УДК 004.3

Прямой метод решения СЛАУ для стационарных и параболических задач на геометрических графах на основе трёхточечной прогонки

С. Ю. Гоголенко , В. А. Святный
Донецкий национальный технический университет
gogolenko@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

***Gogolenko S. Y., Svjatnyj V. A. Direct Method for Solving Linear Systems in Stationary and Parabolic Problems on Geometric Graphs Based on Tridiagonal Matrix Algorithm**. This article contains description of a novel algorithm for efficient solving of special classes of linear systems that appear as a subproblem in implicit numerical methods for ODEs and parabolic PDEs on geometric graphs. The proposed algorithm has several advantages as compared to existing ones. One of them is the simplicity of its parallel implementation. The article also considers the issues of computational complexity and stability of the algorithm.*

Введение

Поведение однотипных сетевых динамических объектов обычно описывается дифференциальными уравнениями в частных производных на стратифицированных множествах. Часто такими множествами являются геометрические графы $\Gamma = (V, E)$, в которых рёбра $E = \{e_i : i \in \mathcal{I}\}$ являются одномерными гладкими регулярными многообразиями, а вершины $V = \{v_J : J \in \mathcal{J}\}$ — точками. Большую группу практически важных задач на геометрических графах составляют параболические задачи

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Au = f \qquad (1)$$

и стационарные задачи

$$Au = f \qquad (2)$$

где A — некоторый одномерный эллиптический оператор на графе, зачастую имеющий вид

$$A = \frac{\partial}{\partial x} k \frac{\partial}{\partial x} - b \frac{\partial}{\partial x} - c, \quad x \in \Gamma \qquad (3)$$

В частности, такие задачи с оператором (3) возникают при моделировании тепловых, конвективных и диффузных процессов на сетевых структурах, при решении многих статических задач физики и инженерии (в машиностроении, задачах электростатике и др.).

Полудискретизация уравнения (1) по пространственной координате приводит к жесткой задаче. Поэтому при решении уравнений (1)–(2) методом прямых или различными сеточными методами, так или иначе приходится иметь дело с решением СЛАУ

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{f} \qquad (4)$$

с разреженной матрицей $\mathbf{A}$, расположение ненулевых элементов в которой определяется графом вторичной топологии $\Gamma_{\Delta x}$. Более того, при применении разностных аппроксимаций малого порядка (трёхточечных схем и т. п.) к задачам с оператором A вида (3) положение ненулевых внедиагональных элементов совпадает с положением ненулевых элементов в матрице смежности $\Gamma_{\Delta x}$. Ненулевые элементы в $\mathbf{A}$ всегда располагаются на диагонали.

Регулярное расположение ненулевых элементов в матрице $\mathbf{A}$ позволяет строить экономичные методы решения СЛАУ (4), число действий в которых пропорционально числу неизвестных. Существенный вклад в разработку и исследование подобных методов был сделан в работах А. Ф. Воеводина и С. М. Шургина [1, 2], Ю. И. Молородова [3, 4]. При получении расчетных формул экономичных методов решения СЛАУ этими авторами делалась ставка на стандартную методику построения вариантов метода прогонки с матрицей, отличной от трёхдиагональной. Иными словами, в предложенных ими алгоритмах решение ищется в виде линейной комбинации обычных трёхточечных задач с различными краевыми условиями [5]. Значительным недостатком такого подхода является сложность реализации алгоритма для решения задачи (4) в общем виде, т. е. задачи с заранее неизвестной структурой графа Γ. В данной работе предлагается метод решения задачи (4), который значительно превосходит упомянутые выше методики в прозрачности для понимания и простоте реализации, но в то же время практически не уступает в быстродействии. Из-за особенностей в своей структуре предлагаемый метод допускает естественную параллельную реализацию.

Особенности СЛАУ в задачах численного решения стационарных и параболических уравнений на графах

Для построения и исследования численных методов решения СЛАУ (4) удобно упорядочить вектора $\mathbf{x}$ и $\mathbf{f}$ таким образом, чтобы они состояли из блоков подряд идущих элементов, первый из которых соответствует внутренним вершинам графа Γ, а остальные — его рёбрам, т. е. $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_0^T, \mathbf{x}_1^T, \mathbf{x}_2^T, \ldots, \mathbf{x}_m^T)^T$ и $\mathbf{f} = (\mathbf{f}_0^T, \mathbf{f}_1^T, \mathbf{f}_2^T, \ldots, \mathbf{f}_m^T)^T$, где элементы векторов $\mathbf{x}_0^T$ и $\mathbf{f}_0^T$ отражают значения во внутренних вершинах графа, а векторы $\mathbf{x}_i^T$ и $\mathbf{f}_i^T$ содержат значения в вершинах графа вторичной топологии $\Gamma_{\Delta x}$, соответствующих внутренним точкам рёбер $e_i \in E$ (включая граничные вершины графа $v \in \partial\Gamma$ на этих рёбрах). При таком представлении $\mathbf{x}$ и $\mathbf{f}$ матрица $\mathbf{A}$ приобретает вид структурированной блочной матрицы

$$\mathbf{A} = \left(\begin{array}{c|cccccc} \mathbf{D} & \mathbf{E}_1 & \mathbf{E}_2 & \ldots & \ldots & \mathbf{E}_m \\ \hline \mathbf{E'}_1 & \mathbf{L}_1 & \mathbf{O} & \ldots & \ldots & \mathbf{O} \\ \mathbf{E'}_2 & \mathbf{O} & \mathbf{L}_2 & \mathbf{O} & \cdots & \mathbf{O} \\ \vdots & \vdots & \mathbf{O} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \mathbf{O} \\ \mathbf{E'}_m & \mathbf{O} & \mathbf{O} & \cdots & \mathbf{O} & \mathbf{L}_m \end{array}\right) = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & \mathbf{E} \\ \mathbf{E'} & \mathbf{L} \end{pmatrix}. \tag{5}$$

В данном представлении матрица $\mathbf{D}$ является диагональной матрицей размерности $n \times n$, где $n = |V \setminus \partial\Gamma|$ — количество внутренних вершин графа Γ. Матрица $\mathbf{E}$ представляет собой блочную матрицу

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_1 & \mathbf{E}_2 & \ldots & \mathbf{E}_m \end{pmatrix},$$

каждый из блоков которой имеет вид

$$\mathbf{E}_i = c_{i,0}\mathbf{e}_{I0}\mathbf{e}_1^T + c_{i,s_i}\mathbf{e}_{I1}\mathbf{e}_{s_i}^T,$$

где $s_i = \ell_i/\Delta x$ — количество дискретных элементов в ребре e_i, ℓ_i — длина ребра e_i, $I1$ — индекс конечной вершины ребра e_i, $I0$ — индекс начальной вершины ребра e_i. Матрица $\mathbf{E}$ может естественным образом быть построена на основе матрицы инцидентности графа Γ и информации о длине его рёбер. Матрица $\mathbf{E'}$ имеет ненулевые элементы в тех же позициях, что и матрица $\mathbf{E}^T$, т. е.

$$\mathbf{E'} = \begin{pmatrix} \mathbf{E'}_1^T & \mathbf{E'}_2^T & \ldots & \mathbf{E'}_m^T \end{pmatrix}^T,$$

где каждый из блоков задаётся выражением

$$\mathbf{E'}_i = b_{i,0}\mathbf{e}_1\mathbf{e}_{I0}^T + b_{i,s_i}\mathbf{e}_{s_i}\mathbf{e}_{I1}^T,$$

Если $v_{I0} \in \partial\Gamma$, то $c_{i,0} = b_{i,0} = 0$, а если $v_{I1} \in \partial\Gamma$, то $c_{i,s_i} = b_{i,s_i} = 0$. В противном случае все слагаемые в определении $\mathbf{E}_i$ и $\mathbf{E'}_i$ могут отличаться от нуля. Матрица $\mathbf{L}$ является блочно-диагональной матрицей

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \mathbf{L}_1 & \mathbf{O} & \ldots & \ldots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{L}_2 & \mathbf{O} & \cdots & \mathbf{O} \\ \vdots & \mathbf{O} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{O} & \cdots & \mathbf{O} & \mathbf{L}_m \end{pmatrix} = \bigoplus_{i=1}^{n} \mathbf{L}_i,$$

каждый из блоков которой имеет размерность $s_i \times s_i$ и в свою очередь является симметричной трёхдиагональной матрицей вида

$$\mathbf{L}_i = \begin{pmatrix} a_{i,1} & c_{i,1} & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ b_{i,1} & a_{i,2} & c_{i,2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_{i,2} & a_{i,3} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & c_{i,s_i-1} \\ 0 & 0 & \ldots & \ldots & b_{i,s_i-1} & a_{i,s_i} \end{pmatrix}.$$

Вывод соотношений и обоснование алгоритма

Представим исходную СЛАУ (4) с матрицей (5) в виде системы матричных уравнений

$$\begin{array}{lllllll} \mathbf{D}\mathbf{x}_0 & + & \mathbf{E}_1\mathbf{x}_1 & + & \ldots & + \ \mathbf{E}_m\mathbf{x}_m & = \mathbf{f}_0 \\ \mathbf{E}'_1\mathbf{x}_0 & + & \mathbf{L}_1\mathbf{x}_1 & & & & = \mathbf{f}_1 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \mathbf{E}'_m\mathbf{x}_0 & & & & & + \ \mathbf{L}_m\mathbf{x}_m & = \mathbf{f}_m \end{array} \tag{6}$$

Таким образом, если матрицы $\mathbf{L}_i$ обратимы, то для каждого $\mathbf{x}_i$ имеет место равенство

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{L}_i^{-1}\left(\mathbf{f}_i - \mathbf{E}'_i\mathbf{x}_0\right), \qquad i \in \mathcal{I},$$

подстановка которого в первое из матричных уравнений системы (6) даёт

$$\mathbf{D}^*\mathbf{x}_0 = \mathbf{f}^*, \tag{7}$$

где

$$\mathbf{D}^* \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{D} - \sum_{i\in\mathcal{I}} \mathbf{E}_i\mathbf{L}_i^{-1}\mathbf{E}'_i, \quad \mathbf{f}^* \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{f}_0 - \sum_{i\in\mathcal{I}} \mathbf{E}_i\mathbf{L}_i^{-1}\mathbf{f}_i.$$

Упростим выражения для $\mathbf{D}^*$ и $\mathbf{f}^*$. Для этого преобразуем входящие в определения $\mathbf{D}^*$ и $\mathbf{f}^*$ суммы.

Слагаемые в выражении для $\mathbf{D}^*$ можно переписать следующим образом

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_i\mathbf{L}_i^{-1}\mathbf{E}_i' &= \left(c_{i,0}\mathbf{e}_{I0}\mathbf{e}_1^T + c_{i,s_i}\mathbf{e}_{I1}\mathbf{e}_{s_i}^T\right) \times \\ &\times \frac{\operatorname{adj}\mathbf{L}_i}{\det \mathbf{L}_i}\left(b_{i,0}\mathbf{e}_1\mathbf{e}_{I0}^T + b_{i,s_i}\mathbf{e}_{s_i}\mathbf{e}_{I1}^T\right) = \\ &= \frac{1}{\det \mathbf{L}_i}\Big(c_{i,0}\mathbf{e}_{I0}L_{1,1}^{(i)}b_{i,0}\mathbf{e}_{I0}^T + c_{i,s_i}\mathbf{e}_{I1}L_{s_i,s_i}^{(i)}b_{i,s_i}\mathbf{e}_{I1}^T + \\ &+ c_{i,0}\mathbf{e}_{I0}L_{s_i,1}^{(i)}b_{i,s_i}\mathbf{e}_{I1}^T + c_{i,s_i}\mathbf{e}_{I1}L_{1,s_i}^{(i)}b_{i,0}\mathbf{e}_{I0}^T\Big) = \\ &= \xi_{0,0}^{(i)}\mathbf{e}_{I0}\mathbf{e}_{I0}^T + \xi_{1,1}^{(i)}\mathbf{e}_{I1}\mathbf{e}_{I1}^T + \xi_{0,1}^{(i)}\mathbf{e}_{I0}\mathbf{e}_{I1}^T + \xi_{1,0}^{(i)}\mathbf{e}_{I1}\mathbf{e}_{I0}^T = \\ &= \begin{pmatrix}\mathbf{e}_{I0} & \mathbf{e}_{I1}\end{pmatrix}\mathbf{\Xi}_i\begin{pmatrix}\mathbf{e}_{I0}^T \\ \mathbf{e}_{I1}^T\end{pmatrix},\end{aligned}$$

где $\operatorname{adj}\mathbf{L}_i$ — союзная матрица к матрице $\mathbf{L}_i$, $L_{jk}^{(i)}$ — алгебраическое дополнение элемента l_{jk} матрицы $\mathbf{L}_i$, а матрица $\mathbf{\Xi}_i$ равна

$$\mathbf{\Xi}_i = \frac{1}{\det \mathbf{L}_i}\begin{pmatrix} c_{i,0}L_{s_i,s_i}^{(i)}b_{i,0} & c_{i,0}L_{s_i,1}^{(i)}b_{i,s_i} \\ c_{i,s_i}L_{1,s_i}^{(i)}b_{i,0} & c_{i,s_i}L_{s_i,s_i}^{(i)}b_{i,s_i}\end{pmatrix}. \tag{8}$$

Поэтому

$$\mathbf{D}^* = \mathbf{D} - \sum_{i\in\mathcal{I}}\mathbf{E}_i\mathbf{L}_i^{-1}\mathbf{E}_i' = \mathbf{D} - \sum_{i\in\mathcal{I}}\begin{pmatrix}\mathbf{e}_{I0} & \mathbf{e}_{I1}\end{pmatrix}\mathbf{\Xi}_i\begin{pmatrix}\mathbf{e}_{I0}^T \\ \mathbf{e}_{I1}^T\end{pmatrix} \tag{9}$$

и формула для определения элементов матрицы $\mathbf{D}^*$ окончательно принимает вид

$$d_{I,J}^* = \begin{cases} d_I - \sum\limits_{i\in\mathcal{I}_I^-}\xi_{0,0}^{(i)} - \sum\limits_{i\in\mathcal{I}_I^+}\xi_{1,1}^{(i)}, & \text{если } I = J \\ -\sum\limits_{i\in\mathcal{I}_I^-\cap\mathcal{I}_J^+}\xi_{0,1}^{(i)} - \sum\limits_{i\in\mathcal{I}_J^-\cap\mathcal{I}_I^+}\xi_{1,0}^{(i)}, & \text{если } I \neq J\end{cases}. \tag{10}$$

При расчёте каждой матрицы $\mathbf{\Xi}_i$ по формуле (8) приходится вычислять значения определителя и угловых алгебраических дополнений матрицы $\mathbf{L}_i$. Угловые алгебраические дополнения $L_{1,s_i}^{(i)}$ и $L_{s_i,1}^{(i)}$ очевидно равны

$$L_{1,s_i}^{(i)} = \prod_{k=1}^{s_i-1} b_{i,k}, \quad L_{s_i,1}^{(i)} = \prod_{k=1}^{s_i-1} c_{i,k}. \tag{11}$$

Поскольку матрицы $\mathbf{L}_i$ являются трёхдиагональными, вычисление определителей $\det \mathbf{L}_i$ и алгебраических дополнений $L_{1,s_i}^{(i)}$ и $L_{s_i,1}^{(i)}$ может быть эффективно реализовано с помощью метода прогонки. Кроме того, следует учитывать равенство нулю некоторых элементов матрицы $\mathbf{\Xi}$, если одна из вершин ребра является граничной $v \in \partial\Gamma$.

С целью упрощения выражения $\mathbf{f}^*$ преобразуем слагаемые в правой части уравнения (7). Пусть $\mathbf{y}_i$ является решением СЛАУ

$$\mathbf{L}_i\mathbf{y}_i = \mathbf{f}_i,$$

тогда

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_i\mathbf{L}_i^{-1}\mathbf{f}_i &= \left(c_{i,0}\mathbf{e}_{I0}\mathbf{e}_1^T + c_{i,s_i}\mathbf{e}_{I1}\mathbf{e}_{s_i}^T\right)\mathbf{y}_i = \\ &= c_{i,0}y_{i,1}\mathbf{e}_{I0} + c_{i,s_i}y_{i,s_i}\mathbf{e}_{I1} = \begin{pmatrix}\mathbf{e}_{I0} & \mathbf{e}_{I1}\end{pmatrix}\mathbf{\Phi}_i,\end{aligned}$$

где

$$\mathbf{\Phi}_i = \begin{pmatrix}\phi_0^{(i)} \\ \phi_1^{(i)}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{i,0}y_{i,0} \\ c_{i,s_i}y_{i,s_i}\end{pmatrix}. \tag{12}$$

Таким образом, формула для вычисления $\mathbf{f}_0^*$ принимает вид

$$\mathbf{f}_0^* = \mathbf{f}_0 - \sum_{i\in\mathcal{I}}\mathbf{E}_i\mathbf{L}_i^{-1}\mathbf{f}_i = \mathbf{f}_0 - \sum_{i\in\mathcal{I}}\begin{pmatrix}\mathbf{e}_{I0} & \mathbf{e}_{I1}\end{pmatrix}\mathbf{\Phi}_i, \tag{13}$$

или в развёрнутом виде для каждого элемента

$$f_{0,I}^* = f_{0,i} - \sum_{i\in\mathcal{I}_I^-}\phi_0^{(i)} - \sum_{i\in\mathcal{I}_I^+}\phi_1^{(i)}. \tag{14}$$

Вычисление элементов $y_{i,0}$ и y_{i,s_i} для дальнейшего определения $\mathbf{\Phi}_i$ по формуле (12) может быть организовано на основе метода прогонки.

Зная вектор $\mathbf{x}_0$, можно вычислить каждый из векторов $\mathbf{x}_i$, $i \in \mathcal{I}$. Действительно, согласно выражению (6) и определению матриц $\mathbf{E}_i'$ имеют место соотношения

$$\begin{aligned}\mathbf{L}_i\mathbf{x}_i &= \mathbf{f}_i - \mathbf{E}_i'\mathbf{x}_0 = \mathbf{f}_i - \left(b_{i,0}\mathbf{e}_1\mathbf{e}_{I0}^T + b_{i,s_i}\mathbf{e}_{s_i}\mathbf{e}_{I1}^T\right)\mathbf{x}_0 = \\ &= \mathbf{f}_i - b_{i,0}\mathbf{e}_1 x_{0,I0} + b_{i,s_i}\mathbf{e}_{s_i}x_{0,I1}, \qquad i \in \mathcal{I},\end{aligned}$$

из которых следует, что для отыскания $\mathbf{x}_i$, $i \in \mathcal{I}$ достаточно решить СЛАУ

$$\mathbf{L}_i\mathbf{x}_i = \mathbf{f}_i^*, \tag{15}$$

где

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_i^* &= \mathbf{f}_i - b_{i,0}x_{0,I0}\mathbf{e}_1 - b_{i,s_i}x_{0,I1}\mathbf{e}_{s_i} = \\ &= (f_{i,1} - b_{i,0}x_{0,I0},\ f_{i,2},\ f_{i,3},\ \ldots, \\ &\quad f_{i,s_i-1},\ f_{i,s_i} - b_{i,s_i}x_{0,I1}).\end{aligned}$$

В итоге алгоритм решения СЛАУ (4), использующий описанные выше преобразования, принимает вид рис. 1. В нём вначале вычисляется матрица $\mathbf{D}^*$ и вектор $\mathbf{f}^*$. Затем путём решения СЛАУ (7) определяются значения вектора $\mathbf{x}_0$. Поскольку матрица $\mathbf{D}^*$ не имеет в общем случае ленточной структуры (индексы её внедиагональных ненулевые элементов совпадают с индексами ненулевых элементов графа Γ', построенного из Γ путём удаления граничных вершин со степенью 1), решать СЛАУ (строка 9 алгоритма рис. 1) методом прогонки нельзя. В данной ситуации следует воспользоваться более общим методом решения СЛАУ (например, методом Гаусса). На заключительном этапе элементы вектора $\mathbf{x}_0$ используются при решении СЛАУ (15) для каждого из рёбер. При этом для выполнения действий, связанных со строками 5 и 11 алгоритма рис. 1, может эффективно использоваться метод прогонки. Поскольку матрица СЛАУ в строках 5 и 11 неизменна, LU-разложение методом прогонки для обоих циклов достаточно выполнить один раз.

Algorithm 1: Метод трёхточечной прогонки для СЛАУ (4)

Дано: $\mathbf{A}$, $\mathbf{f}$
Надо: $\mathbf{x}$

1 **нач**
2 $\quad \mathbf{D}^* \leftarrow \mathbf{D}$
3 $\quad \mathbf{f}^* \leftarrow \mathbf{f}_0$
4 $\quad$ **для каждого** $i \in \mathcal{I}$ **нц**
5 $\quad\quad$ Вычислить элементы матриц Ξ_i и Φ_i /*см. формулы (8) и (12)*/
6 $\quad\quad \mathbf{D}^* \leftarrow \mathbf{D}^* - \begin{pmatrix}\mathbf{e}_{I0} & \mathbf{e}_{I1}\end{pmatrix} \Xi_i \begin{pmatrix}\mathbf{e}_{I0}^T \\ \mathbf{e}_{I1}^T\end{pmatrix}$
7 $\quad\quad \mathbf{f}^* \leftarrow \mathbf{f}^* - \begin{pmatrix}\mathbf{e}_{I0} & \mathbf{e}_{I1}\end{pmatrix} \Phi_i$
8 $\quad$ **кц**
9 $\quad$ Решить систему $\mathbf{D}^*\mathbf{x}_0 = \mathbf{f}^*$
10 $\quad$ **для каждого** $i \in \mathcal{I}$ **нц**
11 $\quad\quad$ Решить систему $\mathbf{L}_i\mathbf{x}_i = \mathbf{f}_i^*$
12 $\quad$ **кц**
13 **кон**

Рисунок 1 – Алгоритм решения СЛАУ (4) с использованием прогонки

Итерации в обоих циклах алгоритма рис. 1 независимы между собой. Это позволяет проводить вычисления для рёбер одновременно. В параллельном варианте алгоритма рис. 1 рёбра графа разбиваются на группы

$$E_k = \left\{e_i \in E : i \in \mathcal{I}^{(k)}\right\}, \quad k = \overline{1,p},$$

где

$$\left(\forall j,k,\ j \neq k \Rightarrow \mathcal{I}^{(j)} \cap \mathcal{I}^{(k)} = \emptyset\right) \wedge \left(\mathcal{I} = \bigcup_{k=1}^{p} \mathcal{I}^{(k)}\right),$$

число которых равно количеству доступных процессов p. С каждым из процессов связывается некоторый набор рёбер $\mathcal{I}^{(k)}$. На первом этапе в процессах параллельно вычисляются значения матриц Ξ и Φ для ассоциированных с процессами рёбер. Затем вычисленные матрицы пересылаются ведущему процессу, в котором производится расчет матрицы $\mathbf{D}^*$ и вектора $\mathbf{f}^*$, а также решение СЛАУ (7). В завершающей фазе каждому процессу от главного пересылаются необходимые элементы вектора $\mathbf{x}_0$, и происходит параллельное решение трёхдиагональных систем (15). С целью достижения более высокой степени сбалансированности нагрузки к длинным рёбрам могут добавляться фиктивные внутренние вершины.

Особенности реализации алгоритма при использовании правосторонней и левосторонней прогонки

Решение СЛАУ (4) с помощью алгоритма рис. 1 включает в себя в качестве одной из подзадач решение трёхдиагональных СЛАУ вида

$$\mathbf{L}_i\mathbf{y} = \mathbf{g} \tag{16}$$

Одним из наиболее эффективных прямых методов вычисления решений трёхдиагональных СЛАУ является метод прогонки. С помощью непосредственной проверки можно убедиться, что в применении к задаче (16) формулы для вычисления прогоночных коэффициентов прямого хода правой прогонки принимают вид

$$\alpha_{i,k} = -\frac{c_{i,k}}{\gamma_{i,k}}, \qquad k = 1,2,\ldots,s_i - 1 \tag{17}$$

$$\beta_{i,1} = \frac{g_{i,1}}{\gamma_{i,1}} \tag{18}$$

$$\beta_{i,k} = \frac{g_{i,k} - \beta_{i,k-1}b_{i,k-1}}{\gamma_{i,k}}, \qquad k = 2,3,\ldots,s_i \tag{19}$$

$$\gamma_{i,1} = a_{i,1} \tag{20}$$

$$\gamma_{i,k} = \alpha_{i,k-1}b_{i,k-1} + a_{i,k}, \qquad k = 2,3,\ldots,s_i. \tag{21}$$

Обратный ход определяется формулами

$$x_{i,1} = \beta_{i,1} \tag{22}$$

$$x_{i,k} = \alpha_{i,k}x_{i,k-1} + \hat{\beta}_{i,k}, \quad k = s_i - 1, s_i - 2, \ldots, 1. \tag{23}$$

Поэтому LU-разложение матрицы $\mathbf{L}_i$ на основе правой прогонки [6, 7] имеет вид

$$\mathbf{L}_i = \begin{pmatrix} \gamma_{i,1} & 0 & \cdots\cdots\cdots & & 0 \\ b_{i,1} & \gamma_{i,2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_{i,2} & \gamma_{i,3} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & b_{i,s_i-1} & \gamma_{i,s_i} \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} 1 & -\alpha_{i,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -\alpha_{i,2} & & \vdots \\ \vdots & 0 & 1 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -\alpha_{i,s_i-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

из чего следуют тождества

$$\det \mathbf{L}_i = \prod_{k=1}^{s_i} \gamma_{i,k}, \qquad \gamma_{i,k} = \frac{\det \mathbf{L}_i^{(k)}}{\det \mathbf{L}_i^{(k-1)}}, \tag{24}$$

где $\mathbf{L}_i^{(k)}$ — обозначает матрицу размерности $k \times k$.

Аналогичные выражения для левой прогонки задаются рекуррентно

$$\hat{\alpha}_{i,k} = -\frac{b_{i,k-1}}{\hat{\gamma}_{i,k}}, \qquad k = s_i, s_i - 1, \ldots, 2 \tag{25}$$

$$\hat{\beta}_{i,s_i} = \frac{g_{i,s_i}}{\hat{\gamma}_{i,s_i}} \tag{26}$$

$$\hat{\beta}_{i,k} = \frac{g_{i,k} - \hat{\beta}_{i,k+1} c_{i,k}}{\hat{\gamma}_{i,k}}, \quad k = s_i - 1, s_i - 2, \ldots, 1 \tag{27}$$

$$\hat{\gamma}_{i,s_i} = a_{i,s_i} \tag{28}$$

$$\hat{\gamma}_{i,k} = \hat{\alpha}_{i,k+1} c_{i,k} + a_{i,k}, \quad k = s_i - 1, s_i - 2, \ldots, 1 \tag{29}$$

$$x_{i,1} = \hat{\beta}_{i,1} \tag{30}$$

$$x_{i,k} = \hat{\alpha}_{i,k} x_{i,k-1} + \hat{\beta}_{i,k}, \qquad k = 2, 3, \ldots, s_i. \tag{31}$$

При одновременном использовании правой и левой прогонки формулы для вычисления $\mathbf{\Xi}_i$ и $\mathbf{\Phi}_i$ принимают достаточно простой вид. Так, воспользовавшись соотношениями (8), (11), (12) и (24), получаем

$$\xi_{0,0}^{(i)} = \frac{c_{i,0} b_{i,0}}{\hat{\gamma}_{i,1}} \tag{32}$$

$$\xi_{1,1}^{(i)} = \frac{c_{i,s_i} b_{i,s_i}}{\gamma_{i,s_i}} \tag{33}$$

$$\xi_{1,0}^{(i)} = \frac{c_{i,s_i} b_{i,0}}{\gamma_{i,s_i}} \prod_{k=1}^{s_i-1} \frac{b_{i,k}}{\gamma_{i,k}} = (-1)^{s_i-1} \frac{c_{i,s_i} b_{i,0}}{\hat{\gamma}_{i,1}} \prod_{k=2}^{s_i} \hat{\alpha}_{i,k} \tag{34}$$

$$\xi_{0,1}^{(i)} = \frac{c_{i,0} b_{i,s_i}}{\hat{\gamma}_{i,s_i}} \prod_{k=1}^{s_i-1} \frac{c_{i,k}}{\hat{\gamma}_{i,k}} = (-1)^{s_i-1} \frac{c_{i,0} b_{i,s_i}}{\gamma_{i,s_i}} \prod_{k=1}^{s_i-1} \alpha_{i,k} \tag{35}$$

и

$$\phi_0^{(i)} = c_{i,0} y_{i,0} = c_{i,0} \hat{\beta}_{i,1} \tag{36}$$

$$\phi_1^{(i)} = c_{i,s_i} y_{i,s_i} = c_{i,s_i} \beta_{i,s_i}. \tag{37}$$

Следует отметить, что если одна из вершин ребра является граничной, то элементы $\xi_{1,0}^{(i)}$, $\xi_{0,1}^{(i)}$, автоматически равны нулю. Также равны нулю сопутствующие граничной вершине элементы $\xi_{I,1}^{(i)}$ и $\phi_I^{(i)}$, где $I = 0$, когда граничная вершина является начальной, и $I = 1$, когда граничная вершина является конечной. Иными словами, если для некоторого ребра e_i начальная вершина $v_{I0} \in \partial\Gamma$, то при вычислении $\mathbf{\Xi}_i$ и $\mathbf{\Phi}_i$, достаточно ограничиться прямым ходом правой прогонки, а если $v_{I1} \in \partial\Gamma$, то прямым ходом левой. Применение этого замечания при реализации алгоритм рис. 1 во многих случаяхпозволяет заметно уменьшить объём требуемых вычислений.

Замечания о вычислительной сложности и об устойчивости метода

Использование указанных в предыдущем пункте формул значительно ускоряет алгоритм рис. 1. Прямой подсчёт операций показывает, что итоговая сложность алгоритма с использованием правой и левой прогонки, а также метода Гаусса для решения СЛАУ (13), имеет порядок $\mathcal{O}\left(15 \sum_{i \in \mathcal{I}} s_i + n^3/6\right)$. При дискретизации оператора A (3) конечными разностями (или конечными элементами) с равномерным шагом по пространству Δx справедливо соотношение

$$\mathcal{O}\left(\sum_{i \in \mathcal{I}} s_i\right) = \mathcal{O}\left(\frac{\ell}{\Delta x}\right),$$

где $\ell = \sum_{i \in \mathcal{I}} \ell_i$ — суммарная длина рёбер графа $\mathbf{\Gamma}$. Таким образом, подобная реализация алгоритма оказывается очень эффективной. Тем не менее, применять её в алгоритме рис. 1 не всегда возможно.

Рассмотрим ограничения на применимость правой и левой прогонки в алгоритме рис. 1. Для получения условий устойчивости схемы рис. 1 с использованием правой и левой прогонки воспользуемся классическими результатами по устойчивости методов прогонки. Как известно, методы право- и левосторонней прогонки для СЛАУ (16) с трёхдиагональными матрицами $\mathbf{L}_i$ устойчивы в случае диагонального преобладания в $\mathbf{L}_i$ (см., например теорему 5.4 в [6, С. 164], лемму 1 в [5, С. 78]). Более того, в этом случае для прогоночных коэффициентов $\alpha_{i,k}$ ($\hat{\alpha}_{i,k}$) и $\gamma_{i,k}$ ($\hat{\gamma}_{i,k}$) справедливы неравенства $|\alpha_{i,k}| \le 1$ ($|\hat{\alpha}_{i,k}| \le 1$) и $\gamma_{i,k} \ne 0$ ($\hat{\gamma}_{i,k} \ne 0$), из которых следует, что элементы матриц $\mathbf{\Xi}_i$ и $\mathbf{\Phi}_i$ существуют, т.е. при их вычислении не возникает ситуаций неограниченного роста произведения всех $\alpha_{i,k}$ ($\hat{\alpha}_{i,k}$) и деления на нулевой элемент $\gamma_{i,k}$ ($\hat{\gamma}_{i,k}$). Далее можно показать, что в случае единственности решения системы (4) матрица $\mathbf{D}^*$ имеет отличный от нуля определитель, откуда следует, что решение СЛАУ будет корректным. Объединяя эти заключения, получаем достаточное условие для устойчивости алгоритма на основе право- и левосторонней прогонки, которое можно сформулировать в виде следующего утверждения.

Утверждение 1. *Если система (4) имеет единственное решение и для каждой матрицы* $\mathbf{L}_i$ *выполнены условия диагонального преобладания*

$$\begin{aligned}
&|a_{i,1}| > 0; \quad |a_{i,s_i}| > 0;\\
&|b_{i,k-1}| > 0; \quad |c_{i,k}| > 0, \qquad k = 2,3,\ldots,s_i-1;\\
&|a_{i,1}| \ge |c_{i,1}|;\\
&|a_{i,k}| \ge |b_{i,k-1}| + |c_{i,k}|, \qquad k = 2,3,\ldots,s_i-1;\\
&|a_{i,s_i}| \ge |b_{i,s_i}|,
\end{aligned}$$

то алгоритм рис. 1 с использованием правосторонней и левосторонней прогонки корректен и устойчив.

Следует подчеркнуть, что утверждение 1 задаёт лишь достаточные условия устойчивости и корректности алгоритма рис. 1 при его использовании совместно с правосторонней и левосторонней прогонкой. Для многих примеров задач на графе эти условия можно усилить (обычно, путём значительного усложнения). Если же установить условия устойчивости не удаётся, то при реализации алгоритма рис. 1 можно воспользоваться немонотонной прогонкой. Поскольку в худшем случае для трёхдиагональных матриц размерности $s_i \times s_i$ немонотонная прогонка требует выполнения $12s_i$ арифметических действий, то сложность реализации алгоритма рис. 1 на основе немонотонной прогонки не превышает порядок $\mathcal{O}\left(48\sum_{i\in\mathcal{I}} s_i + n^3/6\right)$.

Выводы

В работе предложен эффективный и простотой в реализации метод на основе трёхточечной прогонки для СЛАУ, возникающих при решении стационарных и параболических задач на геометрических графах. Дополнительным преимуществом данного метода, в сравнении с уже существующими, является естественная возможность его параллельной реализации. Особенно эффективным предложенный метод оказывается при его использовании совместно с правосторонней и левосторонней прогонкой. Реализация метода рис. 1 на основе правосторонней и левосторонней прогонки оказывается корректной и устойчивой для многих практически важных классов задач. В статье, в частности, показано, что предложенный метод устойчив для задач с диагональным преобладанием в матрице $\mathbf{A}$.

Литература

1. Воеводин А. Ф. Численные методы расчета одномерных систем [Текст] : научное издание / А. Ф. Воеводин, С. М. Шургин; Под ред. Н. Н. Яненко. — Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1981. — 208 с.
2. Воеводин А. Ф. Методы решения одномерных эволюционных систем [Текст] / А. Ф. Воеводин, С. М. Шургин; Под ред. Э. А. Бондарева; Сиб. отд-ние, Ин-т гидродинамики им. М. А. Лаврентьева. — Новосибирск: ВО «Наука», 1993. — 364 с. — ISBN 5-02-030308-9.
3. Молородов Ю. И. Решение систем дифференциальных уравнений, определённых на графе схемами высокого порядка точности / Ю. И. Молородов // Вычислительные технологии. — 1992. — № 6. — С. 60–72.
4. Молородов Ю. И. Применение схем высокого порядка точности к решению задач на графах / Ю. И. Молородов // Труды международной конференции RDAMM-2001. — 2001. — Т. 6. — С. 434–444.
5. Самарский А. А. Методы решения сеточных уравнений [Текст]: Учеб. пособие для вузов по спец. «Прикл. математика» / А. А. Самарский, Е. С. Николаев. — Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1978. – 591 с.
6. Амосов А. А. Вычислительные методы для инженеров [Текст] : Учебное пособие / А.А. Амосов, Ю. А. Дубинский, Н. В. Копченова. — Москва: Высшая школа, 1994. — 544 с. — ISBN 5-06-000625-5.
7. Ильин В. П. Трехдиагональные матрицы и их приложения [Текст] / В. П. Ильин, Ю. И. Кузнецов. — Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1985. — 207 с.

Поступила в редакцию 30.03.2010