



ZBIGNIEW WOŹNICKI (Warszawa)

Dwuprzebiegowe metody iteracyjne AGA rozwiązywania dużych układów równań liniowych

Wstęp. Jednym z ważniejszych zadań współczesnej analizy numerycznej jest rozwiązywanie dużych układów równań liniowych. Zadania takie pojawiają się szczególnie często w fizyce reaktorowej, przy numerycznym rozwiązywaniu wielogrupowego równania dyfuzji neutronów, odgrywającego istotną rolę w opisie matematycznym zjawisk fizycznych zachodzących w reaktorach jądrowych. Wielomiarowe równanie dyfuzji neutronów należy do klasy eliptycznych równań różniczkowych cząstkowych i zwykle w praktycznych zastosowaniach reaktorowych problem rozwiązania takiego równania sprowadza się do równoważnego mu problemu różnicowego polegającego na rozwiązaniu układu równań liniowych postaci

$$(1) \quad A\varphi = c,$$

gdzie c jest znanym wektorem, a A nieosobliwą macierzą $n \times n$.

Macierze A , charakteryzujące takie układy, są zaliczane do macierzy rzadkich, tzn. zawierają znaczną liczbę elementów zerowych, a elementy niezerowe są usytuowane w pewien regularny sposób zajmując miejsca zwykle na kilku tylko diagonalach. Powyższe własności macierzy rzadkich pozwalają przechowywać w pamięci maszyny cyfrowej macierze, których wymiar n przekracza nieraz 100 000. Ponadto macierze tego typu są monotoniczne, tj. spełniają warunek, że macierz odwrotna istnieje i jest nieujemna.

Istnieje wiele metod rozwiązywania dużych układów równań liniowych. W przypadku najprostszym, gdy macierz A jest trójdzielna, stosuje się powszechnie algorytm eliminacji Gaussa. W pozostałych przypadkach, gdy macierz A zawiera więcej niż trzy niezerowe diagonale, przy czym niektóre z nich są oddalone od diagonali głównej, stosuje się metody iteracyjne. Do najczęściej używanych metod iteracyjnych należą rozmaite modyfikacje metody kolejnych nadrelaksacji, tzw. metody SOR. Oprócz metod SOR stosuje się również metody ADI (Alternating Direct Implicit Methods), Czebyszewa i inne. Powyższe metody iteracyjne mają ugruntowane podstawy teoretyczne i są opisane w obszernej monograficznej pracy Younga [12].

W ostatnich kilkunastu latach obserwuje się wzmożone zainteresowanie metodami

faktoryzacyjnymi w zastosowaniu do rozwiązywania dużych układów równań liniowych. Do znanych w literaturze metod faktoryzacyjnych należą metody Buleeva [3], Oliphanta [7], [8], Stone'a [9] i Duponta [4], [5]. Celem niniejszego artykułu jest przedstawienie opracowanych w Instytucie Badań Jądrowych w Świerku metod dwuprzebiegowych, obejmujących obszerną klasę iteracyjnych metod faktoryzacyjnych i opisanych szczegółowo w pracy [11].

Praca [11] zawiera ścisłą analizę i jakościowe porównanie metod faktoryzacyjnych z metodami klasycznymi Jacobiego i Gaussa-Seidela, w oparciu o teorię macierzy nieujemnych zapoczątkowaną przez Perrona i Frobeniusa, a rozszerzoną przez Vargę [10] dzięki wprowadzeniu regularnego podziału macierzy. Praca [11] zapoczątkowała serię dalszych prac nad metodami faktoryzacyjnymi. R. Beauwens, adaptując formalizm macierzowy użyty do opisu metod dwuprzebiegowych, uzyskał szereg wyników dotyczących klasyfikacji i porównania szybkości zbieżności różnych metod faktoryzacyjnych. Jedną z ostatnich publikacji Beauwensa [2] obejmuje analizę szybkości zbieżności niektórych metod faktoryzacyjnych dla macierzy monotonicznych. Próbę klasyfikacji metod faktoryzacyjnych zawiera również praca Miki [6].

Ażeby nie powiększać zbyt wiele objętości niniejszego artykułu, dalsze rozważania ograniczą się do podania podstawowych pojęć teorii macierzy nieujemnych zaczerpniętych z pracy Vargi [10], opisu idei metod dwuprzebiegowych i przytoczenia ważniejszych otrzymanych wyników teoretycznych z pominięciem dowodów oraz podania wyników numerycznych ilustrujących metody dwuprzebiegowe. Szczegółowe informacje dotyczące użytkowania tych metod jak również dowody twierdzeń można znaleźć w pracy [11].

Podstawowe pojęcia teorii macierzy nieujemnych. W przypadku ogólnym typowe metody iteracyjne rozwiązywania równania (1) można opisać wspólnym schematem, wyrażając macierz w równaniu (1) w formie różnicy dwóch macierzy M i N , przy czym M musi być macierzą nieosobliwą, tj.

$$(2) \quad A = M - N.$$

Wprowadzamy następujący schemat iteracyjny

$$M\varphi^{(m+1)} = N\varphi^{(m)} + c, \quad m \geq 0,$$

który można napisać w formie równoważnej jako

$$(3) \quad \varphi^{(m+1)} = M^{-1}N\varphi^{(m)} + M^{-1}c, \quad m \geq 0,$$

Warunkiem koniecznym i dostatecznym zbieżności schematu iteracyjnego (3) do rozwiązania równania (1) dla każdego wektora początkowego $\varphi^{(0)}$ jest

$$(4) \quad \lim_{m \rightarrow \infty} (M^{-1}N)^m = 0,$$

tzn. kolejne potęgi macierzy iteracyjnej $M^{-1}N$ muszą być zbieżne do macierzy zerowej. Macierze spełniające warunek (4) noszą nazwę macierzy zbieżnych.

Poszczególne metody iteracyjne różnią się między sobą wyborem macierzy M i N w podziale macierzy A i poszukiwanie nowych efektywnych metod iteracyjnych

sprowadza się do konstruowania takich podziałów macierzy A , aby kolejne potęgi macierzy iteracyjnych $M^{-1}N$, odpowiednio szybko zbiegały do macierzy zerowej wraz ze wzrostem wykładnika potęgi.

Metody dwuprzebiegowe powstały przy numerycznym rozwiązywaniu dwuwymiarowego równania dyfuzji neutronów, należącego do klasy eliptycznych równań różniczkowych cząstkowych. Macierze $A = (a_{ij})$, gdzie $1 \leq i, j \leq n$, charakteryzujące układy równań liniowych w tego typu problemach oprócz tego, że są rzadkie mają następujące własności:

- (a) wszystkie elementy diagonalu głównej są dodatnie;
- (b) wszystkie elementy nie leżące na głównej diagonalu są niedodatnie;
- (c) są nieredukowalnymi ⁽¹⁾ diagonalnie dominującymi macierzami, tzn.

$$(5) \quad |a_{ii}| \geq \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}|$$

dla wszystkich $1 \leq i \leq n$, przy czym ostra nierówność jest spełniona co najmniej dla jednego i .

Warunki (a) i (c) są warunkami wystarczającymi na to, aby macierz A była nieosobliwa, a warunek (b) sprawia, że macierz A jest monotoniczna, tzn. $A^{-1} \geq 0$.

Dalsze rozważania ograniczymy do macierzy A spełniających powyższe trzy warunki i zdefiniowanych następująco:

$$(6) \quad \left\{ \begin{array}{l} A = K - L - U, \\ K = (k_{ij}) = \text{diag}(A) \geq 0, \quad k_{ij} = \begin{cases} a_{ij} & \text{dla } i = j, \\ 0 & \text{dla } i \neq j; \end{cases} \\ L = (l_{ij}) \geq 0, \quad l_{ij} = \begin{cases} -a_{ij} & \text{dla } i > j, \\ 0 & \text{dla } i \leq j; \end{cases} \\ U = (u_{ij}) \geq 0, \quad u_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{dla } i \geq j, \\ -a_{ij} & \text{dla } i < j. \end{cases} \end{array} \right.$$

Warunek (5) można zapisać w postaci

$$(5a) \quad k_{ii} \geq \sum_{j=1}^n (l_{ij} + u_{ij}) \quad \text{dla } 1 \leq i \leq n$$

przy ostrej nierówności co najmniej dla jednego i . Z powyższych definicji wyraźnie widać, że K jest macierzą diagonalną nieosobliwą, L jest macierzą ściśle trójkątną dolną, a U jest macierzą ściśle trójkątną górną.

Podstawowym pojęciem stosowanym w pracy [11] przy porównywaniu szybkości zbieżności różnych metod iteracyjnych jest promień spektralny, który dla dowolnej $n \times n$ macierzy B definiuje się następująco

$$(7) \quad \rho(B) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|,$$

⁽¹⁾ Definicja por. [10], [11], [12].

gdzie λ_i są wartościami własnymi macierzy B , a warunkiem koniecznym i dostatecznym na to, aby macierz B była zbieżna, jest warunek

$$(8) \quad \varrho(B) < 1.$$

W przypadku dwóch macierzy nieujemnych B_1 i B_2 , dla których $\varrho(B_1) < \varrho(B_2) < 1$ będziemy mówili, że macierz B_1 jest zbieżna szybciej niż macierz B_2 . Tak więc warunkiem koniecznym i dostatecznym, aby metoda iteracyjna wyrażona przez równanie (3) była zbieżna, jest warunek $\varrho(M^{-1}N) < 1$.

Istotną rolę w teorii macierzy nieujemnych odgrywają twierdzenia dla macierzy nieredukowalnych. Dla celów niniejszego artykułu można ograniczyć się do podania niektórych wniosków dotyczących promieni spektralnych:

— dla dowolnej $n \times n$ macierzy nieujemnej i nieredukowalnej $B = (b_{ij})$, promień spektralny $\varrho(B)$ spełnia relację

$$(9) \quad \sum_{j=1}^n b_{ij} = \varrho(B) \quad \text{dla wszystkich } 1 \leq i \leq n$$

albo

$$(10) \quad \min_{1 \leq i \leq n} \left(\sum_{j=1}^n b_{ij} \right) < \varrho(B) < \max_{1 \leq i \leq n} \left(\sum_{j=1}^n b_{ij} \right);$$

— dla dwóch $n \times n$ macierzy B_1 i B_2 , dla których $B_1 \geq B_2 \geq 0$,

$$(11) \quad \varrho(B_2) \leq \varrho(B_1),$$

przy czym ostra nierówność zachodzi w nierówności (11) w przypadku, gdy macierz B_1 jest nieredukowalna (nierówność $B_1 \geq B_2 \geq 0$ oznacza, że istnieje co najmniej jeden element macierzy B_2 większy od zera oraz istnieje jedna para odpowiadających sobie elementów macierzy B_1 i B_2 , dla których zachodzi ostra nierówność).

Macierze występujące przy numerycznym rozwiązywaniu równań cząstkowych eliptycznych są macierzami nieredukowalnymi, a ponieważ spełniają definicję (6) i warunek (5a), stąd nazywane są często macierzami nieredukowalnymi diagonalnie dominującymi, dla których, jak wykazał Varga [10], $A^{-1} > 0$.

Ważnym pojęciem wprowadzonym przez Vargę do teorii macierzy nieujemnych jest regularny podział macierzy A określany następująco: dla $n \times n$ macierzy A , M i N

$$(12) \quad A = M - N$$

jest *regularnym podziałem macierzy A* , jeśli M jest macierzą nieosobliwą i spełnione są warunki

$$(12a) \quad M^{-1} \geq 0 \quad \text{i} \quad N \geq 0.$$

Konsekwencją wprowadzenia tego pojęcia są dwa następujące twierdzenia Vargi:

TWIERDZENIE 1. *Jeśli $A = M - N$ jest regularnym podziałem macierzy A i $A^{-1} \geq 0$, wówczas*

$$(13) \quad \varrho(M^{-1}N) = \frac{\varrho(A^{-1}N)}{1 + \varrho(A^{-1}N)} < 1.$$

TWIERDZENIE 2. Niech $A = M_1 - N_1 = M_2 - N_2$ będą dwoma regularnymi podziałami macierzy A takiej, że $A^{-1} > 0$. Jeśli $N_2 \geq N_1 \geq 0$, wówczas

$$(14) \quad 0 < \varrho(M_1^{-1}N_1) < \varrho(M_2^{-1}N_2) < 1.$$

Z twierdzenia 1 wynika, że w przypadku macierzy monotonicznych wszystkie metody iteracyjne zachowujące regularny podział macierzy A są zbieżne. Natomiast twierdzenie 2 pokazuje, że jeśli w przypadku macierzy nieredukowalnych diagonalnie dominujących uda nam się skonstruować takie regularne podziały macierzy A , w których $N_2 \geq N_1 \geq 0$, to metoda iteracyjna z macierzami M_1 i N_1 będzie zbieżna szybciej niż metoda z macierzami M_2 i N_2 .

Przed przejściem do opisu dwuprzebiegowych metod iteracyjnych zdefiniujemy jeszcze dwie podstawowe metody iteracyjne Jacobiego i Gaussa–Seidela przez podanie macierzy M i N w podziale macierzy A zdefiniowanej jak w (6) i (5a).

Metoda iteracyjna Jacobiego:

$$(15) \quad M_J = K; \quad N_J = L + U \geq 0,$$

$$(16) \quad \varphi^{(m+1)} = K^{-1}(L + U)\varphi^{(m)} + K^{-1}c, \quad m \geq 0.$$

Tak więc, macierzą iteracyjną w metodzie Jacobiego jest macierz

$$(17) \quad \mathcal{B} = K^{-1}(L + U) \geq 0.$$

Metoda iteracyjna Gaussa–Seidela:

$$(18) \quad M_G = K - L; \quad N_G = U \geq 0,$$

$$(19) \quad \varphi^{(m+1)} = (I - K^{-1}L)^{-1}K^{-1}U\varphi^{(m)} + (I - K^{-1}L)^{-1}K^{-1}c, \quad m \geq 0,$$

i macierzą iteracyjną w tej metodzie jest macierz

$$(20) \quad \mathcal{L}_1 = (I - K^{-1}L)^{-1}K^{-1}U \geq 0.$$

Jak łatwo można stwierdzić, w obu metodach występuje regularny podział macierzy A . Przeprowadzona w pracy analiza metod dwuprzebiegowych obejmuje między innymi ich porównanie z metodami Jacobiego i Gaussa–Seidela.

Metody dwuprzebiegowe iteracyjne. Idea metod dwuprzebiegowych polega na wyrażeniu macierzy M w formie iloczynu pewnych macierzy trójkątnych nieosobliwych.

W punkcie wyjściowym korzysta się z następującego przedstawienia macierzy A , równoważnego definicji (6):

$$(21) \quad A = K - P_A - (L + H) - (U + Q) + P_A + H + Q,$$

gdzie macierze K , L i U są zdefiniowane w (6), a

$$(22) \quad \begin{cases} P_A = \text{diag}(p_{ii}) \geq 0, & p_{ii} \geq 0 & \text{dla } 1 \leq i \leq n, \\ H = (h_{ij}) \geq 0, & h_{ij} = 0 & \text{dla } i < j, \\ Q = (q_{ij}) \geq 0, & q_{ij} = 0 & \text{dla } i > j. \end{cases}$$

Tak więc $L + H$ jest ściśle trójkątną dolną macierzą, a $U + Q$ jest ściśle trójkątną górną macierzą.

Zakładamy następujący warunek dla macierzy diagonalnych

$$(23) \quad K \geq P_A \geq 0,$$

gdzie $k_{ii} > p_{ii} \geq 0$ dla wszystkich $1 \leq i \leq n$.

Wówczas macierz

$$(24) \quad D_A = K - P_A \geq 0$$

jest nieosobliwa i $D_A^{-1} \geq 0$. Stąd

$$(25) \quad A = D_A - (L+H) - (U+Q) + P_A + H + Q.$$

Pierwsze trzy człony prawej strony (25) można wyrazić przez tożsamość:

$$(26) \quad D_A - (L+H) - (U+Q) \equiv \\ \equiv [I - (L+H)D_A^{-1}]D_A[I - D_A^{-1}(U+Q)] - (L+H)D_A^{-1}(U+Q),$$

a $(L+H)D_A^{-1}(U+Q)$ przedstawić w formie sumy macierzy nieujemnych, tj.

$$(L+H)D_A^{-1}(U+Q) = R_A + H_1 + Q_1 + T_A \geq 0,$$

gdzie $R_A = \text{diag}[(L+H)D_A^{-1}(U+Q)]$, H_1 jest ściśle trójkątną dolną macierzą, Q_1 jest ściśle trójkątną górną macierzą.

Jeśli dobierzemy macierze P_A , H i Q w taki sposób, że

$$(27) \quad P_A = R_A, \quad H = H_1 \quad \text{ i } \quad Q = Q_1,$$

wówczas otrzymamy

$$(28) \quad A = M_A - N_A,$$

gdzie

$$(29) \quad M_A = [I - (L+H)D_A^{-1}]D_A[I - D_A^{-1}(U+Q)] \quad \text{ i } \quad N_A = T_A \geq 0.$$

W pracy [11] wykazano, że spełnienie warunków (27) jest możliwe zawsze, ponieważ macierze $L+H$ i $U+Q$ są ściśle trójkątne i macierz $(L+H)D_A^{-1}(U+Q)$ ma zawsze zerowe pierwszą kolumnę i pierwszy wiersz. Ponadto Beauwens [1] dowiódł, że w przypadku macierzy nieredukowalnych diagonalnie dominujących macierze D_A są nieosobliwe i nieujemne. Ponieważ macierz M_A jest nieosobliwa i $M_A^{-1} \geq 0$, to z zasady regularnego podziału macierzy A , na mocy twierdzenia 1 wynika, że metoda iteracyjna określona równaniem

$$(30) \quad \varphi^{(m+1)} = M_A^{-1}N_A\varphi^{(m)} + M_A^{-1}c, \quad m \geq 0,$$

jest zbieżna i

$$(31) \quad \mathcal{A}_1 = M_A^{-1}N_A = [I - D_A^{-1}(U+Q)]^{-1}D_A^{-1}[I - (L+H)D_A^{-1}]^{-1}T_A \geq 0$$

jest macierzą iteracyjną w tej metodzie.

Wprowadzając wektor pomocniczy β , równanie (30) można zapisać w następującej formie równoważnej:

$$(32) \quad \begin{aligned} \beta^{(m+1)} &= (L+H)D_A^{-1}\beta^{(m+1)} + T_A\varphi^{(m)} + c, \\ \varphi^{(m+1)} &= D_A^{-1}[(U+Q)\varphi^{(m+1)} + \beta^{(m+1)}], \quad m \geq 0. \end{aligned}$$

Ponieważ $(L+H)D_A^{-1}$ i $D_A^{-1}(U+Q)$ są macierzami ściśle trójkątnymi, kolejne składowe wektora $\beta^{(m+1)}$ można obliczać rekurencyjnie dla wzrastających indeksów, a następnie, mając obliczony wektor $\beta^{(m+1)}$, można znowu obliczać rekurencyjnie kolejne składowe wektora $\varphi^{(m+1)}$ w kierunku malejących indeksów, stąd pochodzi nazwa metod dwuprzebiegowych.

Metoda ta o nazwie AGA jest ogólną formą metody dwuprzebiegowej obejmującą zarówno schematy iteracyjne różniące się między sobą wyborem macierzy H i Q , jak również algorytm metody bezpośredniej, znany jako eliminacja Gaussa, otrzymywany przy szczególnym wyborze macierzy H i Q .

Wersję podstawową metody AGA, tzw. metodę EWA, otrzymuje się przez przyjęcie zerowych macierzy H i Q , a odpowiadające równania wyrażają się następująco:

$$(29a) \quad M_E = [I - LD_E^{-1}]D_E[I - D_E^{-1}U] \quad \text{i} \quad N_E = T_E \geq 0,$$

$$(30a) \quad \varphi^{(m+1)} = M_E^{-1}N_E\varphi^{(m)} + M_E^{-1}c, \quad m \geq 0,$$

gdzie

$$(31a) \quad \mathcal{E}_1 = M_E^{-1}N_E = [I - D_E^{-1}U]^{-1}D_E^{-1}[I - LD_E^{-1}]^{-1}T_E \geq 0$$

jest macierzą iteracyjną w algorytmie EWA oraz

$$(32a) \quad \begin{aligned} \beta^{(m+1)} &= LD_E^{-1}\beta^{(m+1)} + T_E\varphi^{(m)} + c, \\ \varphi^{(m+1)} &= D_E^{-1}[U\varphi^{(m+1)} + \beta^{(m+1)}], \quad m \geq 0. \end{aligned}$$

W przypadku macierzy A trójdzielnych występujących przy rozwiązywaniu jednowymiarowego równania dyfuzji T_E staje się macierzą zerową, tj. $LD_E^{-1}U = P_E$ i algorytm EWA przechodzi w algorytm eliminacji Gaussa powszechnie stosowany w jednowymiarowych kodach dyfuzyjnych.

W przypadku ogólnym można zawsze dobrać macierze H i Q tak, aby otrzymać zerową macierz T , co oznacza, że

$$(L + H_D)D_D^{-1}(U + Q_D) = P_D + H_D + Q_D.$$

W ten sposób otrzymujemy algorytm eliminacji Gaussa dany przez równania

$$(29b) \quad M_D = [I - (L + H_D)D_D^{-1}]D_D[I - D_D^{-1}(U + Q)] \equiv A \quad \text{i} \quad N_D \equiv 0,$$

$$(30b) \quad \varphi = M_D^{-1}c = [I - D_D^{-1}(U + Q)]^{-1}D_D^{-1}[I - (L + H)D_D^{-1}]^{-1}c$$

oraz

$$(32b) \quad \begin{aligned} \beta &= (L + H_D)D_D^{-1}\beta + c, \\ \varphi &= D_D^{-1}[(U + Q_D)\varphi + \beta]. \end{aligned}$$

W pracy [11] są rozważane iteracyjne warianty metody AGA opisywane równaniami (29)–(31), dla których N_A nie są macierzami zerowymi. Porównanie tych metod z innymi metodami iteracyjnymi, takimi jak np. metoda Gaussa–Seidela, na podstawie dostępnych twierdzeń teorii macierzy nieujemnych było niemożliwe, rozszerzono więc w pracy teorię regularnego podziału macierzy A przez wprowadzenie dwóch nowych twierdzeń, a mianowicie

TWIERDZENIE 3. Niech $A = M_1 - N_1 = M_2 - N_2$ będą dwoma regularnymi podziałami macierzy A , gdzie $A^{-1} \geq 0$. Jeśli $M_1^{-1} \geq M_2^{-1} \geq 0$, wówczas

$$(33) \quad \varrho(M_1^{-1}N_1) \leq \varrho(M_2^{-1}N_2) < 1.$$

TWIERDZENIE 4. Niech $A = M_1 - N_1 = M_2 - N_2$ będą dwoma regularnymi podziałami macierzy A , gdzie $A^{-1} > 0$. Jeśli $M_1^{-1} > M_2^{-1} \geq 0$, wówczas

$$(34) \quad 0 < \varrho(M_1^{-1}N_1) < \varrho(M_2^{-1}N_2) < 1.$$

Dysponowanie tymi twierdzeniami pozwala rozszerzyć twierdzenie Steina–Rosenberga na dwuprzebiegowe metody iteracyjne w przypadku, gdy macierz iteracyjna Jacobiego \mathcal{B} jest nieredukowalna. Brzmi ono następująco:

TWIERDZENIE 5. Niech $\mathcal{B} = K^{-1}(L+U)$ będzie nieujemną i nieredukowalną macierzą Jacobiego stopnia $n > 2$, mającą zerowe elementy na głównej diagonalu i taką, że $0 < \varrho(\mathcal{B}) \leq 1$, przy czym macierz LU ma także elementy poza główną diagonalą; niech \mathcal{L}_1 będzie macierzą iteracyjną Gaussa–Seidela, \mathcal{E}_1 macierzą iteracyjną w metodzie EWA i \mathcal{A}_1 macierzą iteracyjną w metodzie AGA. Wówczas będzie zachodziła jedna i tylko jedna z następujących relacji:

1. $0 < \varrho(\mathcal{A}_1) < \varrho(\mathcal{E}_1) < \varrho(\mathcal{L}_1) < \varrho(\mathcal{B}) < 1$,
2. $1 = \varrho(\mathcal{A}_1) = \varrho(\mathcal{E}_1) = \varrho(\mathcal{L}_1) = \varrho(\mathcal{B})$.

W przypadku kiedy macierz \mathcal{B} jest redukowalna, ostre nierówności w relacji 1 w powyższym twierdzeniu zamieniają się na nieostre.

Przytoczone powyżej trzy twierdzenia stanowią główne wyniki teoretyczne.

Pozostała część pracy [11] jest poświęcona opisowi wprowadzenia procedur przyspieszających zbieżność metod dwuprzebiegowych oraz omówieniu użytkowania tych metod od strony praktycznej z obszerną ilustracją i analizą wyników numerycznych otrzymanych dla kilku przykładów.

Wprowadzenie procesu nadrelaksacji do równań (32) i (32a) przyspiesza, przy użyciu optymalnego parametru nadrelaksacji, szybkość zbieżności schematów iteracyjnych w metodach dwuprzebiegowych. Proces nadrelaksacji można stosować przy obliczaniu wektora $\varphi^{(m+1)}$, jak również obu wektorów $\beta^{(m+1)}$ i $\varphi^{(m+1)}$. Odpowiadające równania w poszczególnych metodach są następujące:

Metoda AGA z pojedynczą nadrelaksacją:

$$(35) \quad \begin{aligned} \beta^{(m+1)} &= (L+H)D_A^{-1}\beta^{(m+1)} + T_A\varphi^{(m)} + c, \\ \varphi^{(m+1)} &= \omega D_A^{-1}[(U+Q)\varphi^{(m+1)} + \beta^{(m+1)}] - (\omega-1)\varphi^{(m)}, \quad m \geq 0. \end{aligned}$$

Metoda EWA z pojedynczą nadrelaksacją:

$$(35a) \quad \begin{aligned} \beta^{(m+1)} &= LD_B^{-1}\beta^{(m+1)} + T_B\varphi^{(m)} + c, \\ \varphi^{(m+1)} &= \omega D_B^{-1}[U\varphi^{(m+1)} + \beta^{(m+1)}] - (\omega-1)\varphi^{(m)}, \quad m \geq 0. \end{aligned}$$

Metoda AGA z podwójną nadrelaksacją:

$$(36) \quad \begin{aligned} \beta^{(m+1)} &= \Omega_\beta[(L+H)D_A^{-1}\beta^{(m+1)} + T_A\varphi^{(m)} + c] - (\Omega_\beta-1)\beta^{(m)}, \\ \varphi^{(m+1)} &= \Omega_\varphi D_A^{-1}[(U+Q)\varphi^{(m+1)} + \beta^{(m+1)}] - (\Omega_\varphi-1)\varphi^{(m)}, \quad m \geq 0. \end{aligned}$$

Metoda EWA z podwójną nadrelaksacją:

$$(36a) \quad \begin{aligned} \beta^{(m+1)} &= \Omega_\beta [LD_{\mathbb{E}}^{-1}\beta^{(m+1)} + T_{\mathbb{E}}\varphi^{(m)} + c] - (\Omega_\beta - 1)\beta^{(m)}, \\ \varphi^{(m+1)} &= \Omega_\varphi D_{\mathbb{E}}^{-1}[U\varphi^{(m+1)} + \beta^{(m+1)}] - (\Omega_\varphi - 1)\varphi^{(m)}, \quad m \geq 0. \end{aligned}$$

Stosując proces nadrelaksacji do metody Gaussa–Seidela otrzymujemy powszechnie używaną metodę SOR, którą można napisać następująco.

Metoda SOR:

$$(37) \quad \varphi^{(m+1)} = \omega K^{-1}[L\varphi^{(m+1)} + U\varphi^{(m)} + c] - (\omega - 1)\varphi^{(m)}, \quad m \geq 0.$$

Określenie optymalnego parametru nadrelaksacji $\bar{\omega}$ lub $\bar{\Omega}_\beta$ i $\bar{\Omega}_\varphi$ stanowi problem zasadniczy w powyższych metodach. Dla metody SOR Young podał wzór dla $\bar{\omega}_G$, w przypadku kiedy macierze mają pewne własności spełniane również przez macierze otrzymywane przy numerycznym rozwiązywaniu eliptycznych równań cząstkowych ([12], [10]). Szybkość zbieżności metody SOR jest silnie zależna od stopnia dokładności określenia $\bar{\omega}_G$, uwarunkowanego dokładnością obliczonej wartości $\varrho(\mathcal{L}_1)$. W większości problemów obliczenie wartości $\varrho(\mathcal{L}_1)$ z dostateczną dokładnością jest pracochłonne i zwykle stosuje się procedury przybliżone obliczania $\bar{\omega}_G$ w trakcie procesu iteracyjnego. Zakres zmienności $\bar{\omega}_G$ dla wszystkich problemów jest $1 < \bar{\omega}_G < 2$.

W przypadku metod dwuprzebiegowych jak dotąd nie udało się znaleźć bezpośredniego wzoru na obliczanie optymalnego parametru nadrelaksacji i we wszystkich problemach rozwiązywanych dotychczas parametr ten określano eksperymentalnie. Autor zaobserwował, że szybkość zbieżności metod dwuprzebiegowych jest znacznie mniej wrażliwa na dokładność określenia optymalnego parametru nadrelaksacji niż w metodzie SOR. Ponadto w przypadku używania podwójnej nadrelaksacji najlepsze wyniki otrzymuje się dla $\bar{\Omega}_\beta = \bar{\Omega}_\varphi = \bar{\Omega}$, przy czym we wszystkich liczonych przypadkach dwuwymiarowego równania dyfuzji zachowane były następujące nierówności:

dla metody EWA

$$1 < \bar{\Omega}_E < \bar{\omega}_E < 1,5 \quad \text{i} \quad \bar{\omega}_E < \bar{\omega}_G,$$

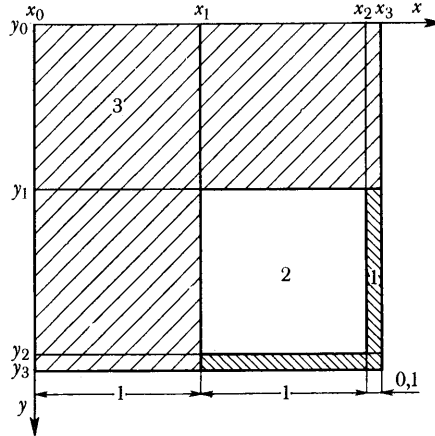
dla metody AGA

$$1 < \bar{\Omega}_A < \bar{\omega}_A < \bar{\omega}_G.$$

Z dotychczasowych obserwacji autora wynika, że metoda AGA z podwójną nadrelaksacją nie wnosi większych korzyści niż metoda AGA z pojedynczą nadrelaksacją i we wszystkich problemach otrzymywano kilkakrotnie większą szybkość zbieżności metody AGA z pojedynczą nadrelaksacją w stosunku do szybkości zbieżności metody SOR. Natomiast szybkość zbieżności w metodzie EWA zachowuje się zmiennie. W większości liczonych problemów reaktorowych szybkość zbieżności metody EWA z podwójną nadrelaksacją była porównywalna z szybkością zbieżności metody AGA z pojedynczą nadrelaksacją. Jednakże nie jest to zasadą i w niektórych przypadkach metoda EWA z pojedynczą lub podwójną nadrelaksacją może mieć mniejszą szybkość zbieżności niż nawet metoda SOR, co jest zilustrowane w poniższym przykładzie numerycznym.

Przykład numeryczny. W przykładzie tym, zaczerpniętym z Appendixu B z [10], rozważać będziemy numeryczne rozwiązywanie następującego dwuwymiarowego eliptycznego równania cząstkowego (równania dyfuzji) typowego w problemach reaktorowych:

$$(38) \quad -(D(x, y)\varphi_x)_x - (D(x, y)\varphi_y)_y + \Sigma(x, y)\varphi(x, y) = S(x, y), \quad (x, y) \in R,$$



Rys. 1

gdzie R jest obszarem kwadratowym $0 < x, y < 2,1$ (pokazany na rysunku), z warunkami brzegowymi

$$(39) \quad \frac{\partial \varphi(x, y)}{\partial n} = 0, \quad (x, y) \in \Gamma,$$

gdzie Γ jest brzegiem obszaru R . Dane funkcje D , Σ i S są obszarami stałe i podane są w tabelcy I.

Tabelca I

Obszar	$D(x, y)$	$\Sigma(x, y)$	$S(x, y)$
1	1,0	0,02	0
2	2,0	0,03	0
3	3,0	0,05	0

Rozważać będziemy numeryczne rozwiązanie problemu na granicach między trzema fizycznie różnymi strefami materiałowymi i granicy zewnętrznej. Dla uproszczenia dyskusji wyników numerycznych przyjęto $S(x, y) = 0$ w całym obszarze $R + \Gamma$. Minimum 16 punktów siatki wystarcza do opisu wszystkich różnych obszarów za pomocą niejednorodnej siatki.

Stosując aproksymację różnicową opartą na centralnym schemacie różnicowym, otrzymamy układ równań różnicowych, który można napisać w formie

$$(40) \quad A\varphi = 0,$$

gdzie 16×16 macierz A ma pięć diagonalni niezerowych.

Celem tego przykładu jest porównanie liczby iteracji w różnych metodach iteracyjnych. Ponieważ jedynym rozwiązaniem równania (40) jest wektor zerowy, więc w każdej iteracji m wektor $\varphi^{(m)}$ będzie jednocześnie wektorem błędów. Ażeby ujedynolicić wszystkie rozważane metody, przyjęto wszystkie składowe wektora $\varphi^{(0)}$ równe 10^4 . Proces iteracyjny prowadzimy tak długo, aż otrzymamy wektor $\varphi^{(m)}$, w którym wszystkie składowe będą mniejsze od jedności. Otrzymane wyniki zestawiono w tablicach II i III, przy czym użyto najprostszej możliwej wersji metody dwuprzebiegowej AGA, w której macierze H i Q mają po jednej niezerowej diagonalu.

Tablica II (bez procesu nadrelaksacji)

Metoda	Liczba iteracji	Promień spektralny
Jacobiego	10 020	0,99908
Gausa-Seidela	5 010	0,99816
EWA	564	0,98374
AGA	371	0,97544

Tablica III (z procesem nadrelaksacji)

Metoda	ω	Liczba iteracji
SOR	1,9177	139
EWA z pojedynczą nadrelaksacją	1,17	404
EWA z podwójną nadrelaksacją	1,09	380
AGA z pojedynczą nadrelaksacją	1,485	36

Tablica IV. Liczba operacji arytmetycznych dla jednego punktu siatki w jednej iteracji

Metoda	Liczba mnożeń	Liczba dodawań
Gausa-Seidela	4	4
EWA	5	6
AGA	6	7
SOR	6	6
EWA z pojed. nadrel.	7	9
EWA z podw. nadrel.	9	10
AGA z pojed. nadrel.	8	9

Tablica II będąca ilustracją twierdzenia 14 z pracy [10] pokazuje dużą skuteczność metod dwuprzebiegowych w stosunku do metody Gausa-Seidela.

Tablica III pokazuje, jak można skutecznie przyspieszyć szybkość zbieżności wprowadzając proces nadrelaksacji w tych metodach, z wyjątkiem metody EWA, która dla tego przykładu nie dostarcza korzyści. W celu pełnej informacji o metodach zestawiono liczby operacji arytmetycznych w tablicy IV.

Zakończenie. Na podstawie prostych wersji iteracyjnych metod dwuprzebiegowych, autor napisał kilka dwuwymiarowych programów dyfuzyjnych przeznaczonych do obliczeń rozkładów strumieni neutronów w reaktorach. W dotychczasowych przykładach stwierdzono, że kody oparte na metodach dwuprzebiegowych dostarczają wyników przy tej samej dokładności rozwiązań przy 5 i więcej razy mniejszej liczbie operacji arytmetycznych niż programy oparte na algorytmach innych metod. W jednym z ostatnich porównań z programem DIXY, opartym na blokowej metodzie iteracyjnej dla cyklicznie redukowalnych macierzy w równaniu (1) ([12]) i stosowanym obecnie w ośrodku jądrowym w Karlsruhe w RFN, otrzymano, na przykładzie realnej konfiguracji reaktora, wyniki o tej samej dokładności obliczeń przy 7-krotnie mniejszej liczbie operacji arytmetycznych w przypadku użycia prostej wersji metody AGA z pojedynczą nadrelaksacją.

Bibliografia

- [1] R. Beauwens, *On the analysis of factorization procedures*, Internal Report, Université Libre de Bruxelles 1973.
- [2] — *Convergence Analysis of Some Factorization Iterative Methods for M-Matrices*, Series in Applied Math., Report No. 73-7, Northwestern University 1973.
- [3] N. I. Buleev, *A numerical method for the solution of two-dimensional and three-dimensional equations of diffusion*, Mat. Sb. 51 (1960), str. 227-238.
- [4] T. Dupont, R. P. Kendall and H. H. Rachford, *An approximate factorization procedure for solving self-adjoint elliptic difference equations*, SIAM J. Numer. Anal. 5 (1968), str. 559-573.
- [5] T. Dupont, *A factorization procedure for the solution of elliptic difference equations*, SIAM J. Numer. Anal. 5 (1968), str. 753-782.
- [6] J. Mika, *Factorization iterative methods in linear algebra*, Internal Report, CYFRONET IBJ, Świerk 1973.
- [7] T. A. Oliphant, *An implicit numerical methods for solving two-dimensional time-dependent diffusion problems*, Quart. Appl. Math. 19 (1961), str. 221-229.
- [8] — *An extrapolation process for solving linear systems*, ibid. 20 (1962), str. 257-267.
- [9] H. L. Stone, *Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations*, SIAM J. Numer. Anal. 5 (1968), str. 530-538.
- [10] R. S. Varga, *Matrix Iterative Analysis*, Prentice Hall 1962.
- [11] Z. Woźnicki, *Two-step iterative methods for solving large linear systems and their application to the numerical solution of multigroup multi-dimensional neutron diffusion equations*, Doctoral Dissertation, Report No. 1447 CYFRONET/PM/A, IBJ, Świerk 1973.
- [12] D. M. Young, *Iterative Solution of Large Linear Systems*, New York and London 1971.