

А. А. Самарский, И. Е. Капорин, А. Б. Кучеров,
Е. С. Николаев

УДК 519.6

**НЕКОТОРЫЕ СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ
РЕШЕНИЯ СЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ**

В настоящее время большое внимание уделяется построению методов решения дискретных аналогов краевых задач для эллиптических уравнений в сеточных областях сложной структуры, которые основаны на применении экономичных прямых методов [1] — [5] для более простых задач в регулярных областях, а также итерационных методов, использующих неполное разложение сеточного оператора на множители [13], [14], [21] — [26]. В данной работе дан обзор ряда методов эффективного решения сеточных уравнений, исследованиями которых занимались авторы статьи.

§ 1. Экономичные прямые методы для задач с разделяющимися переменными в регулярной области

1.1. *Постановки основных задач.* Рассмотрим прямые методы решения разностных эллиптических краевых задач в регулярных областях. Под регулярной сеточной областью понимаем множество узлов прямоугольной (не обязательно равномерной) сетки, введенной в области, являющейся прямоугольником в соответствующей криволинейной ортогональной системе координат. Рассматриваемый класс задач в общем случае есть системы линейных алгебраических уравнений с матрицей порядка MN :

$$Ay = f, \quad A = T_1 \otimes I_N + I_M \otimes T_2, \tag{1}$$

где T_1 и T_2 — матрицы вида

$$S = \begin{bmatrix} c_1 - b_1 & 0 & \dots & 0 & -a_1 \\ -a_2 & c_2 - b_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -a_3 & c_3 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_{K-1} - b_{K-1} \\ -b_K & 0 & 0 & \dots & -a_K & c_K \end{bmatrix}, \quad K \in \{M, N\}, \tag{2}$$

порядков соответственно M и N , \otimes — кронекеровское (тензорное) произведение, I_K — единичная матрица порядка K .

Задача вида (1), (2) возникает, напр., при аппроксимации на неравномерной прямоугольной сетке, заданной в прямоугольнике $\bar{G} = G \cup \partial G$, следующей краевой задачи:

$$-\sum_{\alpha=1}^2 \left\{ \frac{1}{b_\alpha(x_\alpha)} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[k_\alpha(x_\alpha) \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} + c_\alpha(x_\alpha) u \right] + r_\alpha(x_\alpha) \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} - q_\alpha(x_\alpha) u \right\} = f(x),$$

$\frac{\partial u}{\partial n} = \kappa(x)u + \mu(x)$, или $u(x) = \mu(x)$, или заданы условия периодичности на ∂G .

Все известные алгоритмы решения задач этого пункта базируются на эффективных методах решения следующих двух задач. Первая из них — решение системы линейных уравнений $Sx = b$ с матрицей вида (2). Для решения этой задачи применяются различные варианты разреженного исключения Гаусса (прогонка [6], циклическая редукция [3]), имеющие асимптотику числа операций $O(K)$. Вторая задача — умножение на вектор матриц Q и Q^{-1} , приводящих матрицу вида (2) к диагональному виду $Q^{-1}SQ = \Lambda$, $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_K)$. Для специальных случаев, когда

$$c_j \equiv c, a_{j+1} = b_j = a, 1 \leq j \leq K-1, (b_1, a_1), (a_K, b_K) \in \mathfrak{M} = \\ = \{(a, 0), (2a, 0)\} \text{ или } b_1 = b_K = a_1 = a_K = a, \quad (3)$$

известны явные выражения элементов Q , Q^{-1} и Λ (через тригонометрические функции) и эффективные алгоритмы решения этой задачи (основанные на применении быстрого преобразования Фурье [2], [6]). Число операций указанных алгоритмов имеет асимптотику $O(K \log K)$.

1.2. *Метод циклической редукции (CR)*. Метод *CR* изложим для задачи (1) в том случае, когда матрица T_2 имеет вид (2), (3), где $c=2$, $a=1$, $\mathfrak{M} = \{(2, 0)\}$, $N = 2^n - 1$. Соответствующую систему (1) можно записать в виде трехточечного векторного уравнения с краевыми условиями первого рода:

$$-Y_{j-1} + SY_j - Y_{j+1} = F_j, 1 \leq j \leq N, Y_0 = Y_{N+1} = 0, \quad (4)$$

где $Y_j = (y_j(1), \dots, y_j(M))^T$ есть j -й неизвестный вектор, $S = 2I_M + T_1$.

Метод *CR* представляет собой рекурсивную процедуру, применяемую к аналогичному уравнению вида

$$-W_{j-1} + \overset{k}{C}W_j - W_{j+1} = (\overset{k}{C} + \overset{k}{\beta}I_M)P_j, 1 \leq j \leq 2^{n-k} - 1, W_0 = W_{2^{n-k}} = 0, \quad (5)$$

где

$$\overset{k}{C} = 2T_{2^k} \left(\frac{1}{2} S \right), T_r(t) = \cos r \arccos t, \beta + (\beta)^2 = 2, k \geq 0. \quad (6)$$

Заметим, что при $k=0$ и

$$P_j = (S + \overset{0}{\beta}I_M)^{-1} F_j, 1 \leq j \leq 2^n - 1, \quad (7)$$

система (5) переходит в исходную задачу (4).

Размер задачи характеризуется параметром k . Рекурсивный шаг метода *CR* заключается в переходе к системе (5) с параметром размера, на единицу большим:

$$-\hat{W}_{j-1} + \overset{k+1}{C}\hat{W}_j - \hat{W}_{j+1} = (\overset{k+1}{C} + \overset{k+1}{\beta}I_M)\hat{P}_j, 1 \leq j \leq 2^{n-k-1} - 1, \hat{W}_0 = \hat{W}_{2^{n-k-1}} = 0,$$

где

$$\hat{W}_j = W_{2j}, 0 \leq j \leq 2^{n-k-1}. \quad (8)$$

Это осуществляется путем подстановки выражений

$$W_{2j-1} = P_{2j-1} + \overset{k}{C}^{-1}(W_{2j-2} + W_{2j} + \overset{k}{\beta}P_{2j-1}), 1 \leq j \leq 2^{n-k-1}, \quad (9)$$

в уравнения (5) для четных j и домножения на $\overset{k}{C}$ слева. После преобразований, учитывающих (6), получаем формулы

$$\hat{P}_j = P_{2j} + (\overset{k}{C} - \overset{k}{\beta}I_M)^{-1}(P_{2j-1} + \overset{k}{\beta}P_{2j} + P_{2j+1}), 1 \leq j \leq 2^{n-k-1} - 1. \quad (10)$$

Таким образом, рекурсивный шаг метода *CR* описывается формулами (10), (8), (9). Шаги выполняются до тех пор, пока не получится задача (5) при $k = n - 1$. Потребовав, чтобы $\overset{n-1}{\beta} = 0$ (напр., можно взять $\overset{k}{\beta} = 2 \cos((1 - (-2)^{k-n})\pi/3)$), можно получить решение этой задачи „бесплатно“: $W_1 = P_1$. Число операций $\mathfrak{N}(k)$ рекурсивного алгоритма для решения задачи размера k удовлетворяет рекуррентному соотношению $\mathfrak{N}(k) = \mathfrak{N}(k+1) + \mathfrak{N}_1(k)$, где $\mathfrak{N}_1(k)$ — число операций для выполнения рекурсивного шага. Отсюда, учитывая, что $\mathfrak{N}(n-1) = 0$, и прибавляя затраты \mathfrak{N}_0 на сведение (7) задачи (4) к (5) с $k=0$, получаем оценку числа операций метода *CR*:

$$\mathfrak{N} = \mathfrak{N}_0 + \sum_{j=0}^{n-2} \mathfrak{N}_1(j). \quad (11)$$

Величина \mathfrak{R}_0 есть $O(MN)$, т. к. (7) выполняется путем применения, напр., метода прогонки. Вычисления (9), (10) также сводятся к ряду умножений матриц, обратных к трехдиагональным, на вектор (и векторному сложению), причем $\mathfrak{R}_1(j) = O(MN)$. В этом нетрудно убедиться, используя разложение в сумму простейших дробей:

$$(C - \alpha I_M)^{-1} = \left(2T_{2^k} \left(\frac{1}{2} S \right) - \alpha I_M \right)^{-1} = \sum_{j=1}^{2^k} \xi_j (S + \eta_j I_M)^{-1}, \quad \alpha \in \{0, \beta\}. \quad (12)$$

Поэтому из (11) получаем асимптотику $O(MN \log N)$ для числа операций метода *CR*.

Отметим, что описанная методика построения алгоритма успешно обобщается и на те случаи, когда матрица T_2 имеет любую из форм (2), (3) при соответствующих ограничениях на N .

Известные к настоящему времени варианты метода *CR* используют, как правило, представление правой части (5) в виде $\sum_{j=1}^k CP_j + q_j$ (а также факто-

ризацию $C^{-1} = \prod_{j=1}^k (S + \eta_j I_M)^{-1}$ вместо разложения (12), что менее выгодно

в смысле численной устойчивости) и требуют в 1,5 раза больше памяти при реализации на ЭВМ. Алгоритмы указанного типа распространены на случай произвольного N [3], а также на общий случай, когда как T_2 , так и T_1 имеют вид (2) [5]. При этом асимптотика числа операций сохраняется.

1.3. *Дискретное преобразование Фурье (FA)*. Рассмотрим задачу типа (1) с матрицей

$$A = (C - 2I_M) \otimes I_L + I_M \otimes T_2, \quad (13)$$

где C — полином степени K от матрицы вида (2), а T_2 является $(L \times L)$ -матрицей типа (2), (3). Подставляя разложение $T_2 = Q\Lambda Q^{-1}$ в (13), получаем $A = (C - 2I_M) \otimes I_L + I_M \otimes Q\Lambda Q^{-1}$, откуда, используя формулу $(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$, приходим к разложению $A = (I_M \otimes Q) \otimes ((C - 2I_M) \otimes I_L + I_M \otimes \Lambda) \times (I_M \otimes Q^{-1})$. Отсюда и получается алгоритм *FA* для задачи (1), (13):

$$y = (I_M \otimes Q) \operatorname{diag}_{1 \leq j \leq L} \{ [C + (\lambda_j - 2)I_M]^{-1} \} (I_M \otimes Q^{-1}) f.$$

Алгоритм умножения на вектор первого и третьего сомножителя очевидным образом получается применением M раз второго алгоритма п. 1.1, а умножение на вектор второго сомножителя строится по формуле (12) и требует KL применений первого алгоритма п. 1.1. Таким образом, число операций метода *FA* для задачи (1), (13) имеет асимптотику $O(KLM + ML \log L)$. Так, если мы применим построенный метод непосредственно к задаче (4), для которой $K=1$, $L=N$, то получим $O(MN \log N)$. Если же мы используем метод *FA* в рекурсивной процедуре *CR* — выполним l шагов рекурсии и для полученной задачи (5) с параметром размера $k=l$ (которая есть задача (1), (13) при $K=2^l$, $L=(N+1)/2^l - 1$) применим метод *FA* — то число операций такого метода (получившего название *FACR(l)*) будет удовлетворять рекуррентному соотношению

$$\mathfrak{R}(k) = \mathfrak{R}(k+1) + \mathfrak{R}_1(k), \quad k=0, 1, \dots, l-1, \quad \mathfrak{R}(l) = O(MN + 2^{-l} MN \log N).$$

Отсюда $\mathfrak{R}(0) = O(lMN + 2^{-l} MN \log N)$, так что при $l = c_0 \log \log N$ метод *FACR(l)* имеет асимптотику числа операций $O(MN \log \log N)$, т. е. лучшую, чем для *CR* или *FA*.

Другой вариант применения алгоритмов п. 1.1 изложен в следующем пункте.

1.4. *Маршевый метод (МА)*. Рассмотрим задачу (1), где $T_1 = S$ — матрица вида (2), (3), записываемую в виде трехточечного векторного уравнения с периодическими краевыми условиями:

$$-\alpha_j Y_{j-1} + (\gamma_j I + S) Y_j - \beta_j Y_{j+1} = F_j, \quad 1 \leq j \leq N, \quad Y_0 = Y_N, \quad Y_{N+1} = Y_1. \quad (14)$$

Основную роль при построении маршевого метода играют соотношения, связывающие векторы Y_m , Y_{m+1} и Y_j для любых допустимых m, j . Используя эти соотношения, можно построить редуцированную систему вида (15) относительно отстоящих друг от друга пар соседних неизвестных векторов $\dots Y_{j'-1}, Y_{j'}, Y_{j''-1}, Y_{j''}, \dots$, которая решается методом типа *FA*, использующим разложение $S = Q\Lambda Q^{-1}$. Остальные неизвестные определяются непосредственно из исходных уравнений (14). Более подробное изложение метода см. в [7]; мы приведем только окончательные расчетные формулы.

Пусть выбрана последовательность целых чисел m_t , $0 \leq t \leq 2L$, таких, что $1 = m_0 < m_1 < m_2 < \dots < m_{2L} = N + 1$. Маршевый метод заключается в выполнении следующих шести этапов.

I. Вычисляем векторы P_j^p и Q_{r-1}^j :

$$\begin{aligned} P_{p-1}^p &= 0, \quad \beta_p P_p^p = F_p, \quad \beta_j P_j^p = (\gamma_j I + S) P_{j-1}^p - \alpha_j P_{j-2}^p + F_j, \quad j = p+1, p+2, \dots, q-1, \\ Q_{r-1}^r &= 0, \quad \alpha_{r-1} Q_{r-1}^{r-1} = F_{r-1}, \quad \alpha_j Q_r^j = (\gamma_j I + S) Q_{r-1}^{j+1} - \beta_j Q_{r-1}^{j+2} + F_j, \\ & \quad j = r-2, r-3, \dots, q, \\ & \quad p = m_{t-2}, \quad q = m_{t-1}, \quad r = m_t, \quad t = 2, 4, 6, \dots, 2L. \end{aligned}$$

II. Вычисляем векторы Ψ_t :

$$\begin{aligned} \Psi_{t-1} &= Q^{-1} (P_{q-1}^p - Q_{r-1}^{q+1}), \quad \Psi_t = Q^{-1} (Q_{r-1}^q - P_{q-2}^p), \\ & \quad p = m_{t-2}, \quad q = m_{t-1}, \quad r = m_t, \quad t = 2, 4, 6, \dots, 2L. \end{aligned}$$

III. Вычисляем диагональные матрицы Λ_j^s и M_s^j :

$$\begin{aligned} \Lambda_{s-2}^s &= 0, \quad \Lambda_{s-1}^s = I, \quad \beta_j \Lambda_j^s = (\gamma_j I + \Lambda) \Lambda_{j-1}^s - \alpha_j \Lambda_{j-2}^s, \\ & \quad j = s, s+1, \dots, q-1, \quad s = p, p+1, \\ M_s^{s+2} &= 0, \quad M_s^{s+1} = I, \quad \alpha_j M_s^j = (\gamma_j I + \Lambda) M_s^{j+1} - \beta_j M_s^{j+2}, \\ & \quad j = s, s-1, \dots, q, \quad s = r-1, r-2, \\ & \quad p = m_{t-2}, \quad q = m_{t-1}, \quad r = m_t, \quad t = 2, 4, 6, \dots, 2L. \end{aligned}$$

IV. Решаем систему линейных уравнений:

$$\begin{pmatrix} -\frac{\beta_p}{\alpha_p} \Lambda_{q-1}^{p+1} & \Lambda_{q-1}^p & -M_{r-1}^{q+1} & \frac{\alpha_{r-1}}{\beta_{r-1}} & M_{r-2}^{q+1} \\ \frac{\beta_p}{\alpha_p} \Lambda_{q-2}^{p+1} & -\Lambda_{q-2}^p & M_{r-1}^q & -\frac{\alpha_{r-1}}{\beta_{r-1}} & M_{r-2}^q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{t-2} \\ V_{t-1} \\ V_t \\ V_{t+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_{t-1} \\ \Psi_t \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$V_0 = V_{2L}, \quad V_{2L+1} = V_1, \quad p = m_{t-2}, \quad q = m_{t-1}, \quad r = m_t, \quad t = 2, 4, 6, \dots, 2L.$$

V. Вычисляем выделенные пары соседних неизвестных векторов:

$$Y_{m_{t-1}} = QV_{2t-1}, \quad Y_{m_t} = QV_{2t}, \quad 1 \leq t \leq L.$$

VI. Вычисляем остальные неизвестные векторы:

$$\begin{aligned} \beta_j Y_{j+1} &= (\gamma_j I + S) Y_j - \alpha_j Y_{j-1} - F_j, \quad j = p, p+1, \dots, q-2, \\ \alpha_j Y_{j-1} &= (\gamma_j I + S) Y_j - \beta_j Y_{j+1} - F_j, \quad j = r-1, r-2, \dots, q+1, \\ & \quad p = m_{t-2}, \quad q = m_{t-1}, \quad r = m_t, \quad t = 2, 4, 6, \dots, 2L. \end{aligned}$$

LLj

Очевидно, на этапах I, III, VI затрачивается $O(MN)$ операций, на этапах II, V — $O(LM \log M)$ операций. В [7] показано, что для выполнения вычислений на этапе IV достаточно $O(ML)$ операций. Таким образом, общее число операций маршевого метода составляет $O(MN + LM \log M)$. Для рассматриваемого класса задач характерна ситуация, когда матрицы T_1 и T_2 в задаче (1) положительно определены. В этом случае большие длины маршей $m_j - m_{j-1}$, желательные с точки зрения уменьшения L (т. е. ускорения метода), недопустимы, т. к. приводят к численной неустойчивости. Учитывая результаты исследования устойчивости маршевых методов, проведенного в [8], будем считать, что при $M = O(N)$ выполнено $L = O(N/\log N)$ (т. е. $m_j - m_{j-1} = O(\log N)$). Тогда мы получаем численно устойчивый маршевый метод с асимптотикой числа операций $O(N^2)$.

§ 2. Прямые и итерационные методы, основанные на разрезании сеточной области

На практике часто встречаются задачи, поставленные в областях, составленных из прямоугольников либо других областей, допускающих использование сеток, эквивалентных прямоугольным. Возникающие при этом системы L линейных уравнений характеризуются тем, что $O(\sqrt{L})$ значений неизвестной сеточной функции в узлах на границе раздела могут быть найдены посредством решения системы порядка $O(\sqrt{L})$ относительно этих неизвестных и нескольких задач, рассмотренных выше. Построение и решение этой системы, а также нахождение всего решения производится с использованием рассмотренных ранее методов. В качестве примера рассмотрим разностную задачу Дирихле в L -образной области, составленной из двух прямоугольников. Занумеруем в векторы y_1 и y_3 неизвестные в прямоугольниках, в вектор y_2 — неизвестные на границе раздела. Тогда система $Au = f$ запишется в виде

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ 0 & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Исключая из второго уравнения y_1 и y_3 , получим

$$\hat{f}_2 = f_2 - A_{21} A_{11}^{-1} f_1 - A_{23} A_{33}^{-1} f_3, \quad (17)$$

$$Cy_2 = (A_{22} - A_{21} A_{11}^{-1} A_{12} - A_{23} A_{33}^{-1} A_{32}) y_2 = \hat{f}_2, \quad (18)$$

$$A_{11} y_1 = f_1 - A_{12} y_2, \quad A_{33} y_3 = f_3 - A_{32} y_2. \quad (19)$$

Таким образом, решение системы (16) производится в три этапа: сначала мы вычисляем правую часть (17) системы (18) (это требует, вообще говоря, затрат меньших, чем полное решение систем с матрицами $A_{\alpha\alpha}$, $\alpha = 1, 3$, т. к. нужно вычислить лишь $O(\sqrt{L})$ компонент решения), затем решаем систему (18) (это самый сложный этап) и, наконец, решаем две системы (19).

Системы (18) можно решать либо прямыми, либо итерационными методами. В первом случае вычисляются те $O(\sqrt{L})$ компонент векторов $A_{\alpha\alpha}^{-1} a_{\alpha 2}(j)$ (где $a_{\alpha 2}(j)$ есть j -й столбец $A_{\alpha 2}$, $\alpha = 1, 3$), которые необходимы для формирования произведения матриц $A_{2\alpha} A_{\alpha\alpha}^{-1} A_{\alpha 2}$. Если матрицы $A_{\alpha\alpha}$, $\alpha = 1, 3$, имеют вид (1) — (3), то для этого достаточно $O(L \log L)$ операций; в противном случае — $O(L\sqrt{L})$ операций. Далее полученная матрица емкости C разлагается

в произведение $C = \mathcal{L}D\mathcal{L}^T$ по алгоритму симметричного исключения Гаусса с затратой $O(L\sqrt{L})$ операций. Этот вариант алгоритма ориентирован на решение задачи (16) со многими правыми частями, т. к. после разложения $C = \mathcal{L}D\mathcal{L}^T$ для решения системы (16) достаточно не более $O(L \log L)$ операций ($O(L)$, если используется маршевый метод).

Другой вариант метода использует итерационный метод решения системы (18) и не требует явного вычисления C . Если матрицы $A_{\alpha\alpha}$ имеют вид (1) — (3), то для умножения матрицы C на вектор достаточно $O(\sqrt{L} \log L)$ операций (если нет, то $O(L)$ операций). Поэтому явный метод сопряженных градиентов для (18) имеет число операций $O(L \log L)$, т. к. должен дать точное решение за $O(\sqrt{L})$ итераций. Если же построить неявный итерационный процесс (22) с оператором верхнего слоя $B = (1/2)A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$, то скорость его сходимости не будет зависеть от L [9] и решение системы (18) можно будет вычислить с точностью ϵ с затратами от $O(\sqrt{L} \log L \log \epsilon^{-1})$ до $O(L \log \epsilon^{-1})$ операций (в зависимости от свойств $A_{\alpha\alpha}$, $\alpha = 1, 3$).

§ 3. Прямые и итерационные методы, основанные на дополнении сеточной области

В тех случаях, когда область \bar{G} , где поставлена дифференциальная краевая задача, имеет сложную геометрическую конфигурацию, целесообразно ее не разрезать, а дополнять до объемлющего прямоугольника, вводить в нем сетку и строить разностную аппроксимацию на узлах, попавших внутрь исходной области \bar{G} . После этого оказывается возможным дополнить полученные уравнения аналогичными, записанными в остальных узлах прямоугольника, что приводит к системе

$$Ax = b. \quad (20)$$

При этом нетрудно добиться того, чтобы: 1) решение построенной задачи в прямоугольнике совпадало с искомым решением в узлах исходной области; 2) уравнения полученной системы отличались от уравнений стандартной пяти-точечной задачи $Bw = r$ в прямоугольнике лишь в $O(\sqrt{L})$ узлах на границе между областью и ее дополнением. Кроме того, в некоторых важных случаях можно обеспечить „хорошие“ свойства матрицы $B^{-1}A$, что позволяет построить экономичный итерационный метод для задачи (20) со скоростью сходимости, не зависящей от L .

Таким образом, исходная задача сводится к задаче с матрицей $A = B + pq^T$, $pz(p) = O(\sqrt{L})$, $pz(q) = O(\sqrt{L})$, т. е. A отличается от B лишь на слагаемое малого ранга и высокой разреженности. Это обстоятельство позволяет, как и выше, применить метод матрицы емкости, основанный на формуле для модифицированной обратной: $A^{-1} = B^{-1}(I - p(\tilde{I} + q^T B^{-1} p)^{-1} q^T B^{-1})$. Здесь размер матрицы емкости $C = \tilde{I} + q^T B^{-1} p$ также асимптотически равен $O(\sqrt{L})$, но реально может достигать больших величин. Это затрудняет вычисление и факторизацию матрицы C . Как и в случае разрезания, число операций прямого метода матрицы емкости составляет $O(L)$ на каждую из задач в серии (если использовать маршевый метод).

Для одноразового решения задачи целесообразно применять неявные итерационные методы с регуляризатором B . В некоторых важных случаях (третья краевая задача [10], первая краевая задача [11]) удается найти такой способ построения матрицы A , который позволяет добиться быстрой сходимости соответствующего итерационного процесса. Если для обращения B на векторе использовать маршевый метод, то асимптотика числа операций таких методов есть $O(L \log \epsilon^{-1})$.

§ 4. Неявные итерационные методы

При решении разностных краевых задач для общих эллиптических уравнений (трактуемых как операторное уравнение $Au = f$ в гильбертовом пространстве H) применяются, в основном, неявные итерационные методы. Широкое использование в этих методах, базирующихся на двухслойной

$$B \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1, \quad y_0 \in H, \quad (21)$$

или трехслойной

$$By_{k+1} = \alpha_{k+1}(B - \tau_{k+1}A)y_k + (1 - \alpha_{k+1})By_{k-1} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f, \\ k = 0, 1, 2, \dots, n-1, \quad \alpha_1 = 1, \quad y_0 \in H, \quad (22)$$

итерационных схемах, нашли полные и факторизованные операторы верхнего слоя B .

В качестве полных применяются операторы, соответствующие разностным краевым задачам с разделяющимися переменными. Такие операторы могут быть получены, напр., дополнением исходной сеточной задачи до расширенной в объемлющей регулярной области и усреднением коэффициентов расширенной задачи по одной пространственной переменной. Применение экономичных прямых алгоритмов (см. § 1) позволяет реализовать каждую итерацию за $O(MN)$ или $O(MN \log \log N)$ операций. В случае краевых задач для уравнения вида

$$-\sum_{\alpha=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(k_\alpha(x) \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} \right) + q(x)u = f(x), \quad x = (x_1, x_2) \in G,$$

число итераций $n = (1/2)\sqrt{c_0} \ln(2/\varepsilon)$ данного метода не зависит от шага сетки h . Однако в силу зависимости от $c_0 = \max_{x \in G} (\max_{\alpha} k_\alpha(x) / \min_{\alpha} k_\alpha(x))$, итерационные

методы с полным оператором верхнего слоя эффективно применимы лишь к решению разностных уравнений, коэффициенты которых меняются слабо.

К настоящему времени разработано несколько подходов к построению факторизованных операторов B для схем (21), (22).

Первый подход связан с использованием специальной структуры матрицы оператора A . На основе этого подхода построены методы переменных направлений — ADI и верхней релаксации SOR, для которых проблема выбора итерационных параметров решена лишь при весьма жестких ограничениях на свойства матрицы A [6]. Применение метода SOR требует достаточно точного и экономичного вычисления оптимального параметра релаксации. Способ оценки параметра релаксации, предложенной в [12], порождает зависимость числа итераций n от экстремальных характеристик коэффициентов разностных уравнений. Указанная зависимость устраняется применением метода [6], позволяющего вычислить априорную информацию для метода SOR за $O(MN)$ операций. Наряду с ограниченностью области эффективного применения рассмотренные методы обладают достаточно низкой скоростью сходимости с числом итераций $O(h^{-1} \ln \varepsilon^{-1})$.

Конструктивный подход к построению факторизованного оператора верхнего слоя лежит в основе попеременно-треугольного метода А. А. Самарского [13], который применим для решения уравнения с самосопряженным и положительно определенным оператором A . В итерационных схемах используется оператор

$$B = (D + \omega R_1)D^{-1}(D + \omega R_2), \quad (23)$$

построенный по разложению оператора-регуляризатора R , $c_1 R \leq A \leq c_2 R$, в сумму сопряженных друг другу операторов R_1 и R_2 , $R_1 = R_2^*$. Здесь $D = D^* > 0$ — операторный параметр, выбираемый из условия максимума $\eta = \delta/\Delta$, где δ и Δ — числа (априорная информация) из операторных неравенств $\delta D \leq R$, $R_1 D^{-1} R_2 \leq (\Delta/4) R$, $\delta > 0$.

Попеременно-треугольный метод (ПТМ) показал высокую эффективность при решении разностных краевых задач для общих (самосопряженных) эллиптических уравнений 2-го порядка с сильноменяющимися разрывными коэффициентами, заданных как в прямоугольнике, так и в области сложной формы [14]. Для числа итераций ПТМ справедлива оценка $O_1(h^{-\gamma} \ln \varepsilon^{-1})$ с $\gamma = 0,5$, причем число итераций определяется интегральными характеристиками коэффициентов, параметра эллиптичности и шагов сетки. В частности, наличие разрывов коэффициентов не приводит к увеличению показателя γ , форма области не влияет на число итераций.

Сравнение ПТМ с рядом других итерационных методов свидетельствует о его преимуществе. Отметим, что для метода симметричной верхней релаксации SSOR: $0,5 \leq \gamma \leq 0,75$ [15], причем значение $\gamma = 0,5$ достигается лишь в случае гладких коэффициентов; для метода неполного разложения Холецкого ICCG(0) [16] $\gamma = 1$; для варианта метода неполной факторизации [17] $\gamma = 0,5$.

Разработанные точечные и блочные варианты ПТМ позволяют решать разностные смешанные краевые задачи для эллиптических уравнений, заданных в криволинейных ортогональных системах координат [18], системы линейных алгебраических уравнений с матрицей Стильтеса [19], к которым приводятся разностные уравнения на треугольных сетках и девятиточечные разностные схемы, полученные частичным исключением неизвестных в пятиточечных схемах. ПТМ с выбором регуляризатора позволяет решать разностные краевые задачи для эллиптического уравнения со смешанными производными, для систем уравнений теории упругости [6] и другие. Факторизованный оператор ПТМ (23) нашел эффективное применение в итерационных схемах для решения задач на собственные значения [20].

Другим конструктивным подходом к построению оператора верхнего слоя является неполное разложение матрицы оператора A . Методы неполного разложения (МНР), основанные на данном подходе, находят широкое применение при решении разностных уравнений с матрицей сложной структуры, в частности, разреженных систем линейных уравнений, возникающих в схемах метода конечных элементов.

В предположении, что выбор ведущего элемента не требуется, полное разложение $(N \times N)$ -матрицы A на треугольные множители \mathcal{L} и U определяется следующим образом:

$$\mathcal{L} = \prod_{n=1}^N \begin{pmatrix} I_{n-1} & 0 \\ 0 & n_L \end{pmatrix}, \quad U = \prod_{n=N}^1 \begin{pmatrix} I_{n-1} & 0 \\ 0 & n_U \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} {}^1 a_{11} & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & {}^n a_{nn} & \\ 0 & & & \ddots & \\ & & & & {}^N a_{NN} \end{pmatrix},$$

где

$${}^n A := \begin{pmatrix} {}^n a_{nn} & {}^n q^T \\ {}^n p & {}^n a \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} {}^n a_{nn} & 0 \\ {}^n p & I_{N-n} \end{pmatrix}}_{n_L} \begin{pmatrix} {}^n a_{nn}^{-1} & 0 \\ 0 & {}^{n-1} A \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} {}^n a_{nn} & {}^n q^T \\ 0 & I_{N-n} \end{pmatrix}}_{n_U},$$

$${}^{n-1} A = {}^n A - (1/{}^n a_{nn}) {}^n p {}^n q^T, \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad {}^0 A = A.$$

Видно, что матрицы \mathcal{L} и U являются, вообще говоря, заполненными, что и сдерживает применение прямых методов для решения разностных уравнений с большим числом неизвестных в плоском случае, и тем более в трехмерном случае.

В неполном разложении посредством усечения относительно малых элементов матриц nL и nU сохраняется разреженность множителей L и U в операторе $B = LDU$. Возможны два способа усечения элементов: а) усечение после разложения; б) усечение при разложении. В каждом из этих способов возможны следующие стратегии усечения:

1) по индексу усекаемого элемента, когда задано множество $\mathcal{P}(A)$ индексов элементов, не подлежащих отбрасыванию;

2) по абсолютной величине усекаемого элемента, когда задан параметр усечения c такой, что отбрасываются все элементы ${}^na_{ij}$, удовлетворяющие неравенству

$$({}^na_{ij})^2 < c {}^na_{ii} {}^na_{jj}, \quad i \neq j.$$

Не имея возможности останавливаться подробно на достоинствах и недостатках вариантов неполного разложения, укажем лишь основные.

Существенным недостатком первого способа усечения является лишь необходимость предварительного полного разложения, требующего больших объемов вычислений и памяти. С другой стороны, такой способ усечения приводит к невырожденному оператору B , достаточно близкому к исходному оператору A в случае разумного объема усечения. Данное неполное разложение может с успехом быть применено для решения серии задач или задач эволюционного типа с постоянным оператором временного слоя.

В разложении с усечением требуется память меньшего объема, фиксированного в случае усечения по индексу и заранее неизвестного при усечении по значению. Последний случай требует, вообще говоря, разработки специальных стратегий изменения параметра усечения при исчерпании доступной памяти [21]. Существенным недостатком данного способа усечения является возможное вырождение процесса разложения или потеря знакоопределенности оператора B , если A знакоопределен [22]. Для класса \mathcal{K} -матриц, включающего важные случаи разностных уравнений с диагональным преобладанием, устойчивость и невырожденность неполного разложения доказаны в [23]. В иных ситуациях предварительный сдвиг матрицы A — приведение к \mathcal{K} -матрице или переопределение диагональных элементов матриц nL и nU — позволяют избежать вырождения процесса неполного разложения [23], [24].

В заключение отметим, что для методов, использующих факторизованный оператор на верхнем слое, разработаны эффективные алгоритмы, в которых существенное сокращение вычислительной работы получено за счет более простой, чем традиционная, реализации каждой итерации [25], [26].

ЛИТЕРАТУРА

1. Swartztrauber P. N. A direct method for the discrete solution of separable elliptic equations.—SIAM J. Numer. Anal., 1974, v. 11, № 6, p. 1136—1150.
2. Swartztrauber P. N. The method of cyclic reduction, Fourier analysis and FACR algorithms for the discrete solution of Poisson's equation on a rectangle.—SIAM Rev., 1977, v. 19, № 3, p. 490—501.
3. Sweet R. A. A cyclic reduction algorithm for solving block tridiagonal systems of arbitrary dimension.—SIAM J. Numer. Anal., 1977, v. 14, № 4, p. 706—720.
4. Капорин И. Е. Модифицированный марш-алгоритм решения разностной задачи Дирихле для уравнения Пуассона в прямоугольнике.—В сб.: Разностн. методы матем. физ. М., 1980, с. 11—21.
5. Николаев Е. С. Метод неполной циклической редукции.—В сб.: Разностн. методы матем. физ. М., 1981, с. 3—12.
6. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений.—М., 1978.—591 с.
7. Капорин И. Е. Маршевый метод для системы с блочно-трехдиагональной матрицей.—В сб.: Числен. методы линейн. алгебры. М., 1982, с. 63—72.
8. Bank R. E., Rose D. J. Marching algorithms for elliptic boundary value problems, I. The constant coefficient case.—SIAM J. Numer. Anal., 1977, v. 14, p. 792—829.
9. Мацокин А. М. Об одном методе решения систем сеточных уравнений.—В сб.: Методы решения систем вариационно-разностн. J. уравнений. Новосибирск, 1979, вып. 5, с. 136—138.

10. Астраханцев Г.-П. Метод фиктивных областей для эллиптического уравнения второго порядка с естественными граничными условиями.—Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1978, т. 18, № 1, с. 118—125.
11. Капорин И. Е., Николаев Е. С. Метод фиктивных неизвестных для решения разностных эллиптических краевых задач в нерегулярных областях.—Дифференц. уравнения, 1980, т. XVI, № 7, с. 1211—1225.
12. Young D. M. On the accelerated SSOR method for solving large linear systems.—Advances math., 1977, v. 23, № 3, p. 215—271.
13. Самарский А. А. Об одном экономичном алгоритме численного решения систем дифференциальных и алгебраических уравнений.—Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1964, т. 4, № 3, с. 580—585.
14. Кучеров А. Б., Николаев Е. С. Попеременно-треугольный итерационный метод решения сеточных эллиптических уравнений в произвольной области.—Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1977, т. 17, № 3, с. 664—675.
15. Wang H. H. The application of the symmetric SOR and the symmetric SIP methods for the numerical solution of the neutron diffusion equation.—Nuclear Sci. and Eng., 1978, v. 67, p. 162—171.
16. Богданова М. С., Кучеров А. Б., Николаев Е. С. и др. Некоторые новые итерационные методы. Анализ и сравнение.—Препринт № 115. М., 1978.
17. Dupont T., Kendall R. P., Rachford H. H., Jr. An approximate factorization procedure for solving self-adjoint elliptic difference equations.—SIAM J. Numer. Anal., 1968, v. 5, № 3, p. 559—573.
18. Кучеров А. Б. Попеременно-треугольный итерационный метод решения разностных уравнений.—Автореф. кандид. диссерт., Моск. ун-т, 1979.
19. Кучеров А. Б. Попеременно-треугольный итерационный метод решения линейных систем с ленточной S-матрицей.—В сб.: Числен. методы линейн. алгебры. М., 1982, с. 94—102.
20. Приказчиков В. Г. Прототипы итерационных процессов в задаче на собственные значения.—Дифференц. уравнения, 1980, т. XVI, № 9, с. 1688—1697.
21. Munksgaard N. Solving sparse symmetric sets of linear equations by preconditioned conjugate gradients.—ACM TOMS, 1980, v. 6, № 2, p. 206—219.
22. Kershaw D. An incomplete Cholesky conjugate gradient method for iterative solution of systems of linear equations.—J. Comput. Phys., 1978, v. 26, № 1, p. 43—65.
23. Manteuffel T. A. An incomplete factorization technique for positive definite linear systems.—Math. Comput., 1980, v. 34, № 150, p. 473—497.
24. Kershaw D. On the problem of unstable pivots in the incomplete LU-conjugate gradient method.—J. Comput. Phys., 1980, v. 38, № 1, p. 114—123.
25. Кучеров А. Б. Алгоритмы итерационных схем с факторизованным оператором.—В сб.: Разности. методы матем. физ. Теория числен. методов. М., 1981, с. 23—30.
26. Eisenstat S. C. Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient method.—SIAM J. Sci. Stat. Comput., 1981, v. 2, № 1, p. 1—4.