

**Изучение спектра матриц, полученных в результате
центрально - разностной аппроксимации уравнения
конвекции - диффузии ¹**

Соколов В.О.

Ростовский Государственный Университет

email: sokolov@rnd.runnet.ru

1 Введение

Задачи конвекции-диффузии являются типичными для математических моделей механики жидкости и газа. Распространение тепла или примесей, например, происходит не только за счет диффузии, но и обусловлено движением среды, в результате чего, происходит конвективный перенос. Конвективно-диффузионный перенос играет определяющую роль при моделировании самых различных газо- и гидродинамических процессов. В частности, важное значение приобретают экологические проблемы, связанные с описанием процессов распространения примесей в атмосфере и водоемах, с моделированием загрязненных грунтовых вод. Задачи конвекции-диффузии являются базовыми при моделировании проблем динамики и теплообмена в атмосфере и океане.

Будем рассматривать задачу конвекции-диффузии в квадрате.

$$\Omega = \{x | x = (x_1, x_2), 0 \leq x_\alpha \leq 1, \alpha = 1, 2\}$$

записанную в симметричной форме [3]

$$-\frac{1}{Pe} \Delta u + \frac{1}{2} \left(v_1 \frac{\partial u}{\partial x} + v_2 \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial (v_1 u)}{\partial x} + \frac{\partial (v_2 u)}{\partial y} \right) + cu = f, \quad x \in \Omega \quad (1.1)$$

Уравнение (1.1) дополним краевыми условиями первого рода (условия Дирихле), - которые не нарушая общности можно записать в виде:

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 03-01-00005

$$u|_{\partial\Omega} = 0 \quad (1.2)$$

Поставленная краевая задача (1.1)-(1.2) является характерным примером стационарной задачи конвекции-диффузии.

2 Аппроксимация уравнения конечными разностями.

Будем использовать равномерную по каждому направлению сетку ω_h , с шагом $h = h_x = h_y$

$$\omega_h = \{\omega_{ij} = (x_i, y_j), x_i = ih, y_j = jh, i = 1 \dots n, j = 1 \dots n\}$$

Обозначим L_h - разностный оператор, аппроксимирующий дифференциальный оператор в уравнении (1.1). Тогда уравнению (1.1) можно поставить в соответствие разностное уравнение следующего вида:

$$L_h u = \varphi \quad (2.1)$$

Аппроксимируем конвективные члены центральными разностями, тогда разностная схема примет вид:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{Pe} \left[\frac{u_{i+1j} + u_{i-1j} + u_{ij-1} + u_{ij+1} - 4u_{ij}}{h^2} \right] + \\ & \frac{1}{2} \left[v_{1ij} \frac{u_{i+1j} - u_{i-1j}}{2h} + v_{2ij} \frac{u_{ij+1} - u_{ij-1}}{2h} + \frac{v_{1i+1j}u_{i+1j} - v_{1i-1j}u_{i-1j}}{2h} + \right. \\ & \left. \frac{v_{2ij+1}u_{ij+1} - v_{2ij-1}u_{ij-1}}{2h} \right] + cu_{ij} = \varphi_{ij} \end{aligned}$$

Найдем коэффициенты матрицы L_h в уравнении (2.1)

$$a_{1ij}u_{ij} + a_{1ij}u_{i+1j} + a_{3ij}u_{i-1j} + a_{4ij}u_{ij+1} + a_{5ij}u_{ij-1} = \varphi_{ij}, \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned}
a_{1ij} &= \frac{4}{Pe h^2} + c \\
a_{2ij} &= -\frac{1}{Pe h^2} + \frac{1}{4h} (v_{1ij} + v_{1i+1j}) \\
a_{3ij} &= -\frac{1}{Pe h^2} - \frac{1}{4h} (v_{1ij} + v_{1i-1j}) \\
a_{4ij} &= -\frac{1}{Pe h^2} + \frac{1}{4h} (v_{2ij} + v_{2ij+1}) \\
a_{5ij} &= -\frac{1}{Pe h^2} - \frac{1}{4h} (v_{2ij} + v_{1ij-1})
\end{aligned}$$

Используя естественный порядок неизвестных, домножая левую и правую часть на $Pe h^2$, трансформируем (2.1) в несимметричную пяти-диагональную систему линейных уравнений.

$$Au = b \quad (2.2)$$

3 Нахождение спектра матрицы системы (2.2).

Будем исследовать спектр матриц A , полученных путем аппроксимации задачи (1.1)-(1.2), на сетках с различным числом узлов, и при различных числах Pe , при разных v_1 и v_2 (см. таб. 1), *используя QR алгоритм.*

№ Задачи	v_1	v_2
1	1	-1
2	$1 - 2x$	$2y - 1$
3	$x + y$	$x - y$
4	$\sin(2\pi x)$	$-2\pi y \cos(2\pi x)$

Таблица 1. Компоненты вектора скорости, для тестируемых задач

3.1 QR алгоритм

Использование QR алгоритма началось с работой Френсиса [5], который установил в 1961-1962, что QR итерации переводят матрицу хессенберга опять в матрицу хессенберга, это делает процесс

экономичным и также положительно отражается на устойчивости, так как нет необходимости вычислять нулевые элементы.

С 1960 года и по сегодняшний день QR является стандартным алгоритмом для вычисления всех точек спектра вещественных матриц. MATLAB, например, для нахождения спектра использует одну из четырех, реализованных в нем, разновидностей QR алгоритма. В свободно распространяемом пакете LAPACK [6], хорошо работающем на многопроцессорных системах с общей памятью, также реализован QR алгоритм. В пакете ScaLAPACK [7], предназначенном для выполнения матричных вычислений на параллельных компьютерах с распределенной памятью реализована параллельная версия алгоритма, предложенная Генри в 1997 году [4].

Теорема 3.1. (*Вещественное разложение Шура*). Если матрица $A \in R^{n \times n}$, то существует ортогональная матрица $Q \in R^{n \times n}$, такая что

$$Q^T A Q = R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & \dots & R_{1m} \\ 0 & R_{22} & \dots & R_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & R_{mm} \end{pmatrix}$$

где каждый блок R_{ii} - либо матрица 1×1 , либо матрица 2×2 , имеющая комплексно сопряженные собственные значения [1].

Матрица R в теореме 3.1 называется вещественной формой Шура матрицы A .

Алгоритм. QR итерации

Положим $A_0 = A$ и вычислим последовательность матриц A_k , следующим образом:

$$\begin{aligned} A_0 &= Q_0 R_0 \\ A_1 &= R_0 Q_0 = Q_1 R_1 \\ &\vdots \\ A_k &= Q_k R_k = R_{k-1} Q_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Лемма 3.1. Пусть A_i - матрица, вычисляемая в вышеуказанном алгоритме. Тогда $A_i = Z_i^T A Z_i$, где Z_i - ортогональная

матрица u , если все собственные значения имеют разные модули, то матрица A_i сходится к форме Шура. [2]

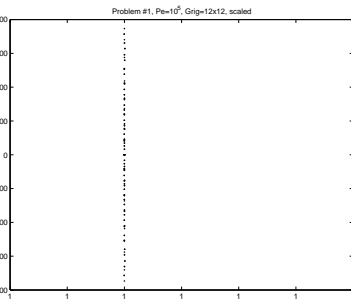
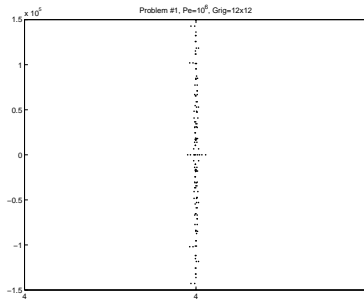
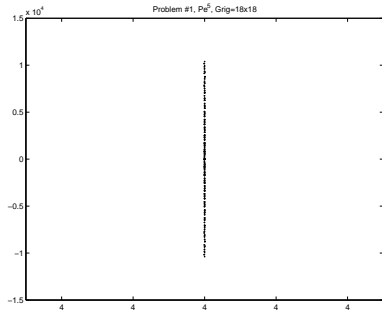
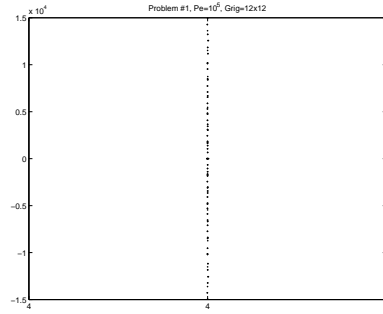
Данный алгоритм является вычислительно невыгодным, небольшие его изменения могут значительно улучшить метод. [1] Приведем матрицу A к верхней Hessenbergовой форме, перед тем, как применить метод. Как уже говорилось выше, QR итерации не "портят" Hessenbergову матрицу. Если QR алгоритм применить к исходной матрице, то это потребует $O(n^3)$ флопп на каждый шаг, в то время, как шаг QR алгоритма, примененного к Hessenbergовой матрице будет стоить $O(n^2)$ флопп [1]. Также можно увеличить скорость сходимости метода, применяя его не к матрице R (R - верхняя Hessenbergова матрица, подобная матрице A), а к матрице R_σ , полученную путем сдвига исходной матрицы. Найдя спектр матрицы R_σ и произведя сдвиг в обратную сторону, получим искомый спектр.

3.2 Численные результаты

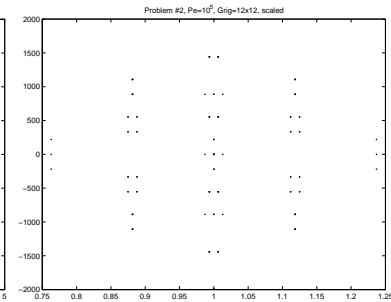
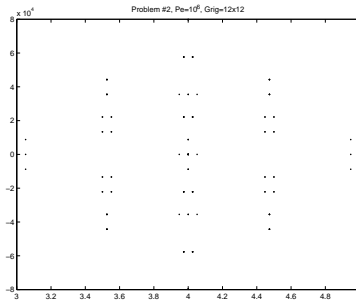
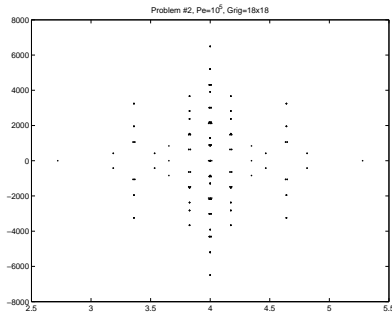
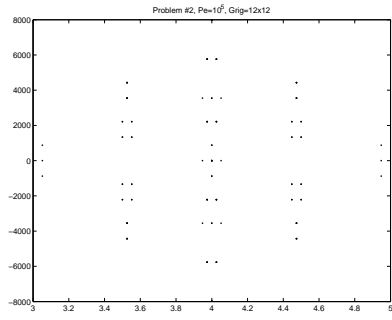
Далее приведены спектральные портреты матриц системы (2.2), при числе узлов равном 12 и 18, при различных числах Pe и $c = 0$, также приведены спектральные портреты масштабированных матриц $D^{-1}A$, где D - диагональная часть матрицы A .

Заключение: Для всех четырех задач, при любом Pe и любом числе узлов спектр матрицы из системы (2.2) располагается симметрично относительно точки $(d + 0i)$, $d = 4 + Pe h^2 c$ (диагональный элемент матрицы A) по вещественной оси он лежит в отрезке $(d-1, d+1)$. Для масштабированной матрицы $d = 1$ (т.е. спектр лежит симметрично относительно точки $(1 + 0i)$ и по вещественной оси он лежит в отрезке $(0, 2)$). Спектры первой (v_1 и v_2 - константы), а также третьей, и вообще любой задачи у которой компоненты вектора скорости суть линейные функции, имеют одинаковую структуру, не понятно, пока, почему!

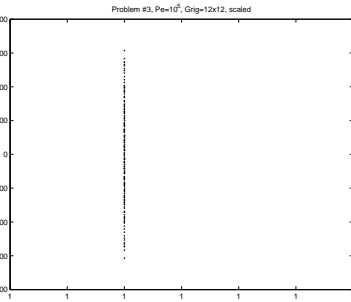
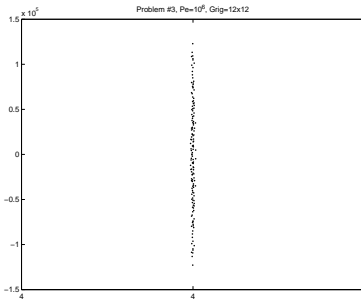
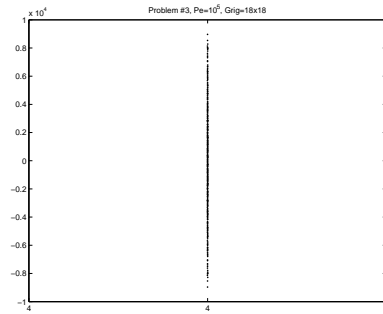
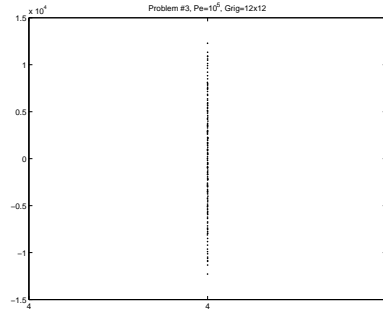
Задача № 1 (см таб. 1)



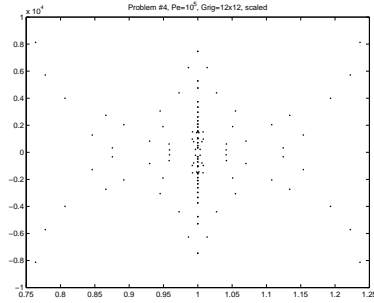
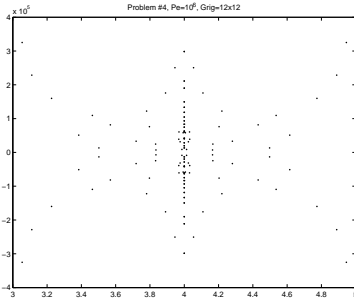
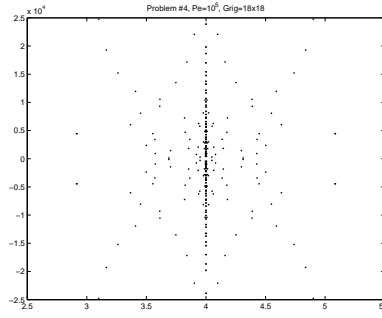
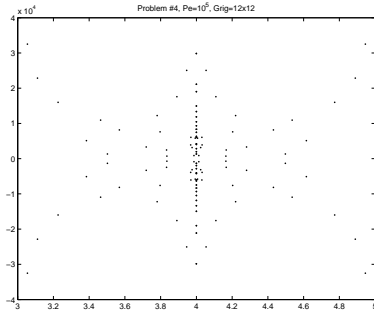
Задача № 2 (см таб. 1)



Задача № 3 (см таб. 1)



Задача № 4 (см таб. 1)



Литература

- [1] Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун, *Матречные вычисления*. Москва, Мир, 1999
- [2] Дж. Деммель, *Вычислительная линейная алгебра*. Москва, Мир, 2001
- [3] А.А Самарский, П.Н. Вабищевич, *Численные методы решения задач конвекции-диффузии*. Москва, Эдиториал УРСС, 1999
- [4] G. Henry, D. Watkins, J. Dongarra, *A parallel implementation of the nonsymmetric QR algorithm for distributed memory architectures*, Technical Report LAPACK Working Note 121, University of Tennessee, 1997.
- [5] J.G.F. Francis, *The QR transformation*, Parts I and II, Computer J. 4 1961 265-272, 332-345.
- [6] E. Anderson et al., *LAPACK Users' Guide*, SIAM, Philadelphia, 2nd Edition, 1995. <http://www.netlib.org/lapack/lug/lapacklug.html>.
- [7] L.S. Blackford et al., *ScaLAPACK Users' Guide*, SIAM, Philadelphia, 1997. <http://www.netlib.org/scalapack/slug/scalapackslug.html>.