

ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОСЕТОЧНЫХ МЕТОДОВ В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

В. В. Попов

РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, Нижегородская обл.

Показана идея использования многосеточных методов при численном моделировании физико-химических процессов, что позволяет повысить скорость сходимости численного решения к точному и уменьшить размерность итоговой системы линейных алгебраических уравнений, решаемой на каждой итерации.

Введение

В настоящее время в мире при проведении НИОКР широко используется математическое моделирование различных физико-химических процессов. При описании таких процессов используются дифференциальные уравнения, в том числе в частных производных. Сложность таких дифференциальных уравнений, как правило, не позволяет найти их аналитическое решение, поэтому ищется приближенное решение с использованием численных методов. При этом нужно получить максимально точное решение исходной дифференциальной задачи при заданных и ограниченных ресурсах компьютера. Для дискретизации исходной задачи часто используются конечно-разностные методы, метод конечных элементов и метод конечных объемов. Применение многосеточных методов позволяет получить решение дискретной задачи за меньшее количество арифметических операций (существует утверждение [1], что многосеточный метод в большинстве случаев единственный метод, который хорошо справится с данной задачей за $O(N)$ арифметических действий). При этом стоит отметить, что на сегодняшний день очень многие уравнения в частных производных (но не любые), имеющие физический смысл, можно решить, используя указанные методы дискретизации и многосеточные методы.

В лекции-докладе изложена идея метода, приведен пример реализации, что должно помочь студентам, аспирантам и молодым специалистам, использующим математическое моделирование в научных исследованиях, более эффективно численно решать поставленные задачи и способствовать лучшему пониманию возможностей и внутреннего устройства современных инженерных пакетов программ. При подготовке материала использованы работы [1, 2]. В силу необходимости компактного изложения материала, доказательства различных утверждений не приводятся, их можно найти, например, в [1, 2].

История метода

Впервые идея многосеточных методов была изложена в 60-е годы 20 века в работах советских математиков Федоренко [3] и Бахвалова [4]. В то время эти работы не привлекли широкого внимания. Позже в 70-е годы метод был заново открыт в работах Брандта [5, 6] и Хакбуша [7], после чего количество публикаций по данному методу резко выросло. В 80-е годы сформировалась современная теория многосеточных методов. Стоит отметить монографию Хакбуша [8], где была изложена абстрактная теория многосеточных методов и приведено описание многих приложений, и монографию Шайдурова [2], требующую серьезной математической подготовки.

Некоторые базовые факты и понятия численных методов

Идею метода можно проиллюстрировать на примере решения одномерного стационарного уравнения диффузии с нулевыми граничными условиями, но сначала необходимо напомнить некоторые факты и базовые понятия.

Численное решение уравнений математической физики (уравнения и системы уравнений в частных производных, описывающие физико-химические процессы), как правило, сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для n неизвестных, каждая из которых является значением искомой функции в некоторой точке пространства в некоторый момент времени. Для этого используются различные методы дискретизации (конечные разности, конечные элементы, конечные объемы). Такие СЛАУ могут быть записаны в матрично-векторной форме:

$$Ax = b, \quad (1)$$

где: $A \in R^{n \times n}$ – заданная матрица, структура и свойства которой существенно зависят от решаемой задачи; $b \in R^n$ – заданный вектор; $x \in R^n$ – вектор из n искомого неизвестных. Матрица A предполагается обратимой, т. е. $\det A \neq 0$.

Для решения СЛАУ существуют прямые (точные) и итерационные методы (приближенные с заданной точностью). Достоинством прямых методов, например, метода Гаусса, является получение точного решения, но метод требует $O(n^3)$ арифметических операций для решения СЛАУ с произвольной матрицей A , что делает метод неприемлемым при большом количестве неизвестных (10^6 и выше). Достоинствами же итерационных методов (простой итерации, Якоби, Гаусса–Зейделя и др.) являются, как правило, меньшее количество арифметических операций, необходимых для нахождения приближенного решения с заданной точностью, и меньший объем занимаемой оперативной памяти, что является следствием сильной разреженности матрицы A .

Любой итерационный метод можно представить в следующем виде. Если задан вектор x^i (i -индекс), рассматриваемый как приближение к неизвестному вектору x из (1), то новое приближение x^{i+1} можно искать из соотношения:

$$W(x^{i+1} - x^i) = b - Ax^i, \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

Для практической реализации здесь необходимо выбрать: начальное приближение x^0 (например $x^0 = 0$); вспомогательную матрицу W (простой, но не самый удачный способ положить ее равной единичной матрице); критерий остановки (например, для выбранной нормы $\|\cdot\|$ и $\varepsilon > 0$ решение x^i достаточно хорошее если $\|b - Ax^i\| \leq \varepsilon$). Матрицу W или W^{-1} называют *переобуславливателем*, а вычисление x^{i+1} при заданном x^i называют *итерацией*.

Метод сходится, если норма ошибки метода (величина $e^i = x - x^i$ является ошибкой метода) стремится к нулю:

$$\|e^i\| \rightarrow 0, \quad i \rightarrow \infty.$$

Метод имеет геометрическую сходимость с показателем $q \in [0,1)$, если на каждой итерации норма ошибки сокращается в q^{-1} раз:

$$\|e^{i+1}\| \leq q \|e^i\|, \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

Из (1) и (2) следует, что вектор ошибки удовлетворяет соотношению

$$e^{i+1} = S e^i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, \tag{3}$$

где S – матрица итераций метода ($S = I - W^{-1}A$, I – единичная матрица). Отсюда x^{i+1} удовлетворяет

$$x^{i+1} = S x^i + g, \quad i = 0, 1, 2, \dots,$$

где g – вектор, зависящий от b , но не от x^i .

Существует достаточно много способов выбора матрицы итераций, которые приводят к упомянутым выше методам: простой итерации ($W = w^{-1}I$, $w > 0$ – параметр релаксации); Якоби ($W = D = \text{diag}(A)$); Гаусса-Зейделя ($W = L + D$, L (R) – левая (правая) треугольная часть A в разложении $A = L + D + R$); SOR (Successive Over Relaxation) ($W = w^{-1}(D + wL)$) и другим.

Идея многосеточного метода, пример двухсеточного метода

Для дальнейшего изложения идеи многосеточных методов рассмотрим одномерное стационарное уравнение диффузии с источником и нулевыми граничными условиями:

$$\begin{aligned} -(k(x)u')' &= f, & x \in (0,1), \\ u(0) &= u(1) = 0. \end{aligned} \tag{4}$$

Произведем его дискретизацию методом конечных элементов [1].

Выберем пространство U_h кусочно-линейных непрерывных функций, заданных на отрезке $[0, 1]$, который поделен на N частей длины h . Конечно-

элементным решением задачи (4) называются функции u_h из U_h , удовлетворяющие равенству

$$\int_0^1 k(x) u_h' v_h' dx = \int_0^1 f v_h \quad \forall v_h(x) \in U_h. \quad (5)$$

В качестве функций v_h выберем в пространстве U_h базис, состоящий из функций $\{\psi_h^i\}$, $i = 1, \dots, N-1$, изображенных на рис. 1 и заданных следующим образом:

$$\psi_h^i = \begin{cases} x/h - (i-1), & x \in [(i-1)h, ih], \\ -x/h + i+1, & x \in [ih, (i+1)h], \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (6)$$

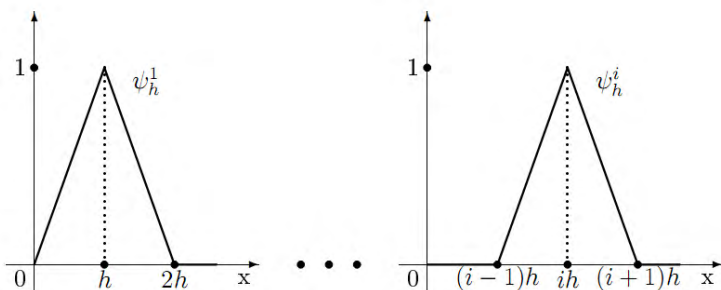


Рис. 1. Базисные функции для кусочно-линейных элементов

Решение u_h будем искать в виде разложения по базисным функциям ($z_h \in R^{N-1}$ – вектор коэффициентов z_i разложения u_h по базису):

$$u_h = \sum_{i=1}^{N-1} z_i \psi_h^i. \quad (7)$$

Подставив (6) и (7) в (5) получим систему вида $A_h z_h = f_h$, где элементы матрицы и вектора правой части вычисляются следующим образом:

$$A_h = \{a_{ij}\}, \quad i, j = 1, \dots, N-1, \quad a_{ij} = \frac{1}{h} \int_0^1 k(x) (\psi_h^i)' (\psi_h^j)' dx, \quad (8)$$

$$f_h = \{f_i\}, \quad i = 1, \dots, N-1, \quad f_i = \frac{1}{h} \int_0^1 f \psi_h^i dx. \quad (9)$$

Для решения системы $A_h z_h = f_h$ рассмотрим метод Якоби с релаксационным параметром w , начальное приближение z_0 задано, а последующие приближения при $i = 0, 1, 2, \dots$ вычисляются следующим образом ($D = \text{diag}(A_h)$ – диагональная матрица из элементов главной диагонали A_h):

$$z^{i+1} = z^i - w D^{-1} (A_h z^i - f_h).$$

Для данного примера метод эквивалентен методу простой итерации

$$z^{i+1} = z^i - w \frac{h^2}{2} (A_h z^i - f_h). \quad (10)$$

О сходимости (10) можно судить по спектру A_h , найденному из равенства

$$A_h \varphi^k = \lambda_k \varphi^k.$$

Для $\varphi^k = \sin(\pi k j h)$, $\lambda_k = 4h^{-2} \sin^2(\pi k h/2)$, $k = 1, \dots, N-1$ минимальное и максимальное собственные числа равны $\lambda_{\min} \leq \pi^2$, $\lambda_{\max} = O(h^{-2})$. Показатель сходимости для итерационного процесса (10) при оптимальном w можно оценить как $1 - O(h^2)$, а количество итераций, необходимых для решения системы с точностью ε , как $O(h^{-2} \ln \varepsilon^{-1})$. Из этой оценки следует, что при малых h (частая сетка) метод сходится очень медленно, а оптимальная сложность ($O(h^{-1})$ для данной задачи) не достигается.

Теперь рассмотрим только «высокочастотные» собственные функции, т. е. φ^k , $k \geq N/2 = 1/(2h)$. Для таких k справедливо $2 = 4 \sin^2(\pi/4) \leq h^2 \lambda_k \leq 4$.

Выберем $w = 1/2$ в (10). Тогда для $S_h = I - \frac{wh^2}{2} A_h$ имеем:

$$|\lambda_k(S_h)| = \left| 1 - \frac{h^2}{4} \lambda^k(A_h) \right| \leq \frac{1}{2}, \text{ при } k \geq \frac{N}{2}.$$

Поскольку матрица итераций ответственна за изменение ошибки в методе, то эта оценка означает, что на высоких гармониках метод Якоби имеет скорость сходимости не хуже чем 0,5. То есть, если вектор ошибки разложить в базисе собственных функций φ^k , то коэффициенты при высоких гармониках ($k \geq N/2$) сокращаются на каждой итерации не меньше чем в два раза. После нескольких итераций вклад высоких гармоник в ошибку будет незначителен.

Теперь необходимо найти итерации для подавления «низкочастотных» компонент в ошибке, т. е. φ^k , $k < 1/(2N)$. Этот шаг будем называть коррекцией с грубой сетки. Здесь необходимо сделать замечания:

– если $e_h = z_h^i - z_h$ гладкая функция, то она может быть хорошо аппроксимирована на сетке с меньшим количеством узлов;

– ошибка e_h является решением уравнения $A_h e_h = d_h$, $d_h = A_h z_h^i - f_h$.

Таким образом, на грубой сетке можно найти приближение e_{2h} к e_h , решая задачу $A_{2h} e_{2h} = d_{2h}$. Если $p: R_{2h} \rightarrow R_h$ – оператор продолжения, то новое приближение z_h^{i+1} к решению z_h будет

$$z_h^{i+1} = z_h^i - p e_{2h}. \quad (11)$$

Данное соотношение называется коррекцией с грубой сетки. При этом возникают вопросы:

- Как выбрать оператор продолжения p ?
- Как выбрать оператор проектирования $r : R_h \rightarrow R_{2h}$, чтобы определить невязку на грубой сетке $d_{2h} = rd_h$?
- Как задать оператор A_{2h} на грубой сетке?

В данных обозначениях выражение (11) может быть переписано

$$z_h^{i+1} = z_h^i - pA_{2h}^{-1}r(A_h z_h^i - f_h). \quad (12)$$

Оператор продолжения \bar{p} из U_{2h} в U_h определяется $\bar{p}(U_{2h}) = U_{2h}$, а продолжение в пространствах коэффициентов $p : R_{2h} \rightarrow R_h$ определяется с помощью изоморфизмов $P_h : R_h \rightarrow U_h$ и $P_{2h} : R_{2h} \rightarrow U_{2h}$: $p : R_{2h} \xrightarrow{P_{2h}} U_{2h} \subset U_h \xrightarrow{P_h^{-1}} R_h$. Остудя $p = P_h^{-1}P_{2h}$. Для кусочно-линейных элементов действие оператора продолжения p показано на рис. 2.

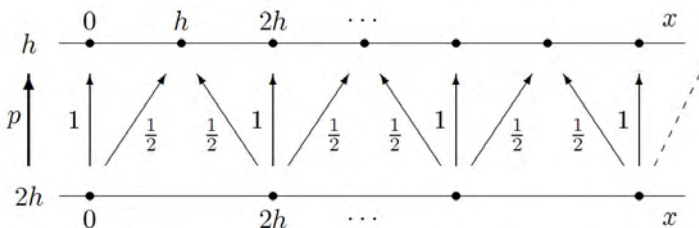


Рис. 2. Оператор продолжения для кусочно-линейных КЭ с грубой сетки на частую

Оператор проектирования с частой сетки на грубую определяется как $r = p^*$, где p^* оператор сопряжения к p . Для рассматриваемого примера $r = 0,5p^T$, здесь фактор 0,5 появляется за счет h и $2h$. Для кусочно-линейных элементов действие оператора проектирования r показано на рис. 3.

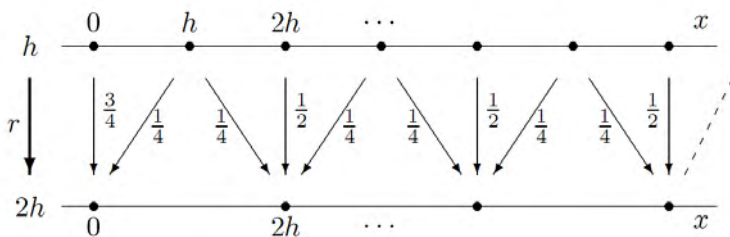


Рис. 3. Оператор проектирования для кусочно-линейных КЭ с частой сетки на грубую

Для выбора оператора A_{2h} на грубой сетке существует два подхода:

- непосредственная аппроксимация задачи на грубой сетке (прямой подход) в пространстве U_{2h} , т. е. для рассмотренного примера A_{2h} из соотношения

$$\langle A_{2h}z, y \rangle_{R_{2h}} = \int_0^1 k(x)u_{2h}'v_{2h}'dx;$$

– определять A_{2h} как произведение $A_{2h} = rA_h p$ (подход Галеркина).

В ряде случаев эти подходы дают разные A_{2h} на грубой сетке.

Таким образом, для нашего примера двухсеточный метод можно рассмотреть как итерационный, где по заданному приближению z_h^k следующее приближение z_h^{k+1} вычисляется в два этапа:

– несколько сглаживаний, например по методу Якоби (общим числом ν)

$z_h^k = S_h z_h^k + g^\nu$ (здесь $S_h = I - \frac{wh^2}{2} A_h$ – матрица сглаживающих итераций, g^ν – вектор, зависящий только от правой части системы f^h , z_h^k – промежуточное приближение);

– z_h^{k+1} находится как результат коррекции z_h^k с грубой сетки, т. е. из (12)

$$z_h^{k+1} = z_h^k - pA_{2h}^{-1}r(A_h z_h^k - f_h).$$

Из этих двух выражений при ν сглаживающих итерациях получаем (\bar{M}_h – матрица итераций двухсеточного метода):

$$z_h^{k+1} = \bar{M}_h z_h^k + \bar{g}^\nu, \quad \bar{M}_h = (I - pA_{2h}^{-1}rA_h)S_h^\nu. \quad (13)$$

Для сходимости метода достаточно, чтобы $\|\bar{M}_h\| < 1$ в некоторой операторной норме или чтобы $|\lambda(\bar{M}_h)| < 1$. В [1] с помощью прямых вычислений и анализа Фурье показывается, что $|\lambda(\bar{M}_h)| < \frac{1}{2}$ и $|\lambda(\bar{M}_h)| \sim \frac{1}{e} \frac{1}{\nu}$, $\nu \rightarrow \infty$ и анало-

гично $\|\bar{M}_h\| < \frac{1}{2}$ и $\|\bar{M}_h\| \sim \frac{\sqrt{2}}{e} \frac{1}{\nu}$, $\nu \rightarrow \infty$. Таким образом норма матрицы итераций двухсеточного метода, в отличие от нормы матрицы базовых итераций, оценивается независимо от h , а зависимость от числа сглаживающих итераций вида $O(\nu^{-1})$ характерная для многосеточных методов.

Таким образом, суть двухсеточного метода, как частного случая многосеточного метода, можно свести к следующему:

– делается несколько базовых сглаживающих итераций;

– строится задача для неизвестной ошибки на грубой сетке $A_{2h}e_{2h} = d_{2h}$ и решается точно;

– после этого вычисляется приближение $\tilde{e}_h = pe_{2h}$ к ошибке e_h на частой сетке;

– делается коррекция приближения к решению на частой сетке.

Классический многосеточный метод

Классический многосеточный метод строится по аналогии с двухсеточным и может рассматриваться как рекурсивное применение двухсеточного

метода с количеством итераций γ . При этом достигается «самая грубая» сетка, на которой система уравнений может быть решена точно, например, с помощью метода Гаусса.

Для формального описания идеи многосеточного метода надо рассмотреть иерархию конечно-элементных пространств:

$$U_0 \subset U_1 \subset \dots \subset U_k \subset \dots \subset U_l = U_h. \quad (14)$$

Соответствующие пространства коэффициентов связаны операторами проектирования и продолжения:

$$\begin{array}{ccccccc} R_0 & \xrightarrow{P} & R_1 & \xrightarrow{P} & \dots & \xrightarrow{P} & R_k & \xrightarrow{P} & \dots & \xrightarrow{P} & R_l = R_h. \\ & & \leftarrow & & \leftarrow & & \leftarrow & & \leftarrow & & \leftarrow \\ & & r & & r & & r & & r & & r \end{array}$$

Операторы $A_l = A_h$ и A_k , $k = 0, \dots, l-1$ заданы (рассчитаны) как описано выше. Заданы: ν – количество сглаживающих итераций; γ – количество рекурсивных вызовов метода на каждом уровне в иерархии (14). Одна итерация решения системы $A_h z_h = f_h$ определяется рекурсивной процедурой $z^{new} = MGM(l, z^{old}, f_h)$, где z^{old} – начальное приближение к z_h , а z^{new} – новое приближение. Схематично процедура имеет следующий вид.

$$\bar{z} = MGM(k, z, b)$$

{ if ($k = 0$) $\bar{z} = A_0^{-1}b$; //точное решение на самой грубой сетке

If ($k > 0$)

{ $z^0 = z$, $z^{i+1} = z^i - W_k^{-1}(A_k z^i - b)$, $i = 0, \dots, \nu - 1$; // ν базовых итераций– сглаживаний

$d = r(A_k z^\nu - b)$; //проектирование невязки на грубую сетку

$y^0 = 0$; //начальное приближение к ошибке

$y^{i+1} = MGM(k-1, y^i, d)$, $i = 0, \dots, \gamma - 1$; // γ итераций многосеточного метода // на грубой сетке

$\bar{z} = z^\nu - p y^\gamma$; //коррекция приближения z^ν с грубой сетки

};

Одно выполнение процедуры $z^{new} = MGM(l, z^{old}, f_h)$ является одной итерацией многосеточного метода. Всего выполняется заданное количество итераций или пока норма невязки $\|A_h z^{new} - f_h\|$ не станет меньше заданного ε .

На практике параметр γ , как правило, выбирают равным $\gamma = 1$ (V-цикл) или $\gamma = 2$ (W-цикл). На рис. 4, 5 показана схема этих циклов (стрелочками показана передача данных с одного сеточного уровня на другой, горизонтальные стрелочки показывают вычисления на одном уровне). Кроме V и W циклов иногда используют другие типы циклов, например F-циклы (рис.6).

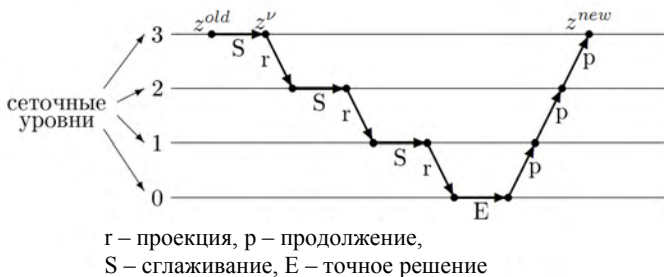


Рис. 4. V-цикл

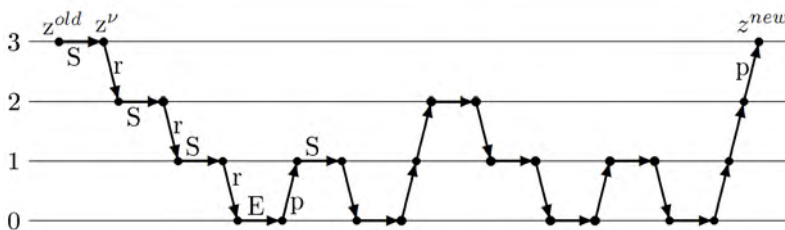


Рис. 5. W-цикл

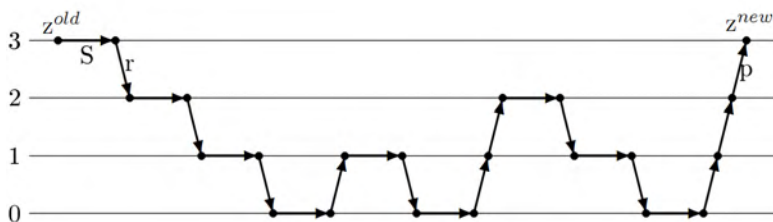


Рис. 6. F-цикл

Трудоёмкость алгоритмов при приближенном решении задач является оптимальной, если число арифметических операций для достижения заданной точности зависит линейно от числа неизвестных. Если обозначить через n_k число неизвестных на k -ом сеточном уровне, определить величину $C_n = \inf_{k=1, \dots, l} (n_k / n_{k-1})$, предположить, что одна итерация сглаживания, проектирования и продолжения на k -ом сеточном уровне требуют $O(n_k)$ операций (выполняется для систем, возникающих в МКЭ для уравнений в частных производных и «разумных» сглаживающих итераций, таким как метод Якоби и Зейделя), то получим трудоёмкость N_{mg} одного цикла многосеточного метода ($k = \gamma C_n^{-1}$) при l сеточных уровнях:

- $k < 1$, $N_{mg} = O(n_l)$;
- $k = 1$, $N_{mg} = O(n_l \ln n_l)$;
- $k > 1$, $N_{mg} = O(k^l n_l)$.

Для двухсеточного метода, рассмотренного выше, $C_n = 2$, V – цикл соответствует первому, а W – цикл второму случаю.

Циклы сглаживания могут использоваться как перед рекурсивным вызовом процедуры $\bar{z} = MGM(k, z, b)$ (предсглаживания), так и после вызова процедуры (постсглаживания). Для этого в алгоритм выше цикл сглаживания должен быть вставлен после коррекции приближения с грубой сетки.

По аналогии с двухсеточным методом (выражение (12)) можно указать матрицу итераций многосеточного метода с v_1 предсглаживаниями и с v_2 постсглаживаниями:

$$M_0(v_1, v_2) = 0, \quad M_k(v_1, v_2) = S_k^{v_2} (I - p(I - M_{k-1}^v) A_{k-1}^{-1} r A_k) S_k^{v_1}, \quad k = 1, \dots, l. \quad (15)$$

Здесь $S_k^{v_1}$, $S_k^{v_2}$ – матрицы сглаживающих итераций до и после коррекции с грубой сетки.

В различных работах, кроме указанных, рассматриваются и другие варианты многосеточных методов, которые адаптированы для конкретных задач или обладают дополнительными преимуществами. Стоит отметить, что универсальной оценки сходимости многосеточного метода для широкого круга задач не существует. В различных работах можно найти оценки сходимости для конкретных вариантов реализации многосеточного метода для рассматриваемого типа задач. В частности, оценки сходимости для задач, описываемых уравнениями типа реакция-диффузия, конвекция-диффузия, Навье–Стокса и ряда других, можно найти в [1, 2].

Список литературы

1. Ольшанский М. А. Лекции и упражнения по многосеточным методам. Москва: Изд-во ЦПИ при механико-математическом факультете МГУ, 2003.
2. Шайдуров В. В. Многосеточные методы конечных элементов. Москва: Наука, 1989.
3. Федоренко Р. П. О скорости сходимости одного итерационного процесса // ЖВМиМФ 4. 1964. С. 227–235.
4. Бахвалов Н. С. О сходимости одного релаксационного метода для эллиптического оператора с естественными ограничениями // Там же. 1966. 6. С. 101–135.
5. Brandt A. Multi-level adaptive technique (MLAT) for fast numerical solution to boundary value problems // Proc. 3rd Int. Conf. on Numerical Methods in Fluid Mechanics, Vol. 1, H. Gabannes, R. Temam (eds) in Lecture Notes in Physics 18, Springer, Berlin, 82–89. 1973.
6. Brandt A. Multi-level adaptive solution to boundary value problems, Math. Comput. 1977. Vol. 31. P. 331–390.
7. Hackbusch W. Ein iteratives Verfahren zur schnellen Auflösung elliptischer Randwertprobleme, Universität Köln, Report 77–8.
8. Hackbusch W. Multi-grid Methods and Applications. Berlin, Heidelberg: Springer, 1985.