Изучение спектров матриц перехода итерационных методов решения сильно несимметричных СЛАУ[1]

Крукиер Л. А. Соколов В. О.
ЮГИНФО, РГУ, Ростов-на-Дону

Введение

Одним из самых важных свойств операторов перехода итерационных методов для решении СЛАУ является распределение собственных чисел.

В данной статье рассмотрены спектры операторов перехода треугольных и попеременно-треугольных итерационных методов, предложенных Крукиером Л. А. [8], [9]. Эти методы предназначены для решения СЛАУ с преобладающей кососимметричной частью. Такие системы, в частности, получаются при центрально-разностной аппроксимации уравнения конвекции-диффузии, с малым параметром при старшей производной. О таких задачах и будет дальше идти речь.

I Уравнение Конвекции-Диффузии

Будем рассматривать стационарную задачу конвекции-диффузии в квадрате.

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

записанную в симметричной форме [3]

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

Уравнение (1) дополним краевыми условиями первого рода (условия Дирихле), которые, не нарушая общности, можно считать однородными:

$$u|_{\partial\Omega} = 0 \tag{2}$$

Поставленная краевая задача (1)-(2) является характерным примером стационарной задачи конвекции-диффузии. Здесь будут рассмотрены четыре различные задачи, соответствующие четырем различным полям скоростей.

№ 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

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке ...

I.1 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:

$$L_h u_h = \varphi \tag{3}$$

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

$$-\frac{1}{Pe}\left[\frac{u_{i+1j} + u_{i-1j} + u_{ij+1} + u_{ij-1} - 4u_{ij}}{h^2}\right] +$$

$$\frac{1}{2}[v_{1ij}\frac{u_{i+1j} - u_{i-1j}}{2h} + v_{2ij}\frac{u_{ij+1} - u_{ij-1}}{2h} + \frac{v_{1i+1j}u_{i+1j} - v_{1i-1j}u_{i-1j}}{2h} + \frac{v_{2ij+1}u_{ij+1} - v_{2ij-1}u_{ij-1}}{2h}] + cu_{ij} = \varphi_{ij}$$

Найдем коэффициенты матрицы L_h в уравнении (3)

$$a_{1ij}u_{ij} + a_{1ij}u_{i+1j} + a_{3ij}u_{i-1j} + a_{4ij}u_{ij+1} + a_{5ij}u_{ij-1} = \varphi_{ij} \tag{4}$$

$$a_{1ij} = \frac{4}{Peh^2} + c$$

$$a_{2ij} = -\frac{1}{Peh^2} + \frac{1}{4h}\left(v_{1ij} + v_{1i+1j}\right)$$

$$a_{3ij} = -\frac{1}{Peh^2} - \frac{1}{4h}\left(v_{1ij} + v_{1i-1j}\right)$$

$$a_{4ij} = -\frac{1}{Peh^2} + \frac{1}{4h}\left(v_{2ij} + v_{2ij+1}\right)$$

$$a_{5ij} = -\frac{1}{Peh^2} - \frac{1}{4h}\left(v_{2ij} + v_{2ij-1}\right)$$

Используя естественный порядок неизвестных, домножая левую и правую часть на Peh^2, трансформируем (3) в несимметричную пяти-диагональную систему линейных уравнений.

$$Au = f \tag{5}$$

.

II Спектр Исходного Оператора

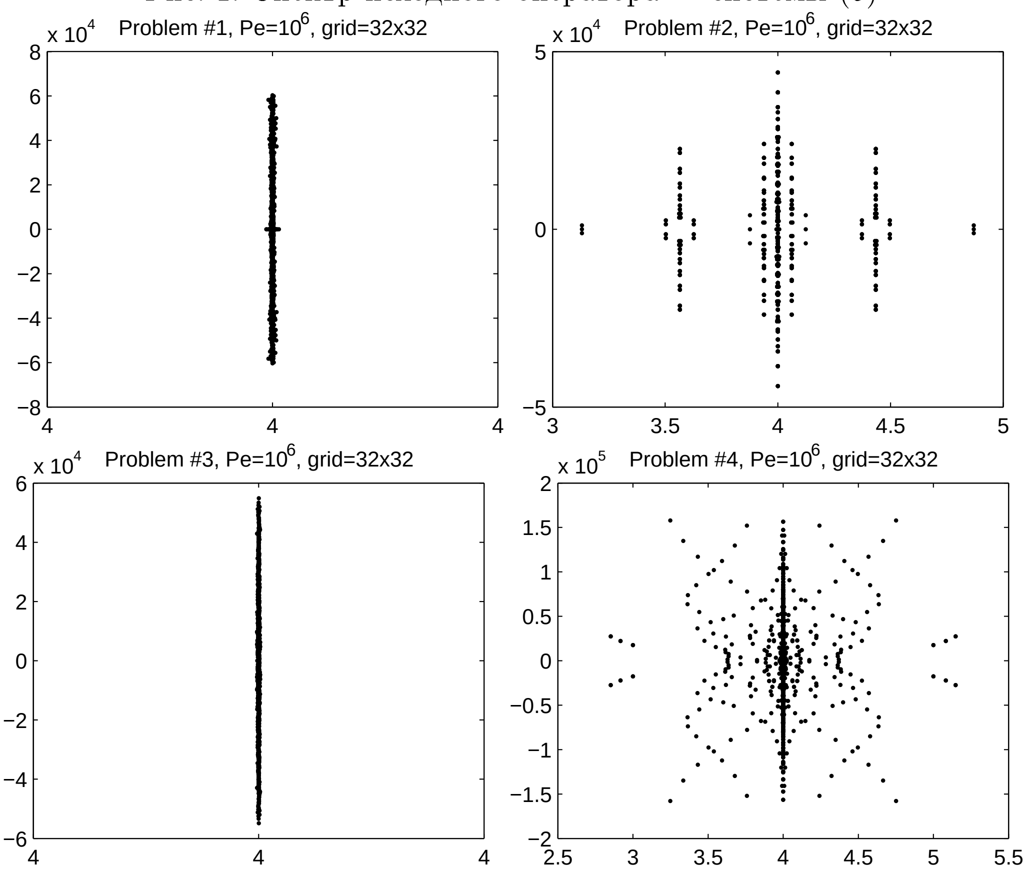
Спектры исходных операторов матриц, соответствующих СЛАУ (5) были получены при помощи QR алгоритма [6].

Теорема 1. *[1] (Вещественное разложение Шура). Если матрица $A \in R^{n\times n}$, то существует ортогональная матрица $Q \in R^{n\times n}$, такая что*

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

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

Рис. 1: Спектр исходного оператора A системы (5)



Алгоритм. *QR итерации*

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

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

Лемма 1. *[2] Пусть A_i - матрица, вычисляемая в вышеуказанном алгоритме. Тогда $A_i = Z_i^T A Z_i$, где Z_i - ортогональная матрица и, если все собственные значения имеют разные модули, то матрица A_i сходится к форме Шура.*

На рисунке (1) видно, что для всех четырех задач, при любом Pe и любом числе узлов спектр матрицы из системы (5) располагается симметрично относительно точки $(d + 0i)$, $d = 4 + Peh^2 c$ (диагональный элемент матрицы A) по вещественной оси он лежит в отрезке (d-1, d+1). Оператор является плохо обусловленным, собственные числа хоть и лежат на небольшом отрезке по вещественной оси, но по мнимой оси имеют очень большой разброс.

III Треугольные и попеременно-треугольные итерационные методы

И так, рассматривается система линейных уравнений (5), полученная в результате аппроксимации двух-мерного уравнения конвекции-диффузии в квадрате, при помощи центрально - разностной аппроксимации. При натуральном упорядочивание узлов сетки получается пяти-диагональная матрица. Так как при старшей производной стоит малый параметр, то матрица будет иметь преобладающую косо-симметрию. То есть для некоторой нормы $\|.\|_*$ выполняется следующее условие:

$$\|A_0\|_* \ll \|A_1\|_*$$

Где $A = A_0 + A_1$, A_0 и A_1 - симметричная и косо-симметричная части матрицы A.

$$
\begin{aligned}
A_0 &= \tfrac{1}{2}(A + A^*) = A_0^* \\
A_1 &= \tfrac{1}{2}(A - A^*) = -A_1^*
\end{aligned}
$$

Представим также матрицу A_1 в виде суммы ее верхне - треугольной и нижне-треугольной части.

$$A_1 = K_B + K_H, \quad K_B = -K_H^*$$

Так как A_1 косо - симметричная матрица, то имеет нулевую диагональ, а это значит, что K_B - строго верхне - треугольная, а K_H - строго нижне-треугольная матрица.

Рассмотрим итерационный метод, записанный в следующем виде:

$$B(\omega)\frac{y_{k+1} - y_k}{\tau} + Ay_k = f, \tag{6}$$

где $A,\ B\ \in\ \mathrm{R}^{n\times n}$ - матрицы, а τ и $\omega > 0$ - итерационные параметры. A и f - это оператор и правая часть системы (5).

Метод (6) также может быть записан в виде:

$$y_{k+1} = Gy_k + \tau B^{-1}(\omega)\,f, \quad G = \left(E - \tau B^{-1}(\omega)\,A\right). \tag{7}$$

Мы будем рассматривать методы [8]:

$$DTKM:\ B(\omega) = B_c + \omega K_H, \quad \omega = 2, \quad b_{c_{ii}} = \sum_{j=1}^{n} |m_{ij}| \tag{8}$$

$$PTKM:\ B(\omega) = (E + \omega K_H)(E + \omega K_B), \quad \omega = \tau \tag{9}$$

$$DPTKM:\ B(\omega) = (B_c + \omega K_H)\,B_c^{-1}(B_c + \omega K_B), \quad \omega = 1, \quad b_{c_{ii}} = \sum_{j=1}^{n} |m_{ij}| \tag{10}$$

$$DPTKM2:\ B(\omega) = (B_c + \omega K_H)\,B_c^{-1}(B_c + \omega K_B), \quad \omega = 1, \quad b_{c_{ii}} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} |m_{ij}| \tag{11}$$

IV Спектры матриц перехода

Нас интересует какой спектр имеет матрица перехода метода (7). Результаты были вычислены при помощи QZ алгоритма - аналога QR, для случая обобщенной проблемы собственных значений. Существует множество различных реализаций QR и QZ алгоритмов [4], [7], [5]. Мы использовали процедуры пакета LAPACK [4].

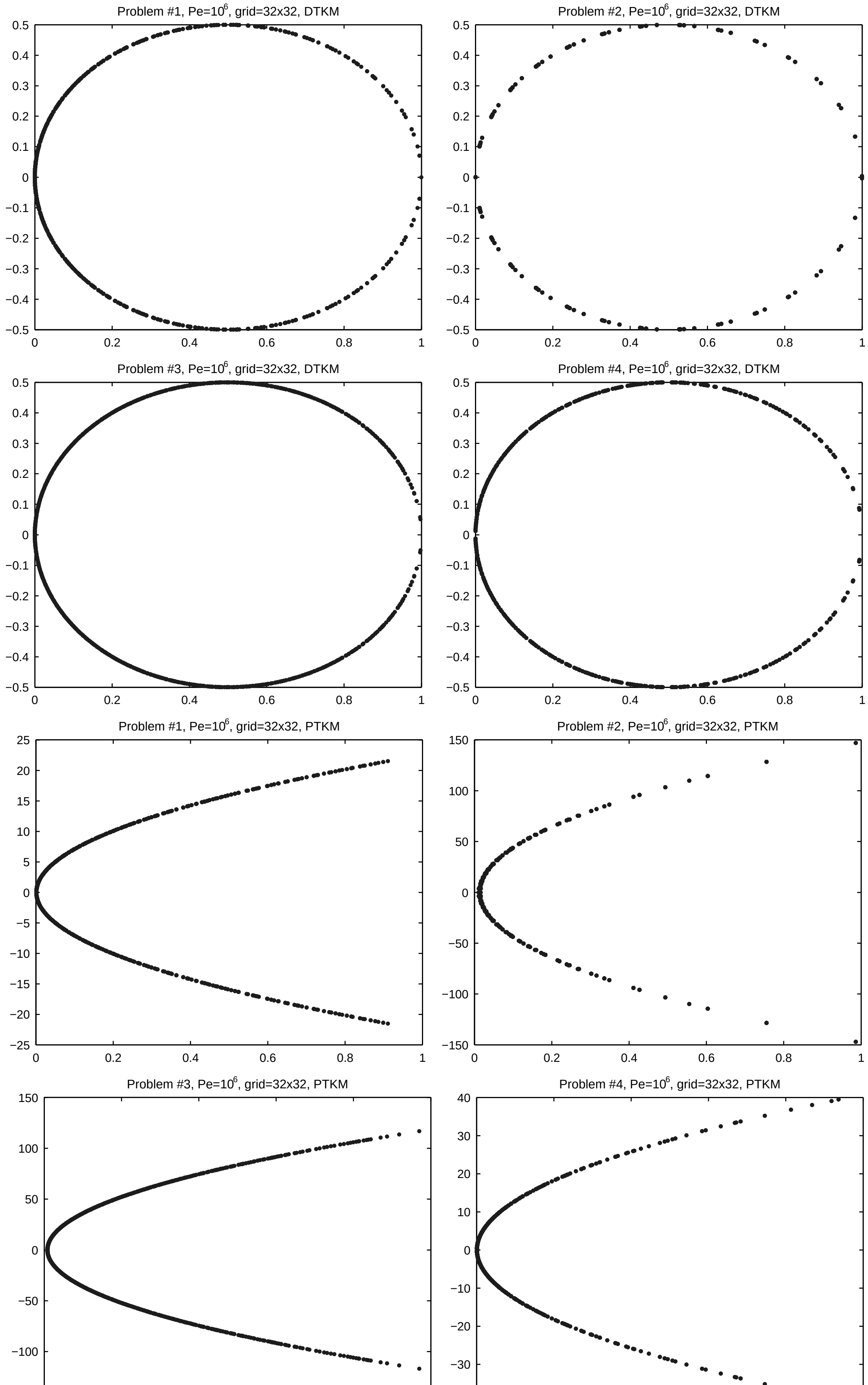
Теорема 2. *[11] (Обобщенное вещественное разложение Шура). Если матрицы $A, B \in R^{n\times n}$, то существует ортогональные матрицы $Q, Z \in R^{n\times n}$, такие, что $Q^T AZ$ - верхне-квазетреугольная, а $Q^T BZ$ - верхне-треугольная.*

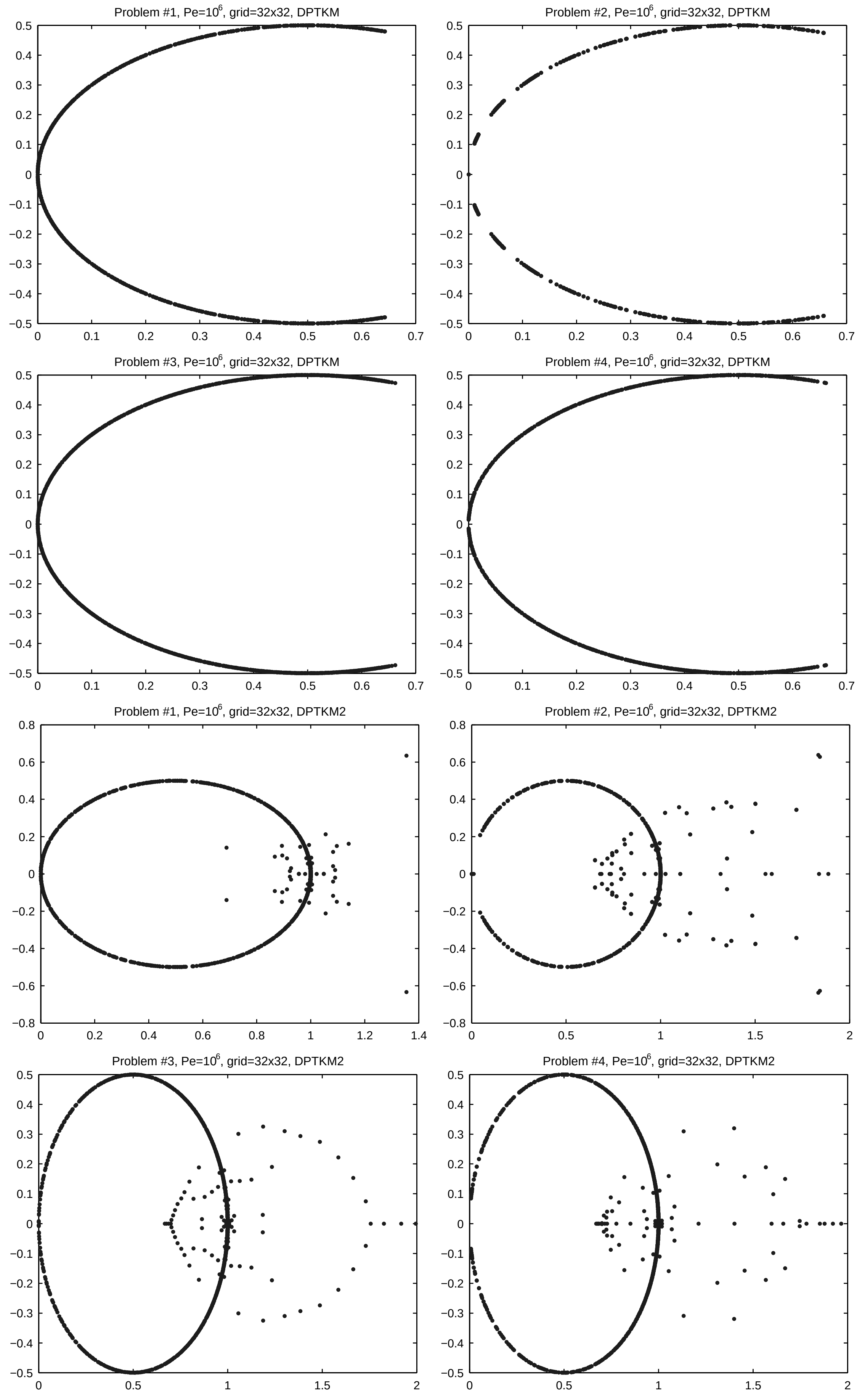
QZ алгоритм хорош тем, что на практике вычисляя спектр пучка матриц нет необходимости в обращение матрицы B.

Далее приведены спектры операторов перехода метода (7), точнее не самого оператора перехода, а его части $B^{-1}(\omega)\,A$. Чтобы получить собственные значения самого оператора, надо лишь умножить все собственные значения $B^{-1}(\omega)\,A$ на $-\tau$ и сместить на $+1$, что соответствует умножению исходной матрицы на τ и прибавлению к ней единичной матрицы. На графиках видно, что спектр имеет хорошее распределение, в том смысле, что собственные числа имеют не большой разброс ни по вещественной ни по мнимой оси, причем для методов $DTKM$, $PTKM$ и $DPTKM$ спектр лежит на эллипсе.

Надо также заметить, что операторы (8) - (11) могут быть использованы в качестве переобуславливателей других итерационных методов. Как показывают численные эксперименты, эти операторы сильно улучшают скорость и характер сходимости таких методов, как $GMRES$, $BiCG$ и $BiCGstab$ [10], в этом случае переобусловленные операторы будут иметь в точности те спектры, которые показаны на Рис. 2.

Рис. 2: Спектры операторов перехода методов (8)-(11)




Problem #1, Pe=10^6, grid=32x32, DPTKM
Problem #2, Pe=10^6, grid=32x32, DPTKM
Problem #3, Pe=10^6, grid=32x32, DPTKM
Problem #4, Pe=10^6, grid=32x32, DPTKM
Problem #1, Pe=10^6, grid=32x32, DPTKM2
Problem #2, Pe=10^6, grid=32x32, DPTKM2
Problem #3, Pe=10^6, grid=32x32, DPTKM2
Problem #4, Pe=10^6, grid=32x32, DPTKM2

Список литературы

1. Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун, *Матричние вычисления.* Москва, Мир, 1999

2. Дж. Деммель, *Вычислительная линейная алгебра.* Москва, Мир, 2001

3. А. А Самарский, П. Н. Вабищевич, *Численные методы рашения задач конвекции-диффузии.* Москва, Эдиториал УРСС, 1999

4. E. Anderson et al., *LAPACK Users' Guide*, SIAM, Philadelphia, 2nd Edition, 1995. http://www.netlib.org/ lapack/lug/lapack lug.html.

5. L.S. Blackford et al., *ScaLAPACK Users' Guide,* SIAM, Philadelphia, 1997. http://www.netlib.org/scalapack/ slug/scalapack slug.html.

6. J.G.F. Francis, *The QR transformation,* Parts I and II, Computer J. 4 1961 265-272, 332-345.

7. 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.

8. L. A. Krukier, *Iterative solution of nonsymmetric linear equation systems with dominant skew-symmetric part. Lectures of Instructors and Abstracts of Young Scientists,* Rostov-on-Don, Russia, RSU CC, 2002. - P. 205-259.

9. L. A. Krukier, L. G. Chikina, T. V. Belokon, *Triangular skew-symmetric iterative solvers for strongly non-symmetric positive real linear system of equations*, Appl. Numer. Math. 41 (2002), 89–105.

10. L. A. Krukier O. A. Lapshina B. L. Krukier *Special preconditioners for solution of transport-dominated convection-diffusion problem.* Book of Abstracts of the Annual Scientific Conference GAMM 2003. - Abano Terme - Padua. Session 22. 2003. - p. 234.

11. G. W. Stewart, *On the Sensitivity of the Eigenvalue Problem* $Ax = \lambda Bx$, SIAM, J. Num. Anal. 9, 669-86

Содержание