

ИТЕРАЦИОННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ СПЕКТРАЛЬНОГО МЕТОДА ЧЕБЫШЕВА ДЛЯ ТРЕХМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА В ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

В. М. Волков¹⁾, Е. И. Кочаловская²⁾, В. Э. Грицель¹⁾

¹⁾ Белорусский государственный университет,
пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь, volkovvm@bsu.by

²⁾ Брестский государственный университет им. А.С. Пушкина\
бул. Космонавтов, 21, 224016, г. Брест, Беларусь, katerina.kulgun@gmail.com

Рассмотрен итерационный алгоритм реализации спектрального метода коллокации Чебышева для трехмерного уравнения Пуассона. Алгоритм основан на двухкомпонентной схеме переменных направлений 1D+2D, в которой для обработки двумерной компоненты использован алгоритм Бартельса – Стюарта. Представленные результаты численных экспериментов демонстрируют высокую эффективность алгоритма, вычислительная сложность которого близка к оптимальной.

Ключевые слова: спектральный метод Чебышева; уравнение Пуассона; метод переменных направлений.

Спектральные методы коллокации на основе полиномов Чебышева в последние годы завоевывают все большую популярность в качестве эффективного, высокоточного инструмента решения дифференциальных краевых задач [1]. В случае многомерных уравнений эллиптического типа одной из актуальных задач является разработка эффективных алгоритмов реализации спектральных моделей. Для двумерных задач весьма перспективные результаты демонстрируют итерационные методы переменных направлений [2]. Среди обобщений данного подхода на случай трехмерных задач можно отметить многокомпонентный вариант данной техники [3], в рамках которой, однако, до настоящего времени не решена в полной мере задача выбора оптимального набора итерационных параметров. В работе [4] для трехмерной задачи рассмотрена двухкомпонентная схема переменных направлений 1D+2D, в которой для реализации двумерной компоненты использован дополнительный внутренний итерационный метод переменных направлений (МПН) с оптимальным набором итерационных параметров. Вычислительная сложность методики [4] близка к оптимальной и оценивается величиной $O(n^3 \log n)$, где n – количество узлов сетки по каждому пространственному направлению. Тем не менее, реальные вычислительные затраты для методики [4] составляют десятки минут при $n \geq 50$.

Ниже представлена модифицированная версия алгоритма [4], которая сохраняет близкую к оптимальной вычислительную сложность и при этом позволяет многократно сократить время решения задачи.

Итак, рассмотрим задачу Дирихле для уравнения Пуассона в кубической области:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = -q(x, y), \quad (x, y, z) \in \Omega = (-1; 1) \times (-1; 1) \times (-1; 1), \quad (1)$$

$$u(x = \pm 1, y, z) = u(x, y = \pm 1, z) = u(x, y, z = \pm 1) = 0. \quad (2)$$

Спектральный метод коллокации для приближенного решения задачи (1), (2) на сетке Чебышевских узлов строится путем замены производных уравнения (1) на соответствующие матрицы спектрального дифференцирования с учетом краевых условий (2) [1]. Двухкомпонентный итерационный метод переменных направлений для реализации спектральной схемы решения (1), (2) представим в виде:

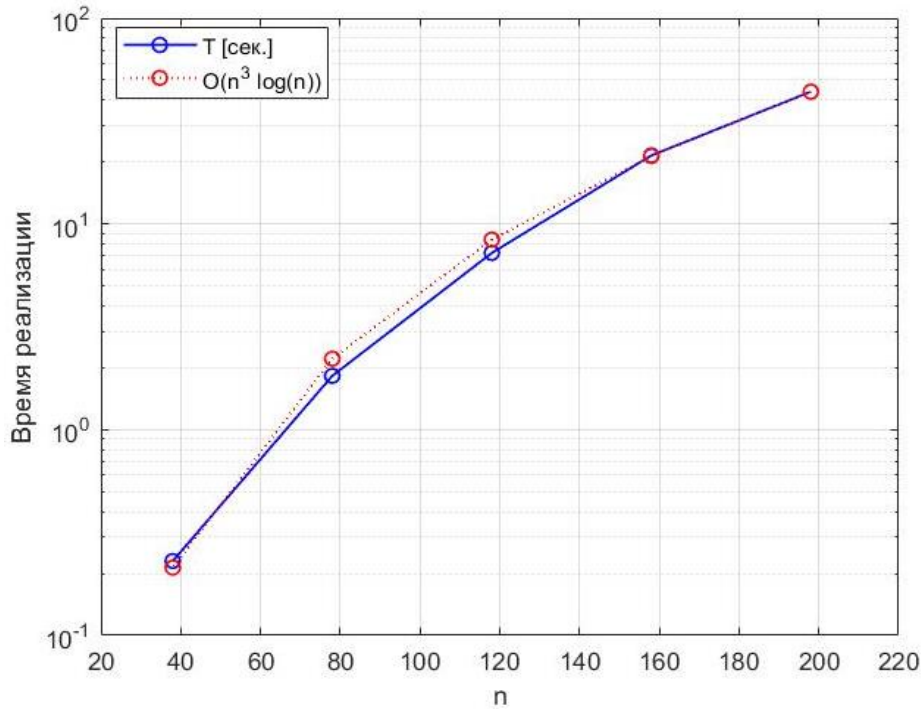
$$S_{m,1-} U^{m+1/2} = \omega_1^{m+1} U^m + DU_{21}^m + DU_{31}^m - F_1, \quad D_x U = DU^{m+1/2}, \quad (3)$$

$$S_{m,2-} U_{i,:}^{m+1} + U_{i,:}^{m+1} S_{m,2-}^T = S_{m,2+} U_{i,:}^{m+1/2} + U_{i,:}^{m+1/2} S_{m,2+}^T + DU_{i,:}^m + \omega_2^{m+1} U_{i,:}^{m+1.2} - F_{i,:}.$$

Здесь $U^{m+1/2} \in R^{(n-2) \times (n-2)^2}$, $S_{m,1\pm} = \omega_1^{m+1} E \pm D$, $S_{m,2\pm} = 2^{(-1\pm 1)/2} \omega_2^{m+1} E \pm D$, ω_1^{m+1} и ω_2^{m+1} — оптимальный набор итерационных параметров [4], $m = \overline{0, K}$, $E, D \in R^{(n-2) \times (n-2)}$ — единичная матрица и матрица дифференцирования Чебышева второго порядка, в которой для учета краевых условий (2) удалены первые и последние строки и столбцы [1], $U_{i,:}^{m+1} \in R^{(n-2) \times (n-2)}$ — двумерные массивы приближенного решения в плоскости (y, z) с координатой $x = x_i$, $i = \overline{2, n-1}$. Для вычисления производных по переменной x — DU_{21}^m (аналогично по z — DU_{31}^m) в трехмерном массиве приближенного решений задачи во внутренних узлах сетки $U \in R^{(n-2) \times (n-2) \times (n-2)}$ производится перестановка местами первой и второй (первой и третьей) размерностей массивов, затем производится преобразование массива к размерности $U \in R^{(n-2) \times (n-2)^2}$ и умножение слева на матрицу второй спектральной производной D . Далее массив приводится трехмерному виду с исходной последовательностью размерностей и преобразуется к двумерному виду $U \in R^{(n-2) \times (n-2)^2}$.

Несложно видеть, что уравнения для второй двумерной компоненты (3) имеет вид матричных уравнений Ляпунова. В отличие от [4], для обработки данной двумерной компоненты вместо МПН использован алгоритм Бартельса – Стюарта [5] с предвычисленным разложением Шура матриц $S_{m,2-}$.

Результаты численных экспериментов по оценке эффективности предложенного алгоритма (3) представлены на следующем рисунке.



Зависимость времени реализации алгоритма от размерности сетки

Вычислительной сложности МПН (3), как для одномерной, так и для двумерной компоненты с использованием алгоритма Бартельса – Стюарта, имеет порядок $O(n^4 \log n)$. В частно-

сти, вычислительная сложность реализация одномерной компоненты определяется необходимостью решения на каждой итерации n^2 систем линейных алгебраических уравнений с одинаковой полной матрицей размерности $n \times n$, минимальные вычислительные затраты на каждую составляют порядка $O(n^2)$ арифметических операций. При реализации двумерной компоненты требуется решение n матричных систем Ляпунова с затратой порядка $O(n^3)$ операций [5]. Векторизация алгоритма позволила оптимизировать временные затраты и по результатам численных экспериментов, фактическое время реализации (3) в зависимости от размерности сетки близко к оптимальным характеристикам и имеет порядок $O(n^3 \log n)$. При размерности сетки $200 \times 200 \times 200$ время решения задачи (1), (2) не превосходит 45 секунд, что более чем на два порядка быстрее, по сравнению с алгоритмом, предложенным в работе [4]. Реализация двумерной компоненты (3) примерно в три раза превосходит по времени реализацию одномерной компоненты. В этом сказывается возможность более полной векторизации операций для одномерной компоненты.

Количество итераций для достижения относительной нормы невязки решения $\varepsilon = 10^{-11}$ при размерности сетки $n = 40 \div 200$ составляет $K = 33 \div 51$. Этим обусловлен дополнительный логарифмический рост вычислительных затрат с ростом размерности сетки.

Аналогично результатам [6], предложенная методика может быть использована для реализации трехмерных эллиптических задач с переменными коэффициентами в качестве алгоритма обработки переобусловливателя итерационного метода би-сопряженных градиентов.

Библиографические ссылки

1. Trefethen L.N. Spectral methods in MATLAB. Society for industrial and applied mathematics, 2000.
2. Peaceman D. W., Rachford, Jr H. H. The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations // Journal of the Society for industrial and Applied Mathematics. 1955. Т. 3. №. 1. Р. 28-41.
3. Абрашин В. Н. Многокомпонентные итерационные методы переменных направлений // Математическое моделирование. 2000. Т. 12. №. 2. С. 45-58.
4. Fortunato D., Townsend A. Fast Poisson solvers for spectral methods // IMA Journal of Numerical Analysis. 2020. Т. 40. №. 3. Р. 1994-2018.
5. Bartels R. H., Stewart G. W. Algorithm 432 [C2]: solution of the matrix equation $AX + XB = C$ [F4] // Communications of the ACM. 1972. Т. 15. №. 9. Р. 820-826.
6. Волков В. М., Качаловская Е. И. Итерационная реализация спектрального метода Чебышева для двумерных эллиптических уравнений с переменными коэффициентами // Журнал Белорусского государственного университета. Математика. Информатика. 2023. №. 3. С. 53-62.