Неявный итерационный полинейный рекуррентный метод с «плоской» экстраполяцией приращения решения

А.А.Фомин, Л.Н. Фомина
Институт угля СО РАН, Кемерово
Кемеровский государственный университет

Предлагается новый алгоритм полинейного рекуррентного метода, который обладает возможностью естественного распространения на трехмерные задачи. Анализируется его эффективность.

На современном этапе развития численных методов решения многомерных задач математической физики наиболее востребованы методы, позволяющие эффективно решать трехмерные по пространству задачи. Понятно, что трудоёмкость решения подобных задач резко возрастает по отношению к двумерным хотя бы потому, что количество уравнений СЛАУ в этом случае увеличивается как минимум на порядок. В связи с этим возникает настоятельная необходимость распространения неявного итерационного полинейного рекуррентного метода, демонстрирующего высокую эффективность при решении двумерных задач, на трехмерный случай.

Однако здесь имеет место проблема, связанная с тем, что разработанные на данный момент четыре алгоритма метода не обладают свойством естественного распространения на системы уравнений с семью диагональными матрицами. Иными словами, использование этих алгоритмов для решения пространственных задач связано с неоправданно большим увеличением доли приближенных преобразований исходной матрицы при применении принципа компенсации и, соответственно, снижением доли эквивалентных преобразований. А, как известно, высокая эффективность неявного итерационного полинейного рекуррентного метода при решении СЛАУ с пятидиагональными матрицами (двумерный случай) обусловлена тем, что всего лишь один из этапов преобразований матрицы системы является приближенным, а все остальные – эквивалентными [1].

Следовательно, требуется разработать новый способ приближенного замыкания преобразований, основные принципы которого сохранялись бы при переходе от двумерных задач к пространственным. Тем самым минимизировалась бы доля приближенных преобразований матрицы системы в пространственном случае и, соответственно, эффективность метода оставалась бы на высоком уровне. При этом по-

нятно, что прежде чем реализовывать новый алгоритм для трехмерных задач, он должен быть всесторонне протестирован на решениях двумерных.

Такой алгоритм был создан и получил наименование LRe2. Суть его приближенного этапа состоит в приравнивании значений искомой функции в центре сеточного прямоугольника, полученных путем интерполяции значений функции в диагонально противоположных углах прямоугольника (узлах сетки). Из данного соотношения, записанного в плоскости сеточного прямоугольника, получается экстраполяционная формула для значения искомой функции в требуемом узле – вершине прямоугольника.

Также был разработан ускоренный в подпространствах Крылова вариант LRe2 – алгоритм LRe2sK. Сравнительный анализ вновь созданных алгоритмов LRe2 и LRe2sK проведён на решении ряда представительных задач [2, 3]. Необходимо понимать, что LRe2 не позиционируется в качестве еще одного алгоритма решения двумерных задач. Даже если окажется, что он будет в разумных пределах уступать по производительности уже существующим алгоритмам полинейного рекуррентного метода, то с этим можно будет согласиться, памятуя о том, что данный вариант метода обладает возможностью естественного распространения на трехмерные задачи.

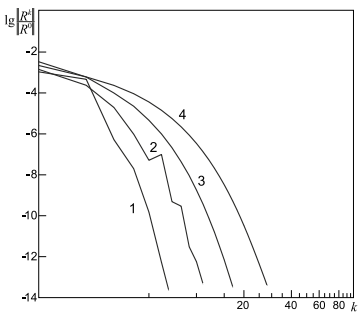

Рис. 1

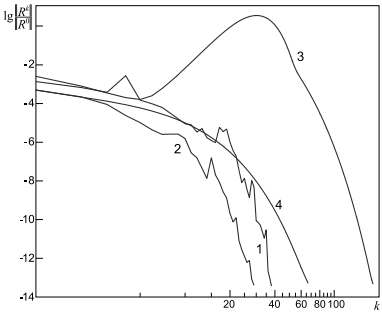

Рис. 2

Зависимость отношения норм невязок от номера итерации при решении первой (рис. 1 – сетка 101×101) и второй (рис. 2 – сетка 1001×1001) тестовых задач. Номера кривых соответствуют решению методом: *1* – LR1sK [2]; *2* – LRe2sK; *3* – LR1 [1]; *4* – LRe2

На рис. 1 приведен график решения первой тестовой задачи [2, 3], разностная дискретизация которой приводит к системе уравнений с самосопряженной матрицей. При решении данной задачи с условиями Дирихле на сетке 101×101 (число обусловленности матрицы СЛАУ $M_A = 5{,}9\times10^3$) четыре алгоритма полинейного рекуррентного метода

продемонстрировали высокие показатели по количеству итераций и по времени расчёта: каждый алгоритм затратил меньше 0,1 с для достижения условия $\|R^k\|/\|R^0\| < \varepsilon$. Здесь R – невязка; ε – наперёд заданная точность. В данном случае $\varepsilon = 5\times10^{-14}$. Использование более подробной сетки 1001×1001 ($M_A = 5{,}9\times10^5$) не изменило качество поведения кривых, только увеличив примерно вдвое количество итераций.

Разностная дискретизация второй тестовой задачи [2,3] приводит к системе уравнений с несамосопряженной матрицей. Результаты расчётов на грубой (101×101, $M_A = 9{,}4\times10^4$) и подробной сетках (1001×1001, $M_A = 9{,}4\times10^6$) в целом повторяют предыдущие результаты с той лишь разницей, что на подробной сетке новый алгоритм LRe2 показал несколько более быструю сходимость по отношению к контрольному LR1 как по итерациям, так и по затратам машинного времени. При этом заданная точность $\varepsilon = 5\times10^{-14}$ алгоритмом LRe2sK достигается за 29 итераций и временем 19,2 с, а алгоритмом LRe2 – за 67 итераций и временем 23,7 с.

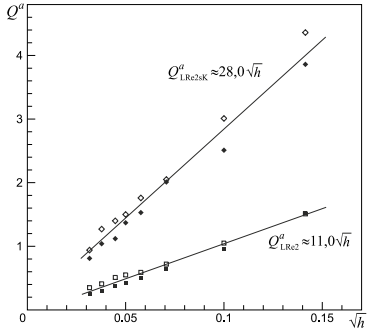

Рис. 3

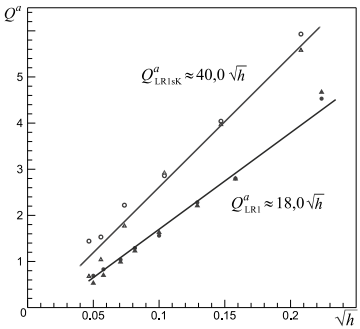

Рис. 4

Предельное значение средней скорости сходимости в зависимости от шага сеточного разбиения области. Расчеты проведены алгоритмами LR1, LR1sK, LRe2 и LRe2sK. Граничные условия первого рода, $\varepsilon = 5\times10^{-14}$, $\Phi^0 = 1$. ■ ♦ – первая тестовая задача, ▪ ◊ – вторая тестовая задача

Эффективность алгоритма метода удобно характеризовать зависимостью предельного значения средней скорости сходимости Q^a от шага сеточного разбиения. Для полинейного рекуррентного метода такие зависимости от квадратного корня из шага сетки очень хорошо аппроксимируются отрезками прямых. Понятно, что чем круче наклон такой прямой, тем эффективнее алгоритм метода. На приведенных графиках рис. 3 и 4 видно, что коэффициенты наклона алгоритма LRe2 (см. рис. 3) приблизительно в $1{,}5 \div 2$ раза меньше соответствующих наклонов контрольного алгоритма LR1 (см. рис. 4).

Для того чтобы более глубоко изучить новый алгоритм, определив его предельные возможности, необходимо попытаться решить им более сложные задачи. Такими задачами являются так называемые задачи Ван-дер-Ворста [4], которые удобно обозначить как вторая и четвертая модельные задачи.

Результаты расчетов второй модельной задачи с точностью $\varepsilon = 10^{-10}$ на оригинальной сетке 150×150 [4] (рис. 5, число обусловленности $M_A = 1{,}8\times10^{7}$) и подробной сетке 1001×1001 (рис. 6, число обусловленности $M_A = 6{,}0\times10^{8}$) говорят о том, что, с одной стороны, темпы сходимости нового алгоритма LRe2 продолжают в 1,5 ÷ 2 раза отставать от алгоритма LR1; а с другой стороны, разрешающие возможности собственно LRe2 на подробной сетке оказались выше, чем у LR1, поскольку методом LR1, в отличие от нового LRe2, не удалось построить решение с наперед заданной точностью. При этом более впечатляющим выглядит результат ускорения алгоритмов в подпространствах Крылова – не в 2 ÷ 3 раза, как для первой и второй тестовых задач, а фактически на порядок.

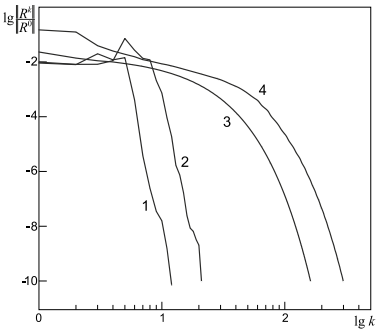

Рис. 5

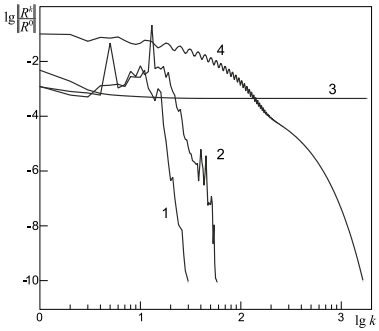

Рис. 6

Зависимость отношения норм невязок от номера итерации при решении второй модельной задачи Ван-дер-Ворста. $\varepsilon = 10^{-10}$. Сетка: рис. 5 – 150×150; рис. 6 – 1001×1001. Номера кривых соответствуют решению методом: *1* – LR1sK; *2* – LRe2sK; *3* – LR1; *4* – LRe2

При расчёте самой сложной, четвёртой модельной задачи Ван-дер-Ворста, в которой перепад коэффициентов при старшей производной доходит до 9 порядков, алгоритм LRe2 позволил получить решение с заданной точностью $\varepsilon = 10^{-10}$ всего за 108 итераций, в то время как LR1 «остановился» на $\|R^k\|/\|R^0\| \approx 2{,}0\times10^{-5}$. На рис. 7 хорошо видна динамика развития процесса сходимости в виде зависимости отношения норм невязок от номера итерации на оригинальной сетке 128×128 ($M_A = 3{,}3\times10^{8}$) [4]. Применение ускоренных алгоритмов LRe2sK и

LR1sK позволило резко сократить количество итераций, причем LRe2sK слегка «обошел» LR1sK: 14 итераций против 15.

Что касается процесса сходимости до заданной точности $\varepsilon = 10^{-10}$ на подробной сетке 1001×1001 ($M_A = 2{,}0\times10^{10}$), то можно сказать, что система оказалась неразрешимой для рассматриваемых релаксационных алгоритмов LR1 и LRe2 (рис. 8), в то время как ускоренные варианты релаксационных алгоритмов LR1sK (28 итераций) и LRe2sK (51 итерация) успешно построили решение с требуемой точностью. Как и ранее, количество необходимых итераций при использовании LR1sK оказалось приблизительно в два раза меньше, чем при использовании LRe2sK.

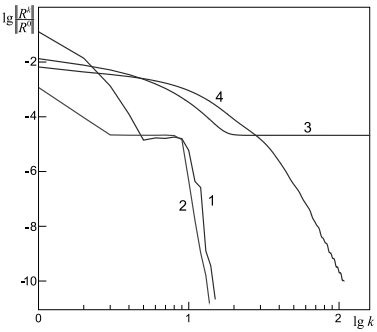

Рис. 7

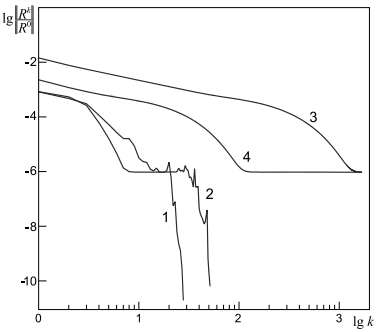

Рис. 8

Зависимость отношения норм невязок от номера итерации при решении четвёртой модельной задачи Ван-дер-Ворста. $\varepsilon = 10^{-10}$. Номера кривых соответствуют решению методом: *1* – LR1sK; *2* – LRe2sK; *3* – LR1; *4* – LRe2

Проведённый сравнительный анализ вновь созданных алгоритмов LRe2 и LRe2sK с их ближайшими аналогами из серии алгоритмов неявного итерационного полинейного рекуррентного метода LR1 и LR1sK позволяет сделать следующие выводы:

1. Алгоритмы LRe2 и его ускоренная версия LRe2sK сопоставимы по эффективности с алгоритмами LR1 и LR1sK, уступая им по итерациям (временам) сходимости в среднем в полтора-два раза. В отдельных случаях (не самосопряженная матрица системы, подробные сетки) эффективность LRe2 (LRe2sK) может превосходить эффективность LR1 (LR1sK).

2. Разрешающие возможности (минимально реализуемые значения отношений нормы текущей невязки к норме начальной невязки) алгоритмов LRe2 и LRe2sK аналогичны возможностям алгоритмов LR1 и LR1sK.

3. Предельное значение средней скорости сходимости при решении задачи с условиями Дирихле для LRe2 составляет $Q^a \approx 11{,}0\sqrt{h}$, а для LRe2sK – $Q^a \approx 28{,}0\sqrt{h}$, где h – сеточный шаг, в то время как для LR1 и LR1sK на тех же задачах они соответственно составляют $Q^a \approx 18{,}0\sqrt{h}$ и $Q^a \approx 40{,}0\sqrt{h}$.

4. С учетом полученных результатов принцип «плоской» экстраполяции, использованный в приближенном этапе алгоритма LRe2, может быть рекомендован для построения «пространственного» варианта неявного итерационного полинейного рекуррентного метода.

Литература

1. **Фомина Л.Н.** Использование полинейного рекуррентного метода с переменным параметром компенсации для решения разностных эллиптических уравнений // Вычислительные технологии. – 2009. – Т. 14, № 4. – С. 108–120.
2. **Фомин А.А.** Ускорение полинейного рекуррентного метода в подпространствах Крылова / А.А. Фомин, Л.Н. Фомина // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2011. – № 2. – С. 45–54.
3. **Фомин А.А.** Сравнение эффективности высокоскоростных методов решения разностных эллиптических СЛАУ / А.А. Фомин, Л.Н. Фомина // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2009. – № 2. – С. 71–77.
4. **Van der Vorst H.A.** BI-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linerar systems // SIAM J. Sci. Stat. Comput. – 1992. – Vol. 13, № 2. – P. 631–644.