сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р11-85-965

В.В.Гусев*, М.С.Касчиев

СХОДИМОСТЬ МЕТОДА ИТЕРАЦИЙ АЛЬТЕРНИРУЮЩИХ ПОДПРОСТРАНСТВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЧАСТИЧНОЙ ОБОБЩЕННОЙ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ ПРОБЛЕМЫ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

* Институт физики высоких энергий, Серпухов

1985

ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] предложен метод итераций альтернирующих подпространств /МИАП/ для численного решения частичной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений

$$A_h y = \lambda^h B_h y\,, \quad A_h = A_h^T > 0, \quad B_h = B_h^T > 0, \qquad /1/$$

возникающей в результате конечно-разностной или конечно-элементной аппроксимации спектральных задач для самосопряженных положительно определенных дифференциальных операторов эллиптического типа.

МИАП - это метод для одновременного вычисления минимальных собственных значений и соответствующих им собственных векторов при помощи минимизации функционала Рэлея - Ритца задачи /1/ по группам компонент на последовательностях вложенных сеток. В указанной работе этим методом были проведены вычисления значений энергий и волновых функций дискретного спектра трехмерного уравнения Шредингера, соответствующего задаче трех тел с кулоновским взаимодействием.

В данной работе доказывается сходимость сглаживающей процедуры метода на заданной сетке при самом общем определении альтернирующих подпространств. Рассмотрены конкретные способы построения этих подпространств и проведен ряд численных исследований метода при решении модельной трехмерной задачи Штурма - Лиувилля для оператора Лапласа.

Приведена модификация метода для решения системы алгебраических уравнений

$$A_h y = b\,, \quad b \in E_N \qquad /2/$$

и проведены соответствующие численные исследования сходимости метода.

1. МЕТОД ИТЕРАЦИЙ АЛЬТЕРНИРУЮЩИХ ПОДПРОСТРАНСТВ

Рассматривается задача о вычислении минимальных p собственных значений $0 < \lambda_1^* < \lambda_2^* < \ldots < \lambda_p^*$ и соответствующих им собственных векторов $Y^* = (y_1^*, y_2^*, \ldots, y_p^*)$ задачи /1/. В дальнейшем индекс h будем опускать. Предполагаем, что собственные значения λ_j^*, $j = 1, 2, \ldots, p$ - простые, а матрицы A и B имеют простую структуру. Обозначим через $E_p = \mathrm{span}\, Y^*$ подпространство E_N. В пространстве E_N рассмотрим q базисов $X^{n_i} = (x_i^1, \ldots, x_i^{n_i})$,

$x_i^k \in E_N$, $k=1,2,\dots,n_i$, $n_i+p<N$, $E_{n_i} = \mathrm{span}\, X^{n_i}$, $i=1,2,\dots,q$, выбранных так, что

а/ $E_N = \bigcup_{i=1}^{q} E_{n_i}$;

б/ $E_p \cap E_{n_i} = \emptyset$, $i=1,2,\dots,q$.

Условие а/ означает, что из столбцов матрицы $(X^{n_1}, X^{n_2}, \dots, X^{n_q})$ можно выделить полный базис пространства E_N, а из б/ вытекает тот факт, что ни один из собственных векторов $y_1^*, y_2^*, \dots, y_p^*$ задачи /1/ не является элементом пространств E_{n_i}, $i=1,2,\dots,q$. Отсюда следует справедливость утверждения:

минимальное число Ритца ρ_1^i для каждого из подпространств E_{n_i} удовлетворяет неравенству

$$\rho_1^i = \min_{x \in E_{n_i}} (Ax,x)/(Bx,x) > \lambda_{p+1}^*, \quad i=1,2,\dots,q. \qquad /3/$$

Действительно, из разложения вектора $x \in E_{n_i}$, $x = \sum_{k=p+1}^{N} a_k^i y_k^*$ по собственным векторам задачи /1/, следующего из условия б/, получаем

$$(Ax,x)/(Bx,x) = \sum_{k=p+1}^{N} (a_k^i)^2 \lambda_k^* \Big/ \sum_{k=p+1}^{N} (a_k^i)^2 \ge \lambda_{p+1}^*,$$

что доказывает утверждение.

Выберем линейно независимые векторы $Y_0 = (y_1^\circ, y_2^\circ, \dots, y_p^\circ)$, имеющие ненулевую проекцию в E_p, которые будем считать начальными приближениями к векторам $y_1^*, \dots, y_p^*$.

Пространства

$$E_{n_i+p} = \mathrm{span}(X^{n_i}, Y_0)$$

назовем альтернирующими подпространствами.

Сглаживающий алгоритм МИАП состоит в следующем:

1. Выбирается матрица Y_0 из начальных приближений к собственным векторам $y_1^*, \dots, y_p^*$.

2. Для $m=1,2,\dots,p$ находятся числа и векторы Ритца в альтернирующих подпространствах E_{n_i}, $i=1,2,\dots,q$.

2.1. Определяем базис $X_m^{n_i+p}$ подпространства E_{n_i+p},

$$X_m^{n_i+p} = (X^{m_i}, Y_m^{i-1}), \quad Y_m^\circ = Y_{m-1}.$$

2.2. Вычисляются проекции матриц A и B в

$$A_m^i = (X_m^{n_i+p})^T A X_m^{n_i+p}, \quad B_m^i = (X_m^{n_i+p})^T B X_m^{n_i+p}.$$

2.3. Находятся минимальные p собственных значений $0 < \mu_1^{m,i} < \mu_2^{m,i} < \dots < \mu_p^{m,i}$ и соответствующих им собственных векторов

$$\Phi_m^i = (\phi_1^{m,i}, \phi_2^{m,i}, \dots, \phi_p^{m,i})$$

задачи

$$A_m^i \phi = \mu B_m^i \phi. \qquad /4/$$

2.4. Получается новое приближение Y_m^i к собственным векторам $y_1^*, \dots, y_p^*$ задачи /1/ по формуле

$$Y_m^i = X_m^{n_i+p} \Phi_m^i.$$

2.5. При $i=q$ полагается

$$Y_{m+1} = Y_m^q, \quad \lambda_j^{m+1} = \mu_j^{m,q}, \quad j=1,2,\dots,p.$$

3. При выполнении заданного критерия точности процесс прекращается, в противном случае переходим к пункту 2.

Конкретные критерии точности приведем ниже.

ГЛОБАЛЬНАЯ СХОДИМОСТЬ МИАП

В монографии Д.К.Фаддева и В.Н.Фаддеевой [2] /с.410/ рассмотрен метод групповой релаксации для определения крайних собственных значений задачи /1/. Там же доказана сходимость метода координатной релаксации для вычисления максимального /минимального/ собственного числа задачи /1/ /с.405/, а в работе [3] доказана сходимость метода верхней релаксации при минимизации функционала Рэлея - Ритца.

Сглаживающая процедура 1-3 является обобщением метода координатной релаксации, метода групповой релаксации на случай одновременного вычисления минимальных p собственных значений и соответствующих им собственных векторов.

Отличительная особенность предлагаемого подхода состоит также в том, что МИАП реализуется на последовательности сеток, учитывающих происхождение исходной проблемы /1/, что приводит к довольно быстрой сходимости метода.

Имеет место следующая теорема о глобальной сходимости процесса 1-3.

Теорема. Пусть начальные приближения Y_0 выбраны так, что

$$\lambda_j^* \le \lambda_j^\circ < \lambda_{j+1}^*, \quad \lambda_j^\circ = (y_j^\circ, Ay_j^\circ)/(y_j^\circ, By_j^\circ), \quad j=1,2,\dots,p. \qquad /5/$$

Тогда последовательности $\{\lambda_j^m\}_{m=1}^{\infty}$, $j=1,2,\dots,p$, $\{Y_m\}_{m=1}^{\infty}$ сходятся, и

$$\lambda_j^* = \lim_{m\to\infty} \lambda_j^m, \quad j=1,2,\dots,p, \quad Y^* = \lim_{m\to\infty} Y_m. \qquad /6/$$

Доказательство: Последовательности $\{\lambda_j^m\}_{m=1}^{\infty}$ монотонно убывают.

Чтобы доказать это, воспользуемся минимаксным принципом определения собственных значений [4]

$$\mu_j^{m,i} = \min_{S_j} \max_{\phi \in S_j} (A_m^i \phi, \phi)/(B_m^i \phi, \phi), \qquad /7/$$

где S_j - произвольное подпространство R^{n_i+p} размерности j.

Матрицы A_m^i и B_m^i имеют вид

$$A_m^i = \begin{pmatrix} A^i & \tilde{y}_1^{m,i-1} \dots & \tilde{y}_p^{m,i-1} \\ (\tilde{y}_1^{m,i-1})^T & \mu_1^{m,i-1} \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ (\tilde{y}_p^{m,i-1})^T & 0 \dots & \mu_p^{m,i-1} \end{pmatrix}, \quad B_m^i = \begin{pmatrix} B^i & \bar{y}_1^{m,i-1} \dots & \bar{y}_p^{m,i-1} \\ (\bar{y}_1^{m,i-1})^T & 1 \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ (\bar{y}_p^{m,i-1})^T & 0 \dots & 1 \end{pmatrix},$$

$$A^i = (X^{n_i})^T A X^{n_i}, \quad B^i = (X^{n_i})^T B X^{n_i}, \quad \tilde{y}_j^{m,i-1} = (X^{n_i})^T A y_j^{m,i-1}, \quad \bar{y}_j^{m,i-1} = (X^{n_i})^T B y_j^{m,i-1}.$$

Рассмотрим подпространство $S_j^* \subset R^{n_i+p}$, $S_j^* = \mathrm{span}(e_{n_i+1}, \dots, e_{n_i+j})$, где e_{n_i+k}, $k = 1,2,\dots,j$ - единичный орт в R^{n_i+p}. Для вектора $\phi \in S_j^*$, $\phi = \sum_{k=1}^{j} \beta_k e_{n_i+k}$, из /7/ следует, что

$$\mu_j^{m,i} \le \max_{\phi \in S_j^*} (A_m^i \phi, \phi)/(B_m^i \phi, \phi) = \max_{\beta_1,\dots,\beta_j} \sum_{k=1}^{j} \beta_k^2 \mu_k^{m,i-1} \Big/ \sum_{k=1}^{j} \beta_k^2 \le \mu_j^{m,i-1},$$

так как $\mu_1^{m,i-1} \le \dots \le \mu_j^{m,i-1}$.

Ввиду условия /5/, последовательности $\{\lambda_j^m\}_{m=1}^{\infty}$ сходятся, и пусть

$$\bar{\lambda}_j = \lim_{m \to \infty} \lambda_j^m, \quad \lambda_j^* \le \bar{\lambda}_j < \lambda_{j+1}^*, \quad j = 1,2,\dots,p. \qquad /8/$$

Обозначим через $(\mu_j^{m,i}, \phi_j^{m,i})$, $j = 1,2,\dots,p$ собственные значения и собственные векторы задачи /3/ и представим $\phi_j^{m,i}$ в виде

$$\phi_j^{m,i} = (z_j^{m,i}, \alpha_{1j}^{m,i}, \dots, \alpha_{pj}^{m,i}),$$

где $z_j^{m,i} \in R^{n_i}$, $\alpha_{kj}^{m,i}$, $j = 1,\dots,p$ - реальные числа.

Из тождества

$$A_m^m \phi_j^{m,i} = \mu_j^{m,i} B_m^i \phi_j^{m,i}$$

получаем

$$A^i z_j^{m,i} - \mu_j^{m,i} B^i z_j^{m,i} + \sum_{k=1}^{p} \alpha_{kj}^{m,i} (\tilde{y}_k^{m,i-1} - \mu_j^{m,i} \bar{y}_k^{m,i-1}) = 0, \qquad /9/$$

$$(z_j^{m,i}, \tilde{y}_k^{m,i-1}) - \mu_j^{m,i} (z_j^{m,i}, \bar{y}_k^{m,i-1}) = \alpha_{kj}^{m,i} (\mu_j^{m,i} - \mu_k^{m,i-1}), \qquad /10/$$

$k = 1,2,\dots,p$.

Кроме этого, из /9/ следует, что

$$(A_m^i \phi_j^{m,i}, \phi_j^{m,i}) - \mu_j^{m,i} (B_m^i \phi_j^{m,i}, \phi_j^{m,i}) = 0, \qquad /11/$$

$$(B_m^i \phi_j^{m,i}, \phi_k^{m,i}) = \delta_{jk}, \quad j,k = 1,2,\dots,p. \qquad /12/$$

С учетом /9/ и /10/ тождество /11/ преобразуем к виду

$$(A^i z_j^{m,i}, z_j^{m,i}) - \mu_j^{m,i} (B^i z_j^{m,i}, z_j^{m,i}) +$$

$$+ \sum_{k=1}^{j-1} (\alpha_{kj}^{m,i})^2 (\mu_j^{m,i} - \mu_k^{m,i-1}) + \sum_{k=j+1}^{p} (\alpha_{kj}^{m,i})^2 (\mu_j^{m,i} - \mu_k^{m,i-1}) = \qquad /13/$$

$$= (\alpha_{jj}^{m,i})^2 (\mu_j^{m,i-1} - \mu_j^{m,i}).$$

Ввиду того, что правая часть в /13/ стремится к нулю при $m \to \infty$, последовательности $\{z_j^{m,i}\}_{m=1}^{\infty}$, $\{\alpha_{kj}^{m,i}\}_{m=1}^{\infty}$ сходятся, и можно обозначить

$$z_j^i = \lim_{m \to \infty} z_j^{m,i}, \quad \alpha_{kj}^i = \lim_{m \to \infty} \alpha_{kj}^{m,i}, \quad j,k = 1,2,\dots,p, \quad i = 1,2,\dots,q.$$

При этом имеем

$$(A^i z_j^i, z_j^i) - \bar{\lambda}_j (B^i z_j^i, z_j^i) + \sum_{k=1}^{j-1} (\alpha_{kj}^i)^2 (\bar{\lambda}_j - \bar{\lambda}_k) +$$

$$+ \sum_{k=j+1}^{p} (\alpha_{kj}^i)^2 (\bar{\lambda}_j - \bar{\lambda}_k) = 0. \qquad /14/$$

Положим в /14/ $j = p$. Из условия /8/ $\bar{\lambda}_p > \bar{\lambda}_k$, $k < p$, а из /3/ следует, что

$$(A^i z_p^i, z^i) - \bar{\lambda}_p^i (B^i z_p^i, z_p^i) \ge (\rho_1^i - \bar{\lambda}_p)(B \hat{z}_p^i, \hat{z}_p^i), \quad \hat{z}_p^i = X^{n_i} z_p^i.$$

Так как B - положительно определенная матрица, $\rho_1^i - \bar{\lambda}_p > 0$, из /14/ получаем $z_p^i = 0$, $\alpha_{kp}^i = 0$, $k = 1,\dots,p-1$, $i = 1,2,\dots,q$, а из условия нормировки /12/ $\alpha_{pp}^i = 1$. Кроме этого, из /12/ следует, что все числа $\alpha_{kp}^i = 0$, $k < p$. В таком случае в /14/ при $j = p-1$ остаются только неотрицательные слагаемые, и следовательно, $z_{p-1}^i = 0$, $\alpha_{kp-1}^i = 0$, $k \ne p-1$, $\alpha_{p-1\,p-1}^i = 1$. Продолжая аналогичным образом, получим, что все $z_j^i = 0$, $\alpha_{jk}^i = \delta_{jk}$, $j,k = 1,\dots,p$, а это означает, что последовательности $\{Y_m\}_{m=1}^{\infty}$ сходятся, и пусть

$$\hat{Y} = \lim_{m \to \infty} Y_m.$$

Устремляя $m\to\infty$ в /9/, получаем

$$(X^{n_i})^T(A\hat y_j - \bar\lambda_j B\hat y_j)=0,\quad i=1,2,\dots,q.$$

Но из свойства а/ следует

$$A\hat y_j - \bar\lambda_j B\hat y_j = 0,\quad j=1,2,\dots,p,$$

а это означает, что число $\bar\lambda_j$ и вектор $\hat y_j$ являются решением задачи /1/. Так как в интервале $[\lambda_j^*,\lambda_{j+1}^*)$ нет иных решений задачи /1/, кроме λ_j^*, то имеем

$$\bar\lambda_j=\lambda_j^*,\quad \hat y_j = y_j^*,\quad j=1,\dots,p.$$

Теорема доказана.

Здесь не устанавливается скорость сходимости алгоритма 1-3, так как рассмотрено самое общее определение альтернирующих подпространств. При конкретном выборе этих подпространств можно оценить скорость сходимости метода, как это делается, например, в работе[3]. Метод, использующий последовательности сеток, требует рассмотрения совсем иных задач, и в данной работе этот вопрос не затрагивается. Здесь проведено только численное исследование скорости сходимости на последовательности сеток на примере модельной задачи.

3. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СКОРОСТИ СХОДИМОСТИ

Рассмотрим модельную задачу

$$-\Delta u(x)=\lambda u(x), \qquad /15/$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_1}\Big|_{x_1=0} = u\Big|_{x_1=1} = \frac{\partial u}{\partial x_2}\Big|_{x_2=0} = \frac{\partial u}{\partial x_2}\Big|_{x_2=1} = \frac{\partial u}{\partial x_3}\Big|_{x_3=0} = u\Big|_{x_3=1} = 0. \qquad /16/$$

Алгебраическая проблема собственных значений в рассмотренных примерах получается путем аппроксимации задачи /15/-/16/ методом конечных разностей и методом конечных элементов. Разностная схема имеет точность $O(h^2)$[5]. Схемы метода конечных элементов используют трилинейные лагранжевые элементы на параллелепипедах /точность схемы $O(h^2)$/, и триквадратичные лагранжевые элементы /точность $O(h^4)$/[4]. В работе[1] задача /15/-/16/ решалась при помощи последних двух схем, подпространства МИАП определялись узлами сетки по плоскостям, параллельным плоскости Ox_1x_2.

Естественным базисом пространства E_N назовем базис, составленный из его ортов. Подпространства МИАП для решения разностной схемы строятся следующим образом. Номер k каждого узла сетки определяется тройкой целых чисел (i_1,i_2,i_3),

$$k = i_1 + (i_2-1)N_1 + (i_3-1)N_1N_2,$$

где N_ℓ - число незакрепленных узлов по оси Ox_ℓ. Шаблон разностной схемы представляет собой семиточечный крест. Все номера разобьем на две группы G_1 и G_2:

$$G_1=\{k;\ i_1+i_2+i_3=0\ (\mathrm{mod}\ 2)\},\quad G_2=\{k;\ i_1+i_2+i_3=1\ (\mathrm{mod}\ 2)\}$$

и каждому элементу $n\in G_i$ сопоставим в соответствие орт $e_n\in E_N$. Совокупность ортов, определяемых элементами множеств G_1 и G_2, определяют два подпространства E_{n_1} и E_{n_2} МИАП. Здесь $n_1=n_2=N/2$, если N - четное, и $n_1=[N/2]$, $n_2=n_1+1$, если N - нечетное. Определив таким образом подпространства метода, мы, казалось бы, ничем не упростили задачу, ибо порядок матриц A_m^i и B_m^i стал равным n_i+p, $i=1,2$, т.е. остался достаточно большим. Внимательное изучение структуры матриц A^i и B^i показывает, что они являются диагональными,

$$A^i=\operatorname*{diag}_{n\in G_i}(a_{nn}),\qquad B^i=\operatorname*{diag}_{n\in G_i}(b_{nn}).$$

Таким образом, к решению задачи /4/ можно применить методы, основанные на обращение матрицы A_m^i, такие, как непрерывный аналог метода Ньютона[6], метод обратной итерации[7], метод итераций подпространств[8].

В работе используется последний метод, так как он позволяет одновременно вычислить минимальные p собственных значений и соответствующих им собственных векторов задачи /4/. Этот метод последовательно применялся авторами к численному решению ряда двумерных спектральных задач квантовой механики[9] и электродинамики[10].

Исследование сходимости МИАП при численном решении задачи /15/-/16/ с таким определением подпространств метода проведено на последовательности из четырех сеток с шагом $h = 1/4,\ 1/8,\ 1/16,\ 1/32$. На сетке с шагом $h = 1/4$ решение задачи /1/ осуществляется методом итераций подпространств[7]. Полученное решение интерполируется в узлах сетки $\omega^{h/2}$ и используется задача /1/ как начальное приближение МИАП. Дальше снова решение интерполируется в узлах $\omega^{h/4}$, применяется МИАП и т.д. Вычислялись одновременно (λ_1^*,y_1^*) и (λ_2^*,y_2^*), которые для задачи /15/-/16/ равны $\lambda_1^*=\pi^2/2$, $\lambda_2^*=3\pi^2/2$, $y_1^*=\cos\pi x_1/2\cos\pi x_3$, $y_2^*=\cos\pi x_1/2\cos\pi x_2\cos\pi x_3/2$.

Критерий точности для прекращения итераций МИАП имеет вид

$$\max_{1\le j\le p}\gamma_j^m<\epsilon,\quad \gamma_j^m=\max_{1\le i\le q}\|z_j^{m,i}\|_C,\quad \epsilon=10^{-5},$$

что гарантирует точность по собственным значениям порядка ϵ^2[7].

В табл.1 показана сходимость метода при использовании разностной схемы. Введены обозначения

$$r_j^m=\|Ay_j^m-\lambda_j^m By_j^m\|_C,\quad \delta_j^m=|1-\lambda_j^m/\lambda_j^{m+1}|,\quad j=1,2,\dots,p.$$

Все вычисления проведены на ЭВМ ЕС-1061 ОИЯИ (скорость $\sim 2\cdot 10^{-6}$ опер./с).

Таблица 1

N	m	δ_1^m	γ_1^m	r_1^m	δ_2^m	γ_2^m	r_2^m	t''
80				0,75(-15			0,I3(-4)	3
576	7	0,26(-I2)	0,76(-7)	0,I8(-7)	0,76(-I0)	0,66(-5)	0,28(-5)	35
4352	6	0,43(-II)	0,I5(-6)	0,I8(-7)	0,28(-I0)	0,I8(-5)	0,48(-6)	I87
33792	5	0,84(-I0)	0,33(-6)	0,2 (-7)	0,26(-9)	0,I3(-5)	0,40(-6)	II97

В табл.2 иллюстрируется сходимость метода на последней сетке с N = 33792.

Таблица 2

m	δ_1^m	γ_1^m	δ_2^m	γ_2^m
2	0,44(-4)	0,24(-3)	0,I3(-3)	0,I0(-2)
3	0,55(-6)	0,26(-4)	0,I7(-5)	0,II(-3)
4	0,68(-8)	0,29(-5)	0,2I(-7)	0,I2(-4)
5	0,84(-I0)	0,33(-6)	0,26(-9)	0,I3(-5)

Проведены численные эксперименты с целью выяснения зависимости сходимости сглаживающего алгоритма 1-3 на сетке с 576 узлами.

В табл.3 показаны результаты вычислений с применением:

- МИАП на сетках с N = 80 и N = 576;
- МИП с N = 576. Начальные приближения выбираются подпрограммой SSPACE [7];
- сглаживающей процедурой 1-3 с начальными приближениями
- $\lambda_1^\circ = 4,98$, $\lambda_2^\circ = 14,8$, $y_1^\circ = (1-x_1^2)(1-x_3^2)$, $y_2^\circ = y_1^\circ\,(1+0,516\cos\pi x_2)$
- $\lambda_1^\circ = 30,94$, $\lambda_2^\circ = 47,25$, $y_1^\circ = \cos\pi x_1/2\cos\pi x_3/2 + 10x_3$, $y_2^* = y_1^\circ \cos\pi x_2$

и времена центрального процессора для решения этих задач.

Таблица 3

N=576	m	δ_1^m	δ_2^m	r_1^m	r_2^m	t''
МИАП	7	0,26(-I2)	0,72(-I0)	0,I8(-7)	0,28(-5)	38
МИП	II			0,26(-I4)	0,26(-5)	80
алгоритм I-3 $\lambda_1^\circ = 4,98$ $\lambda_2^\circ = 14,8$	74	0,59(-9)	0,I3(-9)	0,44(-5)	0,36(-5)	357
алгоритм I-3 $\lambda_1^\circ = 30,94$ $\lambda_2^\circ = 47,25$	I00	0,II(-I0)	0,48(-9)	0,49(-5)	0,40(-5)	470

Видно, что при вычислении решение задачи /1/ на заданной сетке МИАП требует меньше времени, чем метод итераций подпространств, а алгоритм 1-3 сходится даже в случае, когда начальные приближения не удовлетворяют условию /5/. Число итераций, необходимых для достижения заданной точности, из последних двух строк табл.3 согласуется с оценками [3] для метода координатной релаксации.

В табл.4 приведены результаты вычисления собственных чисел по разностной и конечно-элементной схемам.

Таблица 4

	МКР-схема $O(h^2)$		МКЭ-схема $O(h^2)$		МКЭ-схема $O(h^2)$	
N	λ_1^h	λ_2^h	λ_1^h	λ_2^h	λ_1^h	λ_2^h
80	4,87I7I0	I4,244293	4,998540	I5,385I82	4,937329	I4,88II76
576	4,9I8968	I4,662388	4,950677	I4,947758	4,934964	I4,809623
4352	4,930840	I4,768776	4,938767	I4,840I2I	4,9348I2	I4,804740
33792	4,9338II	I4,79549I				
	$\lambda_1^* = 4,934802$		$\lambda_2^* = 14,804407$			

Полученные результаты показывают, что вычисленные собственные значения для разностной схемы приближают снизу собственные числа задачи /15/-/16/, а вычисленные по МКЭ - сверху. Таким образом, получаем двухстороннее приближение к собственным числам этой задачи.

4. ПРИМЕНЕНИЕ МИАП К РЕШЕНИЮ СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

Рассмотрим задачу /2/. Известно [2], что решение этой задачи эквивалентно нахождению минимума функционала ошибки

$$J(y) = (Ay, y) - 2(b, y), \qquad /17/$$

и следовательно, имеет смысл задача о вычислении этого минимума при помощи МИАП.

Пусть минимум /17/ достигается на векторе y*. Выберем подпространства E_{n_i}, удовлетворяющие условию а/ из разд.1,а вместо условия б/ потребуем, чтобы $y^* \bar{\in} E_{n_i}$, $i = 1,2,\ldots,q$.

Сглаживающий алгоритм МИАП для минимизации /17/ имеет вид:

1. Выбирается начальное приближение

2. Для $m = 1, \ldots$

2.1. Вычисляется решение $\phi^i_m = (z^i_m, a^i_m)$ задачи

$$A^i_m \phi^i_m = \tilde{b}^i_m,$$

где

$$A^i_m = \begin{pmatrix} A^i & \tilde{y}^{i-1}_m \\ (\tilde{y}^{i-1}_m)^T & a^{i-1}_m \end{pmatrix}, \qquad \tilde{b}^i_m = \begin{pmatrix} (X^{n_i})^T b \\ b^{i-1}_m \end{pmatrix}, \qquad /18/$$

$$a^{i-1}_m = (A y^{i-1}_m, y^{i-1}_m), \quad b^{i-1}_m = (b, y^{i-1}_m), \quad y^{\circ}_m = y_{m-1}, \quad \tilde{y}^{i-1}_m = (X^{n_i})^T A y^{i-1}_m.$$

2.2 Определяется

$$y^i_m = X^{n_i} z^i_m + a^i_m y^{i-1}_m.$$

2.3. При $i = q$ полагается $y_{m+1} = y^q_m$.

3. При выполнении критерия точности

$$\max_{1 \le i \le q} \| z^i_m \|_C < \epsilon$$

итерации прекращаются, в противном случае переходим к п.2.

Рассмотренный в этом параграфе алгоритм 1-3 не совпадает с методом групповой релаксации /2/ /с.264/, так как там он совпадает с блочным методом Гаусса - Зейделя.

Проведено численное решение задачи

$$-\Delta u(x) = f(x) \qquad /19/$$

при граничных условиях /16/, для различных правых частей. Использована разностная схема решения задачи /19/, и соответствующий способ определения подпространств E_{n_i}, как в разд.3. Отметим, что при $i + m > 2$

$$a^{i-1}_m = b^{i-1}_m = (\tilde{b}^i_m, \phi^i_m).$$

Рассмотрены следующие функции $f(x)$ в правой части /19/:

$$f_1(x) = 3\pi^2/2 \cos \pi x_1/2 \cos \pi x_2 \cos \pi x_3,$$

$$f_2(x) = 1,$$

$$f_3(x) = \begin{cases} 1, & 0{,}25 \le x_1, x_2, x_3 \le 0{,}75, \\ 0. & \end{cases}$$

Решение задачи /19/ с $f = f_1(x)$ есть функция

$$u = \cos \pi x_1/2 \cos \pi x_2 \cos \pi x_3/2.$$

В табл.5 приведены результаты расчетов на сетках ω^h, $\omega^{h/2}$, $\omega^{h/4}$, $\omega^{h/8}$ с $h = 1/4$. На сетке ω^h задача /2/ решалась прямым методом /8/, использующим разложение матрицы $A = LDL^T$; L - нижняя треугольная матрица с единицами на диагонали, D - диагональная матрица.

Таблица 5

		$f_1(x)$				$f_2(x)$			$f_3(x)$	
N	m	r^m	$\|\|y^*-y_m\|\|_C$	t''	m	r^m	t''	m	r^m	t''
		0.29(-I5)	0.39(-I)	I		0.I6(-I5)	I		0.II(-I5)	I
576	5	0.I5(-5)	0.97(-2)	5	I2	0.59(-4)	7	I7	0.45(-4)	II
4352	4	0.I9(-5)	0.24(-2)	I8	8	0.2I(-4)	24	I8	0.32(-4)	5I
33792	4	0.27(-6)	0.60(-3)	I30	4	0.55(-5)	95	9	0.II(-4)	I90

Различия в колонках, указывающих на время вычислений, объясняются тем, что значения функции $f(x)$ в точках сетки каждый раз, когда это необходимо, вычисляются из достаточно сложной формулы, что привело к соответствующему увеличению времени счета. Как видно из табл.5, метод сходится достаточно быстро на последовательностях вложенных сеток и может быть применен к решению практических задач.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрен МИАП для решения обобщенной алгебраической проблемы собственных значений /1/ и системы линейных уравнений /2/. Доказана сходимость сглаживающей процедуры метода при самом общем выборе альтернирующих подпространств. Проведены численные исследования сходимости метода при решении модельных задач, которые показывают, что предложенный метод позволяет весьма быстро находить решение задач /1/ или /2/ для матриц достаточно большой размерности N.

Авторы благодарны Ю.А.Кузнецову и И.В.Пузынину за критические замечания и поддержку на протяжении всей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гусев В.В., Касчиев М.С. ОИЯИ, Р11-85-758, Дубна, 1985.
2. Фаддев Д.К.О Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. Гос. изд.физ.-мат.лит., М., Л., 1963.
3. Ruhe A. Math.Comp., vol.28, № 127, 1974, p.695.
4. Стренг Г., Фикс Дж., Теории метода конечных элементов, "Наука", М., 1976.
5. Андреев В.Б., Самарский А.А., Разностные методы для эллиптических уравнений, "Наука", М., 1977.
6. Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Puzynina T.P. J.Comput.Phys., 22, 1, 1976, p.125.

7. Уилкинсон Дж.Х., Алгебраическая проблема собственных значений, "Наука", М., 1970.
8. Bathe Kl.-J., Wilson Ed. Numerical Methods in Finite Element Analysis, Prentice-Hall, Cliff.N.J., 1976.
9. Kaschiev M.s. et al. Phys.Rev. A., vol.22, 1980, p.557.
10. Fedoseyev A.I. et al. NIM, section A, vol.227, № 3, 1984, p.411.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 декабря 1985 года.

Гусев В.В., Касчиев М.С. P11-85-965
Сходимость метода итераций альтернирующих подпространств для решения частичной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений

Доказана сходимость сглаживающей процедуры метода итераций альтернирующих подпространств при одновременном вычислении минимальных p собственных значений и соответствующих им собственных векторов задачи $Ay = \lambda By,\ A = A^T > 0,\ B = B^T > 0$. Матрицы A и B имеют ленточные размерности $N \gg 1$. Предложена модификация метода для решения системы линейных уравнений $Ay = b$. Проведенные численные исследования при решении задач $-\Delta u = \lambda u$, $-\Delta u = f$, $0 \le x_1, x_2, x_3 \le 1$ с граничными условиями первого или второго рода на разных участках границы области показывают линейную зависимость времени счета от числа узлов N используемых вложенных сеток.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С.Виноградовой

Gusev V.V., Kaschiev M.S. P11-85-965
Convergence of the Alternating Subspace Iteration Method for Solving General Algebraic Eigenvalue Problem

The convergence is proved of the relaxation at alternating subspace iteration method at simultaneous calculation of smallest p eigenvalues and corresponding eigenvectors of the problem $Ay = \lambda By, A = A^T > 0, B = B^T > 0$, where matrixes A and B are banded of the $N \gg 1$ order. The modification of the method for solving a system of linear equations $Ay = b$ is proposed. The numerical investigations carried out on the solution of the $-\Delta u = \lambda u$, $-\Delta u = f, 0 \le x_1, x_2, x_3 \le 1$ problems with boundary conditions of the first or second type on different parts of region boundary show a linear dependence of computational time on number of nodes N that are used sequence of grids.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985