



УДК 051.3

В.В. Аристов, канд. техн. наук
Ин-т проблем моделирования
в энергетике им. Г.Е. Пухова НАН Украины
(Украина, 03164, Киев-164, ул. Генерала Наумова, 15,
тел. (044) 4243251, e-mail: vasily@aristov.com)

Интегро-алгоритмический метод вычисления логарифма матрицы с произвольной точностью

Предложен интегро-алгоритмический метод аппроксимации и итерационной коррекции для вычисления с высокой точностью логарифмов матрицы. Метод основан на применении линейных многошаговых формул численного интегрирования разностного типа, а также разностно-дифференциальных формул Обрешкова с учетом высших производных. В нем обобщены известные алгоритмы логарифмирования на основе формул Паде. В результате итерационных коррекций повышается их порядок и точность. Предложенные соотношения и программные решения позволяют определять необходимые параметры для организации процессов вычисления логарифмов матрицы с произвольно заданной высокой точностью.

Запропоновано інтегро-алгоритмічний метод апроксимації та ітераційної корекції для обчислення з високою точністю логарифмів матриці. Метод базований на застосуванні лінійних багатокрокових формул чисельного інтегрування різницевого типу, а також різницево-диференціальних формул Обрешкова з урахуванням вищих похідних. В ньому узагальнено відомі алгоритми логарифмування на основі формул Паде. В результаті використання ітераційної корекції підвищується їх порядок і точність. Запропоновані співвідношення і програмні рішення дозволяють визначити необхідні параметри для організації процесів обчислення логарифмів матриці з довільно заданою високою точністю.

К л ю ч е в ы е с л о в а: логарифм матрицы, численное интегрирование, интегро-алгоритмический метод, многошаговые формулы интегрирования, передаточные функции, эквивалентные преобразования.

Понятие логарифма числа a , алгоритм вычислений такого логарифма и набор соответствующих таблиц предложены Джоном Непером в начале XVII века. Несколько позже другой математик, Генри Бригс, на основе идей Д. Непера разработал усовершенствованный аппроксимационный алгоритм вычисления логарифмов $b = \ln a$ и опубликовал высокоточные таблицы сначала с восемью достоверными десятичными цифрами (в 1617 г.), а затем — с 14 цифрами (в 1624 г.). В 1633 г. им были опубликованы

© В.В. Аристов, 2014

таблицы десятичных логарифмов от тригонометрических функций. Такая высокая точность в те времена (без использования компьютерных средств) была достигнута в результате простоты и эффективности разработанного алгоритма. Суть использованного алгоритма вычислений — масштабирование числа a последовательностью k операций извлечения квадратного корня $\tilde{a} = a^{1/2^k}$, аппроксимация простейшей функцией F логарифма $\ln \tilde{a} \approx F(\tilde{a})$ для промежуточной переменной \tilde{a} и коррекция эффекта масштабирования $b = \ln a \approx 2^k \ln \tilde{a}$.

В логарифмах матрицы вместо скалярного значения a используется квадратная матрица \mathbf{A} , т.е. $\mathbf{B} = \ln \mathbf{A}$. (Наряду с термином «логарифм матрицы» в научной литературе используется также термин «матричный логарифм».) Существует достаточно много практических задач, связанных с необходимостью вычисления матричных логарифмов, в основном для построения моделей различных дискретных процессов. Матричный логарифм некоторой матрицы \mathbf{A} — это некоторая матрица $\mathbf{B} = \ln \mathbf{A}$, экспонента которой $e^{\mathbf{B}}$ эквивалентна исходной матрице \mathbf{A} , т.е. матричный логарифм есть обратная функция от матричной экспоненты [1—4].

Не все матрицы имеют логарифм, а те матрицы, которые их имеют, могут иметь несколько или даже бесчисленное множество логарифмов. В комплексной постановке матрица имеет логарифм, если и только если она невырожденная. Логарифм не единственный, но если матрица не имеет отрицательных действительных собственных чисел, то она имеет единственный логарифм. Вещественная матрица \mathbf{A} имеет вещественный логарифм \mathbf{B} тогда и только тогда, когда у матрицы \mathbf{A} либо совсем нет элементарных делителей, соответствующих отрицательным характеристическим числам, либо каждый такой элементарный делитель повторяется четное число раз.

Существуют точные алгоритмы вычисления матричных логарифмов. Если \mathbf{A} можно преобразовать в эквивалентную диагональную матрицу, $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{V}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{V}$, составленную из собственных чисел λ_i , где \mathbf{V} — матрица собственных векторов, то, вычислив диагональную матрицу $\ln \bar{\mathbf{A}}$, у которой $\bar{a}_{ii} = \ln \lambda_i$, получаем $\mathbf{B} = \mathbf{V} \cdot \ln \bar{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{V}^{-1} = \ln \mathbf{A}$.

В случае, когда \mathbf{A} не может быть представлена в диагональном виде, ее с помощью преобразующей матрицы \mathbf{U} , выполнив вычисления $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{U}$, сводят к нормальной жордановой форме и далее — к виду $\tilde{\mathbf{A}} = \lambda (\mathbf{E} + \mathbf{K})$, где \mathbf{E} и \mathbf{K} — единичная и квазидиагональная нильпотентная матрицы из элементов λ_i^{-1} . Тогда получаем

$$\mathbf{B} = \mathbf{U} \ln \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U} \left(\ln \lambda \mathbf{E} + \sum_{s=1}^m \frac{(-\mathbf{K})^{-1}}{s} \right) \mathbf{U}^{-1} = \ln \mathbf{A}.$$

Для нахождения матричных логарифмов точными методами требуется определение собственных чисел и матрицы собственных векторов или преобразующей матрицы, алгоритмы вычисления которых достаточно трудоемкие. Поэтому широко используются аппроксимационные методы.

Предложенный в работе [5] метод основан на развитии упомянутого алгоритма Г. Бригса применительно к матричному аргументу логарифма. Пусть $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ — квадратная матрица, не имеющая собственных чисел на \mathbb{R}^- . Согласно этому методу сначала для достаточно большого целого s извлекают s раз квадратные корни $\mathbf{A}^{1/2^s}$, чтобы промежуточная матрица $\mathbf{A}^{1/2^s}$ стала достаточно близкой к единичной диагональной \mathbf{E} . Затем выполняется аппроксимация логарифма от полученной матрицы $\ln(\mathbf{A}^{1/2^s})$ вычислением $r_m(\mathbf{A}^{1/2^s} - \mathbf{E})$, где r_m — полином Паде порядка $[m/m]$ для аппроксимации логарифмической функции $\ln(1+x)$. Окончательный результат по формированию матричного логарифма соответствует выражению $\ln(\mathbf{A}) \approx 2^s r_m(\mathbf{A}^{1/2^s} - \mathbf{E})$.

В работах [3, 4] изложены модификации данного метода для повышения эффективности вычислений логарифма матрицы с заданной точностью посредством сбалансированного выбора значений параметров s и m , а также формирования квази-верхнетреугольной матрицы методом разложения Шура [6].

Постановка задачи. Для обобщения вариантов вычисления матричных логарифмов на основе разностно-дифференциальных аппроксимаций, включая аппроксимации Паде, и достижения произвольной точности предлагается аппроксимационно-итерационный метод вычисления логарифмов матриц на основе многошаговых разностно-дифференциальных формул численного интегрирования и соответствующей им аналитической модели, который назовем интегро-алгоритмическим.

Матричные логарифмы применяются при построении непрерывных моделей различных дискретных процессов: в марковских моделях [7], при решении СЛАУ методом простой итерации [8], для формирования обобщенной модели линейных многошаговых формул численного интегрирования (ФЧИ) [9]. В работах [8, 9] предложены варианты соотношений для вычисления матричного логарифма $\mathbf{B} = \ln(\mathbf{E} + H\mathbf{G})$, полученные на основе адекватных преобразований одношаговых линейных формул численного интегрирования с учетом высших производных.

Модель дискретного интегрирования. Запишем в общем виде многошаговую ФЧИ с постоянным шагом H , учитывая высшие производные:

$$y_{i+1} = \sum_{v=-n_b}^{n_p} a_v y_{i+v} + \sum_{s=0}^m \sum_{v=-n_b}^{n_p} c_{sv} H^{s+1} f_{i+v}^{(s)}, \quad (1)$$

где y_{i+j} и f_{i+j} — дискретные значения интеграла, определяемые для $t_{i+j} = t_0 + (i+j)H$, и исходные значения подынтегральной функции, $f_{i+j} = f_{i+j}^{(0)}$; $f_{i+j}^{(s)}$ — s -я производная подынтегральной функции, $s \in 1 \div m$; j — индекс учитываемых дискрет на каждом шаге вычислений, $j \in -n_b \div n_p$; a_v, c_{0v}, c_{sv} — весовые коэффициенты соответствующих дискрет.

Численное решение однородной линейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) вида

$$\mathbf{Y}' = \mathbf{A}\mathbf{Y}, \mathbf{Y}(t_0) = \mathbf{Y}_0 \quad (2)$$

с помощью формулы (1) может быть описано непрерывной моделью на основе следующих канонических передаточных функций (КПФ):

прямой —

$$S(p) = \frac{1}{p} S_0(p) = \frac{1}{p} \sum_{r=0}^{\infty} \alpha_r H^r p^r,$$

системной —

$$\mathbf{R}(\mathbf{P}) = \mathbf{P}\mathbf{R}_0(\mathbf{P}) = \mathbf{P} \sum_{r=0}^{\infty} \rho_r H^r \mathbf{P}^r, \quad (3)$$

обратной —

$$G(p) = pG_0(p) = p \sum_{r=0}^{\infty} \gamma_r H^r p^r$$

(или обратной системной — $\mathbf{G}(\mathbf{P}) = \mathbf{P}\mathbf{G}_0(\mathbf{P}) = \mathbf{P} \sum_{r=0}^{\infty} \gamma_r H^r \mathbf{P}^r$) [8,10]. Здесь

p — оператор дифференцирования функции, $p^r \doteq \frac{d^r}{dt^r}$; $\mathbf{P} = \mathbf{A}$ — матричный

оператор дифференцирования ОДУ (2); $\alpha_r, \rho_r, \gamma_r$ — безразмерные коэффициенты КПФ для конкретной итерационной формулы (1). Эти коэффициенты взаимосвязаны: определяя последовательно, например α_r , можно в случае необходимости последовательно находить и остальные коэффициенты, что вытекает из соотношений между формальными степенными рядами КПФ:

$$S_0(p) = G_0^{-1}(p) = \frac{p}{[pR_0(p)]^{-1}}, \quad R_0(p) = \frac{[pG_0(p)]^{-1}}{p} = \frac{[pS_0^{-1}(p)]^{-1}}{p}, \quad (4)$$

$$G_0(p) = S_0^{-1}(p) = \frac{[pR_0(p)]^{-1}}{p}$$

где $\varphi^{-1}(x) = 1/\varphi(x)$ — инверсия ряда $\varphi(x)$, а $[\varphi(x)]^{-1}$ — его обращение. Сходимость бесконечных рядов и ее скорость зависит как от параметров ФЧИ, определяющих коэффициенты α_r , ρ_r и γ_r , так и от величины шага интегрирования и нормы $\|\mathbf{A}\|$.

Рекуррентная формула для определения коэффициентов α_r любой ФЧИ из (1) имеет вид

$$\alpha_r = \frac{r_0!}{\sum_{v=-v_p}^{v_b} a_v v^{r_0}} \left(\sum_{l=-n_p}^{n_b} \sum_{s=0}^{\min\{r+r_0-1, m\}} c_{sl} \sum_{\sigma=0}^{r+r_0-1-s} \gamma_{s\sigma} \frac{l^{r+r_0-1-s-\sigma} (-1)^{r-s-\sigma}}{(r+r_0-1-s-\sigma)!} + \frac{(-1)^{r+1}}{(r+r_0)!} \sum_{v=-v_p}^{v_b} a_v v^{r+r_0} - \sum_{j=1}^{r-1} \frac{\alpha_{r-j} (-1)^j}{(r_0+j)!} \sum_{v=-v_p}^{v_b} a_v v^{r_0+j} \right). \quad (5)$$

Соответствующий этой формуле вариант процедуры для вычисления любого набора коэффициентов КПФ на языке математического пакета Maple приведен в работе [11].

Для рассматриваемых ФЧИ (1) формальные ряды КПФ могут быть представлены и в свернутом виде. Так, для разностных формул без учета высших производных ($m = 0$) запишем

$$S_0(\bar{p}) = \bar{p} \frac{\sum_{l=-n_b}^{n_p} c_{0l} e^{l\bar{p}}}{e^{\bar{p}} - \sum_{v=-n_b}^{n_p} a_v e^{v\bar{p}}}, \quad (6)$$

а для одношаговых разностно-дифференциальных ФЧИ с учетом высших производных ($m \geq 0$) —

$$R_0(\bar{p}) = \frac{1}{\bar{p}} \ln \frac{1 + \sum_{s=0}^m c_{s0} \bar{p}^{s+1}}{1 - \sum_{s=0}^m c_{s1} \bar{p}^{s+1}}, \quad (7)$$

где $\bar{p} = Hr$.

Из этих выражений по весовым коэффициентам a_v , c_{0v} и c_{sv} ФЧИ также могут быть определены необходимые коэффициенты α_r , ρ_r и γ_r КПФ. Однако для таких коэффициентов при итерационных уточнениях более пред-

почтительны явные аналитические выражения. Например, для коэффициентов ρ_r системной КПФ одношаговой ФЧИ Обрешкова при $m = 1$

$$Y_{i+1} = Y_i + \frac{H}{2} \mathbf{A} (Y_i + Y_{i+1}) + \frac{H^2}{12} \mathbf{A}^2 (Y_i - Y_{i+1}) \quad (8)$$

для любого r справедлива явная формула

$$\rho_r = \frac{\cos\left(\frac{2r-1}{6}\pi\right) \cos\left(\frac{r}{2}\pi\right)}{2^{r-1} 3^{\frac{r+1}{2}} (r+1)}, \quad (9)$$

а для разностной формулы интегрирования трапеции — формула $p_{2r} = 4^{-r} / (2r+1)$.

На основе системной КПФ (3) может быть сформирована новая система ОДУ

$$\bar{Y}' = \mathbf{B} \bar{Y}, \quad \bar{Y}(t_0) = Y_0, \quad \mathbf{B} = \sum_{r=0}^{\infty} p_r H^r \mathbf{A}^{r+1}, \quad (10)$$

решение которой в точках квантования x_j эквивалентно решению системы (2) с помощью итерационной формулы (1) при согласованном [9] выборе участка разгона. Погрешность аппроксимации \mathbf{B} для сходящегося ряда (10) при увеличении значения r стремится к нулю. Коэффициенты α_r, ρ_r и γ_r зависят от параметров ФЧИ (1) и могут быть представлены как в численном, так и символьном виде. Составленная из минимизируемых выражений для этих коэффициентов совокупность уравнений с неопределенными параметрами и необходимыми дополнительными ограничениями может стать основой для синтеза ФЧИ с желаемыми свойствами.

Вариант программной реализации процедуры SintERDF() на языке Maple для синтеза любой многошаговой разностно-дифференциальной ФЧИ (1) имеет следующий вид:

```
SintERDF:=proc(W0:list) local W1,s,p1, FNI,rk,rmm,p0,fF,rm,
W,L,i,j,XY,YX,i1,j1,k, l,H; global nb, np, m, eC;
eC:=array(-1..m,-nb..np,[]); W1:=(sum(eC[-1,s],s=-nb..np)-1);
FNI:=proc(r:integer)
local sm,s,l; global m,nb,np,eC;
sm:=min(r,m); sum(sum(eC[s,l]*(l-1)**(r-s)/(r-s)!,s=0..sm),l=-nb..
np) + sum(eC[-1,l]*(l-1)**(r+1), l=-nb..np)*(-1)**(r+1)/(r+1)!;
end proc; p1 := proc() nargs end proc;
rk:=(m+2)*(nb+np+1); rmm:=rk-p1(W0); p0:=-1; fF:=1;
while fF=1 do
rk:=rk-1; rm:=rmm+p0; eC:=array(-1..m,-nb..np,[]);
```

```

W:=map(FNI,[seq(L,L=0..rm)]): W:=[op(W),W0[],W1]:
XY:=seq(seq(eC[i,j],j=-nb..np),i=-1..m): YX:=solve(W,[XY]):
if nops(YX)=0 then p0:=p0-1
else fF:=0:
  for i1 from -1 to m do for j1 from -nb to np do
    k:=(i1+1)*(nb+np+1)+j1+nb+1;
    eC[i1,j1]:=(sscanf(nprintf("%q", YX[1,k]),"%*s%*s%a"))[]:
    if type(eC[i1,j1],indexed) then fF:=1: p0:=p0+1 end if:
  end do: end do: end if:
  if rk<1 then print("Unsolved!"): fF:=0: end if:
end do:
end proc:

```

Исходными данными для этой процедуры являются параметры формулы (1) $nb = n_b$, $np = n_p$, $m = m$ и список $W0$ с возможными ограничениями на синтезируемые коэффициенты ФЧИ, а в результате получаем двумерный массив $eC:=array(-1..m,-nb..np,[])$ из синтезируемых коэффициентов a_v (в первой строке) и c_{sv} (в последующих).

Матрица \mathbf{B} эквивалентной системы (10) зависит как от параметров ФЧИ, так и от шага интегрирования H . В дальнейшем в качестве тестовой матрицы будем использовать матрицу Гильберта \mathbf{G} , в которой $g_{i,j} = 1/(i+j-1)$. Для нее характерен большой диапазон значений собственных чисел — приблизительно $10^{1.5nG}$, где nG — размерность \mathbf{G} . Например, при $nG = 12$ квадратная матрица \mathbf{G} имеет максимальное σ_{\max} и минимальное σ_{\min} собственные числа, равные соответственно $1,79537205956$ и $1,0479463979 \cdot 10^{-16}$.

В случае решения ОДУ (2) различными методами при $\mathbf{A} = \mathbf{G}$ собственные числа эквивалентной матрицы \mathbf{B} деформируются (см. таблицу). Естественно, чем выше порядок аппроксимации используемой ФЧИ и меньше шаг интегрирования H , тем меньше изменяются собственные числа σ и, следовательно, точнее формируется результат интегрирования исходной системы (2).

В таблице приведены данные для разностных ФЧИ, т.е. без использования высших производных ($m = 0$ в (1)). В этом случае на основе прямой КПФ (6) можно записать точное дробно-рациональное выражение для эквивалентной матрицы \mathbf{B} . Используя преобразование (4), получаем

$$R_0(\bar{p}) = \frac{1}{\bar{p}} \left[\frac{e^{\bar{p}} - \sum_{v=-n_b}^{n_p} a_v e^{v\bar{p}}}{\sum_{l=-n_b}^{n_p} c_{0l} e^{l\bar{p}}} \right]^{-1}.$$

Тогда для матричного оператора дифференцирования $\mathbf{P} = \mathbf{A}$ запишем

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} \mathbf{R}_0(\mathbf{A}) = \frac{\left[\left(e^{H\mathbf{A}} - \sum_{v=-n_b}^{n_p} a_v e^{vH\mathbf{A}} \right) \left(\sum_{l=-n_b}^{n_p} c_{0l} e^{lH\mathbf{A}} \right)^{-1} \right]^{-1}}{H},$$

где, как и в (4), $()^{-1}$ — инверсия выражения, а $[\]^{-1}$ — обращение.

Эквивалентные преобразования итерационных алгоритмов. Деформация матрицы \mathbf{A} в эквивалентную матрицу \mathbf{B} вследствие погрешностей аппроксимации не всегда является недостатком ФЧИ. Результат \mathbf{B} можно рассматривать как некоторую матричную функцию от \mathbf{A} . Это хорошо видно на примере методов Эйлера и трапеции (см. таблицу). Поскольку эти методы одношаговые, можно воспользоваться КПФ (7):

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} \mathbf{R}_0(\mathbf{A}) = \frac{\ln \left(\left(\mathbf{E} + \sum_{s=0}^m c_{s0} (H\mathbf{A})^{s+1} \right) \left(\mathbf{E} - \sum_{s=0}^m c_{s1} (H\mathbf{A})^{s+1} \right)^{-1} \right)}{H},$$

откуда при $m = 0$ следует

$$\mathbf{B} = \frac{\ln \left((\mathbf{E} + c_{00}(H\mathbf{A})) (\mathbf{E} - c_{01}(H\mathbf{A}))^{-1} \right)}{H}.$$

Тогда для метода трапеции $c_{00} = c_{10} = 1/2$ получаем

$$\mathbf{B} = \frac{\ln \left((\mathbf{E} + H\mathbf{A}/2) (\mathbf{E} - H\mathbf{A}/2)^{-1} \right)}{H} = 2 \operatorname{arth} (H\mathbf{A}/2),$$

Относительная деформация (%) собственных чисел σ_{\max} и σ_{\min} матрицы \mathbf{B}

Погрешность	Метод интегрирования					
	Эйлера (явный)	Трапеция	Милна (4) (явный)	Адамса (4) (явный)	Адамса (4) (неявный)	Адамса (5) (неявный)
$\Delta\sigma_{\max}$ при $H = 1/2$	28,629448	-7,6658	3,1161		-0,9089	-0,3949
$\Delta\sigma_{\min}$ при $H = 1/2$	$-1,7728 \cdot 10^{-13}$	$-1,7392 \cdot 10^{-15}$	$3,90726 \cdot 10^{-15}$	Нет сходимости	$-3,4824 \cdot 10^{-15}$	$4,217 \cdot 10^{-15}$
$\Delta\sigma_{\max}$ при $H = 1/4$	17,395	-1,731	0,281	0,703	-0,0762	-0,020
$\Delta\sigma_{\min}$ при $H = 1/4$	$8,661 \cdot 10^{-14}$	$-8,288 \cdot 10^{-16}$	$2,278 \cdot 10^{-16}$	$5,988 \cdot 10^{-16}$	$-7,916 \cdot 10^{-17}$	$6,0155 \cdot 10^{-18}$

Примечание: (4) — четырехшаговая ФЧИ, (5) — пятишаговая ФЧИ.

т.е. формируется матричный аналог скалярной обратной гиперболической функции. Представление этой функции степенным рядом системной КПФ для метода трапеции принимает вид

$$\mathbf{B} = 2 \operatorname{arth}(H\mathbf{A}/2) = \sum_{r=0}^{\infty} \rho_r H^r \mathbf{A}^{r+1} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{4^{-r}}{(2r+1)} H^{2r} \mathbf{A}^{2r+1}.$$

Для явной ФЧИ Эйлера $c_{00} = 1$ и $c_{10} = 0$. Тогда при $H = 1$ получаем $\mathbf{B} = \ln(\mathbf{E} + \mathbf{A})$, т.е. функцию логарифма матрицы $(\mathbf{E} + \mathbf{A})$. Следовательно, система ОДУ (10), являющаяся непрерывной моделью дискретного решения методом Эйлера,

$$\mathbf{Y}_{i+1} = \mathbf{Y}_i + H \mathbf{A} \mathbf{Y}_i, H = 1, \quad (11)$$

исходной системы ОДУ (2) с матрицей $\mathbf{A} = (\mathbf{C} - \mathbf{E})$, имеет эквивалентную матрицу \mathbf{B} , равную матричному логарифму \mathbf{C} , т.е. $\mathbf{B} = \ln(\mathbf{C})$. Представление матричного логарифма степенным рядом системной КПФ ФЧИ Эйлера принимает вид разложения в степенной ряд Меркатора:

$$\mathbf{B} = \ln(\mathbf{C}) = \ln(\mathbf{E} + \mathbf{A}) = \sum_{r=0}^{\infty} \rho_r \mathbf{A}^{r+1} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r}{(r+1)} \mathbf{A}^{r+1}. \quad (12)$$

Если невырожденная квадратная матрица \mathbf{C} удовлетворяет условиям существования матричного логарифма и норма $\|\mathbf{A}\|$ удовлетворяет условиям сходимости бесконечного ряда (12), то этот ряд с любой заданной точностью сходится к одному из значений матричного логарифма $\ln(\mathbf{C})$. К сожалению, ряд (12) обычно сходится очень медленно, поэтому вычисление матричного логарифма по формуле (12) недостаточно эффективно.

Существует бесчисленное множество вариантов ФЧИ со значительно более быстрой сходимостью ряда $\mathbf{B} = \sum_{r=0}^{\infty} \rho_r \mathbf{A}^{r+1}$, о чем свидетельствуют

графики, представленные на рис. 1, где также приведены графики для оптимальных по точности вариантов многошаговых ФЧИ (1) при $m = 0$.

Из рис. 1 видно, что существуют ФЧИ с высокой скоростью убывания коэффициентов ρ_r . Следовательно, скорость сходимости ряда может быть весьма высокой, однако результат вычислений \mathbf{B} по (10) с новыми коэффициентами ρ_r не будет соответствовать искомому матричному логарифму $\ln(\mathbf{C})$. Необходимо предварительно определить матрицу $\bar{\mathbf{A}}$ некоторой новой системы ОДУ

$$\mathbf{Y}' = \bar{\mathbf{A}}\mathbf{Y}, \mathbf{Y}(t_0) = \mathbf{Y}_0 \quad (13)$$

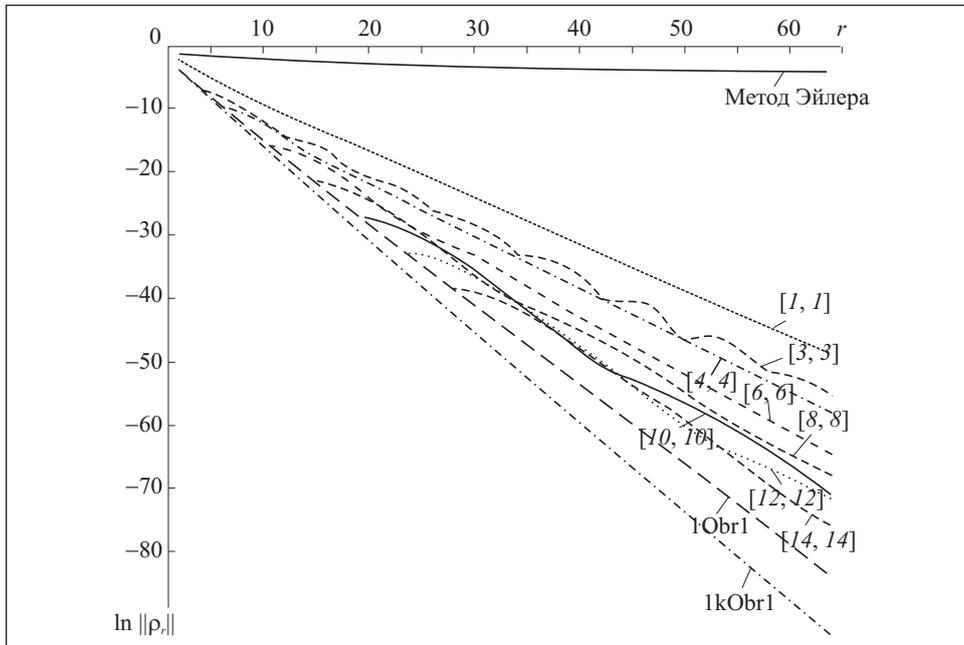


Рис. 1. Графики модулей коэффициентов ρ_r в логарифмическом масштабе для различных ФЧИ: $[n_b, n_p]$ — пошаговые интервалы; 1Obr1 — ФЧИ Обрешкова (8); 1kObr1 — модифицированный вариант одношаговой ФЧИ при $m = 1$

исходя из эквивалентности численного решения на основе ФЧИ Эйлера ОДУ (2) с матрицей \mathbf{A} и численного решения ОДУ (13) с помощью иной ФЧИ, имеющей более подходящие значения ρ_r для быстрой сходимости степенного ряда $\mathbf{B} = \sum_{r=0}^{\infty} \rho_r \bar{\mathbf{A}}^{r+1} = \ln(\mathbf{C})$.

Запишем ФЧИ (1) в матрично-векторной форме для интегрирования ОДУ (13):

$$\mathbf{Y}_{i+1} = \sum_{v=-n_b}^{n_p} a_v \mathbf{Y}_{i+v} + \sum_{s=0}^m \sum_{v=-n_b}^{n_p} c_{sv} H^{s+1} \bar{\mathbf{A}}^{(s+1)} \mathbf{Y}_{i+v}. \quad (14)$$

Системная матрица $\mathbf{B} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r}{(r+1)} H^r \mathbf{A}^{r+1}$ модели решения ОДУ (2) с помощью ФЧИ Эйлера (11) должна быть тождественно равна системной матрице

$$\mathbf{B} = \sum_{r=0}^{\infty} \rho_r H^r \bar{\mathbf{A}}^{r+1} \quad (15)$$

модели решения ОДУ (13) с помощью ФЧИ (14) с более высоким порядком сходимости. Но если системные матрицы одинаковы, то при численном интегрировании, если бы оно выполнялось, были бы одинаковыми и соответствующие обеим системам квантованные векторы Y_{i+v} . На самом деле нет необходимости выполнять численное интегрирование. Воспользуемся подстановкой решения методом Эйлера (11) вместо решения Y_{i+v} в (14). Квантованный вектор для метода Эйлера $Y_{i+1} = Y_i + HAY_i$ запишем в виде $Y_{i+1} = (E + HA) Y_i$, при этом $Y_{i+v} = (E + HA)^v Y_i$. После подстановки этого вектора в (14), полагая $a_1 = -1$, получаем матричное уравнение

$$\sum_{v=-n_b}^{n_p} a_v (E + HA)^v + \sum_{s=0}^m \sum_{v=-n_b}^{n_p} c_{sv} H^{s+1} \bar{A}^{(s+1)} (E + HA)^v = 0, \quad (16)$$

которое является степенной функцией от искомой матрицы \bar{A} .

В зависимости от используемых в ФЧИ (1) высших производных, с учетом $H=1$, уравнение (16) может быть записано в виде следующих вариантов.

1. При использовании разностных ФЧИ, т.е. без высших производных ($m = 0$):

$$\bar{A} \sum_{v=-n_b}^{n_p} c_{0v} (E + A)^v + \sum_{v=-n_b}^{n_p} a_v (E + A)^v = 0. \quad (17)$$

2. При использовании разностно-дифференциальных ФЧИ с первой высшей производной ($m = 1$):

$$\bar{A}^2 \sum_{v=-n_b}^{n_p} c_{1v} (E + A)^v + \bar{A} \sum_{v=-n_b}^{n_p} c_{0v} (E + A)^v + \sum_{v=-n_b}^{n_p} a_v (E + A)^v = 0. \quad (18)$$

3. При использовании разностно-дифференциальных ФЧИ с первой и второй высшими производными ($m = 2$):

$$\begin{aligned} & \bar{A}^3 \sum_{v=-n_b}^{n_p} c_{2v} (E + A)^v + \bar{A}^2 \sum_{v=-n_b}^{n_p} c_{1v} (E + A)^v + \\ & + \bar{A} \sum_{v=-n_b}^{n_p} c_{0v} (E + A)^v + \sum_{v=-n_b}^{n_p} a_v (E + A)^v = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Остальные возможные варианты, по-видимому, практически нецелесообразны для формирования модифицированной матрицы \bar{A} .

Продолжение статьи см. в следующем номере.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гантмахер Ф.П. Теория матриц. — М. : Наука, 1988. — 552 с.
2. Culver W. J. On the existence and uniqueness of the real logarithm of a matrix // Proc. of the American Mathematical Society. — 1966. — Vol. 17, № 5. — P. 1146 — 1151.
3. Al-Mohy A., Higham N. Improved inverse scaling and squaring algorithms for the matrix logarithm // SIAM J. Sci. Comput. — 2012. — Vol. 34, № 4. — P. C.153 — C.169.
4. Cheng S. H., Higham N. J., Kenney C. S., Laub A. J. Approximating the logarithm of a matrix to specified accuracy // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2001. — Vol. 22. — P. 1112—1125.
5. Kenney C., Laub A. Condition estimates for matrix functions // Ibid. — 1989. — Vol. 10. — P. 707— 730.
6. Kenney C., Laub A. A Schur-Frechet algorithm for computing the logarithm and exponential of a matrix // Ibid.—1998. — Vol. 19, № 3. — P. 640 — 663.
7. Higham N.J. Functions of matrices. Theory and computation// Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2008. — 425 p. — ISBN: 978-0- 89871-646-7 MR2396439 (2009b:15001) MR2396439.
8. Аристов В.В. Функциональные макрооперации: Основы итерационных алгоритмов. — Киев : Наук. думка, 1992. — 280 с.
9. Аристов В.В. Модель многошаговых разностно-дифференциальных формул интегрирования с учетом влияния участка разгона // Электрон. моделирование. — 2013. — **35**, № 6. — С. 3—26.
10. Аристов В.В. Интегро-алгоритмические вычисления. — Киев: Наук. думка, 1980. — 192 с.
11. Аристов В.В. Математические модели итерационных соотношений обобщенныхCORDIC-алгоритмов // Электрон. моделирование. — 2011. — **33**, № 1. — С. 3—29.
12. Higham N.J. Evaluating Pade approximants of the matrix logarithm // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2001. — Vol. 22, № 4. — P. 1126—1135.

V.V. Aristov

INTEGRO-ALGORITHMIC METHOD FOR COMPUTATION
THE MATRIX LOGARITHM WITH ARBITRARY ACCURACY

The integro-algorithmic method of approximation and iteration correction for high-accuracy computation of matrix logarithms is proposed. The method is based on the use of linear multistep formulas of numerical integration of the difference type as well as the Obreshkov difference-differential formulas with allowance for higher derivatives. Due to iterations in this case there is not a necessity to choose a high-fidelity primary approximating formula and a basic criterion is a receipt of high-rate of convergence. In addition, the offered method summarizes the known algorithms of taking logs based on the Pade formulas of iteration corrections and increases their order and accuracy. The proposed relations and program solutions permit determining necessary parameters for organizing the processes of matrix logarithms calculations with arbitrary preset high accuracy.

Key words: matrix logarithms, numerical integration, integro-algorithmic method, multistep formulas of integration, transfer function, equivalent transformations.

REFERENCES

1. *Gantmacher F.R.* The Theory of Matrices. — Moscow: Nauka, 1988. — 552 p. (in Russian).
2. *Culver W.J.* On the existence and uniqueness of the real logarithm of a matrix // Proc. of the American Mathematical Society. — 1966. — Vol. 17, № 5. — P. 1146—1151.
3. *Al-Mohy A., Higham N.* Improved inverse scaling and squaring algorithms for the matrix logarithm // SIAM J. Sci. Comput. — 2012. — Vol. 34, № 4. — P. C153—C169.
4. *Cheng S.H., Higham N.J., Kenney C.S., Laub A.J.* Approximating the logarithm of a matrix to specified accuracy // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2001. — Vol. 22. — P. 1112—1125.
5. *Kenney C., Laub A.* Condition estimates for matrix functions // Ibid. — 1989. — Vol. 10. — P. 707—730.
6. *Kenney C., Laub A.* A Schur-Frechet algorithm for computing the logarithm and exponential of a matrix // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 1998. — Vol. 19, № 3. — P. 640—663.
7. *Higham N.J.* Functions of matrices. Theory and computation // Society for Industrial and Applied Mathematics. SIAM-2008. Philadelphia, 2008. — 425 p.
8. *Aristov V.V.* Functional macrooperation: basics of iterative algorithms. — Kiev: Nauk. Dumka, 1992. — 280 p. (in Russian).
9. *Aristov V.V.* Model multistep difference-differential methods integration with regard to the influence of the starting section // Electronic Modeling. — 2013. — Vol. 35, № 6. — P. 3—26 (in Russian).
10. *Aristov V.V.* Integro-algorithmic computations. — Kiev: Nauk. Dumka, 1980. — 192 p. (in Russian).
11. *Aristov V.V.* Mathematical models of iterative relations generalized CORDIC-algorithms // Electronic Modeling. — 2011. — Vol. 33, № 1. — P. 3—29 (in Russian).
12. *Higham N.J.* Evaluating Pade approximants of the matrix logarithm // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — Vol. 22, № 4. — P. 1126—1135.

Поступила 18.06.14

АРИСТОВ Василий Васильевич, канд. техн. наук, вед. науч. сотр. Ин-та проблем моделирования в энергетике им. Г.Е. Пухова НАН Украины. В 1963 г. окончил Харьковский политехнический ин-т. Область научных исследований — теория и реализация итерационных алгоритмов макроопераций, численные методы решения дифференциальных уравнений, схемотехника и архитектура специализированных устройств, геоинформационные системы, радиотехника.

