

УСКОРЕНИЕ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

А.В. Кондратьев

In this article some applications of acceleration methods for finite element problems is presented.

1. Методы решения систем линейных уравнений

В настоящее время известно много численных систем, в которых возникает необходимость решения систем линейных уравнений большой размерности. Возникает задача выбора наилучшего метода решения системы линейных уравнений. Нами была рассмотрена возможность использования ряда прямых (Гаусса, Холецкого, LU-разложение) и итерационных (Зейделя, верхней релаксации, сопряженных градиентов) методов. Для удобства анализа приведем краткое описание методов:

Метод Гаусса. Система:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} = b_i, \quad i = \overline{1, n} \quad (1)$$

приводится к треугольному виду:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} = b_i; \quad i = \overline{1, n} \quad (2)$$

Для этого x_i , $i = \overline{1, n-1}$ исключаем из уравнений $j = i + \overline{1, n}$, вычитая из j -го уравнения i -ое, умноженное на $g = \frac{a_{ji}}{a_{ii}}$;

$$b_j = b_j - gb_i; \quad a_{jk} = a_{jk} - ga_{ik}; \quad k = \overline{i+1, n} \quad (3)$$

Затем вычисляем:

$$x_n = \frac{b_n}{a_{n,n}} \quad (4)$$

а далее

$$x_{n-i} = (b_{n-i} - \sum_m^n a_{m-i,j} x_j) / a_{n-i,n-i} \quad (5)$$

$$j = n - i + 1, \quad i = \overline{1, n-1}$$

Метод Холецкого: Если в системе $[A]\vec{x} = \vec{b}$ матрица $[A]$ симметрична и положительно определена, то \exists нижняя треугольная матрица $[L]$ такая, что

$$[A] = [L][L^T]. \quad (6)$$

Тогда

$$[L][L^T]\vec{x} = \vec{b}, \quad (7)$$

а исходную систему можно заменить двумя системами:

$$[L]\vec{y} = \vec{b}, [L^T]\vec{x} = \vec{y} \quad (8)$$

с треугольными матрицами. Матрицу $[L]$ можно найти из соотношений: $l_{11} = \sqrt{a_{11}}$, $l_{i1} = a_{1i}/l_{11}$, $i = \overline{2, n}$

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}, \quad l_{i1} = a_{1i}/l_{11}, \quad i = \overline{2, n} \quad (9)$$

$$l_{ji} = \frac{a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}l_{jk}}{l_{ii}}, \quad j = \overline{i+1, n}.$$

Этот метод получил широкое распространение при решении больших разреженных систем.

LU-разложение: Систему $[A]\vec{x} = \vec{b}$ заменяют парой систем:

$$[L]\vec{y} = \vec{b}; \quad [U]\vec{x} = \vec{b}, \quad (10)$$

где $[U]$ – верхняя треугольная матрица, образующаяся в прямом ходе метода Гаусса, а $[L]$ – нижняя треугольная матрица, на диагонали которой единицы, в $l_{ij} = g$ (см. метод Гаусса) $j > i$. Этот метод можно считать обобщением метода Холецкого на случай несимметричных матриц.

Однако, как показали расчеты, при большой размерности системы, более 2 тыс. неизвестных и при плохой обусловленности матрицы, прямыми методами не всегда получается получить решение с высокой точностью. Для получения решения в таких случаях мы предлагаем собственную процедуру, заключающуюся в следующем: после решения системы прямым методом полученный вектор решений поступает в качестве первоначального заброса для решения системы итерационным методом.

Приведем описание этих методов:

Метод Зейделя: Из системы

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i; \quad i = \overline{1, n} \quad (11)$$

выражаем x_i , $i = \overline{1, n}$ из i -го уравнения

$$a_{ii}x_i = b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij}x_j = (b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij}x_j) + a_{ii}x_i \quad (12)$$

(в правой части старое значение x_i , в левой – новое).

$$x_i = x_i + \frac{s_i}{a_{ii}}; \quad (13)$$

где

$$s_i = b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \quad (14)$$

невязка i -го уравнения.

Если матрица $[A]$ симметрична и положительно определена, то описанная процедура есть не что иное, как метод покоординатного спуска при минимизации функции:

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}x_i x_j - \sum_{i=1}^n b_i x_i, \quad (15)$$

следовательно, сходится к решению системы.

Метод верхней релаксации: Если x , y - две последовательные итерации метода Зейделя, то можно подобрать число $1 < \omega < 2$, (зависящее от спектра матрицы), такое, что процесс:

$$x = x + \omega(y - x) \quad (16)$$

сходится существенно быстрее метода Зейделя (в отдельных случаях до 30 раз).

Метод сопряженных градиентов:

Если при решении системы $[A]x = b$ с симметричной, положительно определенной матрицей $[A]$ (или, что то же самое при минимизации функции $f(x) = \frac{1}{2}([A]x, x) - (b, x)$, спускаться не по координатам, а по направлениям P_1, \dots, P_n таким, что $(P_i, [A]P_j) = 0$, то можно показать, что такая процедура должна сходиться к решению не более, чем за n шагов (практически требуемая точность достигается существенно быстрее).

Приведем выражение для нахождения $P_i, i = 1, n$ и вычисления шагов вдоль этих направлений

$$r_0 = b - [A]x_0, \quad P_0 = r_0; \quad (17)$$

где x_0 – вектор начального заброса, r_0 – вектор невязок.

Пусть на некотором шаге k

$$\lambda_k = \frac{(\vec{r}_k, \vec{P}_k)}{(\vec{P}_k, [A]\vec{P}_k)}, \quad (18)$$

тогда

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \lambda_k \vec{P}_k \quad (19)$$

$$\vec{r}_{k+1} = \vec{b} - [A]\vec{x}_{k+1} = \vec{r}_k - \lambda_k [A]\vec{P}_k, \quad (20)$$

и если ввести

$$\beta_k = -\frac{(\vec{r}_{k+1}, [A]\vec{P}_k)}{(\vec{P}_k, [A]\vec{P}_k)}, \quad (21)$$

то $\overrightarrow{P_{k+1}}$ вектор сопряженного направления.

$$\overrightarrow{P_{k+1}} = \overrightarrow{r_{k+1}} + \beta_k \overrightarrow{P_k}. \quad (22)$$

Нетрудно показать, что $(\overrightarrow{r_i}, \overrightarrow{r_j}) = 0$, откуда следует сформулированное выше утверждение о сходимости метода, а также $(\overrightarrow{r_j}, \overrightarrow{P_j}) = 0; i > j$ откуда $([A]\overrightarrow{P_i}, \overrightarrow{P_j}) = 0$.

2. Методы ускорения итерационных процессов

Для широкого класса итерационных процессов можно добиться значительного увеличения скорости сходимости применением экстраполяции Эйткина [1, 2]. Приведем краткое описание этой процедуры. Пусть

$$\overline{x}^{n+1} = \overline{g}(\overline{x}^n) \quad (23)$$

– некоторый итерационный процесс, сходящийся к точке \overline{x}^* , тогда

$$\overline{x}^* = \overline{g}(\overline{x}^*). \quad (24)$$

Пусть

$$\overline{e}^n = \overline{x}^n - \overline{x}^*, \quad (25)$$

где \overline{e}^n невязка n -го шага. Далее, разложив \overline{x}^{n+1} в окрестности \overline{x}^* в ряд Тейлора, получим:

$$\overline{x}^{n+1} = \overline{g}(\overline{x}^n) = \overline{g}(\overline{x}^*) - g_{i,k}(\overline{x}^*)(x_k^n - x_k^*) + \dots \quad (26)$$

где $g_{i,k}(\overline{x}^*) = \|J\|$ -матрица Якоби функции g .

Тогда:

$$\overline{x}^{n+1} = \overline{g}(\overline{x}^k) + \|J\|\overline{e}^n, \quad (27)$$

откуда

$$\overline{e}^{n+1} \approx \lambda \overline{e}^n, \quad (28)$$

где λ – максимальное собственное число матрицы $\|J\|$. Соотношение (28) показывает, что итерационный процесс будет расходиться. То есть невязка будет нарастать, если $|\lambda| > 1$, и наоборот, если $|\lambda| < 1$, то процесс будет сходиться. Для оценки значения максимального числа введем два вектора:

$$\overline{Z} = \overline{e}^{n+2} - \overline{e}^{n+1} = \overline{x}^{n+2} - \overline{x}^* - \overline{x}^{n+1} + \overline{x}^* = \overline{x}^{n+2} - \overline{x}^{n+1}, \quad (29)$$

$$\overline{y} = \overline{e}^{n+1} - \overline{e}^n = \overline{x}^{n+1} - \overline{x}^* - \overline{x}^n + \overline{x}^* = \overline{x}^{n+1} - \overline{x}^n. \quad (30)$$

Из соотношений (29) и (30) следует:

$$\overline{Z} = \overline{e}^{n+2} - \overline{e}^{n+1} = \lambda \overline{e}^{n+1} - \lambda \overline{e}^n = \lambda(\overline{e}^{n+1} - \overline{e}^n). \quad (31)$$

Подставим в (31) соотношение (30) и получим

$$\overline{Z} = \lambda \overline{y}. \quad (32)$$

Умножим выражение (32) скалярно справа и слева на \bar{y} , тогда

$$\lambda = \frac{(\bar{Z}, \bar{y})}{(\bar{y}, \bar{y})}. \quad (33)$$

Выразим через λ и \bar{Z} значение вектора \bar{e}^{n+2} из соотношений (28) и (29):

$$\bar{e}^{n+2} = \frac{\lambda \bar{Z}}{\lambda - 1}. \quad (34)$$

Далее, используя выражение (25), получим:

$$\bar{x}^* = \bar{x}^{n+2} - \bar{e}^{n+2}. \quad (35)$$

Выполняя такие поправочные операции после каждых двух итераций процесса, мы получим увеличение скорости сходимости различных методов.

Например, метода Ньютона-Канторовича в 2,5 раза, метода Зейделя для больших разреженных систем в 8 раз.

В работе австралийского математика Лаузера природа такого ускорения получила интересное объяснение [3].

Пусть $\bar{\Phi}$ - собственный вектор матрицы $\|J\|$, соответствующий максимальному собственному числу λ .

Пусть

$$h_i(\bar{x}) = g_i(\bar{x}) + \frac{\lambda}{1 - \lambda} \Phi_i \Phi_e (g_e(\bar{x}) - x_e). \quad (36)$$

Тогда $h_i(\bar{x}^*) = \bar{x}^*$, следовательно, итерационный процесс сходится в той же точке, что и g

$$h_i(\bar{\Phi}) = \lambda \Phi_i + \frac{\lambda}{1 - \lambda} \Phi_i \Phi_e (\lambda \Phi_e - \Phi_e) = \lambda \Phi_i - \lambda \Phi_i = 0. \quad (37)$$

Если $\bar{\Phi}^*$ - собственный вектор, соответствующий собственному числу $\lambda^* \neq \lambda$, то:

$$h_i(\bar{\Phi}^*) = \lambda^* \Phi_i^* + \frac{\lambda}{1 - \lambda} \Phi_i \Phi_e (\lambda \Phi_e^* - \Phi_e) = \lambda^* \Phi_i^* + \frac{\lambda}{1 - \lambda} \Phi_i (\Phi_e \Phi_e^*) (\lambda^* - 1) = \lambda^* \Phi_i^*, \quad (38)$$

откуда видно, что максимальное собственное число матрицы Якоби функции h меньше, чем для g , следовательно, h процесс сходится быстрее, чем исходный. Другими словами, срезается то направление, по которому процесс ведет себя особенно «плохо», таким образом можно не только ускорять сходящиеся процессы, но и добиваться сходимости расходящихся. Если в качестве приближения $\bar{\Phi}$ взять $\frac{\bar{Z}}{\|\bar{Z}\|}$ (см. 29), то получим:

$$h_i(\bar{x}) = g_i(\bar{x}) + \frac{\lambda}{1 - \lambda} \frac{Z_i}{\|Z\|} Z_e (g_e(\bar{x}) - x_e). \quad (39)$$

Подставляя вместо \bar{x} - \bar{x}^{n+1} , получим

$$h_i(\bar{x}) = x_i^{n-2} + \frac{\lambda}{1 - \lambda} \frac{Z_i}{\|Z\|} (Z_e * Z_e) = x_i^{n-2} - \lambda \frac{Z_i}{\lambda - 1}. \quad (40)$$

Сравнивая формулы (40) модификации Лаузера и (34) экстраполяции Эйткина, можно увидеть, что с точки зрения численной реализации, они тождественны. Ряд примеров применения описанной выше процедуры приведен в работе [3].

ВЫВОДЫ

1. Разработана методика и программы расчета для ускорения различных методов решения систем линейных уравнений, надежность методики подтверждена совпадением с аналитическими решениями. На основе использования данных процедур значительно снижены число операций и затраты машинного времени при решении задач расчета напряженно-деформированного состояния методом конечных элементов.
2. В ряде случаев при моделировании итерационных процедур имели место вообще расходящиеся процессы, однако после применения итерационного уточнения с использованием экстраполяции Эйткина удавалось из расходящегося процесса получить сходящийся, что существенно расширяет область применения данных процедур.
3. Для повышения точности расчетов после прямого метода решения системы линейных уравнений применено итерационное уточнение с использованием экстраполяции Эйткина.

ЛИТЕРАТУРА

1. Aitken A.C. *On Bernoulli's numerical Solution of algebraic equation* // Proc. Roy. Soc. Edinburgh. 1926. V.46. P.513-532.
2. Aitken A.C. *Studies in practical mathematics* // Proc. Roy. Soc. Edinburgh. 1926. V.46. P.1112-1123.
3. Lawther R. *Modifications of iterative processes for improved convergence characteristics* // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 1980. V.15. P.1149-1159.