}^{(0)}$ і для всіх $k = 0,1,...$

1. Обчислити вектори $\vec{r}^{(k)}$, $A^T\vec{r}^{(k)}$ та суми
$$d_p = \sum_{j\in I_p} \left(A^T\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_j\right)^2 \Big/ \left\|A\vec{e}_j\right\|_2^2,\ p = 1,...,m .$$
2. Вибрати максимальне значення d_{p_0}, $p_0 \in [1,...,m]$.
3. Уточнити наближення $\vec{u}_{p_0}^{(k+1)} = \vec{u}_{p_0}^{(k)} + \overrightarrow{\delta u}_{p_0}^{(k)}$, $\overrightarrow{\delta u}_{p_0}^{(k)} = \left(\delta x_j\right)_{j\in I_{p_0}}$.

Має місце.

Теорема 1. Метод мінімальних нев'язок розв'язування систем різницевих еліптичних рівнянь $A\vec{x} = \vec{b}$, упорядкованих на ортогональні підсистеми, строго монотонно збігається до розв'язку системи.

Доведення теореми 1. Якщо вектор $\vec{x}^{(k)}$ не є розв'язком рівняння $A\vec{x} = \vec{b}$, то хоча б одна з норм нев'язок $\vec{\rho}_p$, $p \in [1:m]$, відмінна від нуля, а тому $\exists\, p_0 \in [1:m]$ таке, що

$$\sum_{j\in I_{p_0}} \left(\vec{r}^{(k)}, A^T\vec{e}_j\right)^2 \Big/ \left\|A^T\vec{e}_j\right\|_2^2 > 0 \Rightarrow$$

$$\left\|\vec{r}^{(k+1)}\right\|_2^2 = \min\left(\left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2 - \sum_{j\in I_p} \left(\vec{r}^{(k)}, A^T\vec{e}_j\right)^2 \Big/ \left\|A^T\vec{e}_j\right\|_2^2\right) < \left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2.$$

Оскільки послідовність $\left\|\vec{\rho}_p^{(k)}\right\|_2^2$ обмежена знизу і монотонно спадає на кожному кроці, то метод мінімальних нев'язок строго монотонно збігається.

Метод мінімальних похибок (проекцій). Виберемо ортогональні базиси підпросторів $V_p = span\left\{A^T \vec{e}_j\right\}_{j \in I_p}$. Нехай $\vec{x}^{(k)}$ — довільне наближення. Уточнимо його ітераційним процесом

$$\vec{x}_p^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + \sum_{j \in I_p} \alpha_j A^T \vec{e}_j \tag{3}$$

для всіх $p \in [1:m]$, за формулами

$$\alpha_j = -\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_j\right) \Big/ \left\| A^T \vec{e}_j \right\|_2^2, \ j \in I_p, \tag{4}$$

дістанемо вектори похибок

$$\vec{\varepsilon}_p^{(k+1)} = \vec{\varepsilon}^{(k)} - \sum_{j \in I_p} \left(\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_j\right) \Big/ \left\| A^T \vec{e}_j \right\|_2^2 \right) A^T \vec{e}_j .$$

Найкращим наближенням є проекція на гіперплощину $\vec{x} = \vec{x}^* + V_p$, що мінімізує норму вектора похибки

$$\min_{p \in [1:m]} \left\| \vec{\varepsilon}_p^{(k+1)} \right\|_2^2 = \min_{p \in [1:m]} \left(\left\| \vec{\varepsilon}^{(k)} \right\|_2^2 - C_p \right),$$

$$\max_{p \in [1:m]} C_p = \max_{p \in [1:m]} \sum_{i \in I_p} \left(\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_j\right)^2 \Big/ \left\| A^T \vec{e}_j \right\|_2^2, \tag{5}$$

Має місце.

Теорема 2. Метод мінімальних похибок (3)–(5) розв'язання системи різницевих еліптичних рівнянь, упорядкованих на ортогональні підсистеми, строго монотонно збігається до розв'язку системи $A\vec{x} = \vec{b}$.

Доведення теореми 2. Якщо вектор $\vec{x}^{(k)}$ не є розв'язком рівняння $A\vec{x} = \vec{b}$, то не всі компоненти вектора нев'язки $\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_j\right)$, $j \in I_p$, $p \in [1:m]$, рівні нулю, тому існує $p_0 \in [1:m]$, для якого $C_{p_0} > 0$, а тому

$$\left\| \vec{\varepsilon}_{p_0}^{(k+1)} \right\|_2^2 = \left\| \vec{\varepsilon}^{(k)} \right\|_2^2 - C_{p_0} < \left\| \vec{\varepsilon}^{(k)} \right\|_2^2 .$$

Найкраще наближення досягається проекцією на гіперплощину $\vec{x} = \vec{x}^* + V_p$, для якої виконується умова (5).

З формули (5) випливає, що найкраще наближення можна досягти проекціями з тих областей кулі $\left\| \vec{x} - \vec{x}^* \right\|_2 \leq \left\| \vec{x}^* - \vec{x}^* \right\|_2$, де норма вектора нев'язки максимізується. Крім того, максимізація норми вектора нев'язки в кулі забезпечує стійкість обчислювального процесу. Щоб одночасно забезпечити максимізацію норми вектора нев'язки та мінімізувати норму вектора похибки (що еквівалентно максимізації відношення Релея $\rho\left(A^T A, \vec{\varepsilon}\right) = \left\| \vec{r} \right\|_2^2 \Big/ \left\| \vec{\varepsilon} \right\|_2^2$) покладемо:

$$\vec{x} = \vec{x}^{(k)} + \alpha A^T \vec{c}^{(k)} \Rightarrow \vec{r} = \vec{r}^{(k)} + \alpha A A^T \vec{c}^{(k)} .$$

Мінімізація норми вектора похибки виконується за умови $\alpha = -\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{c}^{(k)}\right) \Big/ \left\| A^T \vec{c}^{(k)} \right\|_2^2 \neq 0$. Тоді норма вектора нев'язки:

$$\left\|\vec{r}^{(k+1)}\right\|_2^2 = \left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2 - 2 \cdot \left(\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{c}^{(k)}\right) \Big/ \left\| A^T \vec{c}^{(k)} \right\|_2 \right) \left(\vec{r}^{(k)}, AA^T \vec{c}^{(k)}\right) +$$

$$+ \left(\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{c}^{(k)}\right) \Big/ \left\| A^T \vec{c}^{(k)} \right\|_2 \right)^2 \cdot \left\| AA^T \vec{c}^{(k)} \right\|_2^2 .$$

З останньої формули випливає, для того, щоб у кулі $\left\|\vec{x} - \vec{x}^*\right\|_2 \leq \left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^*\right\|_2$ максимізувалось відношення Релея $\rho\left(A^T A \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right)$, $\vec{\varepsilon} = \vec{x} - \vec{x}^*$, достатньо виконання нерівності $\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{c}^{(k)}\right)\left(\vec{r}^{(k)}, AA^T \vec{c}^{(k)}\right) < 0$.

Має місце.

Лема 1. Максимізація відношення Релея $\rho\left(A^T A \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right)$ у кулі $\left\|\vec{x} - \vec{x}^*\right\|_2 \leq \left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^*\right\|_2$, де вектор $\vec{\varepsilon}^{(k)} = \vec{x}^{(k)} - \vec{x}^*$ не є власним вектором матриці $A^T A$, забезпечується вибором векторів

$$\vec{p} = AA^T \vec{r}^{(k)} + \vec{r}^{(k)},\ \vec{q} = AA^T \vec{r}^{(k)} - \vec{r}^{(k)},\ \vec{c} = \vec{q} - \gamma \vec{p}$$

у процедурі $\vec{x} = \vec{x}^{(k)} - \alpha A^T \vec{c}$:

$$\left(\vec{c}, \vec{p}\right) = 0 \Rightarrow \gamma = \left(AA^T \vec{r}^{(k)} + \vec{r}^{(k)}, AA^T \vec{r}^{(k)} - \vec{r}^{(k)}\right) \Big/ \left\| AA^T \vec{r}^{(k)} + \vec{r}^{(k)} \right\|_2^2 .$$

Доведення леми 1. Нерівність $\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{c}^{(k)}\right)\left(\vec{r}^{(k)}, AA^T \vec{c}^{(k)}\right) < 0$ перепишемо у формі $\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{c}^{(k)}\right)\left(\vec{c}^{(k)}, AA^T \vec{r}^{(k)}\right) < 0$. Тому достатньо, щоб вектор $\vec{c}^{(k)}$ задовольняв умову $\left(\vec{c}^{(k)}, AA^T \vec{r}^{(k)} + \vec{r}^{(k)}\right) = 0$, тоді $\left(\vec{c}^{(k)}, AA^T \vec{r}^{(k)}\right) = -\left(\vec{c}^{(k)}, \vec{r}^{(k)}\right)$ і $\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{c}^{(k)}\right)\left(\vec{r}^{(k)}, AA^T \vec{c}^{(k)}\right) < 0$ виконується, якщо $\left(\vec{c}^{(k)}, \vec{r}^{(k)}\right) \neq 0$. Позначимо $\vec{p} = AA^T \vec{r}^{(k)} + \vec{r}^{(k)}$, $\vec{q} = AA^T \vec{r}^{(k)} - \vec{r}^{(k)}$ — діагоналі паралелограма, побудованого на векторах $AA^T \vec{r}^{(k)}$, $\vec{r}^{(k)}$. Вектор $\vec{c}$ задамо у формі $\vec{c} = \vec{q} - \gamma \vec{p}$, $\left(\vec{c}, \vec{p}\right) = 0 \Rightarrow \gamma = \left(\vec{q}, \vec{p}\right) / \left(\vec{p}, \vec{p}\right)$:

$$\vec{c} = AA^T \vec{r}^{(k)} - \vec{r}^{(k)} - \gamma\left(AA^T \vec{r}^{(k)} + \vec{r}^{(k)}\right) = \left(1 - \gamma\right) AA^T \vec{r}^{(k)} - \gamma \vec{r}^{(k)} .$$

Якщо вектор похибки $\vec{\varepsilon}^{(k)} = \vec{x}^{(k)} - \vec{x}^*$ не є власним вектором матриці $A^T A$ (отже вектор $\vec{r}^{(k)}$ не є власним вектором матриці AA^T), то

$$0<\left(\left\|AA^T\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2-\left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2\right)\Big/\left(\left\|AA^T\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2+2\left\|A^T\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2+\left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2\right)<1,$$

тобто $0<\gamma<1$.

Алгоритм методу мінімальних похибок (проекцій). Для довільного вектора $\vec{x}^{(0)}$ і для всіх $k=0,1,...$

1. Обчислити вектори $\vec{r}^{(k)}$, $AA^T\vec{r}^{(k)}$, $\vec{p}^{(k)}=AA^T\vec{r}^{(k)}+\vec{r}^{(k)}$, $\vec{q}^{(k)}=AA^T\vec{r}^{(k)}-\vec{r}^{(k)}$, $\vec{c}^{(k)}=(1-\gamma)AA^T\vec{r}^{(k)}-\gamma\vec{r}^{(k)}$, де параметр $\gamma=\left(\vec{p}^{(k)},\ \vec{q}^{(k)}\right)\Big/\left(\vec{p}^{(k)},\ \vec{p}^{(k)}\right)$.
2. Обчислити $\vec{u}=\vec{x}^{(k)}-\left(\left(\vec{r}^{(k)},\vec{c}^{(k)}\right)\Big/\left\|A^T\vec{c}^{(k)}\right\|_2^2\right)A^T\vec{c}^{(k)}$ — вектор, для якого одночасно мінімізується норма вектора похибки $\vec{\varepsilon}=\vec{u}-\vec{x}^*$ і максимізується норма вектора нев'язки $\vec{r}=A\vec{u}-\vec{b}$.
3. Для всіх $p\in[1:m]$ обчислити $C_p=\sum\limits_{i\in I_p}\left(\vec{r},\vec{e}_i\right)^2\Big/\left\|A^T\vec{e}_i\right\|_2^2$, $\vec{r}=A\vec{u}-\vec{b}$, $p\in[1:m]$. Знайти максимальне значення $C_{p_0}=\max\limits_{p\in[1:m]}C_p$.
4. Обчислити проекцію $\vec{x}^{(k+1)}=\vec{u}-\sum\limits_{j\in I_{p_0}}\left(\left(\vec{r},\vec{e}_i\right)\Big/\left\|A^T\vec{e}_i\right\|_2^2\right)A^T\vec{e}_j$.

Повторити процес до виконання умови $C_p<\varepsilon$ ($\varepsilon>0$ — задана точність).

З формул (3)–(4) випливає, що вектори, у напряму яких здійснюється проекція на підпростори V_p можна обчислювати паралельно, на основі вектора нев'язки $\vec{r}^{(k)}$, за формулою:

$$\vec{s}_p=-\sum_{j\in I_p}\left(\left(\vec{r}^{(k)},\vec{e}_i\right)\Big/\left\|A^T\vec{e}_i\right\|_2^2\right)\vec{e}_i,\ p\in[1:m]. \tag{6}$$

З формули (6) випливають два способи прискорення методу похибок (проекцій).

Перший спосіб. Нехай вектор наближення $\vec{x}^{(k)}$ не належить жодній гіперплощині $\vec{x}=\vec{x}^*+V_p$. Зкоректований вектор наближення $\vec{u}$ запишемо у формі

$$\vec{u}:=\vec{x}^{(k)}-\sum_{i=1}\gamma_i A^T\vec{s}_i .$$

Параметри γ_i знайдемо з умови мінімізації норми вектора похибки $\vec{\varepsilon} = \vec{u} - \vec{x}^*$, що еквівалентно розв'язуванню системи m-го порядку з симетричною додатно-визначеною матрицею ($m = 5$ для еліптичних рівнянь, дискретизованих у просторі $\mathbb{R}^2$, $m = 7$ — у просторі $\mathbb{R}^3$): $B = \left(\vec{b}_{ij}\right)_{i,j=1}^{m} = \left(A^T\vec{s}_i,\ A^T\vec{s}_j\right)_{i,j=1}^{m}$ і вектором правих частин $\vec{b} = \left(\vec{b}_i\right)_{i=1}^{m} = \left(\vec{r}^{(k)},\ \vec{s}_i\right)_{i=1}^{m}$.

Другий спосіб. Нехай вектор наближення $\vec{x}^*$ належить деякій гіперплощині $\vec{x} = \vec{x}^{(k)} + V_p$, $p \in [1:m]$. Оскільки вектори наближення $\vec{x}^{(k)}$ і розв'язку $\vec{x}^*$ належить даній гіперплощині, то найкраще наближення буде за умови, якщо вектори $A^T\vec{s}_i$, $i \neq p$, $i \in [1:m]$, ортогональні підпростору V_p, що виконується паралельно процедурою:

- обчислити $AA^T\vec{s}_i$, $i \neq p$, $i \in [1:m]$;
- для всіх $j \in I_i$, $i \neq p$, $i \in [1:m]$ сформувати

$$\vec{s}_i := \vec{s}_i - \sum_{j \in I_p}\left(\left(AA^T\vec{s}_i, \vec{e}_j\right) \Big/ \left\|A^T\vec{e}_j\right\|_2^2\right)\vec{e}_j,\ i \neq p,\ i \in [1:m].$$

Для сформованих векторів $\vec{s}_i$ мінімізувати норму вектора похибки.

Узагальнимо результати на випадок розв'язання задач чисельного моделювання для регулярних, напіврегулярних криволінійних сіток розбиття криволінійних зв'язних областей просторів $\mathbb{R}^2$, $\mathbb{R}^3$, обмежених кусково-гладким контуром (поверхнею) Γ. Нехай область D упорядковано розбивається умовно паралельними або умовно полярними лініями на криволінійні чотирикутники розмірності $m \times n$ (рис. 1, 2).

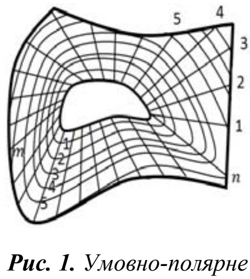

Рис. 1. *Умовно-полярне розбиття області*

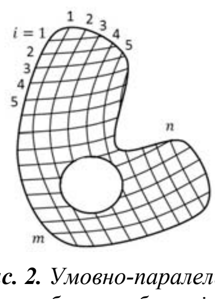

Рис. 2. *Умовно-паралельне розбиття області*

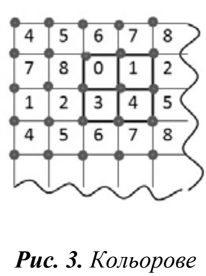

Рис. 3. *Кольорове фарбування сітки*

Має місце.

Лема 2. Якщо зв'язна обмежена область простору $\mathbb{R}^2$ розбита упорядкованими неперервними лініями розмірності $[m \times n]$ на криволінійні чотирикутники, то вузли дев'ятиточкового шаблону дискретизації диференціального оператора другого порядку можна розфарбувати мінімальним числом фарб за правилом $z = \left(3(i-1)+j\right) (\mathrm{mod}\, 9)$, $z = 0,1,...,8$ — кольори (рис. 3).

Лема 3. Якщо зв'язна обмежена область простору $\mathbb{R}^3$ розбита упорядкованими неперервними поверхнями розмірності $[m \times n \times s]$ на криволінійні паралелепіпеди, то вузли 27-точкового шаблону дискретизації диференціального оператора другого порядку можна розфарбувати мінімальним числом фарб за правилом $z = \left(9\left(k-1\right)+3(i-1)+j\right) (\mathrm{mod}\, 27)$.

Якщо змінні упорядкувати за кольорами, то базис AE, $A^T E$ відповідно розіб'ється на 9 (27) ортогональних підсистем.

2. Метод зважених нев'язок.

Ростки многочленів Тейлора. Для визначення якісних змін у поведінці розв'язків диференціальних рівнянь або систем рівнянь у теорії катастроф досліджуються канонічні форми на основі гладких замін змінних [9]. Задача дослідження розв'язків системи диференціальних рівнянь залежних від керуючих параметрів є виключно складною. Тому, як правило, систему рівнянь спрощують і від фізичних параметрів переходять до узагальнених. Такими узагальненими параметрами можуть виступати, наприклад, коефіцієнти розкладу розв'язку в ряд Тейлора [9]. Заміною змінних можна домогтися того, щоб відрізок ряду Тейлора з достатньою точністю наближав гладкий розв'язок диференціального рівняння.

Оскільки для більшості систем диференціальних рівнянь аналітична форма розв'язку, як функція координат і параметрів керування невідома, то розв'язок апроксимують многочленом найкращого наближення [5]. Задача найкращого наближення функції однієї змінної $f(x) \in C^r\left(\Omega\right)$, $r = 0,1,...,m$, многочленом

$$Q_n(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + ... + a_n\varphi_n(x) \tag{7}$$

полягає у знаходженні вектора коефіцієнтів $\vec{a} = \left(a_0, a_1, ..., a_n\right)^T$ з умови

$$\min_{\vec{a} \in R^{n+1}} \max_{x \in \Omega} \left| f(x) - Q_n(x) \right| \text{ або } \min_{\vec{a} \in R^{n+1}} \int_a^b \left(f(x) - Q_n(x) \right)^2 dx,$$

де $\Omega = \left[a;b\right]$ або $\Omega = \left\{x_i \in \left[a;b\right]\right\}_{i=1}^{S}$, $S \ge n+1$, $\left(\varphi_i(x)\right)_{i=0}^{n}$ — лінійно незалежні функції, що задовольняють умову Хаара [6, с. 80], [5, с. 18]. Якщо Ω — дискретна множина, то інтеграл наближено замінюється сумою $\min\limits_{\vec{a}\in R^{n+1}} \sum\limits_{i=1}^{S} \left(f(x_i) - Q_n(x_i) \right)^2$, $S \geq n+1$.

Означення. Ростком многочлена Тейлора

$$Q_n(x) = a_0 P(x) + a_1 P'(x) + ... + a_n P^{(n)}(x), \; x \in \Omega,$$

називається така гладка функція $P(x)$, $x \in \Omega$, що функції $\varphi_i(x) = P^{(i)}\left(x\right)$, $\forall i \in \left\{0,1,...,n\right\}$, $n \in N$ — лінійно незалежні і задовольняють умову Хаара.

Приклад. 1. Функції $th(x)$, $ch^{-1}(x)$, e^{-x^2}, $\frac{1}{1+x^2}$, $(2+\cos x)^{-1}$ є ростками многочлена Тейлора довільного порядку на всій числовій осі.

2. Функції x^n, $e^{-\alpha x}(c_1 \sin x + c_2 \cos x)$ є ростками многочлена Тейлора скінченого порядку на відрізку $\left[a;b\right]$, c_1, c_2, $\alpha > 0$ — $const$.

3. Ростками многочленів Тейлора у просторі $\mathbb{R}^n$ є, наприклад, функції n змінних $\vec{x} = \left(x_1,...,x_n\right)^T$:

$$\prod_{i=1}^{n} th(x_i), \; \prod_{i=1}^{n} ch^{-1}(x_i), \; \prod_{i=1}^{n} e^{-\alpha_i x_i^2}, \prod_{i=1}^{n} (1+x_i^2)^{-1}, \prod_{i=1}^{n} (2+\cos x_i)^{-1},$$

багатомірні многочлени Тома — ростки катастроф (ростки многочлена Тейлора скінченного порядку [9]).

4. Узагальненим многочленом Тейлора назвемо многочлен $S_n(x,\vec{\varphi}) = \sum\limits_{i=0}^{n} a_i \cdot \varphi_i(x) \cdot P^{(i)}\left(x\right)$, де $\varphi_i(x) \in C^{(r)}(\Omega)$ — лінійно-незалежні функції, а $P(x)$ — росток многочлена Тейлора. Аналогічно будуються узагальнені многочлени Тейлора багатьох змінних.

Якщо для деякого диференціального рівняння і з певного класу K визначений росток $P(x)$ для многочлена Тейлора, то, обравши за базис функції $\left\{P^{(k)}(x)\right\}_{k=1}^{n}$, $n \in N$, можна на основі методу зважених нев'язок шукати наближені розв'язки уже для цілого підкласу рівнянь з класу K.

Нехай необхідно розв'язати диференціальне рівняння

$$A(\varphi) = L\varphi + p = 0, \; \varphi = \varphi\left(\vec{x}\right), \; \vec{x} \in \Omega, \tag{8}$$

що задовольняє крайовій умові

$$B(\varphi) = M\varphi + r = 0, \; r \in \Gamma, \tag{9}$$

де L, M — лінійні диференціальні оператори, функції $p = p\left(\vec{x}\right)$, $r = r\left(\vec{x}\right)$ не залежать від φ, $p\left(\vec{x}\right) \in C(\Omega)$, $r\left(\vec{x}\right) \in C(\Gamma)$. Якщо задана крайова умова Діріхле, то $M\varphi = \varphi$, якщо умова Неймана, то $M\varphi = k\dfrac{\partial\varphi}{\partial\vec{n}}$, де $\vec{n}$ — нормаль до поверхні, Γ — кусково-гладка поверхня обмеженої зв'язної області Ω, $\vec{x} = \left(x_1, ..., x_n\right)^T$.

Нехай вибраний росток $P\left(\vec{x}\right)$ многочлена Тейлора у просторі $\mathbb{R}^m$, що до певної міри характеризує поведінку розв'язку рівняння (7). Побудуємо апроксимацію $\tilde{\varphi}$ для розв'язку крайової задачі (8), (9), виконавши розклад $\varphi \approx \tilde{\varphi} = \sum_{k=1}^{M} c_k\, P_k\left(\vec{x}\right)$, дістанемо нев'язку по області Ω: $R_\Omega = = A\left(\tilde{\varphi}\right) = L\left(\tilde{\varphi}\right) + p$ на Ω і нев'язку в крайових умовах $R_\Gamma = B\left(\tilde{\varphi}\right) = = M\left(\tilde{\varphi}\right) + r$ на Γ, де $P_k\left(\vec{x}\right)$ — частинні похідні від ростка $P\left(\vec{x}\right)$ по координатам.

Мінімізуємо зважену суму нев'язок на межі і по області, покладаючи [7]

$$\int_\Omega W_k\, R_\Omega\, d\Omega + \int_\Gamma V_m\, R_\Gamma\, d\Gamma = 0\,, \tag{10}$$

де, взагалі, вагові функції W_k і V_k можуть вибиратися незалежно. Якщо вибрати $W_k = P_k$ (і $V_m = P_m$), то дістанемо метод Гальоркіна і коефіцієнти a_k можна відшукати методом найменших квадратів [7].

Вибір базисних елементів $W_k = P_k$ ($V_m = P_m$) на основі ростків многочлена Тейлора має ряд переваг: природно виконується апроксимація похідних вищих порядків розв'язків диференціальних рівнянь; спрощується застосування формули Гріна, що часто дозволяє виконати слабке формулювання методу зважених нев'язок [7]. Якщо диференціальне рівняння залежить від часової змінної (необмеженої) і від просторових координат (обмежених або одних координат обмежених, інших необмежених), то вибираючи відповідні ростки для многочленів Тейлора можна без значних ускладнень виконати апроксимацію розв'язку. При обчислені $\int_\Omega P_n\left(\vec{x}\right) P_m\left(\vec{x}\right) d\Omega$, виконуючи інтегрування за частинами та заміною змінних, часто можна задачу інтегрування звести до інтегрування многочленів.

Підставляючи в (10) вираз (7), систему рівнянь зважених нев'язок зведемо до системи лінійних алгебричних рівнянь якщо оператор $L\varphi$ — лінійний, і до системи нелінійних рівнянь, якщо оператор $L\varphi$ — нелінійний.

3. Обернені задачі для динамічних систем. Якщо розв'язання прямих задач у теорії динамічних систем не визивають ускладнень, то обернені задачі відносяться до класу некоректно поставлених [8]. Для розв'язання таких задач використовують два підходи, або розв'язок відшукують у заданому класі або використовують регуляризаційні алгоритми за А. М. Тихоновим. При цьому необхідно вивчати геометричні властивості лінеаризованої матриці стійкості прямої задачі, щоб визначати області динамічної і структурної стійкості, що залежать від власних значень матриці [9].

Розглянемо структурно стійкий гармонічний осцилятор із затуханням

$$\frac{d^2x}{dt^2}+a_1\frac{dx}{dt}+a_2x=0\,,\; a_1\neq 0\Rightarrow\; \frac{dx}{dt}=y-a_1x\,,\; \frac{dy}{dt}=-a_2x\,. \quad (11)$$

Це рівняння виникає при вивчені коливань тіла на пружині при наявності сили опору або описує деформацію полімерів [2]. Власні значення матриці стійкості визначаються за формулою $\lambda_{1,2}=$ $=-a_1/2\pm\sqrt{\left(a_1/2\right)^2-a_2}$. Якщо розглядати (a_1,a_2) як параметри керування, то двомірний простір $\mathbb{R}^2$ параметрів розділиться на підобласті: 1) $\operatorname{Re}\lambda_1=0$, $\operatorname{Im}\lambda\neq 0\Rightarrow(a_1=0, a_2>0)$, де розв'язок $x=R\cos(\omega t+\varphi)$, $y=R\sin(\omega t+\varphi)$ описує вихор (множину біфуркацій L_B); 2) $\lambda_1=\lambda_2=-\dfrac{a_1}{2}\neq 0\;\Rightarrow\; a_2=\left(a_1/2\right)^2$, $a_1\neq 0$, — парабола (максвелова множина L_M [9]. Якщо $a_1>0$ — стійкий затухаючий розв'язок з перехідним процесом $x=e^{-(a_1/2)t}\left(c_1+c_2t\right)$; якщо $a_1<0$ — розбіжний розв'язок); 3) $\lambda_1=0$ або ($\lambda_2=0$) $\Rightarrow$ $(a_1\neq 0, a_2=0)$ (біфуркаційна множина L_B, розв’язок $x=c_1+c_2e^{-a_1t}$ — стійкий, якщо $a_1>0$); 4) $\operatorname{Re}\lambda<0, \operatorname{Im}\lambda\neq 0\;\Rightarrow(a_1>0,\, a_2-\left(a_1/2\right)^2>0)$ стійкий гармонічно-затухаючий розв’язок.

Нехай розв’язується крайова задача Діріхле або задача Коші для рівняння (11), яка для заданих параметрів (a_1°,a_2°) має стійкий розв’язок з власними значеннями $\lambda_{1,2}=-\alpha\pm\omega i$, $\alpha=a_1/2>0$, $\omega=\sqrt{a_2-\left(a_1/2\right)^2}$. Тоді спрощеною оберненою задачею є задача визначення допусків на параметри (a_1,a_2), через які необхідно визначити фізичні параметри — коефіцієнт пружності та демпфуючий множник, які б забезпечували знаходження системи у заданому рівноважному стані. Маючи попередній аналіз про області в просторі параметрів можна знайти допуски. Але більш глибокий аналіз показує нестійкість розв'язку до збурень параметрів $a_1 = a_1^{\circ} + \delta a_1$, $a_2 = a_2^{\circ} + \delta a_2$ навіть у малому околі значень $(a_1^{\circ}, a_2^{\circ})$:

$$\delta\left(t,\, \delta a_1,\, \delta a_2\right) = t\, e^{-\alpha_1^{\circ} t}\left[\delta a_2\left(C_2'\frac{1}{2\omega}\cos\omega t - C_1'\frac{1}{2\omega}\sin\omega t\right) + \right.$$

$$\left. + \delta a_1\left(\left(-\frac{1}{2}C_1' - \frac{a_1}{2\omega}C_2'\right)\cos\omega t + \left(-\frac{1}{2}C_2' + \frac{a_1}{2\omega_0}C_1'\right)\sin\omega t\right)\right] + O(\rho),$$

де $\rho = \delta a_1^2 + \delta a_2^2$, C_1', C_2' — значення констант (функцій), що залежать від початкових або крайових умов. Оскільки при зміні параметрів розв'язок є залежним як від $\delta a_1, \delta a_2$, так і від змінної t, то першим доданком розкладу у відрізок Тейлора не можна обмежитись. Щоб дослідити як впливають похибки параметрів $\delta a_1, \delta a_2$ на розв'язок крайової задачі (або задачі Коші) необхідно його локалізувати (визначити як узагальнений многочлен), обираючи за росток многочлена Тейлора, наприклад функцію $\exp\left(-\delta a_1^2 - a_2^2\right)$, або e^{-t^2}, а за вектор-функцію коефіцієнтів частинні похідні по приростам $\delta a_1, \delta a_2$ від функції $\exp\left(-0.5\left(a_1 + \delta a_1\right)t\right)\times$ $\times\left(C_1\cos\omega t + C_2\sin\omega t\right)$, $\omega = \sqrt{a_2 + \delta a_2 - \left(\left(a_1 + \delta a_1\right)/2\right)^2}$, C_1, C_2 в залежності від крайових або початкових умов також можуть бути функціями $\delta a_1, \delta a_2$. Отже задачу про визначення допусків на параметри – обернену задачу, можна сформулювати так: знайти многочлен найкращого наближення $Q_n(t, \delta a_1, \delta a_2)$, що мінімізує норму похибки

$$\max_{(\delta a_1, \delta a_2)\in\Omega}\left\|Q_n(t, \delta a_1, \delta a_2) - x^*(t)\right\|_2$$

при обмеженнях

$$(\delta a_1, \delta a_2) \in \Omega \subset \Omega_0 =$$

$$= \left\{(\delta a_1, \delta a_2) : a_1^0 + \delta a_1 > 0,\, a_2^0 + \delta a_2 - \left(\left(a_1 + \delta a_1\right)/2\right)^2 > 0\right\},$$

де Ω — обмежена замкнена опукла множина, що належить опуклій області Ω_0 гармонічних коливань із затуханням, за умови, що розв'язок $x(t, a_1^0 + \delta a_1, a_2^0 + \delta a_2)$ задовольняє крайовим або початковим умовам.

Узагальнимо задачу на систему матеріальних точок з демпфуванням, дістанемо систему диференціальних рівнянь [2] $M\,\vec{\ddot{x}}(t) =$

$= -B\dot{\vec{x}}(t) - K\vec{x}(t)$, де $M = diag\left(m_1,...,m_n\right)$ — матриця мас, $m_i > 0$, $i \in [1:n]$, $B = diag\left(b_1,...,b_n\right)$ — матриця демпфування, $K = K^T$ — тридіагональна матриця жорсткості:

Ввівши заміну змінних $\vec{y}\left(t\right) = \left[\dot{\vec{x}}\left(t\right), \vec{x}\left(t\right)\right]^T$, диференціальне рівняння другого порядку зведемо до системи

$$\dot{\vec{y}}(t) = \begin{bmatrix} \ddot{\vec{x}}\left(t\right) \\ \dot{\vec{x}}\left(t\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -M^{-1}B\,\dot{\vec{x}}\left(t\right) - M^{-1}K\,\vec{x}\left(t\right) \\ \dot{\vec{x}}\left(t\right) \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} -M^{-1}B & -M^{-1}K \\ I & 0 \end{bmatrix} \cdot \vec{y}\left(t\right) = A\,\vec{y}\left(t\right).$$

Якісний тип розв'язку залежить від того, чи можна діагоналізувати матрицю A, за яких умов частина власних значень може обнулитись [2; 9]. Нехай матриця A діагоналізована: $A = S\,\Lambda\,S^{-1}$, де $\Lambda = diag\left(\lambda_1,...,\lambda_n\right)$, тоді розв'язок [2] $\vec{y}\left(t\right) = S\,e^{\Lambda t}\,S^{-1}\,\vec{y}\left(0\right)$, де $\vec{y}\left(0\right)$, $\dot{\vec{y}}\left(0\right)$ — початкові умови. Якщо матриця A має жорданову форму (недіагоналізована): $S^{-1}A\,S = J = diag\left(J_n\left(\lambda_i\right)\right)$, то малі похибки δA можуть привести до динамічної і структурної нестійкості розв'язку [2; 9]. Недіагоналізовані матриці утворюють межу між двома фізичними станами поведінки розв'язку: осциляціями і монотонним затуханням. Врахувати структурні зміни розв'язку можна на основі ростків многочлена Тейлора.

Висновки.

1. Обґрунтовано, що кольорове фарбування вузлів сіткової матриці, забезпечує упорядкування матриці різницевого рівняння на максимально укрупнені ортогональні підсистеми у просторах AE, $A^T E$.
2. Наближення розв'язків крайових задач на основі ростків многочлена Тейлора дає змогу не лише апроксимувати розв'язок, а й досліджувати якісну зміну розв'язку, в залежності від керуючих параметрів, на основі теорії катастроф.

Список використаних джерел:

1. Хейгеман Л. Прикладные итерационные методы / Л. Хейгеман, Д. Янг ; пер. с англ. — М. : Мир, 1986. — 448 с.
2. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра / Дж. Деммель. — М. : Мир, 2001. — 429 с.
3. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости / С. Патанкар. — М. : Энергоатомиздат, 1984. — 125 с.
4. Зверев В. Г. Модифицированный полилинейный метод решения разностных эллиптических уравнений / В. Г. Зверев // ЖВМ и МФ. — 1998. — Т. 38. — № 9. — С. 1553–1562.

5. Бердышев В. И. Численные методы приближения функций / В. И. Бердышев, Ю. Н. Субботин. — Свердловск : Среднеуральске изд-во, 1979. — 116 с.
6. Ахиезер Н. И. Лекции по теории аппроксимаций / Н. И. Ахиезер. — М. : Наука, 1965. — 407 с.
7. Зенкевич О. Конечные элементы и аппроксимация / О. Зенкевич, К. Морган. — М. : Мир, 1986. — 318 с.
8. Тихонов А. Н. Методы решения некорректных задач / А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. — М. : Наука, 1974. — 223 с.
9. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф / Р. Гилмор. — М. : Мир, 1984. — Кн. 1. — 350 с.; Кн. 2. — 282 с.
10. Абрамчук В. С. Итерационные методы направленного поиска решения систем $Ax = f$ с сингулярно-естественным упорядочением переменных / В. С. Абрамчук // Доп. НАН Украины. — 1996. — № 8. — С. 4–8.

Numerical and approximate methods of solving boundary value problems are proposed. Numerical methods for solving linear boundary value problems are build on ranking of the difference equation matrix to maximize orthogonal subsystem. Approximate methods are based on the approach of solution in the form of the shoots of Taylor polynomial.

Key words: *elliptic difference equation; Minimal Residual method, Minimal error method in AE, $A^T E$ space; inverse problems for dynamic systems.*

Отримано: 17.06.2014

УДК 517.95

Т. П. Гой, канд. фіз.-мат. наук

Прикарпатський національний університет
імені Василя Стефаника, м. Івано-Франківськ

НОВІ ФУНКЦІЇ, ОЗНАЧЕНІ ПРИ ДОПОМОЗІ ФАКТОРІАЛЬНИХ СТЕПЕНІВ

Досліджені нові неелементарні функції дійсної змінної, означені з використанням зростаючих і центральних факторіальних степенів. Встановлені деякі властивості цих функцій, зокрема, показаний їхній зв'язок з узагальненою гіпергеометричною функцією. Виведені звичайні лінійні диференціальні рівняння, розв'язками яких є нові функції.

Ключові слова: *зростаючий факторіальний степінь, центральний факторіальний степінь, узагальнена гіпергеометрична функція.*

1. Вступ. Моделювання багатьох процесів математичної фізики, теорії теплопровідності, астрономії, аеродинаміки, біомедицини, квантової механіки та інших наук приводить до спеціальних функцій різної природи. Різноманітність задач, що породжують спеціальні функції, веде до

