ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ KG-АЛГОРИТМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ТРЕХДИАГОНАЛЬНОЙ МАТРИЦЕЙ КОЭФФИЦИЕНТОВ

УРДАЛЕТОВА Анаркуль Бурганаковна
профессор Кыргызско-Турецкого университета «Манас»,
кандидат физ.-мат. наук, доцент
E-mail: aurdaletova@rambler.ru

СКЛЯР Сергей Николаевич
руководитель направления Математика и естественные науки
Американского университета в Центральной Азии,
доктор физ.-мат. наук, профессор
E-mail: sklyar_s@mail.auca.kg

КЫДЫРАЛИЕВ Сыргык Капарович
профессор Американского университета в Центральной Азии,
кандидат физ.-мат. наук, доцент
E-mail: syrgak@mail.auca.kg

Аннотация

Известно, что системы линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей коэффициентов возникают при аппроксимации краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка трехточечными разностными схемами, а также при реализации разностных схем для эволюционных уравнений в частных производных. Самым простым и распространенным методом решения таких систем является метод монотонной прогонки, однако, естественных условий однозначной разрешимости системы (отличие от нуля определителя системы) зачастую недостаточно для корректности и устойчивости этого метода - требуются некоторые ограничения в виде неравенств для коэффициентов системы. Метод немонотонной прогонки (или метод Гаусса с выбором главного элемента по строке) решает названную систему уравнений в более общих, чем в методе монотонной прогонки предположениях, однако, использует достаточно изощренную логику.

Для решения систем линейных алгебраических уравнений с трехдиа–гональной матрицей авторами был предложен алгоритм, сочетающий рекуррентную структуру метода Гаусса с формулами Крамера (в дальнейшем KG-алгоритм).

Исследование авторов, изложенное в данной работе, показывает, что KG-алгоритм и его модификация много проще, чем метод немонотонной прогонки, и обладает, вообще говоря, большими вычислительными возможностями.

Ключевые слова: системы линейных алгебраических уравнений, дифференциальные уравнения, трехдиагональная матрица коэффициентов, KG-алгоритм, вычислительные возможности.

INVESTIGATING OF THE COMPUTATIONAL POSSIBYLITIES OF THE KG-ALGORITM TO SOLVE THE SYSTEMS OF ALGEBRAIC EDUATIONS WITH THREE DIAGONALS MATRIX OF COEFFICIENTS

Abstract

The main part of computational mathematics' problems can be brought to solving the systems of linear algebraic equations. In case with a big number of equations and unknowns there are some difficulties on this way. To overcome it, the KG-method which combines the algorithmic structure of the Gauss method with Cramer rules are presented in this paper.

Key words: linear algebraic equations, three diagonals matrix, computational mathematics, difference equations.

Введение

Известно, что системы линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей коэффициентов возникают при аппроксимации краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка трехточечными разностными схемами, а также при реализации разностных схем для эволюционных уравнений в частных производных. Самым простым и распространенным методом решения таких систем является метод монотонной прогонки, однако, естественных условий однозначной разрешимости системы (отличие от нуля определителя системы) зачастую недостаточно для корректности и устойчивости этого метода - требуются некоторые ограничения в виде неравенств для коэффициетов системы. Метод немонотонной прогонки (или метод Гаусса с выбором главного элемента по строке) решает названную систему уравнений в более общих, чем в методе монотонной прогонки предположениях, однако, использует достаточно изощренную логику.

Для решения систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей авторами в работе [1] был предложен алгоритм, сочетающий рекуррентную структуру метода Гаусса с формулами Крамера (в дальнейшем KG-алгоритм).

Исследование авторов, изложенное в данной работе, состоит из следующих частей: изучение вычислительных возможностей KG-алгоритма; модификация KG-алгоритма (MKG-алгоритм); различные задачи из теории дифференциальных уравнений, решение которых сводится к решению систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей коэффициентов; таблицы результатов применения методов монотонной и немонотонной прогонки, KG-алгоритма и MKG-алгоритма к названным задачам. Результаты исследования показывают, что модифицированный KG метод (MKG-алгоритм) обладает, вообще говоря, большими вычислительными возможностями, чем методы монотонной и немонотонной прогонки и KG-алгоритм.

Вывод формулы для решения линейных алгебраических систем с трехдиагональной матрицей коэффициентов

Рассмотрим следующую систему линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей:

$$\begin{cases} b_1 y_1 + c_1 y_2 = f_1, \\ a_k y_{k-1} + b_k y_k + c_k y_{k+1} = f_k, \; k = 2,3,...,n-1; \\ a_n y_{n-1} + b_n y_n = f_n. \end{cases} \tag{1}$$

Системы уравнений вида возникают при аппроксимации краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка трехточечными разностными схемами, а также при реализации разностных схем для эволюционных уравнений в частных производных. В последнем случае задача, подобная, решается на каждом слое по времени, т.е. многократно. Одним из классически известных экономичных методов решения задач вида является метод прогонки, различные варианты этого метода описаны, например, в книге [2]. Самый простой и распространенный метод – метод монотонной прогонки, однако, естественных условий однозначной разрешимости системы (отличие от нуля определителя системы) зачастую не достаточно для корректности и устойчивости этого метода. В качестве достаточных условий корректности и устойчивости монотонной прогонки обычно используют следующие:

$$\begin{aligned} &1)\ b_1 \neq 0, b_n \neq 0, a_i \neq 0, c_i \neq 0\ (i = 2,3,\ldots,n-1); \\ &2)\ |b_1| \geq |c_1|, |b_i| \geq |a_i| + |c_i|\ (i = 2,3,\ldots,n-1), |b_n| \geq |a_n|; \end{aligned} \tag{1}$$

и хотя бы одно из неравенств в 2) - строгое. Метод немонотонной прогонки [2] (или метод Гаусса с выбором главного элемента по строке) решает систему в более общих, чем (1) предположениях, однако, использует достаточно изощренную логику. Предлагаемый KG-алгоритм много проще, чем метод немонотонной прогонки, в то же время, он позволяет решать систему уравнений при условии отличия от нуля ее определителя.

Следуя [1], введем обозначения для определителей D_k и F_k, $(k = 1,2,\ldots,n-1)$:

$$D_k = \begin{vmatrix} b_k & c_k & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ a_{k+1} & b_{k+1} & c_{k+1} & 0 & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & \ldots & \ldots & 0 & \ldots \\ \ldots & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 & a_n & b_n \end{vmatrix}, \quad D_n = b_n,\ D_{n+1} = 1;$$

$$F_k = \begin{vmatrix} f_k & c_k & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ f_{k+1} & b_{k+1} & c_{k+1} & 0 & \ldots & \ldots \\ f_{k+2} & \ldots & \ldots & \ldots & 0 & \ldots \\ \ldots & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ f_n & 0 & \ldots & 0 & a_n & b_n \end{vmatrix}, \quad F_n = f_n.$$

Несложно проверить, что для этих определителей справедливы следующие рекуррентные соотношения $\left(k=1,2,...,n-1\right)$:

$$D_k = b_k D_{k+1} - c_k a_{k+1} D_{k+2}, \tag{2}$$

$$F_k = f_k D_{k+1} - c_k F_{k+1}. \tag{3}$$

В дальнейшем будем считать выполненным условие:

$$D_1 \neq 0, \tag{4}$$

необходимое и достаточное для существования единственного решения системы.

Утверждение, на котором основан KG-алгоритм, выглядит следующим образом: *для любого* $k=1,2,...,n-1$, *величины* c_k *и* D_{k+1} *одновременно в ноль не обращаются.*

Действительно, пусть (от противного) $c_k = D_{k+1} = 0$, для некоторого k.

Тогда, из (2) следует, что $D_k = 0$, а значит, в силу (2), индуктивно, заключаем: $D_{k-1} = 0, D_{k-2} = 0,... D_1 = 0$. Последнее соотношение противоречит предположению (4), и наше утверждение доказано.

Прямой ход KG-алгоритма построим на рекуррентном вычислении определителей D_k *и* F_k по формулам (2) и (3), соответственно. Обратный ход, в силу доказанного утверждения, можно реализовать при помощи следующего условного оператора: пусть найдены величины $y_1, y_2,..., y_k$; если $D_{k+1} = 0$, то определяем неизвестное y_{k+1} из уравнения:

$$y_{k+1} = \frac{f_k - a_k y_{k-1} - b_k y_k}{c_k} \tag{5}$$

(в этом случае $c_k \neq 0$), если же $D_{k+1} \neq 0$, то используем формулу Крамера для того, чтобы найти y_{k+1} как решение «усеченной системы» (уравнения системы, начиная с $k+1$-го):

$$y_{k+1} = \frac{F_{k+1} - a_{k+1} D_{k+2} y_k}{D_{k+1}}. \tag{6}$$

Таким образом, в силу формул (2), (3), (5) и (6) получим алгоритм, который, для однозначной трактовки команд, мы представим в виде паскалеподобного псевдокода.

KG-алгоритм

▼INPUT(n; $\{a_k\}_{k=2}^{n}$; $\{b_k\}_{k=1}^{n}$; $\{c_k\}_{k=1}^{n-1}$; $\{f_k\}_{k=1}^{n}$);

begin

$D_{n+1} = 1$; $D_n = b_n$; $F_n = f_n$;

for k = 1 to n-1 do

begin

$D_{n-k} = b_{n-k} D_{n-k+1} - c_{n-k} a_{n-k+1} D_{n-k+2}$;

$F_{n-k} = f_{n-k} D_{n-k+1} - c_{n-k} F_{n-k+1}$;

end

$y_1 = F_1 / D_1$;

if $D_2 = 0$ then $y_2 = (f_1 - b_1 y_1)/c_1$

else $y_2 = (F_2 - a_2 D_3 y_1)/D_2$;

for k=2 to n-1 do

if $D_{k+1} = 0$ then $y_{k+1} = (f_k - a_k y_{k-1} - b_k y_k)/c_k$

else $y_{k+1} = (F_{k+1} - a_{k+1} D_{k+2} y_k)/D_{k+1}$;

end

OUTPUT($\{y_k\}_{k=1}^{n}$) ▲

Как показали численные эксперименты (Таблицы 2 и 3), KG-алгоритм не всегда приводит к желаемому результату: для систем с большим числом уравнений он может накапливать погрешности при рекуррентном вычислении определителей по формулам (2), (3). Чтобы избежать этого дефекта мы модифицировали алгоритм путем введения в него нормирующих множителей. Умножим *k*-ое уравнение системы на отличный от нуля множитель λ_k, тем самым, изменив коэффициенты и правые части системы, но, не изменив ее решения. Применим для решения полученной системы вышеописанный KG-алгоритм, при этом положим:

$$\lambda_k = \frac{1}{|D_{k+1}| + |c_k|} \ (k = 1,2,...,n-1),\ \lambda_n = 1.$$

Такой выбор нормирующих множителей корректен, в силу доказанного нами утверждения о том, что c_k *и* D_{k+1} *одновременно в ноль не обращаются.* В терминах исходной системы новый алгоритм (назовем его Модифицированным KG-алгоритмом или MKG) будет выглядеть нижеследующим образом.

MKG-алгоритм

▼INPUT(n; $\{a_k\}_{k=2}^{n}$; $\{b_k\}_{k=1}^{n}$; $\{c_k\}_{k=1}^{n-1}$; $\{f_k\}_{k=1}^{n}$);

begin

$D_{n+1} = 1;\ D_n = b_n;\ F_n = f_n;\ \lambda_n = 1;$

for k = 1 to n-1 do

begin

$\lambda_{n-k} = 1/\left(|D_{n-k+1}| + |c_{n-k}|\right);$

$D_{n-k} = \left(b_{n-k}D_{n-k+1} - c_{n-k}\lambda_{n-k+1}a_{n-k+1}D_{n-k+2}\right)\lambda_{n-k};$

$F_{n-k} = \left(f_{n-k}D_{n-k+1} - c_{n-k}F_{n-k+1}\right)\lambda_{n-k};$

end

$y_1 = F_1/D_1;$

if $D_2 = 0$ then $y_2 = \left(f_1 - b_1 y_1\right)/c_1$

else $y_2 = \left(F_2 - \lambda_2 a_2 D_3 y_1\right)/D_2;$

for k=2 to n-1 do

if $D_{k+1}=0$ then $y_{k+1}=\left(f_k-a_k y_{k-1}-b_k y_k\right)/c_k$

else $y_{k+1}=\left(F_{k+1}-\lambda_{k+1}a_{k+1}D_{k+2}y_k\right)/D_{k+1}$;

end

OUTPUT($\{y_k\}_{k=1}^{n}$) ▲

Иллюстрация вычислительных возможностей алгоритмов

Проиллюстрируем вычислительные возможности предложенных алгоритмов на серии тестовых задач, одновременно, сравнив их с методом монотонной прогонки, который сокращенно будем обозначать как DSM (Double-Sweep Method). Численные эксперименты проведены в среде MatLab, их результаты представлены в Таблицах 1-5. В таблицах приведены величины абсолютных погрешностей, вычисленные по формуле:

$$\max_{1\le k\le n}\left|y_k-\overline{y}_k\right|,$$

где y_k -точное, а $\overline{y}_k$ -приближенное решения соответствующей задачи.

Задача 1

$$\begin{cases} y_1=\varphi, \\ -y_{k-1}+2y_k-y_{k+1}=0,\ k=2,3,...n-1; \\ y_n=\psi. \end{cases} \tag{7}$$

Система уравнений (7) возникает как результат аппроксимации трехточечной разностной схемой простейшей краевой задачи для уравнения второго порядка:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2y}{dx^2}=0,\ x\in(0,1); \\ y(0)=\varphi,\ y(1)=\psi. \end{cases}$$

Решение системы (7) имеет вид:

$$y_k = \frac{\varphi(n-k)+\psi(k-1)}{n-1},\ k=1,2,...,n.$$

Можно проверить, что условия (1) для системы (7) выполнены, поэтому метод монотонной прогонки корректен и устойчив, что и подтверждают расчеты, результаты которых приведены в Таблице 1. Для этой задачи также эффективны алгоритмы KG и MKG.

Задача 2

$$\begin{cases} y_1 = 0, \\ \left(cth(R)-1\right)y_{k-1} - 2cth(R)y_k + \left(cth(R)+1\right)y_{k+1} = 0,\ k = 2,3,...,n-1; \\ y_n = 1; \end{cases} \tag{8}$$

$$R = \frac{1}{2\varepsilon(n-1)}.$$

Система (8) является разностной схемой Ильина А.М. (см. [3], [4]), аппроксимирующей сингулярно возмущенную краевую задачу:

$$\begin{cases} \varepsilon \dfrac{d^2y}{dx^2} + \dfrac{dy}{dx} = 0,\ x \in (0,1); \\ y(0)=0,\quad y(1)=1. \end{cases}$$

Решение системы (8) имеет вид:

$$y_k = \frac{1-e^{-(k-1)/\varepsilon(n-1)}}{1-e^{-1/\varepsilon}},\ k=1,2,...,n.$$

Условия (1) для системы (8) выполнены, метод монотонной прогонки корректен и устойчив, что, как и в предыдущем примере, подтверждают результаты расчетов, приведенные в Таблице 2. Для этой задачи хорошо работает и MKG-алгоритм, однако, KG-алгоритм начинает накапливать ошибки при достаточно большом числе уравнений в системе.

Задача 3

$$\begin{cases} -y_1 + y_2 = \dfrac{1}{n-1}, \\ \left[1 - \dfrac{(k-1)}{2\varepsilon(n-1)^2}\right] y_{k-1} - 2y_k + \left[1 + \dfrac{(k-1)}{2\varepsilon(n-1)^2}\right] y_{k+1} = \dfrac{k-1}{\varepsilon(n-1)^3}, k = 2,3,\ldots,n-1; \\ y_n = 2. \end{cases} \quad (9)$$

Система уравнений (9) взята из работы [5], и является разностной схемой для решения задачи:

$$\begin{cases} \varepsilon \dfrac{d^2y}{dx^2} + x\dfrac{dy}{dx} = x,\ x \in (0,1); \\ \dfrac{dy}{dx}(0) = 1, \quad y(1) = 2. \end{cases}$$

Решение системы (9) имеет вид:

$$y_k = 1 + \frac{k-1}{n-1}, k = 1,2,\ldots,n.$$

Условия (1) для системы (9), вообще говоря, не выполнены: для $\varepsilon < 1/(n-1)^2, k \geq 3$, в уравнениях из (9) нарушено условие диагонального преобладания. Тем не менее, метод монотонной прогонки, как показано в Таблице 3, работает хорошо. Метод MKG также эффективен, в отличие от KG-алгоритма, который не работает, при достаточно больших *n*.

Задача 4

$$\begin{cases} y_1 = \varphi, \\ -y_{k-1} + y_k - y_{k+1} = 0,\ k = 2,3,\ldots n-1; \\ y_n = \psi. \end{cases} \quad (10)$$

Система уравнений (10) приведена в монографии [2] как пример системы, для которой алгоритм монотонной прогонки не является корректным.

Действительно, при вычислении третьего прогоночного коэффициента в алгоритме возникает операция деления на ноль. Заметим, что для этой системы не выполняются условия (1) диагонального преобладания. В то же время, если $n \neq 3k+1$, для некоторого целого $k>0$, то решение системы (10) существует и определяется формулой:

$$y_k = \frac{\varphi \sin\frac{\pi(n-k)}{3} + \psi \sin\frac{\pi(k-1)}{3}}{\sin\frac{\pi(n-1)}{3}}, \quad k = 1,2,...n.$$

Результаты, приведенные в Таблице 4, показывают полную несостоятель–ность монотонной прогонки для этого случая, оба метода KG и MKG эффективны.

Задача 5

$$\begin{cases} -y_1 + y_2 = -1, \\ \cos(\pi k/2)\, y_{k-1} + \cos(\pi k/2)\, y_k + \sin(\pi k/2)\, y_{k+1} = (-1)^k, \; k = 2,3,...4m-1; \\ y_{4m-1} + y_{4m} = 1. \end{cases} \quad (11)$$

Система уравнений (11) распадается на подсистемы размерности 4×4 и не удовлетворяет условиям (1). Ее решение определяется формулой:

$$y_k = \cos(\pi k/2),\; k = 1,2,...,4m.$$

Как показывают результаты численных экспериментов (Таблица 5), система (11) не решается методом монотонной прогонки. Оба алгоритма KG и MKG решают систему (12).

Задача 6

$$\begin{aligned} &\cos\left(\pi\frac{k+1}{4}\right) y_{k-1} - \cos\left(\pi\frac{k}{4}\right) y_k + 2\sin\left(\pi\frac{k}{3}\right) y_{k+1} = \\ &= 2\sin\left(\pi\frac{k}{3}\right)\cos\left(\pi\frac{k+2}{4}\right),\; k = 1,2,...12m; \end{aligned} \quad (13)$$

еще одна распадающаяся система с решением, определяемым по формуле:

$$y_k = cos\left(\pi \frac{k+1}{4}\right), k = 1,2,...,12m.$$

Система (13) не удовлетворяет условиям (1) и, как показано в Таблице 6, не решается методом монотонной прогонки. Оба алгоритма KG и MKG решают систему (13).

Таким образом, MKG-алгоритм оказался эффективным при решении всех представленных в работе задач, в то время как метод монотонной прогонки имеет ограниченную область применения. KG-алгоритм, как показали численные эксперименты, может приводить к накоплению погрешностей при большом числе уравнений в системе.

Таблица 1. Задача 1, $\varphi = -10, \psi = 7$

	$n=10$	$n=10^2$	$n=10^3$	$n=10^4$
DSM	$2\cdot10^{-15}$	10^{-14}	10^{-12}	$4\cdot10^{-11}$
KG	$2\cdot10^{-15}$	$9\cdot10^{-15}$	$2\cdot10^{-14}$	$7\cdot10^{-14}$
MKG	$4\cdot10^{-15}$	$2\cdot10^{-14}$	$7\cdot10^{-13}$	$2\cdot10^{-11}$

Таблица 2. Задача 2, $\varepsilon = 10^{-2}$

	$n=10$	$n=10^2$	$n=10^3$	$n=10^4$
DSM	$2\cdot10^{-15}$	$7\cdot10^{-15}$	$8\cdot10^{-13}$	$8\cdot10^{-11}$
KG	10^{-15}	$2\cdot10^{-15}$	*NaN*	*NaN*
MKG	10^{-15}	$5\cdot10^{-14}$	$2\cdot10^{-13}$	$8\cdot10^{-13}$

Таблица 3. Задача 3, $\varepsilon = 10^{-2}$

	$n = 10$	$n = 10^2$	$n = 10^3$	$n = 10^4$
DSM	$2 \cdot 10^{-16}$	$4 \cdot 10^{-15}$	10^{-13}	10^{-12}
KG	10^{-15}	10^{-13}	*NaN*	*NaN*
MKG	10^{-15}	$5 \cdot 10^{-14}$	10^{-13}	$6 \cdot 10^{-12}$

Таблица 4. Задача 4, $\varphi = 7, \psi = -5$

	$n = 30$	$n = 3 \cdot 10^2$	$n = 3 \cdot 10^3$	$n = 3 \cdot 10^4$
DSM	NaN	NaN	NaN	NaN
KG	$3 \cdot 10^{-14}$	$5 \cdot 10^{-13}$	$7 \cdot 10^{-12}$	$8 \cdot 10^{-11}$
MKG	$3 \cdot 10^{-14}$	$5 \cdot 10^{-13}$	$7 \cdot 10^{-12}$	$8 \cdot 10^{-11}$

Таблица 5. Задача 5

	$n = 40$	$n = 4 \cdot 10^2$	$n = 4 \cdot 10^3$	$n = 4 \cdot 10^4$
DSM	0.5	0.5	0.5	0.5
KG	$4 \cdot 10^{-15}$	$8 \cdot 10^{-14}$	$7 \cdot 10^{-13}$	$6 \cdot 10^{-12}$
MKG	$4 \cdot 10^{-15}$	$8 \cdot 10^{-14}$	$7 \cdot 10^{-13}$	$6 \cdot 10^{-12}$

Таблица 6. Задача 6

	$n = 12$	$n = 120$	$n = 12 \cdot 10^2$	$n = 12 \cdot 10^3$
DSM	0.04	0.3	0.3	0.3
KG	$6 \cdot 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-13}$	$2 \cdot 10^{-12}$	$2 \cdot 10^{-11}$
MKG	$5 \cdot 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-13}$	$2 \cdot 10^{-12}$	$3 \cdot 10^{-11}$

Список литературы

[1]. Kydyraliev S.K., Sklyar S.N., Urdaletova A.B., Ispolzovanie metoda KG dlya resheniya system lineinyh algebraicheskih uravnenii. Vyshee obrazovanie Kyrgyzskoi Respubliki, 2(12) (2008): 18-23.

[2]. Samarskii A.A., Nikolaev E.S., Metody resheniya setochnyh uravnenii, Moskva, Nauka, 592pp., 1978.

[3]. Ilin A.M., Raznostnaya shema dlya differentsialnogo uravneniya s malym parametrom pri starshei proizvodnoi, Matematicheskie Zametki, 6(2) (1969): 237-248.

[4]. Dulan E., Miller J., Shilders U., Ravnomernye chislennye metody resheniya zadach s pogranichnym sloem, Moskva, Mir, 200 pp., 1983.

[5]. Ilin V.P., Pryamoi analiz ustoichivosti metoda progonki, V knige aktualnye problem vychislitelnoi matematiki I matematicheskogo modelirovaniya, Novosibirsk, Nauka, 189-201 pp., 1985.