

МОДИФИКАЦИЯ МЕТОДА НЕПОЛНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЛАПЛАСА В КУСОЧНО-ОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ С НЕЛИНЕЙНЫМИ ГРАНИЦАМИ

В. В. АЛЬЧИКОВ, В. И. БЫКОВ

Красноярский государственный технический университет, Россия

The questions of the decision of the equation Laplas in piece - homogeneous environment with nonlinear borders are considered. The updating of the incomplete Choleski-Conjugate Gradient Method ICCG is offered. The method is checked up on test examples.

Задача решения уравнения Лапласа в кусочно-однородной среде с нелинейными границами возникает во многих областях науки и техники. Например, при расчете электрического поля внутри ванны алюминиевого электролизера необходимо учитывать криволинейность границы между жидким алюминием и электролитом, наклон бортов ванны, наличие осадка на бортах и прочее [5]. Использование в этом случае мелкой прямоугольной сетки приводит к неоправданным затратам времени счета и памяти компьютера. Поэтому предлагается другой способ учета криволинейных границ. Решение уравнения Лапласа

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0 \quad (1)$$

в кусочно-однородной среде с прямоугольными границами и заданными граничными условиями сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$A\vec{U} = \vec{R} \quad (2)$$

с семидиагональной симметричной положительно определенной матрицей A . Граничные условия учитываются при формировании матрицы и вектора R . Для решения системы (2) используются методы неполной факторизации [1–3], в частности, метод неполного разложения Холлесского-сопряженных градиентов (ICCG), обладающий высокой скоростью сходимости итерационного процесса.

В цилиндрических и сферических областях последние могут быть разбиты на элементарные объемы с взаимно ортогональными гранями [4], что дает возможность использовать метод ICCG. В общем случае нелинейных границ задача значительно усложняется.

Рассмотрим некоторую прямоугольную область R в системе координат q_1, q_2, q_3 и разобьем ее на равные элементарные объемы с шагами h_1, h_2, h_3 по осям координат. В результате получим некоторую сетку S . Отобразим каждую точку R в соответствующую точку области Ω :

$$x = x(q_1, q_2, q_3), \quad y = y(q_1, q_2, q_3), \quad z = z(q_1, q_2, q_3) \quad (3)$$

Преобразование (3) задается таким образом, чтобы каждой криволинейной границе в области Ω соответствовала прямая $q_i = \text{const}$ ($i = 1, 2, 3$) в области R .

Считая U функцией координат q_i ($i = 1, 2, 3$)

$$U = U(x(q_1, q_2, q_3), y(q_1, q_2, q_3), z(q_1, q_2, q_3)), \quad (4)$$

запишем уравнение Лапласа (1) в системе координат q_1, q_2, q_3 . Для этого возьмем первые производные от U по q_i :

$$\frac{\partial U}{\partial q_i} = \frac{\partial U}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial q_i} + \frac{\partial U}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial q_i} + \frac{\partial U}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial q_i} \quad (5)$$

По правилу Крамера получаем (в дальнейшем знак Σ для повторяющихся индексов будем опускать):

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{\alpha_i}{\Delta} \cdot \frac{\partial U}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial U}{\partial y} = \frac{\beta_i}{\Delta} \cdot \frac{\partial U}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial U}{\partial z} = \frac{\gamma_i}{\Delta} \cdot \frac{\partial U}{\partial q_i}, \quad (6)$$

*Грант Минобрзования РФ по фундаментальным исследованиям

где

$$\alpha_1 = \frac{\partial y}{\partial q_2} \frac{\partial z}{\partial q_3} - \frac{\partial y}{\partial q_3} \frac{\partial z}{\partial q_2}, \quad \beta_1 = \frac{\partial x}{\partial q_3} \frac{\partial z}{\partial q_2} - \frac{\partial x}{\partial q_2} \frac{\partial z}{\partial q_3}, \quad \gamma_1 = \frac{\partial x}{\partial q_2} \frac{\partial y}{\partial q_3} - \frac{\partial x}{\partial q_3} \frac{\partial y}{\partial q_2}, \quad (7)$$

$$\alpha_2 = \frac{\partial y}{\partial q_3} \frac{\partial z}{\partial q_1} - \frac{\partial y}{\partial q_1} \frac{\partial z}{\partial q_3}, \quad \beta_2 = \frac{\partial x}{\partial q_1} \frac{\partial z}{\partial q_3} - \frac{\partial x}{\partial q_3} \frac{\partial z}{\partial q_1}, \quad \gamma_2 = \frac{\partial x}{\partial q_3} \frac{\partial y}{\partial q_1} - \frac{\partial x}{\partial q_1} \frac{\partial y}{\partial q_3}, \quad (7)$$

$$\alpha_3 = \frac{\partial y}{\partial q_1} \frac{\partial z}{\partial q_2} - \frac{\partial y}{\partial q_2} \frac{\partial z}{\partial q_1}, \quad \beta_3 = \frac{\partial x}{\partial q_2} \frac{\partial z}{\partial q_1} - \frac{\partial x}{\partial q_1} \frac{\partial z}{\partial q_2}, \quad \gamma_3 = \frac{\partial x}{\partial q_1} \frac{\partial y}{\partial q_2} - \frac{\partial x}{\partial q_2} \frac{\partial y}{\partial q_1}, \quad (7)$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial q_i} & \frac{\partial y}{\partial q_i} & \frac{\partial z}{\partial q_i} \end{vmatrix} \quad (8)$$

Используя (1), (6), получаем выражения для вторых производных

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} &= \frac{1}{\Delta} \alpha_j \cdot \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{1}{\Delta} \alpha_i \frac{\partial U}{\partial q_i} \right), \\ \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} &= \frac{1}{\Delta} \beta_j \cdot \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{1}{\Delta} \beta_i \frac{\partial U}{\partial q_i} \right), \\ \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} &= \frac{1}{\Delta} \gamma_j \cdot \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{1}{\Delta} \gamma_i \frac{\partial U}{\partial q_i} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

и уравнение для определения функции U в системе координат q_1, q_2, q_3

$$\alpha_j \cdot \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{1}{\Delta} \alpha_i \frac{\partial U}{\partial q_i} \right) + \beta_j \cdot \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{1}{\Delta} \beta_i \frac{\partial U}{\partial q_i} \right) + \gamma_j \cdot \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{1}{\Delta} \gamma_i \frac{\partial U}{\partial q_i} \right) = 0 \quad (10)$$

После разностной аппроксимации уравнения (10) в узлах сетки S получаем СЛАУ

$$\widehat{A} \cdot U = \widehat{b}, \quad (11)$$

где \widehat{b} — столбец свободных членов, соответствующий заданным граничным условиям. Матрица \widehat{A} в общем случае не удовлетворяет условиям симметричности и положительной определенности и, следовательно, при решении системы (11) метод *ICCG* может не сходиться.

В ряде случаев, например, когда коэффициенты $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ могут быть внесены под знаки дифференцирования, уравнение (10) приводится к виду

$$\frac{\partial}{\partial q_j} \left(F_j(q_1, q_2, q_3, \frac{\partial U}{\partial q_1}, \frac{\partial U}{\partial q_2}, \frac{\partial U}{\partial q_3}) \right) = 0, \quad (12)$$

где F_j — некоторые непрерывные функции.

Не проводя трудоемких исследований симметричности и положительной определенности матрицы \widehat{A} , для решения (11) может быть использована следующая **теорема 1**:

*Если уравнение (10) может быть приведено к виду (12), то метод *ICCG* для решения системы (11) сходится при выборе матрицы-предобусловливателя [1, 6], соответствующей уравнению Лапласа*

$$\frac{\partial^2 U^*}{\partial q_j \partial q_j} = 0. \quad (13)$$

Доказательство.

Так как F_j являются непрерывными функциями координат q_i ($i = 1, 2, 3$), то их можно положить равными компонентам градиента некоторой скалярной функции $U^* = U^*(q_1, q_2, q_3)$:

$$F_j \left(q_1, q_2, q_3, \frac{\partial U}{\partial q_1}, \frac{\partial U}{\partial q_2}, \frac{\partial U}{\partial q_3} \right) = \frac{\partial U^*}{\partial q_j}. \quad (14)$$

Подставляя (14) в (12), получаем уравнение Лапласа (13) в области R . Обратно, подставляя первые производные из (14) в (13), получаем (12). Так как для решения (12) и (13) используется одна и также разностная сетка S , то должно выполняться равенство

$$A^* \cdot U^* = \widehat{A} \cdot U. \quad (15)$$

Рассмотрим СЛАУ

$$A^* \cdot U^* = \hat{b}, \quad (16)$$

где A^* — матрица, соответствующая разностной аппроксимации уравнения (13). Так как матрица A^* является симметричной и положительно определенной, то метод *ICCG* для решения системы (16) сходит-ся.

Ввиду того, что в алгоритме *ICCG* матрица A^* участвует лишь как множитель в произведениях $A^* \cdot U^*$, то из (15) следует, что если в процессе итераций произведения $A^* \cdot U^*$ заменять произведениями $\hat{A} \cdot U$, то итерационный процесс останется сходящимся и в результате будет получено искомое решение системы (11). Теорема доказана.

Проиллюстрируем использование доказанной теоремы на примере трехмерной области Ω , представляющей собой параллелепипед с наклонной верхней гранью. Сечение Ω плоскостью, параллельной координатной плоскости XOZ , представляет собой трапецию (рис. 1). К таким областям могут быть сведены участки кусочно-однородных сред с кусочно-линейной аппроксимацией криволинейных границ, например, участок жидкого металла в алюминиевом электролизере [5].

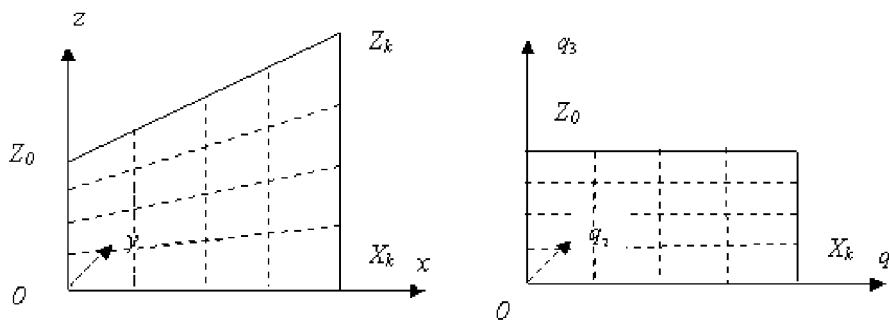


Рис. 1. Пример областей Ω и R .

Разобьем основание и верхнюю границу Ω вдоль оси OX на $N - 1$, а каждую из боковых граней вдоль осей OZ и OY , соответственно, на $L - 1$ и $M - 1$ равных частей. Если через точки разбиений провести плоскости, то получим систему неравных элементарных объемов. Обозначим через Z_0 , Z_k , соответственно, высоты левой и правой боковых граней, а через X_k , Y_k — размеры основания вдоль осей OX , OY .

Преобразуем параллелепипед R ($0 \leq q_1 \leq X_k$, $0 \leq q_2 \leq Y_k$, $0 \leq q_3 \leq Z_0$) в область Ω следующим образом:

$$x = q_1, \quad y = q_2, \quad z = q_3 \cdot (1 + cq_1), \quad (17)$$

$$c = \frac{Z_k - Z_0}{Z_0 \cdot X_k}.$$

В результате область R перейдет в область Ω , равным прямоугольным элементарным объемам в области R будут соответствовать неравные криволинейные объемы в области Ω .

Запишем уравнение Лапласа в области R . Из (7), (8) следует:

$$\alpha_1 = 1 + cq_1, \quad \alpha_2 = 0, \quad \alpha_3 = -cq_3,$$

$$\beta_1 = 0, \quad \beta_2 = 1 + cq_1, \quad \beta_3 = 0, \quad (18)$$

$$\gamma_1 = 0, \quad \gamma_2 = 0, \quad \gamma_3 = 1,$$

$$\Delta = \frac{1}{1 + cq_1}.$$

Подставляя (18) в (10), получаем уравнение

$$(1 + cq_1) \cdot \frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{\partial U}{\partial q_1} - \frac{cq_3}{1 + cq_1} \frac{\partial U}{\partial q_3} \right) - cq_3 \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{\partial U}{\partial q_1} - \frac{cq_3}{1 + cq_1} \frac{\partial U}{\partial q_3} \right) +$$

$$+(1+cq_1) \cdot \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{\partial U}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{1}{1+cq_1} \frac{\partial U}{\partial q_3} \right) = 0$$

или

$$\frac{\partial^2 U}{\partial q_1^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial q_2^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial q_3^2} \cdot \frac{1+c^2 q_3^2}{(1+cq_1)^2} - 2 \frac{\partial^2 U}{\partial q_1 \partial q_3} \cdot \frac{cq_3}{1+cq_1} + 2 \frac{\partial U}{\partial q_3} \cdot \frac{c^2 q_3}{(1+cq_1)^2} = 0. \quad (19)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться в том, что уравнение (19) можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial q_1} \left[\frac{\partial U}{\partial q_1} \cdot \frac{1}{1+c^2 q_3^2} - 2 \frac{\partial U}{\partial q_3} \cdot \frac{cq_3}{1+cq_1} \cdot \frac{1}{1+c^2 q_3^2} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial q_2} \left[\frac{\partial U}{\partial q_2} \cdot \frac{1}{1+c^2 q_3^2} \right] + \frac{\partial}{\partial q_3} \left[\frac{\partial U}{\partial q_3} \cdot \frac{1}{(1+cq_1)^2} \right] = 0, \end{aligned} \quad (20)$$

следовательно, по теореме 1 уравнение (19) может быть решено предложенным методом.

В результате разностной аппроксимации уравнения (19) получаем СЛАУ:

$$\begin{aligned} & a1_{i-1,j,k} \cdot U_{i-1,j,k} + a2_{i,j-1,k} \cdot U_{i,j-1,k} + a3_{i,j,k-1} \cdot U_{i,j,k-1} + a1_{i,j,k} \cdot U_{i+1,j,k} + \\ & + a2_{i,j,k} \cdot U_{i,j+1,k} + a3_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k+1} + a0_{i,j,k} \cdot U_{i,j,k} + \frac{\beta_k c}{(1+cq_1)^2 h_1} \cdot (U_{i,j,k+1} - U_{i,j,k-1} - \\ & - \frac{2\beta_k}{(1+cq_1) \cdot h_1 \cdot h_3} \cdot (U_{i+1,j,k+1} - U_{i-1,j,k+1} - U_{i+1,j,k-1} + U_{i-1,j,k-1})) = R_{i,j,k}, \\ & (i=2, \dots, N-1, \quad j=2, \dots, M-1, \quad k=2, \dots, L-1) \end{aligned} \quad (21)$$

где коэффициенты определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} a1_{i,j,k} &= -\frac{h_2 \cdot h_3}{h_1}, \quad a2_{i,j,k} = -\frac{h_1 \cdot h_3}{h_2}, \quad a3_{i,j,k} = -\frac{h_1 \cdot h_2}{h_3}, \\ a0_{i,j,k} &= |a1_{i-1,j,k} + a1_{i,j,k} + a2_{i,j-1,k} + a2_{i,j,k} + a3_{i,j,k-1} + a3_{i,j,k}|. \end{aligned}$$

Предложенный метод проверялся на тестовых примерах путем непосредственного вычисления гармонических функций $U = 1$, $U = xy + xz + yz$, $U = x + y + z$, $U = xyz$ в трехмерной области с углом наклона верхней границы, равным $\frac{\pi}{4}$, и в результате решения уравнения Лапласа модифицированным методом *ICCG*. Результаты расчетов совпали в пределах заданной точности.

Метод может быть использован для решения уравнения Лапласа в области с непрерывной нелинейной границей, если эта граница может быть аппроксимирована участками различных плоскостей. Для этого преобразования (3) должны быть записаны для каждого из участков. На границах между участками должны выполняться условия непрерывности функции U и ее нормальных производных.

Список литературы

- [1] Ильин В. П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Физматлит, 1995. 288 с. ISBN 5-02-014979-9.
- [2] БУЛЕЕВ Н. И. Метод неполной факторизации для решения двумерных задач эллиптического типа // Численные методы динамики вязкой жидкости. Новосибирск: Наука, 1979. С. 31–45.
- [3] ОРТЕГА Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М.: Мир, 1991. 367 с.
- [4] КАРПЛЮС У. Моделирующие устройства для решения задач теории поля. М. 1962.
- [5] АЛЬЧИКОВ В. В., БЫКОВ В. И. Пакет программ расчета электрических и магнитных полей алюминиевых электролизеров. Ж. Наука-производству. 2000, №3. С. 17–20. НТП “Вираж-Центр”.
- [6] АЛЬЧИКОВ В. В., БЫКОВ В. И. Использование метода неполной факторизации Холесского-сопряженных градиентов для решения трехмерных уравнений Лапласа // Вычислите. технологии. ИВТ СО РАН. Новосибирск, 2000. С. 62–67.