

*Алгебраический многосеточный
метод для решения сингулярно
возмущенных задач*

Тиховская С. В.

Вычислительные методы линейной алгебры

- Вычислительные методы линейной алгебры:
 - разделение вычислительных методов от их приложения к задачам математической физики, задачам линейного программирования;
 - трудность в отделении вычислительных методов от теоретических вопросов линейной алгебры, используемых при построении вычислительных алгоритмов;
 - отсутствие четкой границы между линейными и нелинейными задачами.
- Некоторые вопросы:
 - средства и метод оценки качества численного решения задачи (нормы, обусловленность, масштабирование, ошибки округления);
 - прямые методы решения систем линейных уравнений (матрицы и системы линейных уравнений специального вида, системы с разреженными матрицами);
 - итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений (явные итерационные процессы, методы типа Гаусса-Зейделя, методы переменных направлений, методы спуска).

Исследование смешанной точности для разреженных СЛАУ

Описание проекта



В настоящее время широко используются системы автоматизированного конструирования (**Computer-Aided Engineering**). Такое программное обеспечение позволяет улучшать и оптимизировать существующие конструкции, помогает при решении инженерных проблем во многих областях: гидродинамике (OpenFoam, AUTODESC, Ansys), структурной механике (Ansys, COMSOL, Abaqus), схемотехническом моделировании (Silvaco TCAD, OrCAD), электромагнитных полях, магнитогазодинамике, экономическом моделировании и во многих других областях.

3/6

Большая Математическая Мастерская 2023

Задачи на мастерскую

Одними из базовых методов решения систем линейных алгебраических уравнений являются итерационные методы в **подпространствах Крылова**, эффективность и точность которых зависит от используемой точности машинного представления числа и точности вычислений.

Основная задача проекта — проанализировать производительность решателя методом сопряжённых градиентов для разреженных матриц с предобуславливателем Холецкого. Для этого нужно исследовать влияние точности машинного представления числа на количество итераций, точность и скорость работы алгоритма.

Описание проекта

Как правило, при подобном моделировании необходимо решать системы линейных алгебраических уравнений, представленные разреженными матрицами — матрицами большого размера, в которых большинство элементов равны нулю. Специальное представление в памяти позволяет уменьшить её объём, необходимый для хранения матрицы, а также повысить эффективность вычислений, т.к. вычисления с нулевыми элементами можно пропускать.



G.tettel/TEM152078,
электромагнетизм



FEMLAB/poisson3Db,
вычислительная гидродинамика



V.SI/test1,
моделирование полупроводников

4/6

Большая Математическая Мастерская 2023

Требования к участникам

Для участия в проекте нужно:

- знать базовый курс вычислительных методов линейной алгебры,
- знать базовый курс программирования.

Плюсом будет знакомство с форматами хранения разреженных матриц.

Исследование смешанной точности для разреженных СЛАУ

- Вычисления с пониженной точностью возникают при решении некоторых задач машинного обучения и искусственного интеллекта, при моделировании погодных явлений.
- Цель: проанализировать поведение предобусловленного неполным разложением Холецкого итерационного метода сопряженных градиентов в смешанной точности.

Исследование смешанной точности для разреженных СЛАУ

Набор матриц для вычислительного эксперимента

- Матрицы симметричные положительно определенные.
- Репозиторий (хранилище матриц): <https://sparse.tamu.edu/>

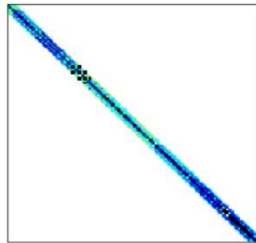
SuiteSparse Matrix Collection
Formerly the University of Florida Sparse Matrix Collection

Index About Interfaces Submit Matrix

HB/bcsstk16

S STIFFNESS MATRIX - CORP. OF ENGINEERS DAM

Name	bcsstk16
Group	HB
Matrix ID	38
Num Rows	4,884
Num Cols	4,884
Nonzeros	290,378
Pattern Entries	290,378
Kind	Structural Problem
Symmetric	Yes
Date	1985
Author	M. Will
Editor	I. Duff, R. Grimes, J. Lewis



SuiteSparse Matrix Collection
Formerly the University of Florida Sparse Matrix Collection

Index About Interfaces Submit Matrix

Structural Rank	4,884	SVD Statistics	
Structural Rank Full	true	Matrix Norm	4.943166e+09
Num Dmperm Blocks	75	Minimum Singular Value	9.999966e-01
Strongly Connect Components	75	Condition Number	4.943183e+09
Num Explicit Zeros	0	Rank	4,884
Pattern Symmetry	100%	sprank(A)-rank(A)	0
Numeric Symmetry	100%	Null Space Dimension	0
Cholesky Candidate	yes	Full Numerical Rank?	yes
Positive Definite	yes	Download Singular Values	<input type="button" value="MATLAB"/>
Type	real		

Download

Notes

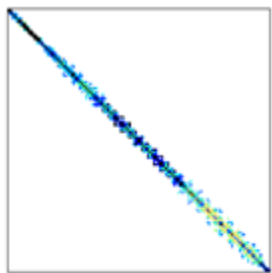
Исследование смешанной точности для разреженных СЛАУ

Набор матриц для вычислительного эксперимента

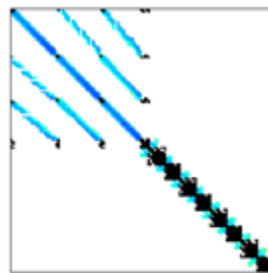
№	Id	Name	Group	Rows	Nonzeros	Kind	Date
1	38	bcsstk16	HB	4 884	147 631	Structural Problem	1985
2	804	cfdl	Rothberg	70 656	949 510	Computational Fluid Dynamics Problem	1997
3	1270	oilpan	GHS_psddef	73 752	1 835 470	Structural Problem	2004
4	2374	consph	Williams	83 334	3 046 907	2D/3D Problem	2008
5	805	cfdl2	Rothberg	123 440	1 605 669	Computational Fluid Dynamics Problem	1997
6	1454	boneS01	Oberwolfach	127 224	3 421 188	Model Reduction Problem	2006
7	1849	Dubcova3	UTEP	146 689	1 891 669	2D/3D Problem	2007
8	1254	bmwcrs_1	GHS_psddef	148 770	5 396 386	Structural Problem	2004
9	2259	thermomech_dM	Botonakis	204 316	813 716	Thermal Problem	2009
10	1266	hood	GHS_psddef	220 542	5 494 489	Structural Problem	2004
11	1850	BenElechi1	BenElechi	245 874	6 698 185	2D/3D Problem	2007
12	942	af_shell3	Schenk_AFE	504 855	9 046 865	Subsequent Structural Problem	2003
13	943	af_shell4	Schenk_AFE	504 855	9 046 865	Subsequent Structural Problem	2003
14	946	af_shell7	Schenk_AFE	504 855	9 046 865	Subsequent Structural Problem	2003
15	947	af_shell8	Schenk_AFE	504 855	9 046 865	Subsequent Structural Problem	2003
16	1853	parabolic_fem	Wissgott	525 825	2 100 225	Computational Fluid Dynamics Problem	2007
17	1423	apache2	GHS_psddef	715 176	2 766 523	Structural Problem	2006
18	1899	tmt_sym	CEMW	726 713	2 903 837	Electromagnetics Problem	2008
19	1883	ecology2	McRae	999 999	2 997 995	2D/3D Problem	2008
20	1403	thermal2	Schmid	1 228 045	4 904 179	Thermal Problem	2006
21	1421	G3_circuit	AMD	1 585 478	4 623 152	Circuit Simulation Problem	2006

Исследование смешанной точности для разреженных СЛАУ

Набор матриц для вычислительного эксперимента



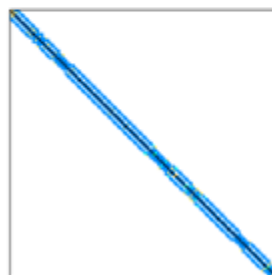
oilpan



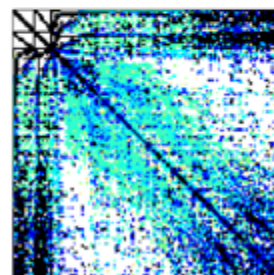
consph



cfd2



boneS01



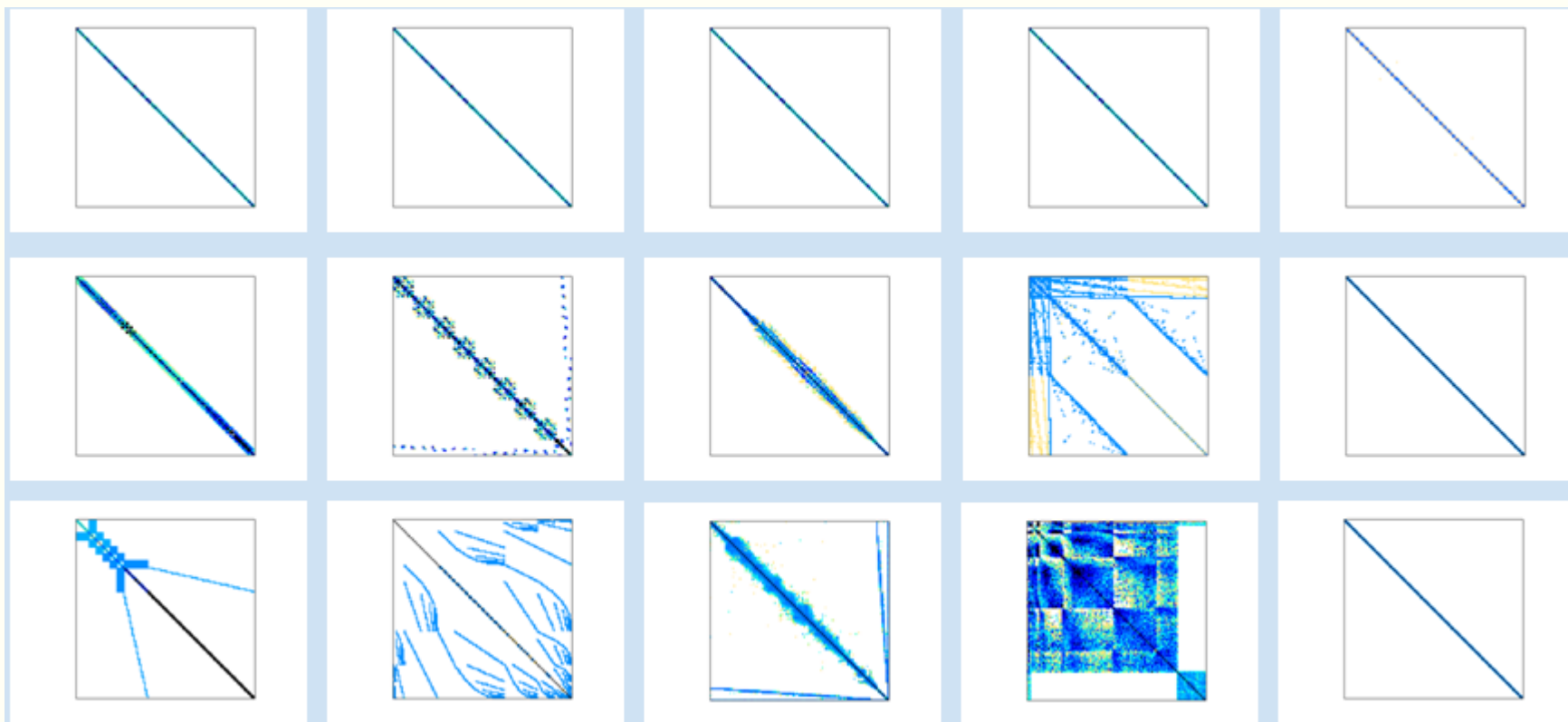
hood



BenElechi1

Исследование смешанной точности для разреженных СЛАУ

Набор матриц для вычислительного эксперимента



Дифференциальная задача

- Рассмотрим краевую задачу:

$$\begin{aligned} \varepsilon \Delta u + a(x, y)u_x + b(x, y)u_y - c(x, y)u &= f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \\ u(x, y) &= g(x, y), \quad (x, y) \in \Gamma, \end{aligned} \tag{1.1}$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon > 0, \quad a(x, y) \geq \alpha > 0, \quad b(x, y) \geq \beta > 0, \quad c(x, y) \geq 0, \\ \Omega = (0,1)^2, \quad \Gamma = \overline{\Omega} \setminus \Omega, \end{aligned} \tag{1.2}$$

a, b, c, f, g – достаточно гладкие.

Сетка Шишкина

- Зададим сетку:

$$\Omega_N = \{(x_i, y_j), i, j = \overline{0, N}, h_i = x_i - x_{i-1}, \tau_j = y_j - y_{j-1}\},$$

где

$$h_i = \frac{2\sigma_x}{N}, 1 \leq i \leq \frac{N}{2}, \quad h_i = \frac{2(1-\sigma_x)}{N}, \frac{N}{2} < i \leq N;$$

$$\tau_j = \frac{2\sigma_y}{N}, 1 \leq j \leq \frac{N}{2}, \quad \tau_j = \frac{2(1-\sigma_y)}{N}, \frac{N}{2} < j \leq N;$$

$$\sigma_x = \min \left\{ \frac{1}{2}, \frac{2\varepsilon}{\alpha} \ln N \right\}, \quad \sigma_y = \min \left\{ \frac{1}{2}, \frac{2\varepsilon}{\beta} \ln N \right\}.$$

Разностная схема

- Рассмотрим схему направленных разностей:

$$\begin{aligned} \varepsilon \lambda_{xx}^N u_{i,j}^N + \varepsilon \lambda_{yy}^N u_{i,j}^N + a(x_i, y_j) \lambda_x^N u_{i,j}^N + \\ + b(x_i, y_j) \lambda_y^N u_{i,j}^N - c(x_i, y_j) u_{i,j}^N = f(x_i, y_j); \\ u_{i,j}^N = g(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \Gamma_N = \Gamma \cap \Omega_N, \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$\lambda_{xx}^N u_{i,j}^N = \frac{(\lambda_x^N u_{i,j}^N - \lambda_x^N u_{i-1,j}^N)}{(h_i + h_{i+1})/2}, \quad \lambda_x^N u_{i,j}^N = \frac{(u_{i+1,j}^N - u_{i,j}^N)}{h_{i+1}}.$$

- **Theorem (Шишкин, 1992)**

$$\| [u]_{\Omega_N} - u^N \| = \max_{i,j=0,N} |u(x_i, y_j) - u_{i,j}^N| \leq C \Delta_N, \quad \Delta_N = \frac{\ln N}{N}.$$

Дифференциальная задача

- Рассмотрим краевую задачу:

$$\begin{aligned} \varepsilon \Delta u + a(x, y)u_x - c(x, y)u &= f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \\ u(x, y) &= g(x, y), \quad (x, y) \in \Gamma, \end{aligned} \quad (2.1)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon > 0, \quad a(x, y) \geq \alpha > 0, \quad c(x, y) \geq 0, \\ \Omega = (0,1)^2, \quad \Gamma = \overline{\Omega} \setminus \Omega, \end{aligned} \quad (2.2)$$

a, c, f, g – достаточно гладкие.

Сетка Шишкина

- Зададим сетку:

$$\Omega_N = \{(x_i, y_j), i, j = \overline{1, N}, h_i = x_i - x_{i-1}, \tau_j = y_j - y_{j-1}\},$$

где

$$h_i = \frac{2\sigma_x}{N}, \quad 1 \leq i \leq \frac{N}{2}, \quad h_i = \frac{2(1-\sigma_x)}{N}, \quad \frac{N}{2} < i \leq N;$$

$$\tau_j = \frac{4\sigma_y}{N}, \quad 1 \leq j \leq \frac{N}{4}, \quad \frac{3N}{4} < i \leq N, \quad \tau_j = \frac{2(1-2\sigma_y)}{N}, \quad \frac{N}{4} < i \leq \frac{3N}{4};$$

$$\sigma_x = \min \left\{ \frac{1}{2}, \frac{2\varepsilon}{\alpha} \ln N \right\}, \quad \sigma_y = \min \left\{ \frac{1}{4}, 2\sqrt{\varepsilon} \ln N \right\}.$$

Разностная схема

- На каждой итерации будем использовать схему направленных разностей:

$$\varepsilon \lambda_{xx}^N u_{i,j}^N + \varepsilon \lambda_{yy}^N u_{i,j}^N + a(x_i) \lambda_x^N u_{i,j}^N - c(x_i, y_j) u_{i,j}^N = f(x_i, y_j); \quad u_{i,j}^N = g(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \Gamma_N, \quad (2.3)$$

$$\lambda_x^N u_{i,j}^N = \frac{(u_{i+1,j}^N - u_{i,j}^N)}{h_{i+1}}, \quad \lambda_{xx}^N u_{i,j}^N = \frac{(\lambda_x^N u_{i,j}^N - \lambda_x^N u_{i-1,j}^N)}{(h_i + h_{i+1})/2}.$$

- Теорема (Шишкин, 1992).

$$\| [u]_{\Omega_N} - u^N \| = \max_{i,j=0,N} |u(x_i, y_j) - u_{i,j}^N| \leq C \Delta_N, \quad \Delta_N = \frac{\ln N}{N}.$$

Многосеточный метод

- Одна итерация многосеточного метода с V-циклом:
 $U^{(1)} = MG(U^{(0)}, F, N)$.
- 1. Apply relaxation to $AU = F$ with initial guess $U^{(0)}$, producing $U^{(r)}$.
- 2. Compute $F_c = R(F - AU^{(r)})$, for restriction matrix R .
- 3. Compute $U_c = MG(0, F_c, N/2)$.
- 4. Compute $U^{(c)} = U^{(r)} + PU_c$, for interpolation matrix P .
- 5. Apply relaxation to $AU = F$ with initial guess $U^{(c)}$, producing $U^{(1)}$.
- Используем R из Gaspar F. J., Clavero C., Lisbona F., J. of Comp. and Appl. Math., 138 (2002), 21–35.

Многосеточный метод

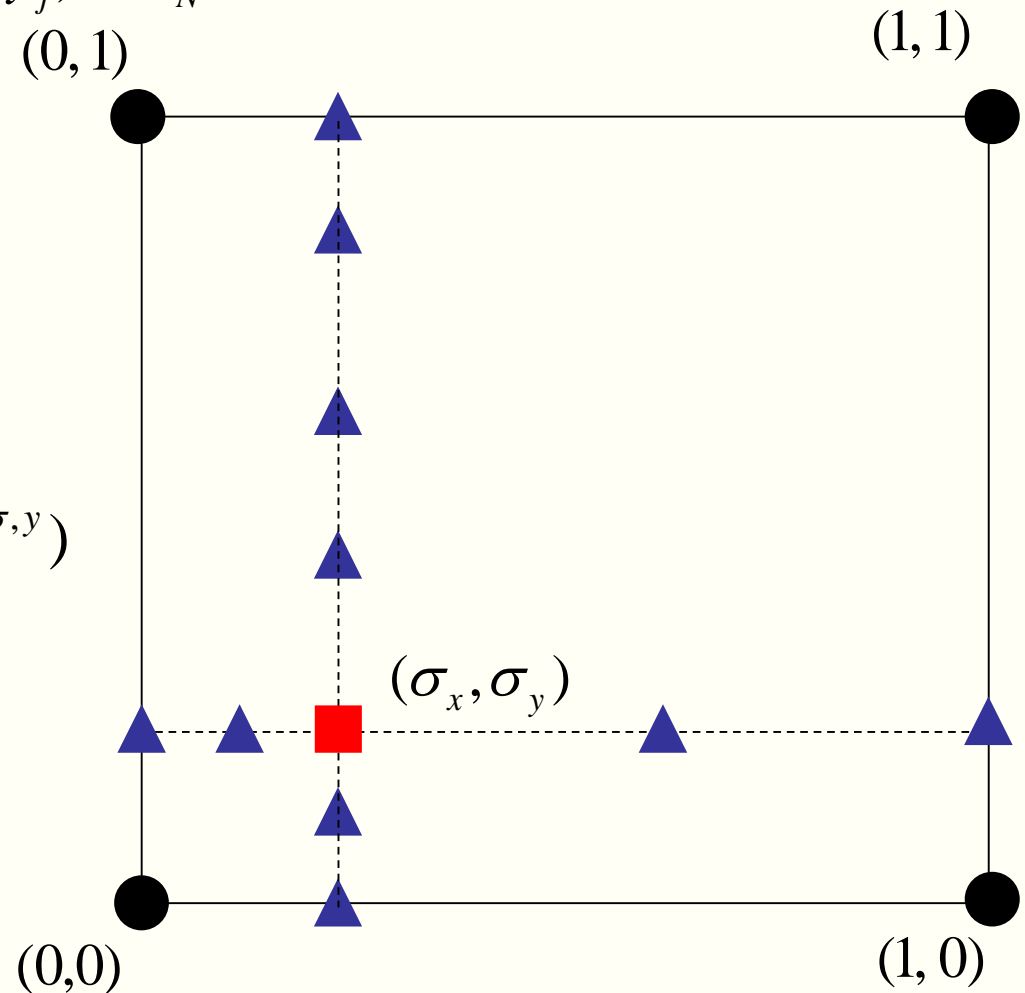
- Иллюстрация узлов $(x_i, y_j) \in \Omega_N$:

$$\Omega^{\sigma,\sigma} = \{(\sigma_x, \sigma_y)\}$$

$$\Omega^{x,\sigma} = \{(x_i, \sigma_y), i = \overline{0, N}\} \setminus \Omega^{\sigma,\sigma}$$

$$\Omega^{\sigma,y} = \{(\sigma_x, y_j), j = \overline{0, N}\} \setminus \Omega^{\sigma,\sigma}$$

$$\Omega^r = \Omega_N \setminus (\Omega^{\sigma,\sigma} \cup \Omega^{x,\sigma} \cup \Omega^{\sigma,y})$$



Многосеточный метод

- Иллюстрация узлов $(x_i, y_j) \in \Omega_N$:

$$\Omega^{\sigma, \sigma} = \{(\sigma_x, \sigma_y)\}$$

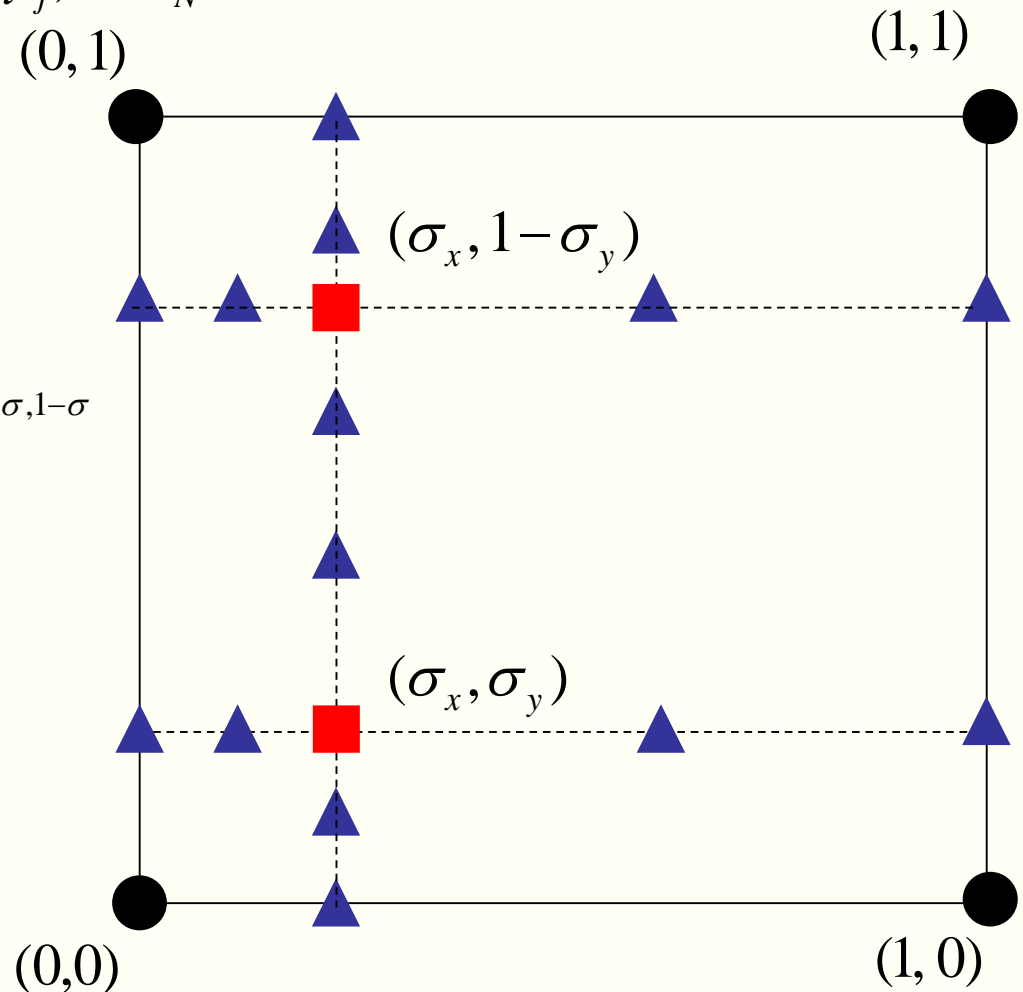
$$\Omega^{\sigma, 1-\sigma} = \{(\sigma_x, 1-\sigma_y)\}$$

$$\Omega^{x, \sigma} = \{(x_i, \sigma_y), i = \overline{0, N}\} \setminus \Omega^{\sigma, \sigma}$$

$$\Omega^{x, 1-\sigma} = \{(x_i, 1-\sigma_y), i = \overline{0, N}\} \setminus \Omega^{\sigma, 1-\sigma}$$

$$\Omega^{\sigma, y} = \{(\sigma_x, y_j), j = \overline{0, N}\} \setminus (\Omega^{\sigma, \sigma} \cup \Omega^{\sigma, 1-\sigma})$$

$$\Omega^r = \Omega_N \setminus (\Omega^{\sigma, \sigma} \cup \Omega^{\sigma, 1-\sigma} \cup \Omega^{x, \sigma} \cup \Omega^{x, 1-\sigma} \cup \Omega^{\sigma, y})$$



Многосеточный метод

- Оператор сужения $(x_i, y_j) \in \Omega_N$:

$$R_\sigma = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \text{ if } (x_i, y_j) \in \Omega^r$$

$$R_\sigma = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 - \sigma_y & 2(2 - \sigma_y) & 2 - \sigma_y \\ \sigma_y & 2\sigma_y & \sigma_y \end{pmatrix},$$

if $(x_i, y_j) \in \Omega^{x,\sigma}$

$$R_\sigma = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sigma_x(2 - \sigma_y) & (2 - \sigma_x)(2 - \sigma_y) & 0 \\ \sigma_x\sigma_y & (2 - \sigma_x)\sigma_y & 0 \end{pmatrix},$$

if $(x_i, y_j) \in \Omega^{\sigma,\sigma}$

$$R_\sigma = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} \sigma_x & 2 - \sigma_x & 0 \\ 2\sigma_x & 2(2 - \sigma_x) & 0 \\ \sigma_x & 2 - \sigma_x & 0 \end{pmatrix},$$

if $(x_i, y_j) \in \Omega^{\sigma,y}$

$$R_\sigma = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} \sigma_y & 2\sigma_y & \sigma_y \\ 2 - \sigma_y & 2(2 - \sigma_y) & 2 - \sigma_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

if $(x_i, y_j) \in \Omega^{x,1-\sigma}$

$$R_\sigma = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \sigma_x\sigma_y & (2 - \sigma_x)\sigma_y & 0 \\ \sigma_x(2 - \sigma_y) & (2 - \sigma_x)(2 - \sigma_y) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

if $(x_i, y_j) \in \Omega^{\sigma,1-\sigma}$

Метод Гаусса-Зейделя

- Пятиточечная схема (3) может быть представлена:

$$a_{i,j}u_{i-1,j}^N + b_{i,j}u_{i,j-1}^N + c_{i,j}u_{i+1,j}^N + d_{i,j}u_{i,j+1}^N - e_{i,j}u_{i,j}^N = f_{i,j}^N, \quad 0 < i, j < N. \quad (7)$$

- Тогда метод Гаусса-Зейделя имеет вид:

$$u^{(m)} = D^{-1}(f + Lu^{(m)} + Uu^{(m-1)}), \quad (8)$$

где $(Lv)_{i,j} = a_{i,j}v_{i-1,j} + b_{i,j}v_{i,j-1},$

$$(Uv)_{i,j} = c_{i,j}v_{i+1,j} + d_{i,j}v_{i,j+1}, \quad (Dv)_{i,j} = e_{i,j}v_{i,j}.$$

Каскадный многосеточный метод

- Решение схемы (3) может быть найдено на основе итераций.
- Чтобы уменьшить число итераций используем каскадный многосеточный метод с числом узлов грубой сетки 4.
- Step 1. Compute the solutions $u_1^{N/4}, u_2^{N/2}$ on the coarse meshes and $m = 3$.
- Step 2. Get an *initial guess* $u_m^{N,(0)} = E_m^N(u_{m-2}^{N/4}, u_{m-1}^{N/2})$.
- Step 3. Solve till the *stop criterion* is not fulfill.
- Step 4. If $m \neq \log_2(N) - 2$ then $m := m + 1$ and return Step 2 else stop and $u_m^{N,(M)} = R_m^N(u_{m-2}^{N/4}, u_{m-1}^{N/2}, u_m^N)$.
- Заметим, что для $m = 1$ $u_1^{N,(0)} \equiv 0$ в узлах $(X_l, Y_m) \in \Omega_N \setminus \Gamma_N$,
 $u_1^{N,(0)} \equiv g^N(X_l, Y_m)$ в узлах $(X_l, Y_m) \in \Gamma_N$.

Алгебраический многосеточный метод

Comparison between the GMG and the AMG

	GMG method	AMG method
Solved problem	Continuous problem	Linear system of algebraic equations
Used information	Geometrical structure of the problem	Only entries of the matrix
Smoothing operator	vary for each problem	Fixed
Program	Compose program for each problem	Only one program for different problems
Efficiency	Very good	Good

$$M_l^{l-1} = S_l^{v_2} (I_l - P_{l-1}^l L_{l-1}^{-1} R_l^{l-1} L_l) S_l^{v_1}.$$

$$A_H u^H = f^H$$

$$A_H = R A_h P, \quad f^H = R f_h,$$

$$Q = S_p (I - P A_H^{-1} R A_h) S_p.$$

Многосеточный метод

F.J. Gaspar et al. / Journal of Computational and Applied Mathematics 138 (2002) 21–35

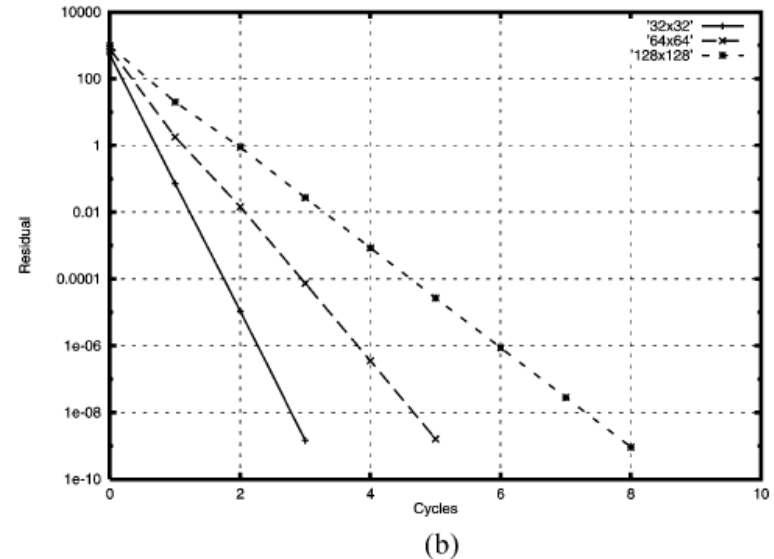
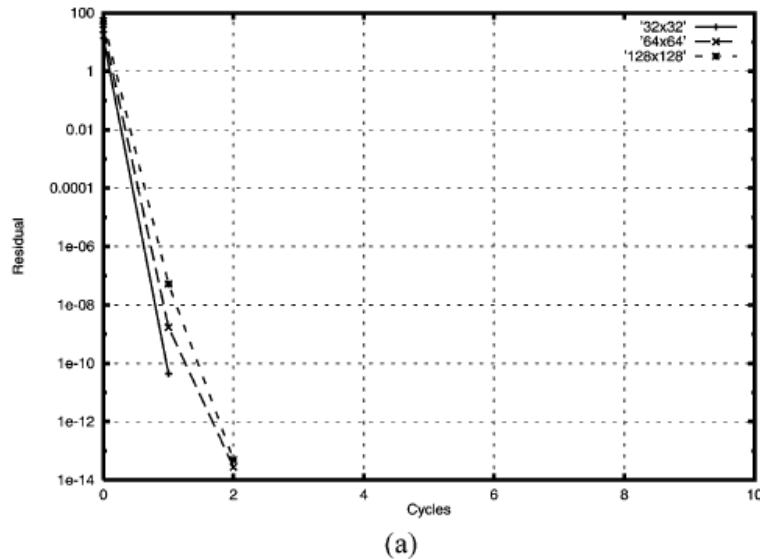


Fig. 1. Rate of convergence of standard multigrid method on uniform grids (a) and on stretched grids (b) with $\varepsilon = 10^{-4}$.

Многосеточный метод

F.J. Gaspar et al. / Journal of Computational and Applied Mathematics 138 (2002) 21–35

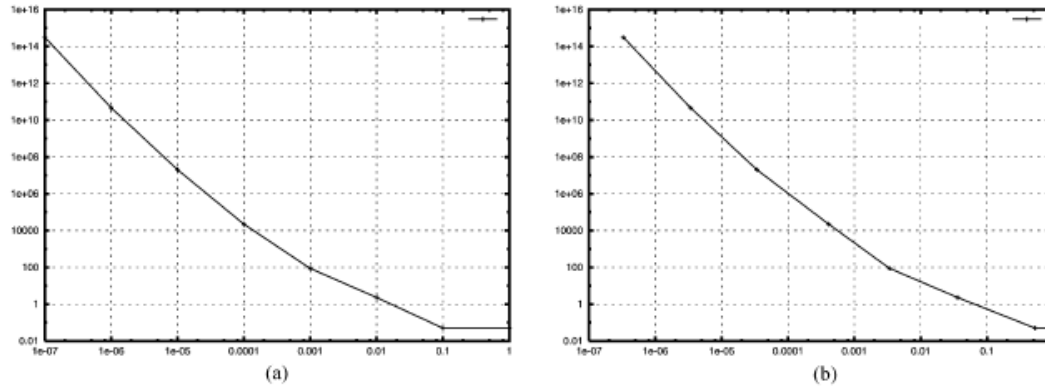


Fig. 2. Spectral radius of the multigrid iteration matrix as function of ϵ (a) and as function of h/H (b) on a 32^2 grid.

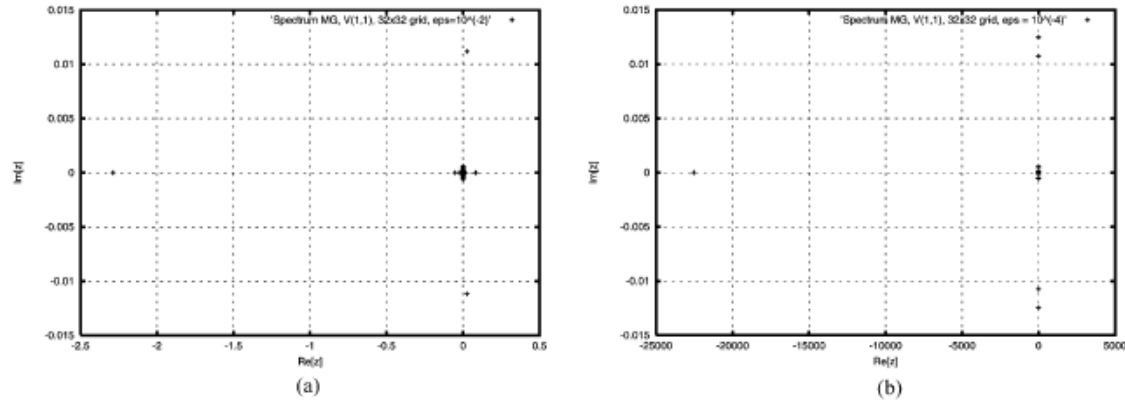


Fig. 3. Spectrum of the multigrid iteration matrix with a 32^2 grid and $\epsilon = 10^{-2}$ (a), $\epsilon = 10^{-4}$ (b).

Многосеточный метод

F.J. Gaspar et al. / Journal of Computational and Applied Mathematics 138 (2002) 21–35

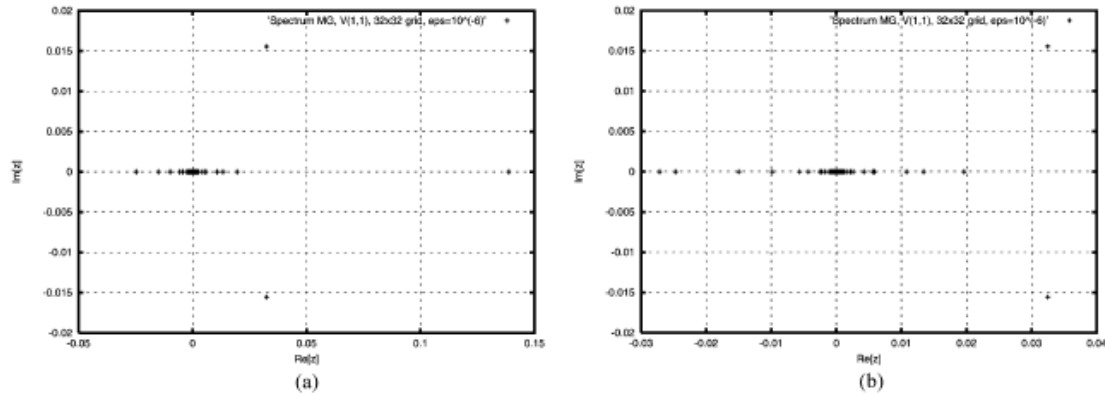


Fig. 6. Spectrum of the multigrid iteration matrix with a 32^2 grid and $\varepsilon = 10^{-6}$ in Case 2 (a), and in Case 3 (b).

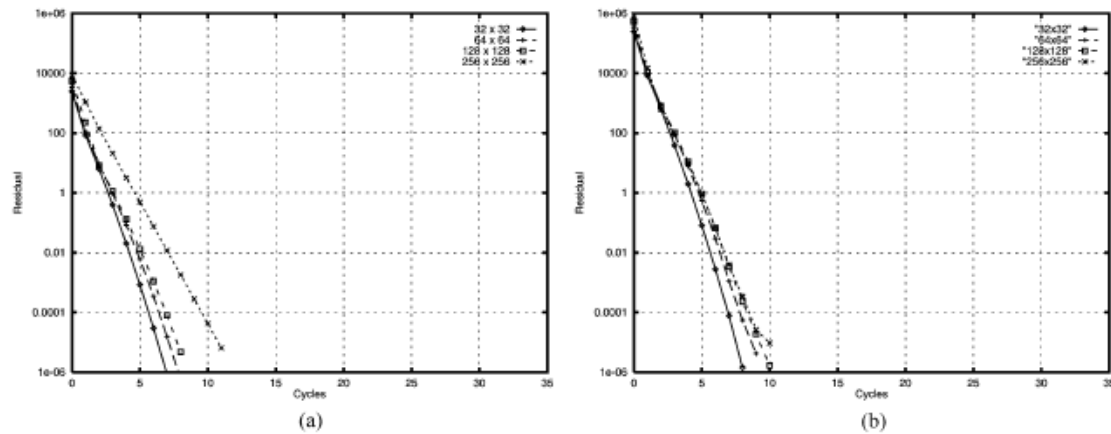
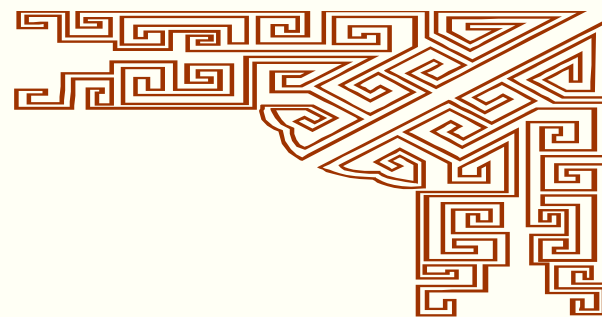
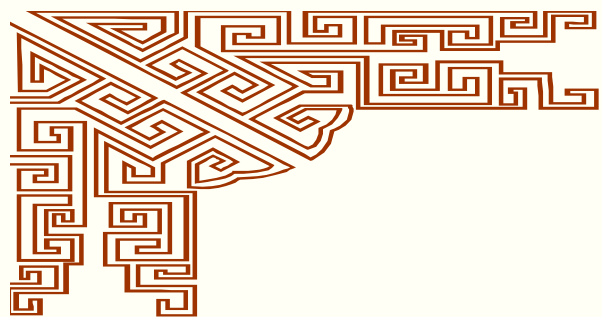


Fig. 7. Rate of convergence of new multigrid method with $\varepsilon = 10^{-4}$ (a) and $\varepsilon = 10^{-6}$ (b) for Example 4.1.



Благодарю за внимание!

