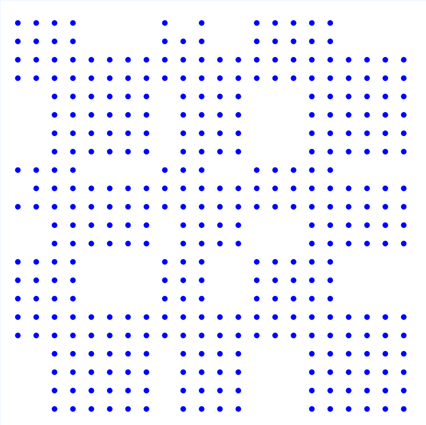
Řešení úloh s problematickými maticemi

Eva Neumanová

Ústav technické matematiky FS ČVUT v Praze



Programy a algoritmy numerické matematiky

2.-6. červen 2008, Horní Maxov

OBSAH

1. Úvod

Budeme se zabývat řešením soustav lineárních algebraických rovnic tvaru

$$\boldsymbol{A}\vec{x} = \vec{b}.$$

Tyto soustavy jsou generovány při diskretizaci okrajové úlohy s počátečními podmínkami pro parciální diferenciální rovnici s neznámými funkcemi rychlostí a tlaku užitím metody konečných prvků.

2. Vlastnosti matic

- plné, čtvercové, řádu $n \sim 10^1 - 10^2$,
- symetrické a pozitivně definitní (nejedná se ale o M-matice),
- nejsou diagonálně dominantní,
- s číslem podmíněnosti $\varkappa \sim 10^3$,
- prvky matic jsou ve dvou třídách velikosti:
  velké prvky jsou řádově $\sim 10^8$, dále třída $\mathcal{B}$,
  malé prvky jsou řádově $\sim 10^{-8}$, dále třída $\mathcal{S}$,
- matice, v níž ponecháme pouze prvky třídy $\mathcal{B}$, je regulární.

3. Řešení soustavy lineárních rovnic

3.1. Gaussovou eliminací s částečnou pivotací.

Standartní algoritmy ve FORTRANu 99
(REAL*4, REAL*8, REAL*16),
algoritmy ve dvojné aritmetice dostupné v MATLABu
(operace \ a LU rozklad).

3.2. *Metoda asociovaná s BS rozkladem matice $\boldsymbol{A}$*

Definujme rozklad

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} + \boldsymbol{S}, \tag{1}$$

kde $\boldsymbol{B}$ obsahuje pouze prvky třídy $\mathcal{B}$
a $\boldsymbol{S}$ obsahuje pouze prvky třídy $\mathcal{S}$.
Označme $\vec{x}_B$ řešení soustavy $\boldsymbol{B}\vec{x}_B = \vec{b}$.
Užitím rozkladu (1) zkonstruujeme iterační metodu:

$$\boldsymbol{A}\vec{x} = \vec{b} \quad \Leftrightarrow \quad (\boldsymbol{B} + \boldsymbol{S})\vec{x} = \vec{b}$$

$$\boldsymbol{B}\,\underbrace{(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{S})\vec{x}}_{\vec{x}_B} = \vec{b}$$

Po jednoduché úpravě dostáváme rovnost

$$\vec{x} = -\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{S}\vec{x} + \vec{x}_B$$

a iterační metodu:

$$\vec{x}^{(n+1)} = -\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{S}\vec{x}^{(n)} + \vec{x}_B \tag{1.a}$$

Nutná a postačující podmínka konvergence $\rho(-\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{S}) < 1$.

3.3. *Metoda asociovaná s modifikovaným rozkladem matice* $\boldsymbol{A}$

Necht' α je přirozené číslo. Definujme rozklad matice $\boldsymbol{A}$ takto:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}_\alpha + \boldsymbol{S}_\alpha, \tag{2}$$

kde $\boldsymbol{B}_\alpha = \boldsymbol{B} - 10^\alpha \boldsymbol{I}, \qquad \boldsymbol{S}_\alpha = \boldsymbol{S} + 10^\alpha \boldsymbol{I}.$

Označme $\vec{x}_\alpha$ řešení soustavy $\boldsymbol{B}_\alpha \vec{x}_\alpha = \vec{b}$.

$$(\boldsymbol{B}_\alpha + \boldsymbol{S}_\alpha)\vec{x} = \vec{b}$$

$$\boldsymbol{B}_\alpha \underbrace{(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{B}_\alpha^{-1}\boldsymbol{S}_\alpha)\vec{x}}_{\vec{x}_\alpha} = \vec{b}$$

Úpravou rovnosti $\vec{x}_\alpha = (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{B}_\alpha^{-1}\boldsymbol{S}_\alpha)\vec{x}$ dostáváme

$$\vec{x} = -\boldsymbol{B}_\alpha^{-1}\boldsymbol{S}_\alpha \vec{x} + \vec{x}_\alpha.$$

Definujeme iterační metodu

$$\vec{x}^{(n+1)} = -\boldsymbol{B}_\alpha^{-1}\boldsymbol{S}_\alpha \vec{x}^{(n)} + \vec{x}_\alpha. \tag{2.a}$$

Nutná a postačující podmínka konvergence $\rho(-\boldsymbol{B}_\alpha^{-1}\boldsymbol{S}_\alpha) < 1$.

3.4. *Metoda se škálováním v BS rozkladu matice $\boldsymbol{A}$*

Definujme parametr σ takto:

$\sigma = 10^r, r = [\frac{p-q}{2}]$, $p > 0$ značí řád třídy $\mathcal{B}$, $q < 0$ řád třídy $\mathcal{S}$, $[a]$ znamená celou část čísla a.

Definujme matice $\boldsymbol{B}_\sigma = \sigma^{-1}\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{S}_\sigma = \sigma\boldsymbol{S}$.

Rozklad $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} + \boldsymbol{S}$ zapíšeme takto

$$\boldsymbol{A} = \sigma\boldsymbol{B}_\sigma + \sigma^{-1}\boldsymbol{S}_\sigma, \tag{3}$$

V rovnosti $\boldsymbol{A}\vec{x} = \vec{b}$ použijeme vztah (3) a po úpravě dostáváme

$$\boldsymbol{B}_\sigma(\sigma\boldsymbol{I} + \sigma^{-1}\boldsymbol{B}_\sigma^{-1}\boldsymbol{S}_\sigma)\vec{x} = \vec{b}$$

Označme $\vec{x}_\sigma$ řešení soustavy $\boldsymbol{B}_\sigma\vec{x}_\sigma = \vec{b}$.

Je tedy $\vec{x}_\sigma = (\sigma\boldsymbol{I} + \sigma^{-1}\boldsymbol{B}_\sigma^{-1}\boldsymbol{S}_\sigma)\vec{x}$.

Po úpravě pak dostáváme $\sigma\vec{x} = (-\sigma^{-1}\boldsymbol{B}_\sigma^{-1}\boldsymbol{S}_\sigma)\vec{x} + \vec{x}_\sigma$.

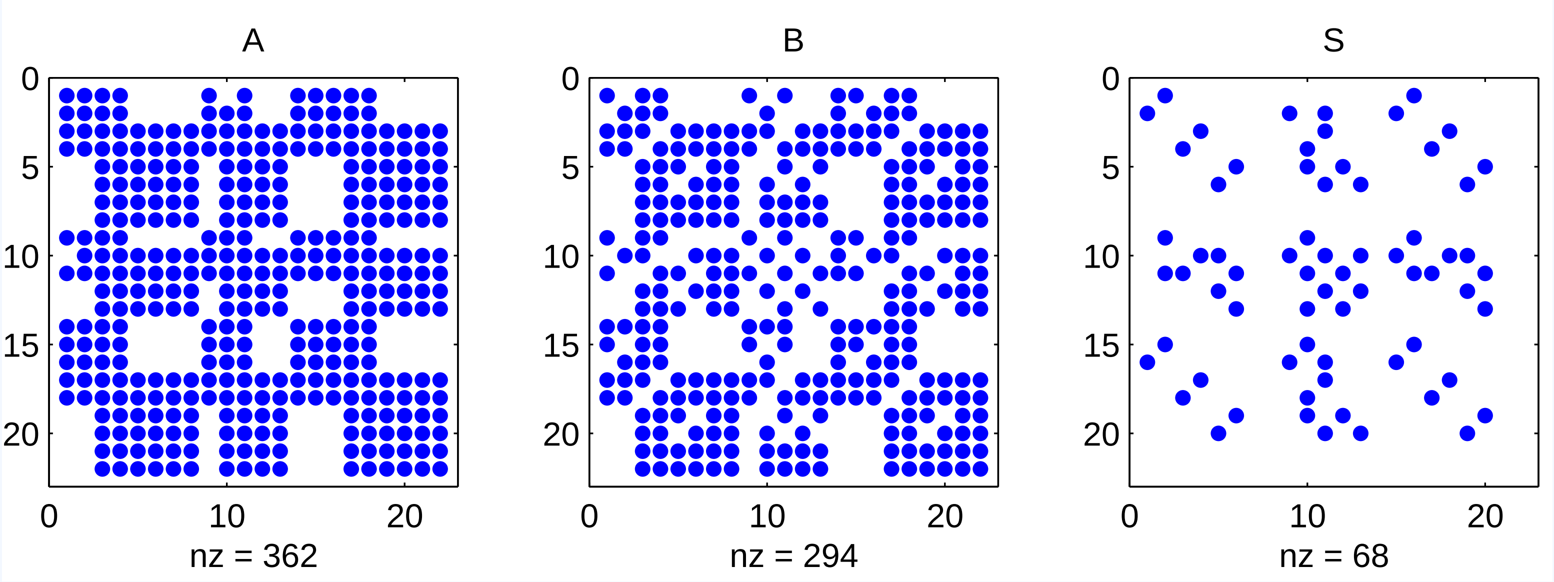
Iterační proces definujeme takto:

$$\sigma\vec{x}^{(n+1)} = -\sigma^{-1}\boldsymbol{B}_\sigma^{-1}\boldsymbol{S}_\sigma\vec{x}^{(n)} + \vec{x}_\alpha \tag{3.a}$$

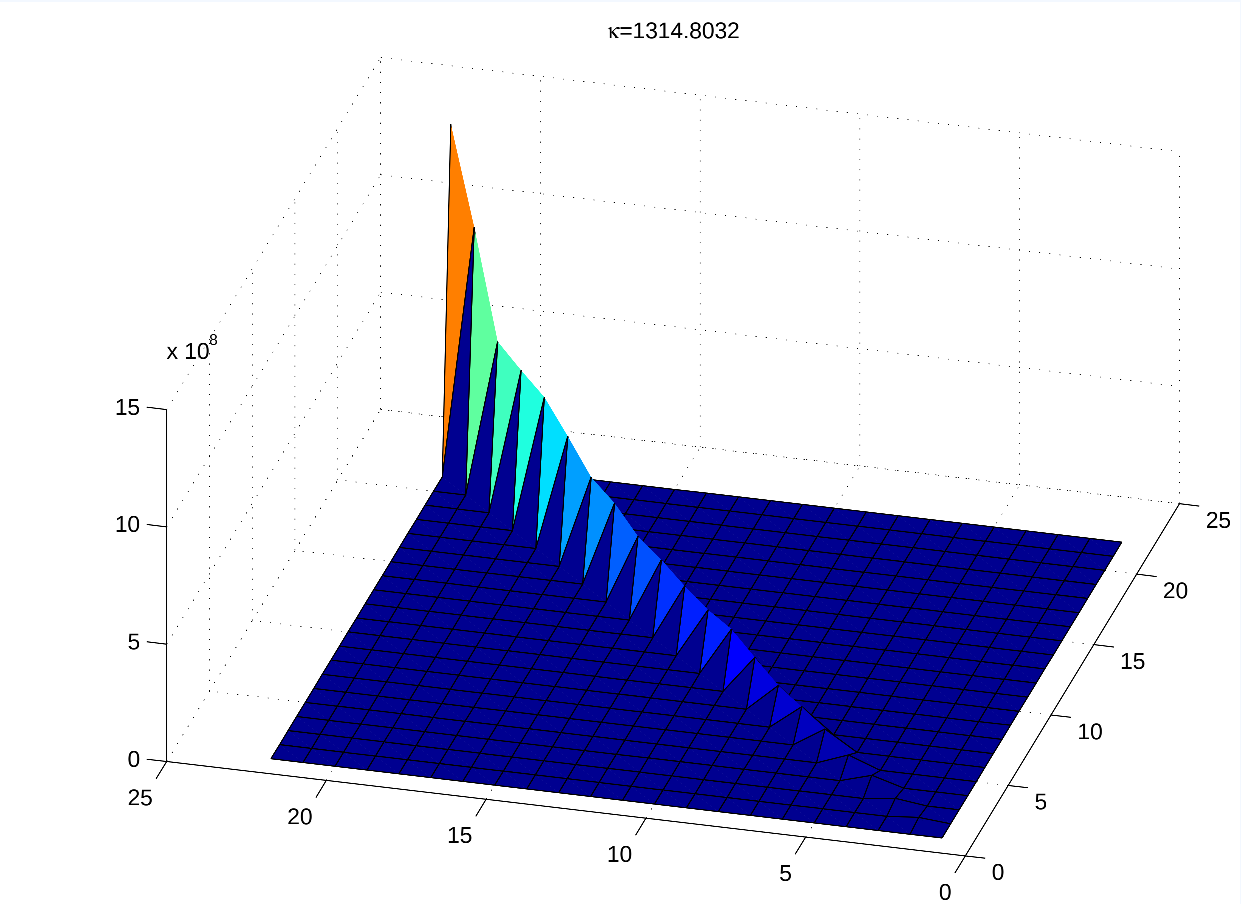
Nutná a postačující podmínka konvergence $\rho(-\sigma^{-2}\boldsymbol{B}_\sigma^{-1}\boldsymbol{S}_\sigma) < 1$.

4. Numerické výpočty

Uvažujme matici $\boldsymbol{A}$ řádu $n = 22$. Struktura nenulových prvků matic $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{S}$ je znázorněna na obr. 1.



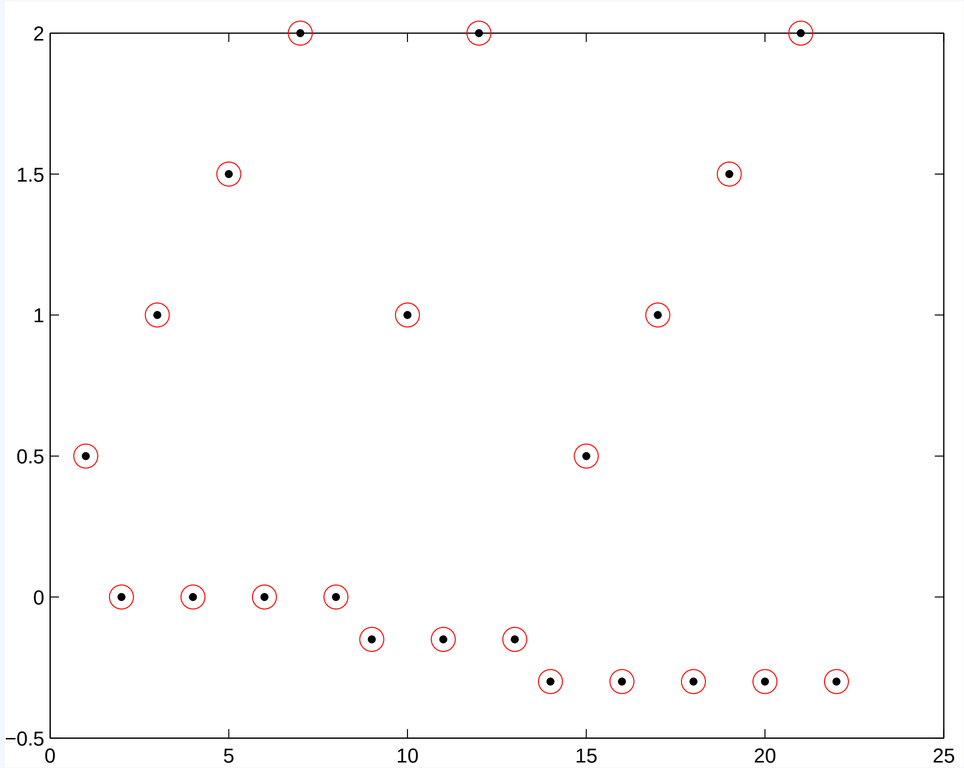
Obr. 1. Matice $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{S}$



Obr. 2. Spektrum matice $\boldsymbol{A}$

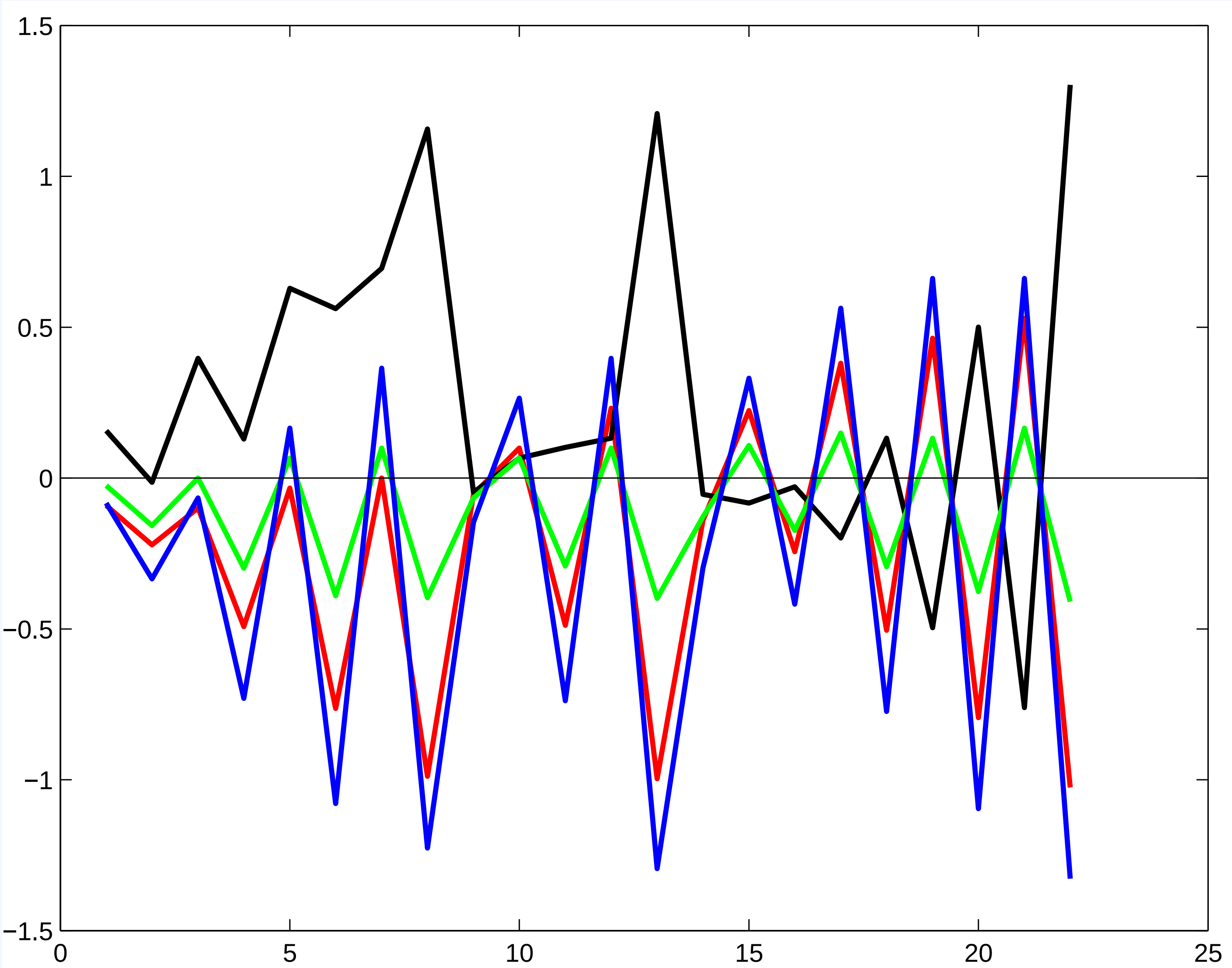
Porovnáváme řešení $\vec{x}$ soustavy $\boldsymbol{A}\vec{x} = \vec{b}$, vypočtené Gaussovou eliminační metodou s částečnou pivotací v dvojné aritmetice s řešením soustavy $\boldsymbol{B}\vec{x}_B = \vec{b}$. Grafické znázornění výsledků je na Obr. 3.

Norma rozdílu $\|\vec{x}_B - \vec{x}\| = 2.424170738922339 \cdot 10^{-22}$.



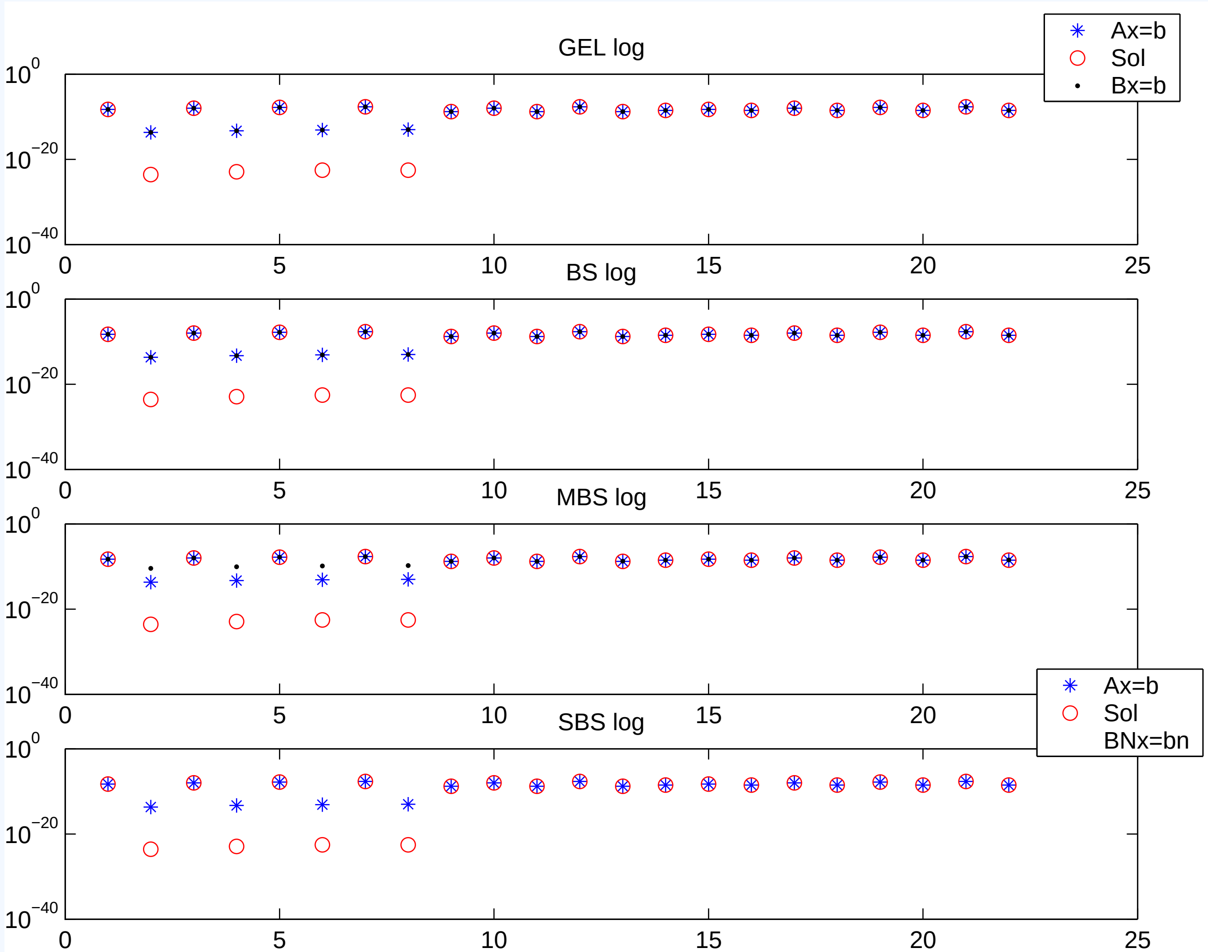
Obr. 3. Řešení $\vec{x}$ $\cdot$, $\vec{x}_B$ $\circ$

Porovnání diferencí pro jednotlivé metody.



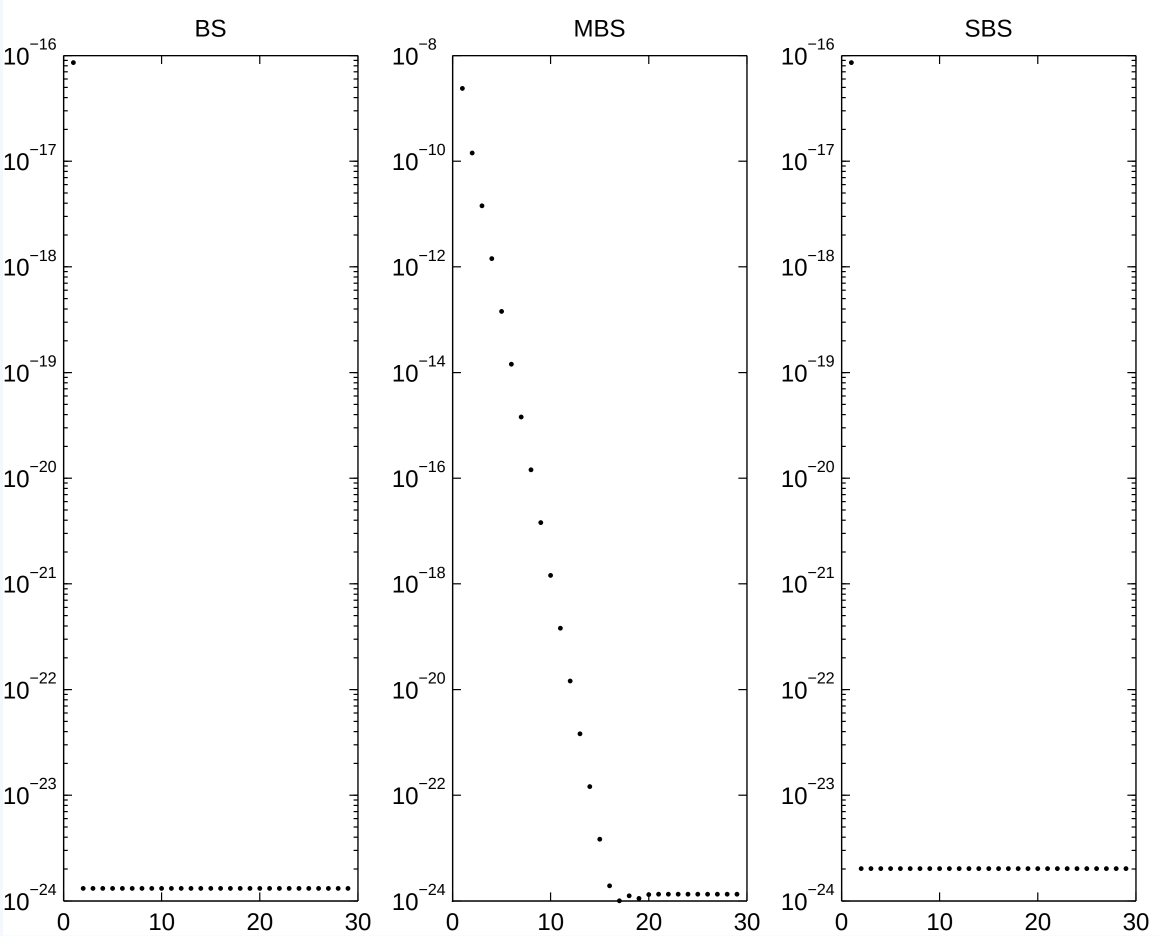
Obr. 4. Rozdíl řešení

Výpočty znázorněné v logaritmické stupnici.



Obr. 5.

Výsledky pro metodu asociovanou s BS rozkladem, pro modifikovanou metodu s parametrem $\alpha = 10^5$ a pro metodu asociovanou s BS rozkladem se škálováním a $\sigma = 10^8$.



Obr. 6. Relativní rezidua pro jednotlivé iterační metody

Literatura

[1] P. Burda, M. Čertíková, A. Damašek, E. Neumanová, J. Novotný, J. Šístek. Application of the BDDC method to linear elasticity problems. In Sameš M., editor, *Proceedings of SAMO'06, Ostravice, Czech Republic, September 13-15*, pages 9-10,VŠB TU Ostrava, 2006.

[2] P. Burda, M. Čertíková, J. Novotný, J. Šístek. BDDC method with simplified coarse problem and its parallel implementation. In *Proceedings of MIS 2007, Josefův Důl, Czech Republic, January 13- 20*, 2007.

Děkuji Vám za pozornost.