

Некоторые алгоритмы решения методом конечных элементов двуточечной задачи для ОДУ 2-го порядка

ПРОФ. В. Г. Корнеев

1 Метод конечных элементов с линейными конечными элементами

Нахождение решения дифференциального уравнения

$$-(a(x)u')' + c(x)u = f(x), \quad x \in (0, 1), \quad u(0) = u(1) = 0, \quad (1)$$

при достаточно гладких $a(x) > 0$, $c(x) \geq 0$ и $f(x)$ эквивалентно нахождению решения интегрального тождества: найти $u(x) \in \mathring{H}^1(0, 1)$ такую, что

$$\int_0^1 [(a(x)u'v' + c(x)uv)] dx = \int_0^1 f(x)v dx, \quad \forall v \in \mathring{H}^1(0, 1) \quad (2)$$

Здесь

$$\mathring{H}^1(0, 1) = \left\{ v : \int_0^1 [((v')^2 + v^2)] dx < \infty, v(0) = v(1) = 0 \right\}$$

– пространство функций, производные которых интегрируются с квадратом и удовлетворяющих однородному первому краевому условию.

Замечание 1.1. Тождество выражает принцип Лагранжа возможных перемещений (напр., для задачи о струне). При этом возможным считается любое перемещение с конечной энергией, удовлетворяющее краевым условиям. Из курса матем. физики вам известно, что решение $u(x) \in \mathring{H}^1(0, 1)$ тождества (2) существует и единствено, если $f \in H^{-1}(\Omega)$.

В методе конечных элементов вводится сетка узлов

$$x^{(i)} = ih, \quad h = 1/N, \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad x^{(0)} = 0, \quad x^{(N)} = 1,$$

а приближенное решение ищется в конечномерном размерности ($N - 1$) подпространстве $\mathring{V}_h(0, 1) \subset \mathring{H}^1(0, 1)$ непрерывных линейных на каждом *конечном элементе* $\tau_i = (x^{(i-1)}, x^{(i)})$ функций

$$\mathring{V}_h(0, 1) = \left\{ v : v \in C(0, 1), v \Big|_{\tau_i} \in \mathcal{P}_1, i = 1, 2, \dots, N, v(0) = v(1) = 0 \right\}. \quad (3)$$

Здесь \mathcal{P}_1 пространство полиномов первой степени. Иными словами, ищется функция $u_{\text{fem}} \in$

$\overset{\circ}{V}_h(0, 1)$, удовлетворяющая тождеству

$$\int_0^1 \left[(a(x)u'_{\text{fem}}v' + c(x)u_{\text{fem}}v) \right] dx = \int_0^1 f(x)v dx, \quad \forall v \in \overset{\circ}{V}_h(0, 1). \quad (4)$$

Выберем в пространстве $\overset{\circ}{V}_h(0, 1)$ базис $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{N-1}$, например, базис, определяемый равенствами

$$\phi_i(x^{(j)}) = \delta_{i,j}, \quad i, j = 1, 2, \dots, N-1. \quad (5)$$

При этом (4) равносильно $N-1$ уравнениям

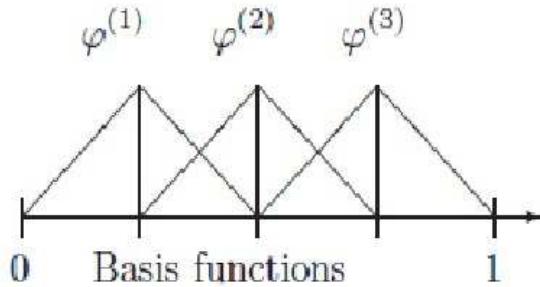


Рис. 1:

$$\int_0^1 \left[a(x)u'_{\text{fem}}\phi'_j(x) + c(x)u_{\text{fem}}\phi_j(x) \right] dx = \int_0^1 f(x)\phi_j(x) dx, \quad j = 1, 2, \dots, N-1. \quad (6)$$

Решение МКЭ удобно искать в виде

$$u_{\text{fem}}(x) = \sum_1^{N-1} \phi_i(x)u^{(i)}. \quad (7)$$

откуда следует, что коэффициенты $u^{(i)} = u_{\text{fem}}(x^{(i)})$ приближают значения в узлах $u(x^{(i)})$ точного решения $u(x)$. При этом (6) становится системой алгебраических уравнений

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}, \quad (8)$$

где $\mathbf{u} = \{u^{(i)}\}_{i=1}^{N-1}$ – вектор неизвестных коэффициентов $u^{(i)}$ и

$$\mathbf{K} = \mathbf{A} + \mathbf{C}, \quad \mathbf{K} = \{k_{i,j}\}_{i,j=1}^{N-1}, \quad \mathbf{A} = \{a_{i,j}\}_{i,j=1}^{N-1}, \quad \mathbf{C} = \{c_{i,j}\}_{i,j=1}^{N-1}, \quad \mathbf{f} = \{f^{(j)}\}_{j=1}^{N-1},$$

$$a_{i,j} = \int_0^1 a(x)\phi'_i\phi'_j dx, \quad c_{i,j} = \int_0^1 c(x)\phi_i\phi_j dx, \quad f^{(i)} = \int_0^1 f(x)\phi_i dx.$$

Матрицы \mathbf{K} , \mathbf{A} , \mathbf{C} , как легко увидеть трехдиагональные, и имеют некоторые другие важные свойства, позволяющие использовать быстродействующие алгоритмы, в частности, параллельные. Рассмотрим некоторые из них.

2 Решение систем алгебраических уравнений метода конечных элементов

Алгоритм 1. Так как матрица \mathbf{K} трехдиагональная, можно применить метод прогонки, описание которого можно найти в [1, стр. 9] и в [2, стр. 42].

Алгоритм 2. При необходимости ускорения вычислений, применяют распараллеленные варианты алгоритма. Для простоты полагаем $c(x) \equiv 0$ в (1), (2) и считаем $N = n^2$. Разбиваем узлы на группы $X_r = \{x^{(i)} : i \in \omega_r, r = 1, 2, \dots, n-1, \omega_r = \{(r-1)n+1, (r-1)n+2, \dots, rn-1\}\}$ и $X_{n+1} = \{x^{(i)} : i \in \omega_{n+1} = \{i = rn, r = 1, 2, \dots, n-1\}\}$. Исключение (методом прогонки) каждой из групп неизвестных $u^{(i)}$, $i \in \omega_r$, $r = 1, 2, \dots, n$ можно выполнять в параллельном режиме, после чего получаем систему уравнений

$$\mathbf{S}\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{F}_S, \quad \mathbf{u}_{n+1} = \{u^{(rn)}\}_{r=1}^{n-1},$$

с матрицей, \mathbf{S} , которую называют дополнением Шуры. Она тоже трехдиагональная. Обратный ход также выполняется для каждой группы неизвестных $u^{(i)}$, $i \in \omega_r$, $r = 1, 2, \dots, n$, независимо от других групп.

Для реализации в параллельном режиме целесообразно перенумеровать координатные функции в соответствии с последовательным перебором узлов множеств X_r , $r = 1, 2, \dots, n+1$.

Изложенный метод – простейший представитель класса *методов декомпозиции области типа Дирихле-Дирихле*. Инженеры, активно применяющие этот метод для расчета сложных конструкций с 1960-х г.г., называют его *методом подконструкций*, в работах физиков встречается название *стреловидный метод*. Как и предыдущий, он требует $\mathcal{O}(N)$ арифметических действий. Такие методы называют *оптимальными по арифметической работе, методами линейной сложности, быстрыми методами*. Дополнительное достоинство Алгоритма 2 по сравнению с Алгоритмом 1, что он распараллеливается на $\sqrt{N} + 1$ процессоров с сокращением времени T_N выполнения до $T_N = \mathcal{O}(\sqrt{N})$. То есть он становится в \sqrt{N} раз быстрее прогонки.

Замечание 2.1. При $c(x) \equiv 0$ матрица \mathbf{K}_{Hh} в (9) блочно диагональная. Изложенный алгоритм эквивалентен решению методом прогонки $n+1$ независимых подсистем (системы (9)) с блоками $\mathbf{K}_{Hh,r,p}$ и преобразования вектора \mathbf{u}_{Hh} в вектор \mathbf{u} . При этом преобразование $\mathbf{u}_{Hh} \Rightarrow \mathbf{u}$ эквивалентно обратному ходу в Алгоритме 2.

Алгоритм 3. Этот алгоритм итерационный. В настоящее время итерационные методы чаще, чем точные методы, применяются для решения систем уравнений сеточных аппроксимаций уравнений в частных производных, поскольку как правило они используют меньше памяти ЭВМ, являются более быстродействующими и легче распараллеливаются.

Перейдем к новому базису $\{\psi_i(x)\}_{i=1}^{N-1}$ в конечно-элементном пространстве $V_h(0, 1)$. Боль-

шинство элементов базиса оставим прежними, положив $\psi_i(x) = \phi_i(x)$ для $i \in \omega_r$, $r = 1, 2, \dots, n$. Элементы $\phi_i(x)$, $i \in \omega_{n+1}$, заменим новыми следующим образом. Рассмотрим разреженную сетку узлов $x = z^{(r)} = rH = x^{(nr)}$, $r = 0, 1, \dots, n$, с шагом $H = nh$. На этой сетке можно определить конечно-элементное пространство $V_H(0, 1)$ так же, как определялось пространство $V_h(0, 1)$ на сетке с шагом h , и ввести в нем базис $\{\phi_{H,r}\}_{r=1}^{n-1}$, аналогичный базису $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{N-1}$. Легко проверить, что

$$\psi_i(x) = \phi_i(x), \quad i \in \omega_r, \quad r = 1, 2, \dots, n, \quad \text{и} \quad \phi_{H,r}(x), \quad r = 1, 2, \dots, n-1,$$

образуют в $V_h(0, 1)$ базис. Мы дополнитель но переупорядочим элементы введенного базиса, приняв

$$\psi_i(x) = \begin{cases} \phi_j(x), & i = 1, 2, \dots, n(n-1), \quad j = i + \lfloor \frac{i}{n-1} \rfloor, \\ \phi_{H,r}(x), & i = n(n-1) + r, \quad r = 1, 2, \dots, n-1, \end{cases}$$

с тем, чтобы элементам базиса, порождаемого редкой сеткой, соответствовал один блок, обрабатываемый одним процессором. При этом в общем случае матрица новой системы алгебраических уравнений

$$\mathbf{K}_{Hh}\mathbf{u}_{Hh} = \mathbf{f}_{Hh} \tag{9}$$

имеет $(n+1) \times (n+1)$ -блочную структуру $\mathbf{K}_{Hh} = \{\mathbf{K}_{Hh,r,p}\}_{r,p=1}^{n+1}$. При этом отличны от нуля только блоки на диагонали и блоки, у которых один из индексов r, p равен $n+1$.

Предположим, что $a(x), c(x)$ не сильно изменяются на каждом интервале $\delta_r := (x^{(r-1)}, x^{(r)})$ редкой сетки и удовлетворяют, например, условиям

$$\left. \begin{aligned} \max_{x,y \in \delta_r} (a(x) - a(y)) &\leq \gamma_0 + \gamma_1 a(y) \\ \max_{x,y \in \delta_r} (c(x) - c(y)) &\leq \gamma^{(0)} + \gamma^{(1)} c(y) \end{aligned} \right\}, \quad \forall x, y \in \delta_r, \quad r = 1, 2, \dots, n. \tag{10}$$

В частности, эти условия выполняются, если $a(x), c(x) \in C^1[0, 1]$. Пусть также $\bar{a}(x), \bar{c}(x)$ кусочно постоянные аппроксимации коэффициентов $a(x), c(x)$, равные на каждом интервале δ_r своим средним на δ_r , которые обозначим a_r, c_r , соответственно. Обозначим \mathcal{K}_{Hh} матрицу жесткости для задачи (2) с коэффициентами $\bar{a}(x), \bar{c}(x)$, определяемую, очевидно, тождеством

$$\int_0^1 [(\bar{a}(x)v'w' + \bar{c}(x)vw)] dx = \mathbf{w}^\top \mathcal{K}_{Hh} \mathbf{v}, \quad \forall \mathbf{w}, \mathbf{v} \Leftrightarrow, v, w \in \mathring{V}_h(0, 1) \tag{11}$$

где \Leftrightarrow обозначает изоморфизм, индуцируемый базисом $\{\psi_i(x)\}_{i=1}^{N-1}$.

Важным для эффективного численного решения и распараллеливания вычислений является тот факт, что для широкого круга коэффициентов $a(x), c(x)$ матрицы $\mathcal{K}_{Hh}, \mathbf{K}_{Hh}$ спектрально эквивалентны равномерно по шагу сетки h и шагу редкой сетки H . Это делает

быстро сходящимся итерационный процесс с предобусловливателем $\mathbb{B}_{Hh} = \mathcal{K}_{Hh}$

$$\mathbf{u}_{Hh}^{k+1} = \mathbf{u}_{Hh}^k - \sigma \mathbb{B}_{Hh}^{-1} (\mathbf{K}_{Hh} \mathbf{u}_{Hh}^k - \mathbf{f}_{Hh}), \quad k = 0, 1, \dots, k_\varepsilon, \quad \mathbf{u}_{Hh}^0 = 0. \quad (12)$$

Для достижения погрешности ε он требует конечного числа итераций k_ε равномерно по h и H . Этот итерационный процесс очевидным образом распараллеливается на $n + 1$ процессоров с относительно малым обменом информации.

Алгоритм 4. Можно без существенных потерь эффективности использовать более простые предобусловливатели. Их вид зависит от свойств коэффициентов уравнения. Если

$$0 < \underline{\mu} \leq a(x) \leq \bar{\mu}, \quad 0 \leq c(x) \leq \underline{\mu}/2, \quad (13)$$

и $\underline{\mu}, \bar{\mu}$ – постоянные, не сильно различающиеся, то можно принять $\mathbb{B}_{Hh} = \Delta_{Hh}$, где

$$\Delta_{Hh} = a_{\text{mean}} \text{diag} \left[\underbrace{\Delta_h, \Delta_h, \dots, \Delta_h}_{n \text{ times}}, \Delta_H \right], \quad (14)$$

a_{mean} – среднее значение на $(0, 1)$ коэффициента $a(x)$ и Δ_h – $(n - 1) \times (n - 1)$ матрицы

$$\Delta_h = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ 0 & & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & -1 & 1 & \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Алгоритм 5. Простейший итерационный алгоритм – метод Якоби с постоянным итерационным параметром σ . Для системы (8) он имеет вид

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k - \sigma \mathcal{D}^{-1} (\mathbf{K} \mathbf{u}^k - \mathbf{f}), \quad k = 0, 1, \dots, k_\varepsilon, \quad \mathbf{u}^0 = 0, \quad (16)$$

где \mathcal{D} – диагональная матрица, совпадающая на главной диагонали с \mathbf{K} .

3 Дополнительные замечания

Замечание 3.1. Шаг H редкой сетки может отличаться от $1/\sqrt{N}$ в меньшую или большую сторону. Так как при $H = h$ возвращаемся к исходной схеме, то существует H_* , при котором эффект распараллеливания максимален.

Замечание 3.2. Компоненты $u^{(i)}$ решения \mathbf{u} системы (8) являются значениями в узлах $x^{(i)}$ конечно-элементного решения u_{fem} , т. е. $u_{\text{fem}}(x^{(i)}) = u^{(i)}$. Это следует из определения базиса (5) и представления (7). Для компонент решения \mathbf{u}_{Hh} системы (9), относящихся к внутренним узлам интервалов δ_r , это свойство утрачивается.

Замечание 3.3. Предположим, что

$$0 < \underline{\mu} \leq a(x) \leq \bar{\mu}, \quad 0 \leq c(x) \leq \bar{\mu}_c. \quad (17)$$

и $u \in H^2(0, 1)$. Для любой функции $\varphi \in \dot{H}^2(0, 1)$ определена интерполяция $\tilde{\varphi} \in \overset{\circ}{V}_h(0, 1)$, совпадающая с φ в узлах сетки: $\varphi(x^{(i)}) = \tilde{\varphi}(x^{(i)})$, $i = 0, 1, \dots, N$. При этом можно показать справедливость оценок аппроксимации

$$|\varphi - \tilde{\varphi}|_{1,(0,1)} \leq \frac{h}{\sqrt{2}} |\varphi|_{2,(0,1)}, \quad (18)$$

и

$$\|\varphi - \tilde{\varphi}\|_{0,(0,1)} \leq \frac{h^2}{\sqrt{2\pi}} |\varphi|_{2,(0,1)}. \quad (19)$$

Введем обозначение

$$a(v, w) = \int_0^1 [a(x)v'w' + c(x)vw] dx$$

Другое основное для оценки ошибки неравенство, вытекающее из определений точного и конечноэлементного решений u и u_{fem} и неравенств (17), имеет вид

$$\begin{aligned} a(u - u_{\text{fem}}, u - u_{\text{fem}}) &= \min_{v \in V_h(0,1)} a(u - v, u - v) \leq \\ &\leq \bar{\mu} |u - \tilde{u}|_{1,(0,1)}^2 + \bar{\mu}_c \|u - \tilde{u}\|_{0,(0,1)}^2. \end{aligned} \quad (20)$$

Комбинируя с первым неравенством (17) и оценками аппроксимации (18) и (19), получим оценку скорости сходимости метода конечных элементов

$$\begin{aligned} |u - u_{\text{fem}}|_{1,(0,1)} &\leq \frac{h}{\sqrt{2\underline{\mu}}} (\sqrt{\bar{\mu}} + \frac{h}{\pi} \sqrt{\bar{\mu}_c}) h |u|_{2,(0,1)} \leq \\ &\leq Ch |u|_{2,(0,1)}, \quad C = \text{const}. \end{aligned} \quad (21)$$

Замечание 3.4. Скорость сходимости итерационного процесса (16) определяется границами спектра λ_{\min} , λ_{\max} матричной задачи на собственные значения

$$\mathbf{K}_{Hh}\mathbf{z} = \lambda \mathbb{B}_{Hh}\mathbf{z}.$$

Для Алгоритмов 3 и 4 при условиях, сформулированных при их описании, λ_{\min} , λ_{\max} – постоянные. Пусть имеются достаточно хорошие оценки $\lambda_{\min} \geq \lambda_{\underline{\lambda}}$, $\lambda_{\max} \leq \lambda_{\bar{\lambda}}$. Тогда при постоянном итерационном параметре

$$\sigma = \frac{2}{\lambda_{\underline{\lambda}} + \lambda_{\bar{\lambda}}}$$

имеет место сходимость

$$|\mathbf{u}_{Hh} - \mathbf{u}_{Hh}^k| \leq \rho^k |\mathbf{u}_{Hh} - \mathbf{u}_{Hh}^0|, \quad \rho = \frac{\lambda_{\bar{\lambda}} - \lambda_{\underline{\lambda}}}{\lambda_{\bar{\lambda}} + \lambda_{\underline{\lambda}}}, \quad (22)$$

в энергетической норме $|\cdot|$, определяемой выражением

$$\|\mathbf{v}\|^2 := \mathbf{v}^\top \mathbf{K}_{Hh} \mathbf{v} = a(v, v), \quad \forall \mathbf{v} \Leftrightarrow v \in V_h(\Omega).$$

Замечание 3.5. Для определения σ , близкого оптимальному

$$\sigma_{\text{opt}} = \frac{2}{\lambda_{\min}(\mathbf{K}) + \lambda_{\max}(\mathbf{K})},$$

нужно прежде всего оценить $\lambda_{\max}(\mathbf{K})$. Можно воспользоваться достаточно простой оценкой Фробениуса

$$\lambda_{\max}(\mathbf{K}) \leq \max_j \sum_{i=1}^{N-1} |k_{i,j}|, \quad (23)$$

в результате которой убеждаемся, что

$$\lambda_{\max}(\mathbf{K}) \leq \mathbb{C}_2 h^{-1}, \quad \mathbb{C}_2 = \text{const}. \quad (24)$$

Не трудно проверить, что

$$\lambda_{\min}(\mathbf{K}) \geq \mathbb{C}_1 h, \quad \mathbb{C}_1 = \text{const}. \quad (25)$$

Обратные (24) и (25) оценки с теми же порядками получим, оценивая отношение Релея $\mathbf{v}^\top \mathbf{K} \mathbf{v} / \mathbf{v}^\top \mathbf{v}$ на походящих фиксированных векторах \mathbf{v} . В совокупности они показывают, что при достаточно густой сетке $\lambda_{\min}(\mathbf{K}) \ll \lambda_{\max}(\mathbf{K})$, и можно использовать $\sigma = 2/\mathbb{C}_2 h^{-1}$. Для конечноэлементных матриц \mathbf{K} оценка (25) доказывается цепочкой неравенств

$$\mathbf{v}^\top \mathbf{K} \mathbf{v} \geq \underline{\mu}(v', v') \geq \pi^2(v, v) = \pi^2 \mathbf{v}^\top \mathbf{M} \mathbf{v} \geq \frac{\pi^2}{3} h \mathbf{v}^\top \mathbf{v}, \quad \forall \mathbf{v} \Leftrightarrow v \in \mathring{V}_h(0, 1) \quad (26)$$

где $\mathbf{M} = \{(\phi_i, \phi_j)\}_{i,j=1}^{N-1} = \text{tridiag}[\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}]$ – матрица $N-1 \times N-1$, для которой, очевидно, $\lambda_{\min}(\mathbf{M}) \geq \frac{1}{3}h$, и

$$(v, w) = \int_0^1 vw dx.$$

Список литературы

- [1] Пакулина А. Н. *Практикум по методам вычислений, Часть 2. Учебно-методическое пособие*. Санкт-Петербург: СПбГУ, 2019, 113 с.

- [2] А. А. Самарский. *Введение в теорию разностных схем*. М.: Физматгиз, 1970.