0 Увод.

Компютърното моделиране е в основата на много от най-значимите достижения в съвременната наука и технологии. Това е сложен интердисциплинарен процес, който включва създаването на: а) математически модел, адекватно описващ резултатите от планирани експерименти и наблюдения; б) числени методи за дискретизация на диференциални и/или интегрални уравнения; в) ефективни методи и алгоритми за решаване на получените след дискретизацията системи от линейни алгебрични уравнения; г) алгоритми за визуализация и анализ на резултатите от проведените изчислителни експерименти; д) високопроизводителни компютърни програми, които в максимална степен използват възможностите и архитектурата на съвременните изчислителни системи. Компютърният модел дава възможност не само за икономии при скъпо струващи лабораторни и реални практически експерименти. В редица случаи още по-важно е моделирането на характеристиките на нови материали и технологии, както и изследването на процеси, за които измерванията и наблюденията са невъзможни.

Методът на крайните разлики и методът на крайните елементи са основни средства за дискретизация на диференциални уравнения. След тяхното прилагане, задачата се свежда до система от линейни алгебрични уравнения. Едно от най-важните свойства на тези системи е, че съответната матрица е разредена. Това означава, че броят на ненулевите елементи във всеки ред или стълб е ограничен от константа, която не зависи от параметъра на дискретизация на съответния метод и следователно не зависи от размерността на дискретната задача.

Известно е, че решаването на задачи на изчислителната линейна алгебра с разредени матрици е определящо за ефективността на доминиращата част от съществуващите програми за компютърно моделиране на процеси, които се описват с диференциални уравнения. Това с особена сила се проявява при решаване на сложни задачи с голяма размерност. Понятието *голяма размерност* се променя с нарастване на производителността на изчислителната техника. И независимо от огромния прогрес в това отношение, определящи за развитието на компютърното моделиране са постиженията в областта на числените методи и алгоритмите за тяхната реализация. Съвременното разбиране за задачи с голяма размерност е свързано с брой на неизвестните (степени на свобода) от порядък $10^6 - 10^9$ и дори 10^{12}. Такъв клас задачи са предмет на направлениетоот изчислителната математика, което в буквален превод от английски се нарича *научни пресмятания за задачи с голяма размерност* (*Large Scale Scientific Computations*). Настоящият курс е в тази атуална и динамично развиваща се област област.

Методът на крайните елементи и методът на крайните разлики са представители на мрежовите методи и при определени предположения матриците на получаваните линейни системи са с близки свойства и могат дори да съвпадат. Независимо от това, методът на крайните елементи има определени предимства по отношение на общността и алгоритмите за неговата реализация. В тази книга системно е използвана терминология и свойства на метода на крайните елементи.

Таблица 1: Изчислителна сложност на методи за решаване на системи със симетрични и положително определени разредени матрици.

метод	$\mathcal{N}(A^{-1}b)$
Метод на Холецки: LDL^t факторизация.	$O(N^2)$
Метод на вложените сечения: ND.	$O(N^{3/2})$
Метод на спрегнатия градиент: CG.	$O(N^{3/2})$
Метод на спрегнатия градиент с преобуславяне: PCG. Преобуславяне по метода на непълната факторизация.	$O(N^{5/4})$
Метод на спрегнатия градиент с преобуславяне: PCG. Оптимален преобусловител.	$O(N)$

Нека е дадена елиптична гранична задача в областта $\Omega \subset \mathbf{R}^2$ и нека за нейното числено решаване е приложен мрежов числен метод. При много общи предположения диференциалната задача се свежда до система от линейни уравнения със симетрична положително определена матрица A с размерност $N \times N$. В Таблица 1 са представени данни за изчислителната сложност на някои от основните методи за решаване на такъв клас линейни системи. Предполага се, че методът на Холецки отчита лентовата структура или профила на матрицата при подходяща номерация на неизвестните. Този метод е все още най-разпространен в комерсиалните пакети и се прилага успешно за решаване на задачи с умерена размерност. Методът на вложените сечения (Nested Dissection) е най-бързият измежду преките методи. В основата на този метод е рекурсивното разделяне на графа, представящ структурата на ненулевите елементи на матрицата A. Следващите четири метода са итерационни. Виждаме, че още първият от тях, т.е. методът на спрегнатия градиент има изчислителна сложност, която е асимптотично равна на сложността на най-добрия пряк метод. По тази причина е прието, че предимствата на итерационните методи за решаване на задачи с достатъчно голяма размерност са безспорни. Следват методи на спрегнатия градиент с преобуславяне, ефективността на които се определя от качествата на преобусловителя. В тази група специално ще отбележим метода на непълна факторизация. Един от най-често прилаганите варианти на непълна факторизация е т.н. MIC(0) (Modified Incomplete Cholecki). Достатъчно условие за съществуване на устойчива MIC(0) факторизация е матрицата A да бъде M-матрица.

В тома е отделено специално внимание на системно представяне на теоретичните основи на метода на спрегнатия градиент с преобуславяне. На тази основа е ормулирана и стратегията за конструиране на ефективни преобусловители. Така стигаме до естествения въпрос за съществуването на оптимални методи за преобуславяне и отговорът на този въпрос е положителен. Основен подход при конструирането на оптимални преобусловители е използването на дискретизации върху последователности от мрежи. Курсът завършва с въведение в теорията на алгебричните многонивови методи от тип A.

Изчислителната сложност е основно понятие при изграждане на методологията на изследване при решаване на дискретни задачи с голяма размерност. Представените резултати имат изразено конструктивен характер. Всички разгледани методи имат ясна алгоритмична структура. Това дава възможност за оценка на броя на аритметичните операции за тяхната реализация, което е и мярката за изчислителна сложност. Крайната цел е получаването на оптимални итерационни методи. Това означава, че броят на итерациите n_{it} е равномерно ограничен от константа, която не зависи от N и изчислителната сложност на една итерация е $\mathcal{N}_{it} = O(N)$.

Итерационните методи в подпространства на Крилов са едно от десетте най-значими постижения в областта на алгоритмите през XX век. Независимо от субективния и много често спорен подбор при подобни класации, значението на този клас методи е безспорно. Най-изявеният от тях е методът на спрегнатия градиент с преобуславяне, който е в основата на съвременните оптимални итерационни методи.

Подходите, прилагани при конструиране на преобусловители могат да бъдат класифицирани в следните три групи:

- Известно е, че при точното решаване на системи от линейни алгебрични уравнения, в процеса на последователно изключване на неизвестните, разредената структура на матрицата се нарушава. В основата на методите на непълна факторизация е поддържане на контролирана разредена структура на допълнението на Шур .

- Обобщение на класическия метод на Шварц са различните методи, свеждащи задачата в изходната област, до задачи в подобласти . Методъд на фиктивните области и методите за локално сгъстяване от тип FAC и BEPS могат да бъдат изследвани с помощтта на обща алгебрична интерпретация, което дава основание да ги поставим в една и съща група, независимо от съществените различия в целите и крайния резултат .

- В съвременната теория на оптималните итерационни методи, основна роля играят методите построени върху последователност от мрежи (триангулации). Тези методи се разделят на многомрежови (*multigrid*) и многонивови (*multilevel*). Терминологично това разделяне е доста условно. Независимо от това, по традиция първата група се счита, че използва повече свойствата на диференциалната задача, докато при втората група конструкцията е в значителна степен алгебрична и се реализира в термините на метода на крайните елементи и съответните матрици на коравина. Изследванията в тази област водят началото си от работа на Р. Федоренко , публикувана през 1961 г. .

Определящи за съвременното състояние на ефективните итерационни методи и алгоритми са работите на У. Акселсон, И. Бабушка, Д. Браас, П. Василевски, Дж. Брамбъл, А. Джордж, Х. Изерентант, В. П. Илин, Р. Лазаров, Ю. А. Кузнецов, Ст. МакКормик, Р. Федоренко, В. Хакбуш. Тук по азбучен ред са изброени само част от имената на водещи учени, чиито работи представят някои от основните идеи и резултати, като претенциите за пълнота са предварително изключени.

В тази област на изчислителната математика българската школа има значим и международно признат принос.

Книгата е в областта на изчислителната математика. В същото време част от използваните подходи, както и възможните приложения на представените резултати, са непосредствено свързани с математическото моделиране и съвременната информатика. Подбора на материла отразява и научните интереси и резултати на автора, както и резултати получени в секцията по Научни пресмятания на Института по паралерна обработка на информацията на Българската академия на науките.

Настоящият том представлява сборник от лекции. Избрана част от тези лекции са използвани в курсове за бакалаври, магистри и докторанти, четени през последните години във Факултета по математика и информатика на Софийския университет „Св. Климент Охридски„ и в Центъра по обучение на докторанти към Българската академия на науките.

В сборника са включени 19 лекции. В първите две е направено кратко въведение в метода на крайните елементи. Следващите пет лекции са посветени на преки методи за решаване на системи с разредени матрици. След това, в три лекции са представени теорията на метода на спрегнатия градиент и метода на спрегнатия градиент с преобуславяне. В следващите 12 лекции са разгледани ефективни методи и алгоритми за преобуславяне, като в последните три лекции е представено въведение в теорията на оптималните многонивови методи.

Лекциите посветени на марш алгоритъма и преобуславяне с блочна циркулантна факторизация са написани съответно от Гергана Бенчева и Иван Лирков.