

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА НЕПОЛНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ ХОЛЕССКОГО — СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ЛАПЛАСА*

В. В. Альчиков, В. И. Быков

Красноярский государственный технический университет, Россия

e-mail: sek@ksc.krasn.ru

The problems of using the Choleski's incomplete factorization — conjugate gradients method for the iterational solution of three dimensional Laplace equations in bit-homogeneous surroundings are discussed.

Решение уравнения Лапласа

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0 \quad (1)$$

в трехмерной области Ω с заданными граничными условиями в результате аппроксимации сводится к построению решения системы линейных алгебраических уравнений

$$AU = b \quad (2)$$

большого порядка с семидиагональной симметричной положительно определенной матрицей A . При этом возникают проблемы сходимости, времени счета и необходимого объема памяти компьютера. Для решения алгебраических систем известны методы неполной факторизации, обладающие рекордной скоростью сходимости итерационных процессов [1–4]. Один из этих методов используется в данной работе.

Рассмотрим задачу решения уравнения Лапласа (1), в общем случае кусочно-однородной относительно некоторого физического параметра p (электропроводность, магнитная проницаемость, упругость и др.) среды, заполняющей область Ω . На каждой из поверхностей S разрыва параметра p должны выполняться граничные условия

$$U^+ = U^-, \quad (3)$$

$$p^+ \frac{\partial U^+}{\partial n} = p^- \frac{\partial U^-}{\partial n}, \quad (4)$$

где p^+ , U^+ и p^- , U^- — значения параметра p и функции U на внутренней и внешней сторонах поверхности S соответственно. Такая задача эквивалентна задаче определения

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ.

© В. В. Альчиков, В. И. Быков, 2000.

электрических потенциалов U поля постоянного тока, когда параметром p является электропроводность среды σ . Граничные условия (3), (4) в данном случае означают непрерывность потенциала и тока, нормального к поверхности S .

Пусть Ω — параллелепипед с гранями, параллельными координатным плоскостям. Используя электрическую модель кусочно-однородной среды, разобьем Ω плоскостями, параллельными координатным плоскостям, на элементарные объемы $V_{i,j,k}$ с заданными значениями электропроводностей $\sigma_{i,j,k}$. Индексы i, j, k отвечают номерам объемов $V_{i,j,k}$ вдоль осей координат. Нумерацию вдоль каждой из осей OX, OY, OZ будем вести, начиная с 2 и кончая $n-1, m-1, l-1$ соответственно. Узлы с индексами 1, n, m, l являются фиктивными (расположенными вне исходного параллелепипеда). Каждый из объемов $V_{i,j,k}$ можно рассматривать как однородный проводник с сопротивлениями $Rx_{i,j,k}, Ry_{i,j,k}, Rz_{i,j,k}$ в направлениях осей координат, определяемыми по формуле для сопротивления провода:

$$Rx_{i,j,k} = \frac{hx_i}{\sigma_{i,j,k}hy_jhz_k}, \quad Ry_{i,j,k} = \frac{hy_j}{\sigma_{i,j,k}hx_ihz_k}, \quad Rz_{i,j,k} = \frac{hz_k}{\sigma_{i,j,k}hx_ihy_j}. \quad (5)$$

Сопротивления, пересекаясь в центре объема $V_{i,j,k}$, образуют узлы электрической сетки. Для каждого узла в соответствии с законами Кирхгофа и Ома можно записать уравнение

$$\begin{aligned} \frac{U_{i-1,j,k} - U_{i,j,k}}{Rx_{i-1,j,k} + Rx_{i,j,k}} + \frac{U_{i+1,j,k} - U_{i,j,k}}{Rx_{i+1,j,k} + Rx_{i,j,k}} + \frac{U_{i,j-1,k} - U_{i,j,k}}{Ry_{i,j-1,k} + Ry_{i,j,k}} + \frac{U_{i,j+1,k} - U_{i,j,k}}{Ry_{i,j+1,k} + Ry_{i,j,k}} + \\ + \frac{U_{i,j,k-1} - U_{i,j,k}}{Rz_{i,j,k-1} + Rz_{i,j,k}} + \frac{U_{i,j+1,k} - U_{i,j,k}}{Rz_{i,j+1,k} + Rz_{i,j,k}} = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

$(i = 2, 3, \dots, n-1; \quad j = 2, 3, \dots, m-1; \quad k = 2, 3, \dots, l-1),$

где каждое слагаемое — величина тока, втекающего в узел (i, j, k) из соседнего узла; в знаменателях — выражения для сопротивлений между узлами; $U_{i,j,k}$ — значения искомых потенциалов в узлах. Уравнение (6) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} k1_{i-1,j,k}U_{i-1,j,k} + k2_{i,j-1,k}U_{i,j-1,k} + k3_{i,j,k-1}U_{i,j,k-1} + \\ + k1_{i,j,k}U_{i+1,j,k} + k2_{i,j,k}U_{i,j+1,k} + k3_{i,j,k}U_{i,j,k+1} + k0_{i,j,k}U_{i,j,k} = R_{i,j,k}, \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$k1_{i,j,k}, \quad k2_{i,j,k}, \quad k3_{i,j,k} \leq 0, \quad (8)$$

$$k0_{i,j,k} = |k1_{i-1,j,k} + k1_{i,j,k} + k2_{i,j-1,k} + k2_{i,j,k} + k3_{i,j,k-1} + k3_{i,j,k}|. \quad (9)$$

Условия Неймана на границе параллелепипеда учитываются путем переноса известных слагаемых (6) в правые части и приравнивания нулю соответствующих коэффициентов в (7), (9). Для граничных условий Дирихле значения $U_{1,j,k}, U_{n,j,k}, U_{i,1,k}, U_{i,m,k}, U_{i,j,1}, U_{i,j,l}$ определяются в момент задания начальных приближений и не подлежат изменению при работе программы. Очевидно, что граничные условия на плоскостях разрыва электропроводности выполняются автоматически при достаточно мелком разбиении параллелепипеда Ω на элементарные объемы.

Рассмотрим методику формирования элементов матрицы A . На ее диагонали расположим коэффициенты $k0_{i,j,k}$ в порядке первоочередного изменения индекса i от 2 до $n-1$, затем j от 2 до $m-1$ и k от 2 до $l-1$. Последним диагональным элементом является коэффициент $k0_{n-1,m-1,l-1}$. В такой же последовательности нумеруются искомые значения

$U_{i,j,k}$. В каждой строке матрицы ненулевыми являются элементы на местах, соответствующих неизвестным величинам $U_{i-1,j,k}$, $U_{i,j-1,k}$, $U_{i,j,k-1}$, $U_{i+1,j,k}$, $U_{i,j+1,k}$, $U_{i,j,k+1}$. Остальные элементы матрицы полагаем равными нулю. Полученная семидиагональная матрица симметрична. Из условий (8), (9) следует также ее положительная определенность. В памяти компьютера хранятся трехмерные массивы коэффициентов $k0_{i,j,k}$, $k1_{i,j,k}$, $k2_{i,j,k}$, $k3_{i,j,k}$ и свободных членов $R_{i,j,k}$.

Известно [1–3], что скорость сходимости метода сопряженных градиентов определяется числом обусловленности матрицы A с собственными значениями $\lambda_n \geq \dots \geq \lambda_1 > 0$:

$$\kappa = \text{cond}(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_n}{\lambda_1}. \quad (10)$$

Чем ближе κ к 1, тем выше скорость сходимости.

Введем предобусловленную матрицу

$$\hat{A} = SAS^T, \quad (11)$$

где S — невырожденная матрица, выбранная таким образом, что выполняется условие

$$\text{cond}(\hat{A}) < \text{cond}(A). \quad (12)$$

Рассмотрим решение системы

$$\hat{A}\tilde{y} = \hat{b} \quad (13)$$

($\tilde{y} = (S^T)^{-1}U$ и $\hat{b} = Sb$). Время решения системы (13) значительно меньше времени решения системы (2).

Алгоритм решения системы (13) методом сопряженных градиентов строится так, что в процессе вычислений используется исходная матрица A [3]. Матрица S участвует в расчетах неявно в соответствии с формулой

$$(S^T S)^{-1} = M, \quad (14)$$

где M — симметричная положительно определенная матрица, аппроксимирующая матрицу A . На каждой итерации метода сопряженных градиентов решается некоторая промежуточная система $Mx = y$. Из (9) и (12) получаем

$$S^T \hat{A} (S^T)^{-1} = S^T S A = M^{-1} A. \quad (15)$$

Отсюда следует, что матрица $M^{-1}A$ подобна матрице \hat{A} , поэтому число обусловленности предобусловленной матрицы \hat{A} равно отношению наибольшего собственного значения матрицы $M^{-1}A$ к ее наименьшему собственному значению:

$$\text{cond}(\hat{A}) = \frac{\lambda_{\max}(M^{-1}A)}{\lambda_{\min}(M^{-1}A)}. \quad (16)$$

Таким образом, с одной стороны, матрица M должна быть такой, чтобы промежуточная система на каждой итерации решалась просто, с другой стороны, для повышения скорости сходимости итераций необходимо, чтобы матрица M хорошо аппроксимировала матрицу A .

Упомянутым выше двум противоречивым требованиям хорошо отвечает неполное разложение Холесского, которое получается заменой нулями элементов множителя Холесского L , расположенных в тех же позициях, что и нулевые элементы матрицы A . Если

исключить операции с нулями, то решение промежуточных систем на каждой итерации выполняется быстро при помощи последовательного решения треугольных систем. Рассмотрим алгоритм полного разложения Холецкого:

$$\begin{aligned}
 l_{11} &= \sqrt{a_{11}}, \\
 l_{ij} &= \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right) / l_{jj}, \\
 l_{ii} &= \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2} \\
 &(i = 2, 3, \dots, n; \quad j = 1, 2, \dots, i - 1).
 \end{aligned} \tag{17}$$

Если l_{ij} вычислять при $a_{ij} \neq 0$, а в противном случае полагать $l_{ij} = 0$, то получим алгоритм неполного разложения Холецкого, которое выполняется лишь один раз в начале работы программы.

Ненулевыми элементами матрицы A являются коэффициенты $k0_{i,j,k}$, $k1_{i,j,k}$, $k2_{i,j,k}$, $k3_{i,j,k}$, расположенные на ее диагоналях. Непосредственной проверкой можно убедиться в том, что при $a_{ij} \neq 0$ сумма $\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}$ равна нулю. Учитывая сказанное, получаем следующий алгоритм неполного разложения Холецкого:

$$\begin{aligned}
 lk0_{2,2,2} &= \sqrt{k0_{2,2,2}} \\
 &\text{для } k \text{ от } 2 \text{ до } l - 1 \\
 &\text{для } j \text{ от } 2 \text{ до } m - 1 \\
 &\text{для } i \text{ от } 2 \text{ до } n - 1 \\
 &\text{если } i = 2 \text{ и } j = 2 \text{ и } k = 2, \text{ то перейти к } 2 \\
 1: \quad lk1_{i,j,k} &= k1_{i-1,j,k} / lk \\
 \quad lk2_{i,j,k} &= k2_{i,j-1,k} / lk \\
 \quad lk3_{i,j,k} &= k3_{i,j,k-1} / lk \\
 lk0_{i,j,k} &= \sqrt{k0_{i,j,k} - lk1_{i,j,k}^2 - lk2_{i,j,k}^2 - lk3_{i,j,k}^2} \\
 2: \quad lk &= lk0_{i,j,k} \\
 &\text{перейти к } 1.
 \end{aligned} \tag{18}$$

Программа проверена на тестовых примерах. Так же, как в [1], уравнение Лапласа решалось в декартовой системе координат в квадратной области с постоянными граничными условиями первого рода на квадратной сетке. Коэффициенты системы определялись по описанной выше методике для кусочно-однородной среды. Точное решение такой алгебраической задачи при любом числе узлов совпадает с решением дифференциальной задачи и равно 1. Критерием окончания итераций служило условие

$$\frac{\|r^N\|_2}{\|r^0\|_2} \leq \varepsilon = 10^{-5}, \tag{19}$$

где в левой части записано отношение норм векторов невязок на последней N -й и нулевой итерациях. Для разных чисел разбиений nk решение, удовлетворяющее условию (17), получено за различное количество итераций N :

Число разбиений	nk	8	16	32	64	128
Количество итераций	N	8	13	22	34	57

Таким образом, количество итераций соответствует числу итераций решения аналогичной тестовой задачи в [1].

Кроме того, программа проверялась путем решения уравнения Лапласа (1) со значениями U на границе, найденными для заданной гармонической функции, например $U = xyz$. Результаты решения уравнения (1) совпадают со значениями U , вычисленными непосредственно по формуле. При использовании данной программы получены положительные результаты для расчета электрического и магнитного полей алюминиевого электролизера [4].

Список литературы

- [1] Ильин В. П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Физматлит, 1995. 288 с.
- [2] Булеев Н. И. Метод неполной факторизации для решения двумерных задач эллиптического типа // Численные методы динамики вязкой жидкости. Новосибирск: Наука, 1979. С. 31–45.
- [3] ОРТЕГА ДЖ. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М.: Мир, 1991. 367 с.
- [4] Альчиков В. В. Задача расчета магнитных полей алюминиевых электролизеров с учетом влияния ферромагнитных конструкций: Сб. докл. на междунар. семинаре “Алюминий Сибири – 99”. Красноярск, 1999. С. 186–192.

*Поступила в редакцию 22 февраля 2000 г.,
в переработанном виде — 6 сентября 2000 г.*