

УДК 519.632.4

А.А.Фомин, Л.Н. Фомина

ОБ ОДНОМ ВАРИАНТЕ ПОЛИНЕЙНОГО РЕКУРРЕНТНОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ РАЗНОСТНЫХ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

Рассматривается новый вариант замыкающего соотношения полинейного рекуррентного метода, представляющий собой двухточечную линейную связь значений искомого решения в соседних узлах сеточного разбиения области. Особенностью рассматриваемого замыкания являются асимптотически точные значения коэффициентов соотношения в случае сходимости решения. На примерах решения модельных задач показана более высокая эффективность данного варианта полинейного рекуррентного метода решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с плохо обусловленными матрицами по сравнению с его предыдущими вариантами.

Ключевые слова: *система линейных алгебраических уравнений, итерационный метод решения, замыкающие соотношения.*

Современные задачи вычислительной гидромеханики обычно сводятся к решению систем линейных алгебраических уравнений. Матрицы таких систем имеют высокий порядок и разреженную структуру специального вида [1]. Многие современные методы решения подобных СЛАУ обладают высокими скоростными характеристиками [2 – 6], которые, прежде всего, проявляются при решении систем с «хорошими» матрицами. Одним из таких эффективных методов решения систем уравнений с матрицами положительного типа [7] является полинейный рекуррентный метод, различные варианты которого позволяют понижать первоначальную норму невязки систем с количеством уравнений $\sim 10^5 \div 10^6$ на $10 \div 14$ порядков за $10 \div 10^2$ итераций [8, 9]. Однако на практике нередко встречаются задачи с различного рода осложнениями в своей исходной постановке: например, со скачкообразно меняющимися коэффициентами при вторых производных, – которые при своих дискретизациях сводятся к СЛАУ с плохо обусловленными матрицами. В подобных ситуациях даже самые лучшие методы начинают испытывать трудности при построении решений для таких систем и тогда вопрос ставится не о быстром (эффективном) решении СЛАУ, а о решении системы вообще [10]. Исходя из этого, в настоящей работе рассматривается новый вариант полинейного рекуррентного метода, который обладает улучшенными «разрешающими» способностями по сравнению со своими предыдущими вариантами [8 – 10].

Постановка задачи

Пусть имеет место двумерная по пространству краевая задача на прямоугольной области $\Omega = \{(x, y): 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y\}$. Внутри области Ω поведение искомой функции $\Phi(x, y)$ описывается дифференциальным уравнением

$$U \frac{\partial \Phi}{\partial x} + V \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(v^x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(v^y \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + S,$$

где U, V – компоненты скорости, v^x, v^y – коэффициенты переноса, S – источник. На границе области Γ в общем случае имеют место условия третьего рода

$$a_{\Gamma} \frac{\partial \Phi}{\partial n} + b_{\Gamma} \Phi = c_{\Gamma},$$

где $a_{\Gamma}, b_{\Gamma}, c_{\Gamma}$ – известные величины, а n – нормаль к границе.

Разностная аппроксимация подобной задачи приводит к системе линейных уравнений с пятидиагональной матрицей положительного типа. Основная суть полинейного рекуррентного метода состоит в последовательности преобразований исходной системы уравнений с целью приведения ее к виду, в котором матрица системы имеет четырехдиагональную структуру (рис. 1).

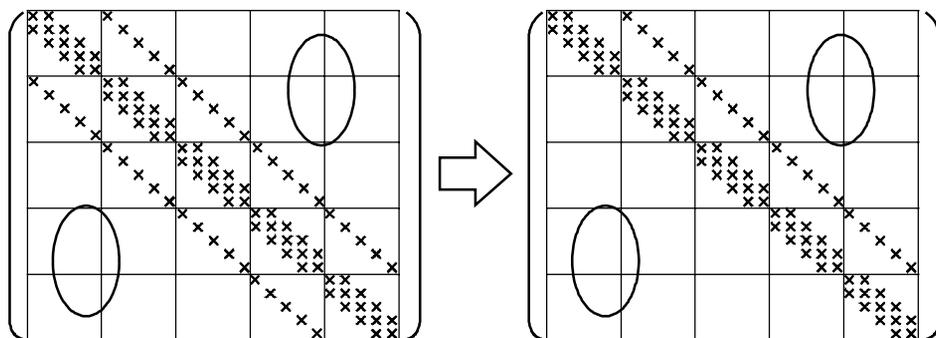


Рис. 1

Причем практически на всех этапах этой последовательности проводимые преобразования являются эквивалентными, кроме одного этапа, на котором значение поправки решения в так называемом «внешаппонном» узле приближенно выражается через поправку решения в узлах основного разностного шаблона. Легко показать, что данный прием по своей сути аналогичен применению принципа компенсации Н.И. Булеева [7], который, как известно, заключается в добавлении к уравнению таких итерировуемых членов, которые приводят к взаимному исключению ошибок итерационных приближений, если они являются гладкими функциями координат.

Модификация метода

Нетрудно видеть, что преобразованную таким образом систему можно разрешить последовательными трехточечными скалярными прогонками по клеткам матрицы [9]. В вариантах полинейного рекуррентного метода с линейной (LR1) и квадратичной (LR2) экстраполяцией поправки решения искомое значение Φ_{ij} во «внешаппонном» узле выражается соответственно следующим образом:

$$\Phi_{ij}^{k+1} = \Phi_{ij}^k + \theta [2(\Phi_{ij+1}^{k+1} - \Phi_{ij+1}^k) - (\Phi_{ij+2}^{k+1} - \Phi_{ij+2}^k)]; \quad (1)$$

$$\Phi_{ij}^{k+1} = \Phi_{ij}^k + \theta [3(\Phi_{ij+1}^{k+1} - \Phi_{ij+2}^{k+1}) + \Phi_{ij+3}^{k+1}] - \theta [3(\Phi_{ij+1}^k - \Phi_{ij+2}^k) + \Phi_{ij+3}^k]. \quad (2)$$

Здесь θ – итерационный параметр компенсации ($0 \leq \theta \leq 1$), k – номер итерации, а экстраполяция проводится вдоль линии $i = \text{const}$ сеточного разбиения области ре-

шения. Формулы (1), (2), являясь, по сути, разложением искомой функции в ряд Тейлора по рядом лежащим узлам, позволяют замкнуть итерационный алгоритм построения решения, не добавляя никакой новой информации и, тем самым, не переопределяя исходную систему уравнений. Легко видеть, что в случае сходимости решения $\lim_{k \rightarrow \infty} \Phi_{ij}^k = \Phi_{ij}^*$ они вырождаются в тождества типа $\Phi_{ij}^* \cong \Phi_{ij}^*$. Основ-

ным недостатком этих формул является их приближенный характер на протяжении всего итерационного процесса. Следовательно, при неудачном стечении обстоятельств, например при решении СЛАУ с плохо обусловленной матрицей, ошибка, порождаемая приближенным соотношением (1) или (2) может на некотором этапе сходимости решения привести к неуклучшаемой ситуации. Например, в [10] показано как при решении тестовой задачи с плохо обусловленной матрицей отношение норм текущей невязки к первоначальной быстро достигало величины $\varepsilon_0 \approx 2,0 \times 10^{-5}$ и при дальнейших итерациях уже никак не менялось.

Как уже отмечалось, в цепочке последовательных преобразований системы полинейного рекуррентного метода только один этап является приближенным. В данном случае это использование формулы (1) или формулы (2). Если бы вместо них было бы использовано некоторое точное соотношение, связывающее компоненты искомого вектора решения, то метод утратил бы свой итерационный характер и стал бы прямым. В силу того, что построить такое соотношение на данный момент не удастся, можно принять компромиссный вариант, а именно – использовать замыкающее соотношение с переменными коэффициентами, которые по мере исполнения итераций стремились бы к некоторым предельным величинам, точно связывающим точные значения компонентов вектора решения. В качестве таких замыкающих соотношений удобно использовать двухточечные связи из метода В.Г. Зверева [3], имеющие следующий вид:

$$\Phi_{ij}^{k+1} = \xi_{ij}^k \Phi_{ij+1}^{k+1} + \eta_{ij}^k, \quad (3)$$

здесь ξ_{ij}^k, η_{ij}^k – коэффициенты, принимающие асимптотически точные значения в случае сходимости решения. То есть, если имеют место пределы $\lim_{k \rightarrow \infty} \xi_{ij}^k = \xi_{ij}^*, \lim_{k \rightarrow \infty} \eta_{ij}^k = \eta_{ij}^*, \lim_{k \rightarrow \infty} \Phi_{ij}^k = \Phi_{ij}^*$, то точно выполняются соотношения

$$\Phi_{ij}^* = \xi_{ij}^* \Phi_{ij+1}^* + \eta_{ij}^*. \quad (4)$$

Следуя методике [3], несложно получить расчетные формулы вычисления ξ_{ij}^k, η_{ij}^k . Пусть разностная схема исходной СЛАУ, построенная методом контрольного объема [11] для узла (i, j) имеет вид

$$a_{P_{ij}} \Phi_{ij} = a_{W_{ij}} \Phi_{i-1j} + a_{E_{ij}} \Phi_{i+1j} + a_{S_{ij}} \Phi_{ij-1} + a_{N_{ij}} \Phi_{ij+1} + b_{ij}. \quad (5)$$

Используя механизм принципа компенсации, можно добавить в обе части (5) выражение $-\theta(a_{W_{ij}} + a_{E_{ij}})\Phi_{ij}$. Тогда с учетом (3) уравнение (5) приобретет вид

$$\begin{aligned} \left[a_{P_{ij}} - \theta(a_{E_{ij}} + a_{W_{ij}}) \right] \Phi_{ij} &= a_{N_{ij}} \Phi_{ij+1} + a_{W_{ij}} \Phi_{i-1j} + a_{E_{ij}} \Phi_{i+1j} - \\ &- \theta(a_{W_{ij}} + a_{E_{ij}}) \Phi_{ij}^k + a_{S_{ij}} (\xi_{ij-1}^k \Phi_{ij} + \eta_{ij-1}^k) + b_{ij}, \end{aligned} \quad (6)$$

или окончательно

$$\begin{aligned} & \left[a_{P_{ij}} - \theta(a_{E_{ij}} + a_{W_{ij}}) - \xi_{ij-1}^k a_{S_{ij}} \right] \Phi_{ij} = a_{N_{ij}} \Phi_{ij+1} + \\ & + \left[b_{ij} + \eta_{ij-1}^k a_{S_{ij}} + a_{W_{ij}} \Phi_{i-1j}^k + a_{E_{ij}} \Phi_{i+1j}^k - \theta(a_{W_{ij}} + a_{E_{ij}}) \Phi_{ij}^k \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

Сравнение (7) с (3) позволяет записать рекуррентные двухточечные связи:

$$\begin{aligned} \xi_{ij}^k &= a_{N_{ij}} / \left[a_{P_{ij}} - \theta(a_{W_{ij}} + a_{E_{ij}}) - \xi_{ij-1}^k a_{S_{ij}} \right]; \\ \eta_{ij}^k &= \frac{b_{ij} + \eta_{ij-1}^k a_{S_{ij}} + a_{W_{ij}} \Phi_{i-1j}^k + a_{E_{ij}} \Phi_{i+1j}^k - \theta(a_{W_{ij}} + a_{E_{ij}}) \Phi_{ij}^k}{a_{P_{ij}} - \theta(a_{W_{ij}} + a_{E_{ij}}) - \xi_{ij-1}^k a_{S_{ij}}}. \end{aligned} \quad (8)$$

Если итерационный параметр компенсации θ зависит от номера итерации, например, при использовании технологии его адаптации под очередное приближение вектора решения $\{\Phi_{ij}^k\}$ [9,12], то итерируются оба коэффициента в соотношении (3). В противном случае вектор $\{\xi_{ij}\}$ вычисляется один раз, а итерируется только вектор свободного члена $\{\eta_{ij}^k\}$. Нетрудно видеть, что при сходимости решения существуют и пределы коэффициентов двухточечных связей. Иными словами, если бы заранее были известны векторы $\{\xi_{ij}^*\}$ и $\{\eta_{ij}^*\}$, то подстановка их в общий алгоритм полинейного рекуррентного метода позволила бы сразу без итераций построить вектор решения. Отсюда следует, что совершенно не обязательно, чтобы ξ_{ij}^k и η_{ij}^k рассчитывались по формулам (8). Подойдет любой алгоритм, в том числе и не зависящий явно от очередного приближения Φ_{ij}^k , лишь бы он позволял получать предельные значения коэффициентов, корректные с точки зрения выполнения соотношения (4). В этом смысле рассматриваемый метод (в дальнейшем обозначаемый как *LRz*) перекликается с основной идеей метода Б.Н. Четверушкина [13], в котором, как известно, итерируется не сам вектор решения, а коэффициенты некоторого вычислительного представления его компонент в виде их линейной взаимозависимости. И только после сходимости этих коэффициентов с заданной точностью производится окончательное вычисление компонент искомого вектора решения за один проход по расчетной области.

В методе *LRz* итерируются как сам вектор решения, так и коэффициенты двухточечной связи замыкающего соотношения (3). Именно эта особенность обеспечивает данному варианту полинейного рекуррентного метода повышенные «разрешающие» свойства. Действительно, в варианте *LRz* замыкающие соотношения по мере сходимости решения становятся практически точными, в то время как в рассмотренных ранее вариантах (*LR1*, *LR2*) они продолжают оставаться приближенными, по сути – разложениями в ряд Тейлора с первым (*LR1*) или вторым (*LR2*) порядком точности [8, 9]. Отсюда следует, что по мере сходимости решения экстраполяционная формула (3) в *LRz* все более и более уточняется, что и приводит, в конечном счете, к достижению заданной точности решения безотносительно к количеству затраченных на это итераций. Иными словами, реализуется «двухходовый» механизм сходимости: уточняется решение \rightarrow уточняется экстраполяционные соотношения, уточняется экстраполяционные соотношения \rightarrow уточняется решение и т.д. В то время как в вариантах *LR1* и *LR2* подобный механизм «одноходовой»: уточняется только решение, а коэффициенты экстраполяци-

онных соотношений остаются неизменно приближенными (см. (1) – (2)). Отсюда следует, что, в принципе, нельзя исключить прекращение процесса сходимости решения в районе некоторого критического ϵ_0 , что и произошло при решении тестовой задачи в работе [10].

Вычислительный эксперимент. Для сравнительного исследования свойств варианта *LRz* была решена следующая краевая задача Дирихле в единичной квадратной области:

$$(v^x \Phi_x)_x + (v^y \Phi_y)_y = S(x, y), \quad (9)$$

$$\Phi|_{\Gamma} = 0.$$

Коэффициенты при старших производных и точное решение задачи известны:

$$v^x = 1 + 2[(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2], \quad v^y = 1 + 2[0.5 - (x - 0.5)^2 - (y - 0.5)^2],$$

$$\Phi(x, y) = 256[xy(1-x)(1-y)]^2.$$

Правая часть $S(x, y)$ вычислялась путем подстановки v^x , v^y и $\Phi(x, y)$ в уравнение (9). Сеточное разбиение области составляло $401 \times 401 = 160\,801$ узлов. Сетка равномерная. Решение считалось найденным при выполнении условия сходимости $\|R^k\|_2 / \|R^0\|_2 < \epsilon$, где R^k , R^0 – соответственно текущая и начальная невязки, а ϵ – заданная точность решения, которая в данном и последующих расчетах принималась равной 10^{-10} . На рис. 2 представлены зависимости отношений норм невязок от номера итерации при решении данной задачи вариантами полинейного рекуррентного метода: *LR1* ($\theta = 0,99960$), *LR2* ($\theta = 0,9999970$) и *LRz* ($\theta = 0,9999250$). В скобках приведены значения итерационного параметра компенсации для каждого из вариантов, позволивших достичь максимальной скорости сходимости. Тем самым была проведена своеобразная «оценка сверху» возможностей каждого из вариантов полинейного рекуррентного метода. Видно, что кривые вариантов *LR1* и *LR2* ведут себя почти одинаково и для достижения необходимой точности потребовалось по 25 итераций, в то время как вариант *LRz* построил решение за 15 итераций.

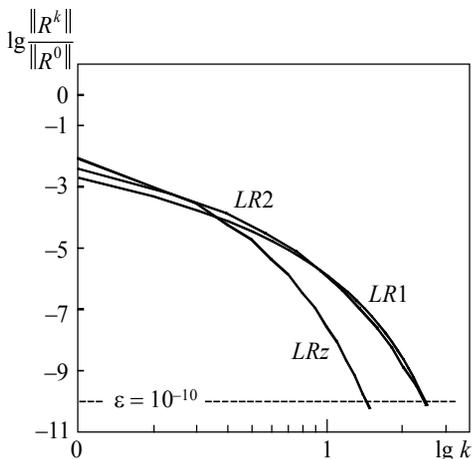


Рис. 2

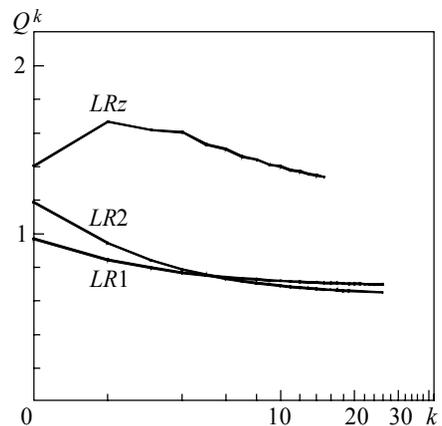


Рис. 3

Как известно, важной характеристикой процесса сходимости является величина средней скорости сходимости, вычисляемая по формуле [3]

$$Q^k = -\frac{1}{k} \ln \left(\frac{\|Z^k\|_2}{\|Z^0\|_2} \right), \quad (10)$$

где Z^k, Z^0 – соответственно текущая и начальная погрешности решения. На рис. 3 сравниваются кривые средних скоростей сходимости вариантов $LR1$, $LR2$ и LRz . Видно, что графики вариантов $LR1$ и $LR2$, так же как и на рис. 2, ведут себя почти одинаково, что вполне естественно. А график LRz расположен заметно выше, что тоже понятно, поскольку этот расчет по количеству итераций сошелся почти в два раза быстрее. Обращает на себя внимание тот факт, что по порядку величины в рассматриваемых расчетах средняя скорость сходимости Q^k может быть оценена как $O(1)$. Более подробное исследование вопроса зависимости средней скорости сходимости от количества решаемых уравнений показало, что при увеличении числа уравнений в 100 раз: сетка $41 \times 41 \rightarrow$ сетка 401×401 , – средняя скорость сходимости уменьшается в 3 раза: $Q^k \approx 4,0 \rightarrow Q^k \approx 1,4$.

Следует заметить, что минимальное число итераций еще не означает минимальные затраты машинного времени. В проведенных расчетах на варианты с применением $LR1$ и $LR2$ потребовалось 6,0 с, а на вариант LRz – 8,5 с. Получается, что на проведение одной итерации варианту LRz требуется приблизительно в два раза больше времени, чем вариантам $LR1$ и $LR2$.

Для демонстрации улучшенных «разрешающих» свойств варианта LRz были решены две задачи повышенной сложности из [4]. Первая из этих задач формулируется в единичном квадрате следующим образом:

$$-(D\Phi_x)_x - (D\Phi_y)_y = 1; \quad (11)$$

$$\Phi|_{y=0} = 1, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_{y=1} = 1, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=0} = -1, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=1} = 1.$$

Причем функция D определяется как $D = 1000$ для $0,1 \leq x, y \leq 0,9$ и $D = 1$ в оставшейся части области. Шаг равномерной сетки равен $1/150$. Графики отношений норм невязок в зависимости от номера итерации представлены на рис. 4. Видно, что вариант $LR1$ ($\theta = 0,999988$) сошелся приблизительно за 160 итераций, вариант LRz ($\theta = 0,999930$) – за ≈ 1900 итераций, а вариант $LR2$ ($\theta = 0,999990$) за 2000 итераций достиг отношения $\|R^k\|_2 / \|R^0\|_2 \sim 10^{-4}$. Продолжение счета вариантом $LR2$ позволили достичь значений по точности $\sim 10^{-8}$ за 5000 итераций, после чего вычислительный процесс был прекращен. Следует заметить, что оригинальным методом бисопряженных градиентов [4] решить данную задачу не удалось по причине расходимости решения [10].

Коэффициенты уравнения определяются следующим образом: $B(x, y) = 2 \exp[2(x^2 + y^2)]$; $F = 100$ в небольшой квадратной области в центре единичного квадрата, в основной его части $F = 0$; коэффициент A по области меняется кусочно-постоянным образом и его значение скачкообразно варьируется от 10^{-5} до 10^4 согласно схеме, приведенной в [4] или [10]. Шаг равномерной сетки составляет $1/128$. Как и в предыдущей задаче, расчеты проводились вариантами полинейного рекуррентного метода $LR1$ ($\theta = 0,950$), $LR2$ ($\theta = 0,550$), LRz ($\theta = 0,999927$). На

рис. 5 изображены соответствующие кривые сходимости решения. Видно, что отношения $\|R^k\|_2 / \|R^0\|_2$ для вариантов *LR1* и *LR2* достаточно быстро, через $30 \div 100$ итераций, достигают значения $\approx 2,0 \times 10^{-5}$, после чего перестают уменьшаться. В то время как вариант *LRz* свел решение к требуемой точности за 1680 итераций. Обращают на себя внимание относительно невысокие значения итерационного параметра компенсации для вариантов *LR1* и *LR2*. Данные значения θ являются наибольшими, при которых расчеты выполнялись устойчиво с максимальной скоростью сходимости. При дальнейших малых увеличениях параметра компенсации происходил аварийный останов вычислительного процесса. Также следует отметить, что в отличие от предыдущей, данная задача была успешно решена различными вариантами метода бисопряженных градиентов за $\approx 70 \div 120$ итераций.

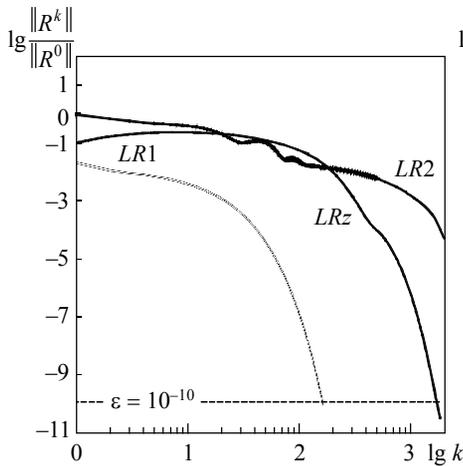


Рис. 4

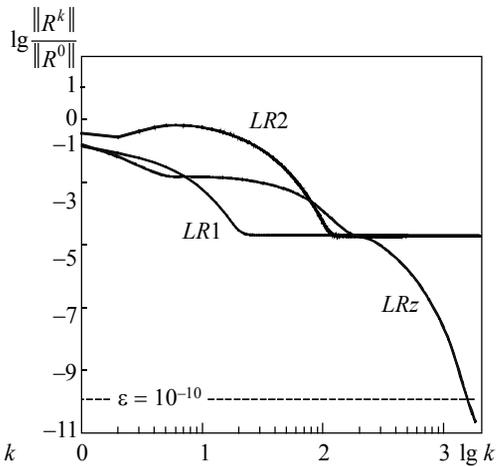


Рис. 5

Вторая краевая задача повышенной сложности формулируется в единичном квадрате следующим образом:

$$-(A\Phi_x)_x - (A\Phi_y)_y + B(x, y)\Phi_x = F; \quad (12)$$

$$\Phi|_{y=1} = 0, \quad \Phi|_{y=0} = 1, \quad \Phi|_{x=1} = 1, \quad \Phi|_{x=0} = 1.$$

Выводы

На основании изложенного материала можно сделать следующие выводы.

Разработан вариант *LRz* полинейного рекуррентного метода с асимптотически точными замыкающими соотношениями.

Для достижения заданной точности решения для варианта *LRz* требуется приблизительно столько же машинного времени, сколько и для вариантов *LR1* и *LR2* полинейного рекуррентного метода.

Время, необходимое для реализации одной итерации вариантом *LRz* при прочих равных условиях, приблизительно в два раза превосходит аналогичное время вариантов *LR1* и *LR2*.

Вариант *LRz* обладает более высокими «разрешающими» способностями по отношению к вариантам *LR1* и *LR2* безотносительно к их скорости сходимости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Самарский А.А., Вабичевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. М.: Эдиториал УРСС, 1999. 248 с.
2. Yousef Saad. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. N.Y.: PWS Publ., 1996. 460 p.
3. Зверев В.Г. Модифицированный полинейный метод решения разностных эллиптических уравнений // ЖВМ и МФ. 1998. Т. 38. № 9. С. 1553 – 1562.
4. Van der Vorst H.A. BI-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems // SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1992. V. 13. № 2. P. 631 – 644.
5. Старченко А.В. Сравнительный анализ некоторых итерационных методов для численного решения пространственной краевой задачи для уравнений эллиптического типа // Вестник ТГУ. Бюллетень оперативной научной информации. Томск: ТГУ, 2003. № 10. С. 70 – 80.
6. Ильин В.П. Методы бисопряженных направлений в подпространствах Крылова // Сибирский журнал индустриальной математики. 2008. Т. 11. № 4. С. 47 – 60.
7. Ильин В.П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Физматлит, 1995. 288 с.
8. Фомин А.А., Фомина Л.Н. Полинейный рекуррентный метод решения СЛАУ с пятидиагональной матрицей // Четвертая Сибирская школа-семинар по параллельным и высокопроизводительным вычислениям (Томск, 9 – 11 октября 2007 г.). Томск: Дельтаплан, 2008. С. 192 – 201.
9. Фомина Л.Н. Использование полинейного рекуррентного метода с переменным параметром компенсации для решения разностных эллиптических уравнений // Вычислительные технологии. ИВТ СО РАН. 2009. Т. 14. № 4. С. 108 – 120.
10. Фомин А.А., Фомина Л.Н. Сравнение эффективности высокоскоростных методов решения разностных эллиптических СЛАУ // Вестник ТГУ. Математика и механика. 2009. № 2. С. 71 – 77.
11. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.
12. Zverev V.G. About the iteration method for solving difference equations // Lecture notes in computer science. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. V. 3401. P. 621 – 628.
13. Четверушкин Б.Н. Об одном итерационном алгоритме решения разностных уравнений // ЖВМ и МФ. 1976. Т. 16. № 2. С. 519 – 524.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

ФОМИН Александр Аркадьевич – кандидат физико-математических наук, руководитель отдела информационных технологий, ОАО «Издательско-полиграфическое предприятие «Кузбасс». E-mail: fomin_aa@mail.ru

ФОМИНА Любовь Николаевна – старший преподаватель кафедры вычислительной математики Кемеровского государственного университета. E-mail: lubafomina@mail.ru

Статья принята в печать 10.05.2010 г.