ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΚΑΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ

Κ.Χ. ΓΙΑΝΝΑΚΟΓΛΟΥ, Επ. Καθηγητής, Τομέας Ρευστών, Τμήμα Μηχανολόγων Ε.Μ.Π.

ΕΝΟΤΗΤΑ ΠΠ

ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΗΣ ΠΑΡΑΓΟΝΤΟΠΟΙΗΣΗΣ

ΠΠ.1 Γενικά

Ας θεωρήσουμε ένα αραιό (sparse) μητρώο A του οποίου τα στοιχεία θα συμβολίζονται με $a_{i,j}$. Το μητρώο είναι τετραγωνικό, διάστασης NxN. Θα ονομάζουμε **παραγοντοποίηση του A σε άνω και κάτω τριγωνικά μητρώα** ή απλά **παραγοντοποίηση** (factorization) τη διαδικασία εύρεσης ενός κάτω τριγωνικού μητρώου L και ενός άνω τριγωνικού μητρώου U, τέτοιων ώστε να ισχύει

$$A = LU \qquad \text{(ΠΠ.1)}$$

Η παραπάνω σχέση, προφανώς, δε σχετίζεται αποκλειστικά με την ιδιότητα του να είναι το μητρώο αραιό, αλλά εδώ εντοπίζουμε την ανάλυση μας σε τέτοιου τύπου μητρώα όπως αυτά που πρακτικά προκύπτουν από την ανάλυση φυσικών προβλημάτων (λ.χ. κατά την αριθμητική επίλυση προβλημάτων ροής) με τεχνικές πεπερασμένων όγκων ή πεπερασμένων διαφορών. Αν τα μητρώα L και U ικανοποιούν πλήρως την ισότητα (ΠΠ.1), η διαδικασία αυτή θα ονομάζεται **ακριβής παραγοντοποίηση** (exact factorization). Μια γνωστή τεχνική ακριβούς παραγοντοποίησης είναι η τεχνική Cholesky. Δεν θα αναφερθούμε στην τεχνική αυτή, αφού δε βρίσκει εφαρμογή στα προβλήματα που μας ενδιαφέρουν.

Εναλλακτικά, θα ονομάζουμε **προσεγγιστική ή μη-πλήρη παραγοντοποίηση** σε άνω και κάτω τριγωνικό μητρώο (approximate or incomplete LU factorization, συνήθως θα συμβολίζεται με **ILU**) κάθε ανάλυση του αραιού μητρώου A της μορφής

$$A = LU - R \qquad \text{(ΠΠ.2)}$$

όπου το “υπόλοιπο” R είναι ένα μητρώο που ικανοποιεί προκαθορισμένες συνθήκες. Στις συνθήκες αυτές θα αναφερθούμε παρακάτω. Πάντως, αναφέρουμε εκ των προτέρων ότι η πιο συνηθισμένη συνθήκη είναι η απαίτηση του να μηδενίζονται στοιχεία του R που βρίσκονται σε συγκεκριμένες θέσεις. Πρέπει να γίνει κατανοητό ότι η ανάγκη να στραφούμε προς προσεγγιστικές παραγοντοποιήσεις αντί των ακριβών υπαγορεύεται από το υψηλό υπολογιστικό κόστος των τελευταίων. Έτσι, σε γενικές γραμμές, προτιμώνται ακόμα και για γραμμικά προβλήματα οι τεχνικές ILU, έστω και αν με τον τρόπο αυτό έμμεσα εισάγουμε την ανάγκη επαναληπτικών διαδικασιών.

Η ανάλυση που ακολουθεί αναφέρεται αρχικά σε τεχνικές ILU για M-μητρώα. Μετά αναλύεται η πιο συνηθισμένη τεχνική ILU, η λεγόμενη ILU(0), η οποία χρησιμοποιείται ευρύτατα για την προδιάθεση άλλων μεθόδων επίλυσης. Τέλος, αναφέρονται χρήσιμες τεχνικές LU παραγοντοποίησης που έχουν χρησιμοποιηθεί σε προβλήματα υπολογιστικής ρευστομηχανικής. Για την κατανόηση όσων ακολουθούν είναι χρήσιμη η κατανόηση προηγούμενα της ενότητας ΕΜ.

ΠΠ.2 Μη-πλήρης Παραγοντοποίηση Μ-Μητρώων

Παρακάτω περιγράφεται ένας απλός και πολύ γενικός τρόπος να δημιουργήσουμε τα μητρώα L και U που αντιστοιχούν στη μη-πλήρη παραγοντοποίηση ενός Μ-Μητρώου, διατυπώνοντας χρήσιμα σχετικά θεωρήματα. Η ιδέα είναι να πραγματοποιηθεί αφενός η κατά Gauss απαλοιφή στοιχείων στο μητρώο Α και αφετέρου στο μητρώο που προκύπτει να παραληφθούν ορισμένα στοιχεία του που καταλαμβάνουν προκαθορισμένες θέσεις (εκτός φυσικά της διαγωνίου). Το θεώρημα του Ky Fan αναφέρεται στην παραπάνω ιδέα και διατυπώνεται στη συνέχεια. Συνιστάται η ανάγνωση και της απόδειξης του θεωρήματος ως μια επιπλέον εξοικείωση με το αντικείμενο.

Θεώρημα του Ky Fan: Ας είναι Α ένα Μ-μητρώο και A_1 το μητρώο το οποίο προκύπτει από το Α μετά το πρώτο βήμα της απαλοιφής κατά Gauss. Τότε, το μητρώο A_1 είναι επίσης ένα Μ-μητρώο.

Απόδειξη: Αφού το μητρώο Α είναι Μ-μητρώο θα ισχύουν οι εξής τρεις ιδιότητες :
- Θα είναι μη-θετικό κάθε μη-διαγώνιο στοιχείο του ($a_{i,j} \leq 0$, $i \neq j$).
- Το Α είναι ομαλό μητρώο και μπορεί να αντιστραφεί.
- Ο αντίστροφος του Α είναι μη-αρνητικό μητρώο ($A^{-1} \geq 0$).

Τα παραπάνω προκύπτουν από την πρόταση ΠΡ.12/ΕΜ.

Το πρώτο βήμα της απαλοιφής κατά Gauss περιλαμβάνει την αντικατάσταση κάθε γραμμής του μητρώου Α, πλην της πρώτης, με το αποτέλεσμα της πρόσθεσης αντιστοίχων στοιχείων της πρώτης γραμμής πολλαπλασιασμένης με κατάλληλο συντελεστή και αυτών της τρέχουσας γραμμής. Για το στοιχείο της j στήλης στη γραμμή i (i= 2,…,N) ο συντελεστής αυτός είναι ο ($-a_{i,j}/a_{1,1}$). Το αποτέλεσμα αυτού του βήματος, μετά που θα σαρωθούν όλες οι γραμμές είναι η απαλοιφή των στοιχείων της πρώτης στήλης σε όλες τις γραμμές του μητρώου, πλην της πρώτης. Με την πράξη αυτή δημιουργούνται τα στοιχεία $a^1_{i,j}$ του μητρώου A^1 που θα είναι τα

$$a_{i,j}{}^{1} = a_{i,j} - \frac{a_{i,1}a_{1,j}}{a_{1,1}} \qquad \text{(ΠΠ.3)}$$

Το μητρώο A^1 πρέπει να αποδειχθεί ότι ικανοποιεί τις προαναφερθείσες τρεις ιδιότητες έτσι ώστε να είναι και αυτό ένα Μ-μητρώο. Η πρώτη ιδιότητα, το ότι δηλαδή τα μη-διαγώνια $a^1_{i,j}$ ($i \neq j$) στοιχεία είναι μη-θετικά προκύπτει άμεσα από την έκφραση (ΠΠ.3). Σ' αυτή, το γινόμενο $a_{i,1}a_{1,j}$ είναι μη-αρνητικό ως γινόμενο δύο μη-θετικών αριθμών. Ο παρονομαστής του κλάσματος $a_{1,1}$ είναι θετικός, αφού αυτό αποτελεί μια επιπλέον ιδιότητα των Μ-μητρώων (βλέπει πρόταση ΠΡ.10/ΕΜ). Άρα ο αφαιρετέος είναι θετική ποσότητα που αφαιρούμενη από το μη-θετικό μειωτέο δίνει μη-θετικό κάθε μη-διαγώνιο στοιχείο $a^1_{i,j}$.

Για να αποδειχθεί, στη συνέχεια, ότι το μητρώο A_1 είναι ομαλό θα χρησιμοποιήσουμε το ότι η απαλοιφή κατά Gauss που περιγράψαμε αντιστοιχεί στην πράξη

$$A = L_1 A_1 \qquad \text{(ΠΠ.4)}$$

όπου

$$L_1 = \left(\frac{a_{*,1}}{a_{1,1}}, e_2, e_3, \ldots e_N\right) \qquad \text{(ΠΠ.5)}$$

όπου e_i είναι διάνυσμα στήλης με όλα τα στοιχεία του μηδενικά, με εξαίρεση το i- ιοστό στοιχείο του που έχει την τιμή 1. Ο αστερίσκος συμβολίζει φυσικά τα στοιχεία της πρώτης στήλης του Α.

Για την κατανόηση των παραπάνω χρησιμοποιούμε την εποπτεία που παρέχει το απλό 2x2 γραμμικό σύστημα. Σ' αυτό, το πρώτο βήμα απαλοιφής κατά Gauss δίνει ότι

$$A = \begin{vmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{vmatrix} \rightarrow A^1 = \begin{vmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ 0 & a_{2,2} - \dfrac{a_{1,2}a_{2,1}}{a_{1,1}} \end{vmatrix}$$

ενώ η σχέση (ΠΠ.4) γράφεται, στην περίπτωση αυτή, ως

$$\begin{vmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{1,1}/a_{1,1} & 0 \\ a_{2,1}/a_{1,1} & 1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ 0 & a_{2,2} - \dfrac{a_{1,2}a_{2,1}}{a_{1,1}} \end{vmatrix}$$

Το μητρώο L_1 είναι ομαλό και η σχέση (ΠΠ.4) δείχνει ότι και το μητρώο A_1 είναι επίσης ομαλό.

Τέλος για να αποδείξουμε ότι το μητρώο A_1^{-1} είναι μη-αρνητικό θα εξετάσουμε τα γινόμενα $A_1^{-1}e_j$, για j=1,…,N. Η δομή του μητρώου A_1 επιτρέπει τον άμεσο υπολογισμό του παραπάνω γινομένου για j=1. Θα είναι

$$A_1^{-1}e_1 = \frac{1}{a_{1,1}}e_1$$

Για κάθε άλλη τιμή του j, j=2,…,N, χρησιμοποιούμε τις σχέσεις (ΠΠ.4) και (ΠΠ.5) και έχουμε ότι

$$A_1^{-1}e_j = A^{-1}L_1e_j = A^{-1}e_j \geq 0$$

κατά συνέπεια, κάθε στήλη του A_1^{-1} είναι μη-αρνητική και γενικεύοντας, το μητρώο A_1^{-1} είναι κι αυτό μη αρνητικό. Κατά μείζονα λόγο, το (N-1)x(N-1) μητρώο που προκύπτει από το A_1 απαλείφοντας την πρώτη στήλη και την πρώτη γραμμή του είναι επίσης Μ-μητρώο.

Στη συνέχεια, στο μητρώο A_1 που με τον τρόπο αυτό σχηματίσθηκε απαλείφουμε συγκεκριμένα στοιχεία του που καταλαμβάνουν μη-διαγώνιες θέσεις, θέτοντας τα ίσα με μηδέν. Με τον τρόπο αυτό θα προκύψει ένα νέο μητρώο A_1 τέτοιο ώστε

$$\widetilde{A}_1 = A_1 + R \qquad \text{(ΠΠ.6)}$$

Το μητρώο R περιλαμβάνει, με αντίθετο πρόσημο, τα μη-διαγώνια στοιχεία του A_1 που μηδενίστηκαν στο μητρώο $\widetilde{A}_1$. Θα ισχύουν , προφανώς, για τα στοιχεία του R οι σχέσεις

$$r_{i,i} = 0, \qquad \text{και} \qquad r_{i,j} \geq 0 \qquad (\text{για } i \neq j) \qquad \text{(ΠΠ.7)}$$

Επομένως θα ισχύει ότι

$$A_1 \leq \widetilde{A}_1$$

δηλαδή τα μη-διαγώνια στοιχεία του $\widetilde{A}$ είναι μή-θετικοί αριθμοί. Επειδή το A_1 είναι ένα Μ-μητρώο, χρησιμοποιώντας το θεώρημα ΠΡ.13/ΕΜ, αποδεικνύεται ότι και το $\widetilde{A}_1$ είναι επίσης Μ-μητρώο.

Μπορούμε πλέον να επαναλάβουμε τη διαδικασία αυτή στο (N-1)x(N-1) μητρώο και να προκύψει ένα (N-2)x(N-2) μητρώο κ.ο.κ, μέχρι να επιτευχθεί η μή-πλήρης παραγοντοποίηση του μητρώου A. Η παραπάνω ανάλυση δείχνει ότι σε κάθε βήμα παίρνουμε ένα Μ-μητρώο και ότι η διαδικασία αυτή είναι πραγματοποιήσιμη. Σε κάθε βήμα θα μηδενίζονται εκείνα τα στοιχεία του προκύπτοντος μητρώου τα οποία ανήκουν σε ένα σύνολο θέσεων που αποτελεί υποσύνολο των μή-διαγωνίων στοιχείων του N x N μητρώου.

Το σύνολο των θέσεων μηδενισμού θα παριστάνεται συμβολικά με ένα μητρώο-οδηγό P, για τον οποίο θα ισχύει ότι

$$P \subset \{(i,j) \mid i \neq j, 1 \leq i, j \leq N\} \qquad \text{(ΠΠ.8)}$$

Η μη-πλήρης παραγοντοποίηση που έτσι προκύπτει θα ονομάζεται **ILU$_P$**. Ο μηδενισμός των στοιχείων των μητρώων επιβάλλεται στατικά. Έτσι, σε συμβολική γλώσσα προγραμματισμού, η διαδικασία ILU$_P$ θα περιγράφεται ως εξής

Αλγόριθμος 1:

```
do k=1,N-1
A(k+1:N,k:N)=A(k+1:N,k:N)-A(k+1:N,k)*A(k,k:N)/a(k,k)
For all (i,j) with i>k, j≥k and (i,j)∈P, set A(i,j)=0
enddo
```

Η παρακάτω πρόταση σχετίζεται με τον Αλγόριθμο 1:

ΠΡ.1 Αν A είναι ένα M-μητρώο και P ένα δεδομένο σύνολο θέσεων σύμφωνο με την (ΠΠ.8) όπου ζητάμε μηδενικά στοιχεία, τότε ο Αλγόριθμος 1 είναι πραγματοποιήσιμος και οδηγεί σε μια μη-πλήρη παραγοντοποίηση

$$A = LU - R$$

η οποία αποτελεί μια κανονική διάσπαση του A.

Γενικά, πετυχαίνοντας την παραγοντοποίηση του μητρώου A αποκτούμε τα τριγωνικά μητρώα L και U. Ως αποτέλεσμα, η επίλυση του συστήματος

$$Ax = b$$

προϋποθέτει την πραγματοποίηση δύο βημάτων, δηλαδή

$$\begin{aligned} L\xi &= b \\ Ux &= \xi \end{aligned} \qquad \text{(ΠΠ.9)}$$

Το πρώτο βήμα της (ΠΠ.9) απαιτεί μια πρόσω αντικατάσταση, ενώ το δεύτερο βήμα μια πίσω αντικατάσταση.

ΠΠ.3 Μη-πλήρης LU παραγοντοποίηση χωρίς πλήρωση (ILU (0))

Η μη-πλήρης LU παραγοντοποίηση ενός μητρώου A θα συμβολίζεται με **ILU(0)** και θα προκύπτει επιλέγοντας τον “οδηγό “ P να αντιστοιχεί στις θέσεις μηδενικών στοιχείων του αρχικού μητρώου A. Στη συνέχεια θα συμβολίζουμε με $b_{i,*}$ την i-οστή γραμμή του μητρώου-οδηγού B και με NZ(B) το σύνολο των ζευγών (i, j), $1 \leq i, j \leq N$ για τα οποία υπάρχουν μή-μηδενικά $b_{i,j}$ στοιχεία στον οδηγό (NZ=non-zero)

Η μη-πλήρης παραγοντοποίηση ILU(0) κατανοείται εύκολα αν εξεταστεί το απλό πρόβλημα ενός πενταδιαγώνιου μητρώου A. Αυτή είναι μια κλασσική μορφή μητρώου συντελεστών που προκύπτει από μια εξίσωση τύπου Laplace, όταν αναλύεται με πεπερασμένες διαφορές σε ένα διδιάστατο ορθογώνιο πλέγμα. Είναι η περίπτωση που το σχήμα πεπερασμένων διαφορών σε ένα τυχαίο εσωτερικό κόμβο εμπλέκει τον κεντρικό και τους 4 άμεσα γειτονικούς κόμβους (πάνω, κάτω, αριστερά και δεξιά του κεντρικού). Ανάλογα με τον τρόπο αρίθμησης στο δομημένο πλέγμα καθορίζεται και η απόσταση της πρώτης και της πέμπτης διαγωνίου από την κύρια διαγώνιο. Η δεύτερη και τέταρτη διαγώνιες είναι πάντοτε άμεσα γειτονικές της κυρίας διαγωνίου. Το μητρώο A φαίνεται στο Σχήμα ΠΠ.1 (κάτω-αριστερά). Έστω τώρα δύο τριγωνικά μητρώα L και U, όπως αυτά που απεικονίζονται στο Σχήμα ΠΠ.1 (πάνω). Το κάτω τριγωνικό μητρώο L έχει την ίδια δομή με το κάτω τριγωνικό τμήμα του Α, ενώ το άνω τριγωνικό μητρώο U έχει την ίδια δομή με το άνω τριγωνικό τμήμα του Α. Πραγματοποιώντας τον πολλαπλασιασμό LU, προκύπτει ένα μητρώο μορφής όπως αυτή που φαίνεται στο Σχήμα ΠΠ.1 (κάτω δεξιά). Το γινόμενο LU διαθέτει γενικά δύο ακόμα μη-μηδενικές διαγωνίους, τις γειτονικές της πρώτης και της πέμπτης διαγωνίου του Α, προς την πλευρά που βρίσκεται η κύρια διαγώνιος. Τα στοιχεία που εμφανίζονται σ' αυτές τις επιπλέον δύο διαγωνίους διακρίνουν καταρχήν τα μητρώα Α και LU και θα ονομάζονται **νέα στοιχεία πλήρωσης** (fill-in elements). Αν αποφασίσουμε να αμελήσουμε τα νέα στοιχεία πλήρωσης, τότε υπάρχει τρόπος να αναζητήσουμε εκφράσεις για τα στοιχεία των L και U ώστε το γινόμενο LU να ταυτίζεται με το μητρώο Α.

Η διαδικασία αυτή εκφράζει ακριβώς τη λεγόμενη παραγοντοποίηση ILU(0). Σε εναλλακτική διατύπωση, η ILU (0) υπολογίζει ζεύγη μητρώων L και U με την προαναφερθείσα δομή έτσι ώστε τα στοιχεία του μητρώου A-LU να είναι μηδενικά στις θέσεις NZ(A). Η τελευταία απαίτηση δεν καθορίζει μονοσήμαντα μια διάσπαση του Α σε L και U, αφού θεωρητικά μπορούν να βρεθούν "άπειρα" ζεύγη L και U που να έχουν την παραπάνω ιδιότητα. Εν τούτοις, η τυπική παραγοντοποίηση ILU(0) συνδέεται με μιά συγκεκριμένη εφαρμογή της απαλοιφής κατά Gauss. Έτσι, για γενικά αραιά μητρώα, ο τυπικός τρόπος να υλοποιηθεί η παραγοντοποίηση ILU (0) είναι να πραγματοποιηθεί η απαλοιφή Gauss αμελώντας όλα τα νέα στοιχεία πλήρωσης, όπου αυτά εμφανίζονται. Ο Αλγόριθμος 1 να τροποποιηθεί ώστε να προσαρμοστεί σ' αυτή τη διαδικασία.

Μια άλλη γνωστή παραλλαγή για τη δημιουργία της μη-πλήρους παραγοντοποίησης LU είναι η λεγόμενη **IJK έκδοση της απαλοιφής κατά Gauss**. Για μη-αραιούς πίνακες, η τεχνική αυτή περιγράφεται από τον παρακάτω αλγόριθμο.

Αλγόριθμος 2:

```
do i=2,N
do k=1,i-1
aux=A(i,k)/a(k,k)
do j=k+1,N
A(i,j)=A(i,j)-aux*A(k,j)
enddo
A(i,k)=aux
enddo
enddo
```

Στον αλγόριθμο 2, η i-οστή γραμμή του μητρώου Α αντικαθίσταται από τις i-οστές γραμμές των μητρώων L και U που προκύπτουν από την παραγοντοποίηση. Κατά τον υπολογισμό των i-οστών γραμμών του L και U χρησιμοποιούνται αλλά δεν τροποποιούνται τα ήδη υπολογισθέντα στοιχεία των L και U στις γραμμές 1,2,……,i-1.Τέλος, όπως φαίνεται από τον παρακάτω αλγόριθμο, κατά τον υπολογισμό της i-οστής γραμμής των L και U δε χρησιμοποιούνται τα στοιχεία του Α που βρίσκονται στις γραμμές i+1,…,N.

Παρατήρηση: Σε ορισμένες περιπτώσεις είναι δυνατό να συναντήσουμε την προσεγγιστική παραγοντοποίηση στη μορφή

$$A \approx (D-E)D^{-1}(D-F) \qquad \text{(ΠΠ.10)}$$

όπου -E και -F είναι τα αυστηρά κάτω και αυστηρά άνω διαγώνια τμήματα του Α, ενώ D είναι κάποιο διαγώνιο μητρώο, γενικά διαφορετικό από την κύρια διαγώνιο του Α. Σε μια τέτοια περίπτωση, το μόνο που πρέπει να υπολογιστεί είναι τα στοιχεία του διαγωνίου μητρώου D και το σχετικό πλεονέκτημα είναι ότι απαιτείται επιπλέον μόνο η αποθήκευση μιας διαγωνίου.

ΠΠ.4 Βαθμός Πλήρωσης και Προσεγγιστική Παραγοντοποίηση ILU (p)

Η ακρίβεια της προσεγγιστικής παραγοντοποίησης ILU (0) μπορεί να είναι ανεπαρκής ώστε να προσδώσει στο αριθμητικό σχήμα ικανοποιητικό βαθμό σύγκλισης. Περισσότερο ακριβείς μη-πλήρεις παραγοντοποιήσεις έχουν αναπτυχθεί και δοκιμαστεί στη βιβλιογραφία. Η διαφορά τους από μια μέθοδο χωρίς πλήρωση όπως, είναι η ILU(0), είναι ότι επιτρέπουν κάποιο ποσοστό πλήρωσης. Έτσι, για παράδειγμα, η ILU(0) διατηρεί μόνο τα **νέα στοιχεία πλήρωσης πρώτης τάξης** (first-order fill-ins), όπως θα εξηγηθεί παρακάτω

Για να γίνει κατανοητή η τεχνική **ILU(1)** ξεκινάμε από τη μορφή του γινομένου LU, όπως προέκυψαν από την ILU (0) , βλ. Σχήμα ΠΠ.1 (κάτω δεξιά) Ας δεχτούμε τώρα ότι το αρχικό μητρώο A έχει σχηματισμό μη-μηδενικών στοιχείων $NZ_1(A)$ ίδιο με αυτόν που παρουσιάζει το Σχήμα ΠΠ.1 (κάτω δεξιά). Με άλλα λόγια, στις θέσεις που δημιουργήθηκαν τα νέα στοιχεία πλήρωσης από το γινόμενο LU, θεωρείται ότι το μητρώο A έχει μη-μηδενικά στοιχεία (ανήκουν στο $NZ_1(A)$), μόνο που οι τρέχουσες τιμές είναι μηδέν. Με βάση το θεωρητικά επηυξημένο μητρώο A πραγματοποιούμε μία νέα παραγοντοποίηση ILU(1) που δημιουργεί τους τριγωνικούς πίνακες L_1 και U_1, όπως απεικονίζονται στο Σχήμα ΠΠ.2. Το γινόμενό τους L_1U_1 εισάγει δύο πρόσθετες διαγωνίους και έχει τη μορφή του μητρώου που απεικονίζεται στο Σχήμα ΠΠ.2 (κάτω αριστερά).

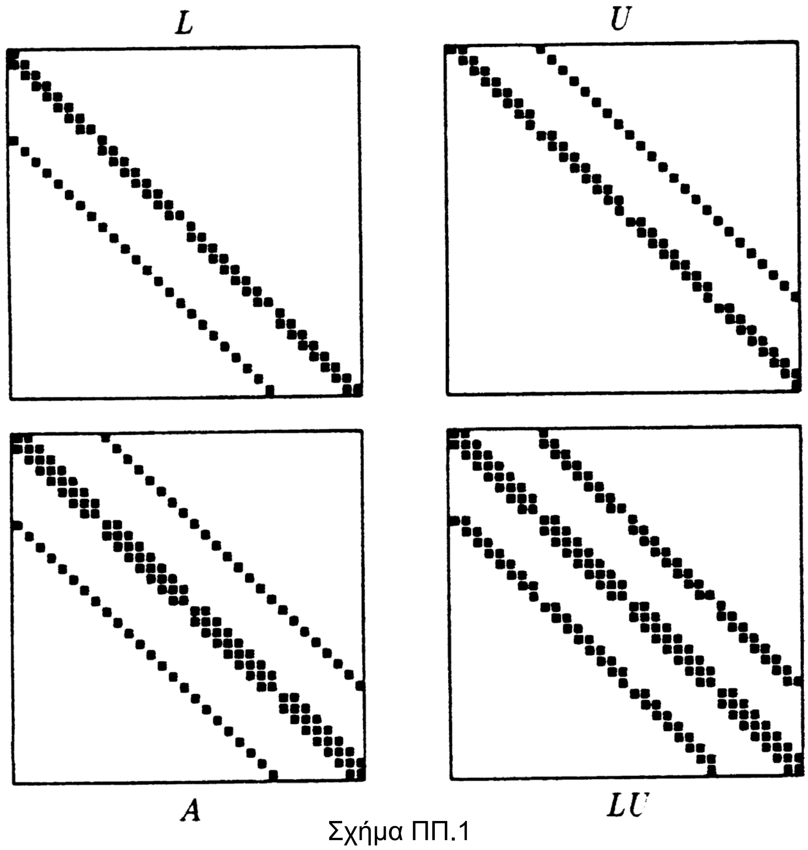
Ενα πρόβλημα με τον παραπάνω τρόπο δημιουργίας της ILU(1) είναι ότι δεν επεκτείνεται εύκολα για γενικά αραιά μητρώα. Μπορούμε όμως να γενικεύσουμε τη μέθοδο που παρουσιάσαμε εισάγοντας την έννοια του **βαθμού πλήρωσης** (level of fill-in). Η ιδέα είναι απλή. Κάθε μη-μηδενικό στοιχείο του A αποκτά αρχικά μηδενικό βαθμό πλήρωσης. Όταν ένα στοιχείο λ.χ. το $f_{i,j}$, ανανεώνεται κατά τη διαδικασία της απαλοιφής κατά Gauss σύμφωνα με τη σχέση

$$f_{i,j} = f_{i,j} - l_{i,k} u_{k,j} \qquad \text{(ΠΠ.11)}$$

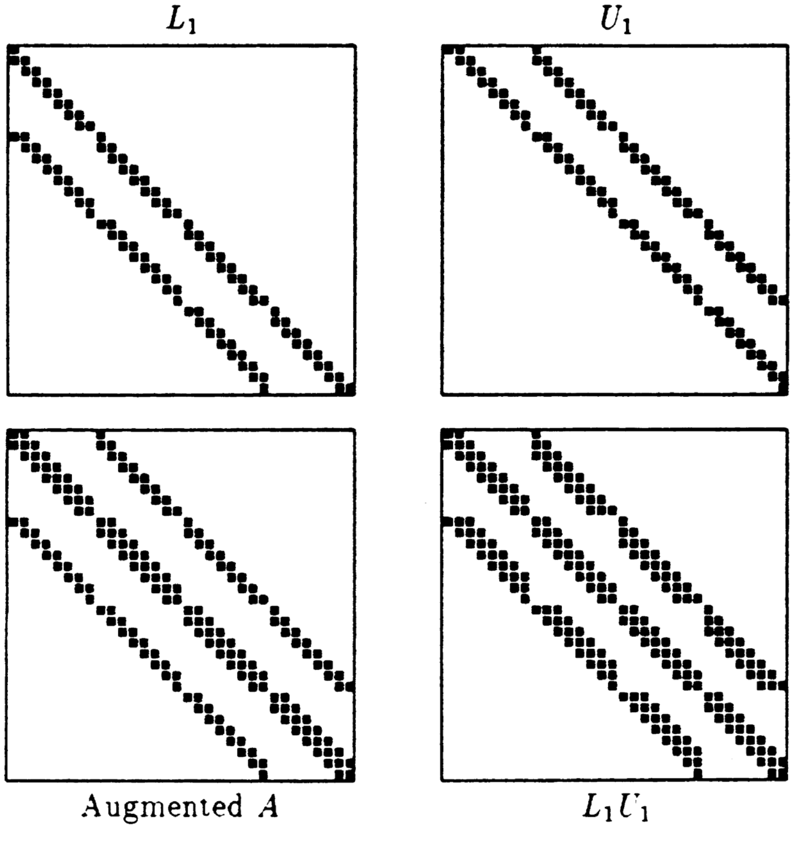
όπου $l_{i,j}$ και $u_{i,j}$ είναι τα στοιχεία των L και U, τότε οι βαθμοί πλήρωσης του στοιχείου ανανεώνεται παίρνοντας την τιμή

$$level(f_{i,j}) = \min\{level(f_{i,j}), level(l_{i,k}) + level(u_{k,j}) + 1\} \qquad \text{(ΠΠ.12)}$$

Η σχέση (ΠΠ.12) δημιουργεί μια φυσική διαδικασία για να απορρίπτονται στοιχεία. Έτσι, στην παραγοντοποίηση **ILU(p)** κρατάμε όλα τα νέα στοιχεία πλήρωσης για τα οποία ο βαθμός πλήρωσης δεν υπερβαίνει την τιμή p. Όταν p=0, δημιουργούμε την ILU(0) με τρόπο συμβατό με τον προηγούμενο ορισμό της.



Σχήμα ΠΠ.1



Σχήμα ΠΠ.2

ΠΠ.5 Προσεγγιστικές Παραγοντοποιήσεις για Σχήματα Πεπερασμένων Διαφορών

Η χρήση των Πεπερασμένων Διαφορών (Π.Ο.) στην Υπολογιστική Ρευστομηχανική, μέσω δομημένων πλεγμάτων, δημιουργεί μητρώα συντελεστών A του εκάστοτε γραμμικοποιημένου προβλήματος που αποτελούνται από συγκεκριμένες διαγώνιους με μη-μηδενικά στοιχεία. Ο αριθμός των διαγωνίων που θα προκύψουν εξαρτάται από το σχήμα διακριτοποίησης που θα υιοθετηθεί, την ακρίβειά του και τη διάσταση του προβλήματος (διδιάστατο ή τριδιάστατο).

Διδιάστατα προβλήματα που αντιμετωπίζονται με κεντρικές διαφορές σε «τυπικές» εξισώσεις καταλήγουν πολλές φορές σε πενταδιαγώνια συστήματα. Η πενταδιαγώνια μορφή μητρώου είναι η πιο απλή μορφή που θα κληθούμε να αντιμετωπίσουμε και για το λόγο αυτό θα αναλυθεί με προσοχή. Οι πέντε διαγώνιοι αντιστοιχούν στον κεντρικό κόμβο (i,j) του πλέγματος και στους τέσσερις άμεσα γειτονικούς του (i+1,j), (i-1,j), (i,j+1) και (i,j-1). Θα συμβολίζουμε τον εκάστοτε κεντρικό κόμβο με το γράμμα P, ενώ για τους προαναφερθέντες τέσσερις γειτονικούς θα χρησιμοποιήσουμε τα σύμβολα F (front), B (back), E (east) και W (west). Οι συμβολισμοί αυτή αντιστοιχούν σε ένα συγκεκριμένο σύστημα προσανατολισμού και μπορούν να αναπροσαρμοστούν κατά περίπτωση.

Ας δεχτούμε ότι το διδιάστατο πλέγμα που χρησιμοποιούμε έχει αναλυθεί με ένα δομημένο πλέγμα διάστασης ($I_{max} \times J_{max}$). Για λόγους ευκολίας, θα θεωρήσουμε ότι οι κόμβοι αριθμούνται με ενιαίο αύξοντα αριθμό, έτσι ώστε ο αύξων αριθμός του κόμβου (i,j) να είναι ο

$$l = (i-1)\cdot J_{\max} + j \qquad \text{(ΠΠ.13)}$$

Για πενταδιαγώνιο μητρώο με τον παραπάνω τρόπο αρίθμησης των κόμβων του, οι τέσσερις άμεσα γειτονικοί κόμβοι του P (δηλαδή ενός κόμβου με αύξοντα αριθμό l) θα είναι οι

$$l + J_{\max} - 1, l - J_{\max} + 1, l + 1, l - 1$$

σε πλήρη αντιστοίχηση με τους κόμβους που πριν ονομάσθηκαν F, B , E και W.

Στη συνέχεια, με βάση τους προηγούμενους ορισμούς θα δοθούν τρόποι προσεγγιστικής παραγοντοποίησης που έχουν βρει ευρύτατη εφαρμογή σε τέτοιου είδους προβλήματα. Μια τέτοια τεχνική είναι ο Ισχυρά Πεπλεγμένος Αλγόριθμος (Strongly Implicit Procedure, SIP), που προτάθηκε το 1968 από το Stone.

Βασική ιδέα της Μεθόδου SIP είναι να βρεθούν μητρώα L και U τέτοια ώστε να έχουν την ίδια δομή με το άνω και το κάτω τμήμα του μητρώου A. Το Σχήμα ΠΠ.3 παρουσιάζει την παραγοντοποίηση αυτή, ορίζοντας συγχρόνως με μικρούς λατινικούς χαρακτήρες τις διαγώνιους των L και U με μη-μηδενικά στοιχεία. Για την l γραμμή του L, από αριστερά προς τα δεξιά, οι διαγώνιοι του L θα περιέχουν τα στοιχεία $b(l)$, $d(l)$ και $e(l)$. Η ίδια γραμμή και με την ίδια σάρωση για το μητρώο U εμφανίζει μοναδιαίο στοιχείο στη διαγώνιο (αυτό εξασφαλίζει τη μοναδικότητα της διάσπασης) και τα στοιχεία $f(l)$ και $h(l)$.Ο πολλαπλασιασμός LU θα δημιουργήσει δύο επιπλέον διαγώνιους, τις EB και WF, που θα αντιστοιχούν στις θέσεις (i-1,j+1) και (i+1,j-1). Το αποτέλεσμα του γινομένου LU δίνει ένα μητρώο P, ευρύτερο του A κατά τις δύο νέες διαγώνιους που ήδη αναφέραμε. Εισάγουμε ένα νέο μητρώο R το οποίο συνοψίζει τη διαφορά μεταξύ του P και του A. Θα είναι

$$P = A + R = LU \qquad \text{(ΠΠ.14)}$$

το οποίο καταρχήν θα έχει μη-μηδενικά στοιχεία στις δύο νέες διαγώνιους. Με εκτέλεση του γινομένου LU και κατάλληλη επεξεργασία προκύπτουν οι σχέσεις που επιτρέπουν τον καθορισμό των μη-μηδενικών στοιχείων του P. Αυτές είναι

$$
\begin{aligned}
&P_B = b(l)\\
&P_{EB} = b(l)f(B)\\
&P_W = d(l)\\
&P_P = e(l) + d(l)f(W) + b(l)h(B)\\
&P_E = e(l)f(l)\\
&P_{WF} = d(l)h(W)\\
&P_F = e(l)h(l)
\end{aligned}
\qquad \text{(ΠΠ.15)}
$$

Σημειώνεται ότι τα στοιχεία των μητρώων P και A θα συμβολίζονται χωρίς παρένθεση που να προσδιορίζει τον κόμβο στον οποίο αναφέρονται, γνωρίζοντας ότι αναφερόμαστε πάντοτε στον κόμβο l. Έτσι λ.χ. το στοιχείο P_W θα είναι το "west" στοιχείο του κόμβου l (δηλαδή της γραμμής l του μητρώου). Προσδιοριστικές παρενθέσεις θα χρησιμοποιούνται μόνο για τα στοιχεία a, b, c, d, e, f, g, h, k των L ή U. Σημειώνεται ότι δίνονται τα στοιχεία για ανάλυση σε εννέα κόμβους (ακολουθεί αμέσως μετά), αλλά εδώ βέβαια θα χρησιμοποιηθεί μόνο μέρος από τα σύμβολα αυτά Για διευκόλυνση δίνεται σε μορφή πίνακα η σχετική θέση των συμβόλων αυτών που, για τον κόμβο l, είναι

$$
\begin{matrix}
c & f & k\\
b & e & h\\
a & d & g
\end{matrix}
$$

όπου ο δείκτης i μετρά προς τα δεξιά και ο δείκτης j προς τα πάνω. Με δεδομένο το σύστημα (ΠΠ.15) που γράφεται για κάθε κόμβο l, επιθυμούμε το μητρώο P να προσεγγίζει όσο το δυνατό περισσότερο το μητρώο A. Μια λύση που συζητήθηκε προηγούμενα στη μορφή της ILU(0) είναι να αμεληθούν τα επιπλέον στοιχεία που εισάγει το γινόμενο LU. Αυτό πρακτικά θα σήμαινε ότι οι δύο νέες διαγώνιες θα αποτελέσουν τις μοναδικές μη-μηδενικές διαγώνιες του συμπληρωματικού μητρώου R. Συγχρόνως βέβαια θα επιβληθούν οι ισότητες στα υπόλοιπα στοιχεία.

Το σχήμα SIP που πρότεινε ο Stone βασίζεται στην ιδέα του να επιτραπεί το μητρώο R να έχει μη-μηδενικά στοιχεία και σε άλλες (πλην των δύο) διαγώνιους, προς όφελος του ρυθμού σύγκλισης του αλγορίθμου. Για κάθε γραμμή l, το σύστημα

$$Px = (A + R)x$$

όπου x το διάνυσμα των μεταβλητών επίλυσης, δίνει την προφανή ισότητα

$$
\begin{aligned}
&P_B x_B + P_{EB} x_{EB} + P_W x_W + P_P x_P + P_E x_E + P_{WF} x_{WF} + P_F x_F =\\
&= (A_B + R_B)x_B + P_{EB} x_{EB} + (A_W + R_W)x_W + (A_P + R_P)x_P +\\
&+ (A_E + R_E)x_E + P_{WF} x_{WF} + (A_F + R_F)x_F
\end{aligned}
\qquad \text{(ΠΠ.16)}
$$

Στην τελευταία σχέση, τα μεν στοιχεία P αποτελούν εκφράσεις των αγνώστων στοιχείων L και U, βλ. σχέση (ΠΠ.15), τα δε στοιχεία A είναι γνωστά ως στοιχεία του αρχικού μητρώου. Συγχρόνως όμως με την (ΠΠ.16), θα απαιτήσουμε το μητρώο R να είναι όσο το δυνατό πιο «μικρό», δηλαδή επιβάλλουμε να ισχύει η σχέση

$$R_B x_B + P_{EB} x_{EB} + R_W x_W + R_P x_P + R_E x_E + P_{WF} x_{WF} + R_F x_F = 0 \qquad \text{(ΠΠ.17)}$$

όπου έχει χρησιμοποιηθεί ότι $P_{EB} = R_{EB}$ και $P_{WF} = R_{WF}$ για κάθε κόμβο l.

Ο Stone ανέπτυξε και πρωτοεφάρμοσε τη μέθοδό του σε ελλειπτικά προβλήματα, όπου η λύση αναμένονταν να είναι συνεχής. Σύμφωνα λοιπόν με την τοπολογία των κόμβων που υιοθετήσαμε, ο Stone πρότεινε τη χρήση αναπτυγμάτων Taylor για τις ποσότητες x_{EB} και x_{WF}, ως εξής

$$
\begin{aligned}
x_{EB} &= \psi(x_B + x_E - x_P) \\
x_{WF} &= \psi(x_W + x_F - x_P)
\end{aligned}
\qquad \text{(ΠΠ.18)}
$$

Η ποσότητα ψ είναι ένας συντελεστής που όταν ψ=1 οι παραπάνω σχέσεις αντιστοιχούν σε ακρίβεια δεύτερης τάξης. Όμως, για λόγους ευστάθειας απαιτούνται τιμές του ψ μικρότερες τις μονάδος. Γενικά, καλή σύγκλιση φαίνεται να δίνουν τιμές μεταξύ 0.7 και 0.9, αλλά αυτό εξαρτάται από το πρόβλημα που αντιμετωπίζουμε.

Με την ανάπτυξη (ΠΠ.18), η εξίσωση (ΠΠ.16) στην οποία έχουν απαλειφθεί όροι λόγω της ισχύος της (ΠΠ.17), γράφεται ξανά στη μορφή

$$
\begin{aligned}
&(P_B + \psi P_{EB})x_B + (P_W + \psi P_{WF})x_W + (P_P - \psi P_{EB} - \psi P_{WF})x_P + \\
&+ (P_E + \psi P_{EB})x_E + (P_F + \psi P_{WF})x_F = \\
&= A_B x_B + A_W x_W + A_P x_P + A_E x_E + A_F x_F
\end{aligned}
\qquad \text{(ΠΠ.19)}
$$

Η εξίσωση (ΠΠ.19) απαιτεί να ισχύουν οι παρακάτω επιμέρους ισότητες

$$
\begin{aligned}
P_B &= A_B - \psi P_{EB} \\
P_W &= A_W - \psi P_{WF} \\
P_P &= A_P + \psi(P_{EB} + P_{WF}) \\
P_E &= A_E - \psi P_{EB} \\
P_F &= A_F - \psi P_{WF}
\end{aligned}
\qquad \text{(ΠΠ.20)}
$$

Λύνοντας το σύστημα που προκύπτει από το συνδυασμό των (ΠΠ.20) και (ΠΠ.15) παίρνουμε

$$
\begin{aligned}
b(l) &= \frac{A_B}{1 + \psi f(B)} \\
d(l) &= \frac{A_W}{1 + \psi h(W)} \\
e(l) &= A_P - d(l)f(W) - b(l)h(B) + a(b(l)f(B) + d(l)h(W)) \\
f(l) &= \frac{A_E - \psi b(l) f(B)}{e(l)} \\
h(l) &= \frac{A_F - \psi d(l) h(W)}{e(l)}
\end{aligned}
\qquad \text{(ΠΠ.21)}
$$

με τους συντελεστές $b(l), d(l), e(l), f(l), h(l)$ να υπολογίζονται με την παραπάνω σειρά, σαρώνοντας από τον κόμβο $l = 1$ μέχρι τον κόμβο $l = I_{\max} \times J_{\max}$. Σημειώνεται ότι με B και W συμβολίζονται τιμές των σχετικών στοιχείων διαγωνίων που αντιστοιχούν στον back και west κόμβους του τρέχοντα κόμβου l.

ΠΠ.6 Παραλλαγές του σχήματος SIP

Μια πρώτη ενδιαφέρουσα παραλλαγή του SIP αφορά εφαρμογές με αναλύσεις πεπερασμένων διαφορών που εμπλέκουν εννέα διαγώνιους, δηλαδή τους ευρύτερα γειτονικούς κόμβους του κεντρικού κόμβου. Τα σχετικά μητρώα A, L, U απεικονίζονται στο Σχήμα ΠΠ.4. Οι συμβολισμοί προκύπτουν εύκολα από την προηγούμενη συζήτηση. Το σχήμα που ακολουθεί αναπτύχθηκε από τους Zedan και Schneider.

Όπως και προηγούμενα, οι αναπτύξεις Taylor των επιπλέον στοιχείων που θα δώσει το γινόμενο LU δίνουν

$$\begin{aligned}
x_{EEB} &= \psi(x_B + 2x_E - 2x_P) \\
x_{WW} &= \psi(2x_W - x_P) \\
x_{EE} &= \psi(2x_E - x_P) \\
x_{WWF} &= \psi(x_W + 2x_F - 2x_P)
\end{aligned} \qquad \text{(ΠΠ.22)}$$

με προφανείς συμβολισμούς (λ.χ. το EEB είναι συντομογραφία του κόμβου (i-1,j+2)). Χρησιμοποιώντας τις αναπτύξεις αυτές με τρόπο ανάλογο με προηγούμενα, προκύπτει ο παρακάτω αλγόριθμος που επιτρέπει τον υπολογισμό των στοιχείων των L και U. Θα είναι

$$\begin{aligned}
a(l) &= A_{WB} \\
b(l) &= \frac{A_B - \psi f(EB)A_{EB} - a(l)f(WB)}{1 - \psi f(B)f(EB)} \\
c(l) &= A_{EB} - b(l)f(B) \\
d(l) &= \frac{A_W - 2\psi a(l)g(WB)A_{EB} - a(l)h(WB) - b(l)g(B)}{1 + 2\psi g(W)} \\
e(l) &= A_P - a(l)k(WB) - b(l)h(B) - c(l)g(EB) - d(l)f(W) + \\
&+ 2\psi(c(l)f(EB) + d(l)g(W)) + \psi(a(l)g(WB) + c(l)k(EB)) \\
f(l) &= \frac{A_E - 2\psi c(l)[f(EB) + k(EB)] - b(l)k(B) - c(l)h(EB)}{e(l)} \\
g(l) &= \frac{A_{WF} - d(l)h(W)}{e(l)} \\
h(l) &= \frac{A_F - \psi d(l)g(W) - d(l)k(W)}{e(l)} \\
k(l) &= \frac{A_{EF}}{e(l)}
\end{aligned} \qquad \text{(ΠΠ.23)}$$

Συνήθως, με το σχήμα των εννέα κόμβων χρησιμοποιούνται μικρότερες τιμές του συντελεστή ψ (ψ=0.3,…,0.5).

Τέλος, ενδιαφέρον παρουσιάζει και η περίπτωση τριδιάστατων προβλημάτων (Σχήμα ΠΠ.5), όπου οι πεπερασμένες διαφορές οδηγούν σε σχήματα επτά διαγωνίων (ο κεντρικός και οι έξι άμεσα γειτονικοί). Τα σύμβολα N (north) και S (south) χαρακτηρίζουν τους δύο επιπλέον κόμβους.

Οι αναπτύξεις Taylor των επιπλέον στοιχείων που θα δώσει το γινόμενο LU δίνουν

$$\begin{aligned}
x_{NB} &= \psi(x_B + x_N - x_P) \\
x_{EB} &= \psi(x_B + x_E - x_P) \\
x_{WN} &= \psi(x_N + x_W - x_P) \\
x_{ES} &= \psi(x_S + 2x_E - 2x_P) \\
x_{WF} &= \psi(x_F + 2x_W - 2x_P) \\
x_{SF} &= \psi(x_F + 2x_S - 2x_P)
\end{aligned} \qquad \text{(ΠΠ.24)}$$

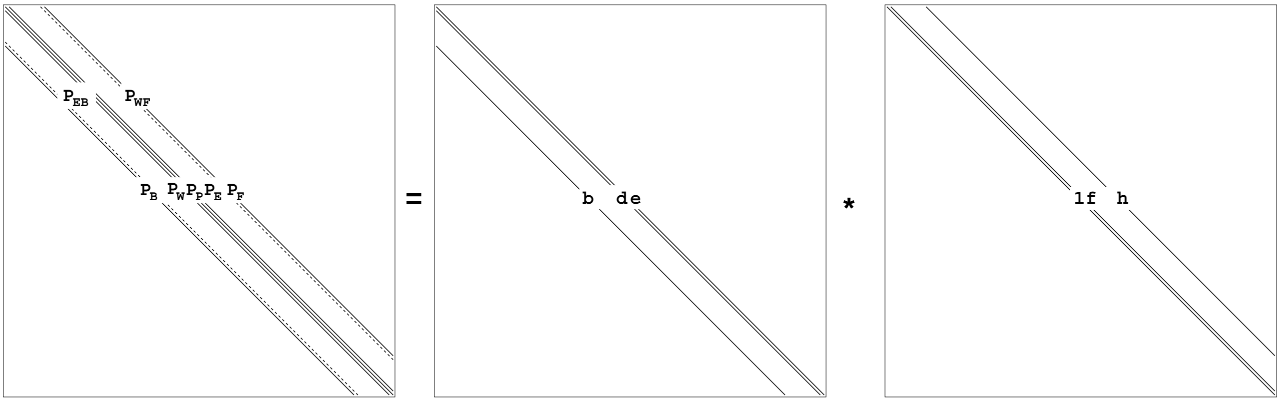
και ο τελικός αλγόριθμος είναι

$$
\begin{aligned}
b(l) &= \frac{A_B}{1+\psi[f(B)+s(B)]} \\
d(l) &= \frac{A_W}{1+\psi[h(W)+s(W)]} \\
n(l) &= \frac{A_S}{1+\psi[h(S)+f(W)]} \\
e(l) &= A_P - d(l)f(W) - b(l)h(B) - n(l)s(S) + \\
&+ \psi[b(l)f(B) + d(l)h(W) + b(l)s(B) + d(l)s(W) + n(l)f(S) + n(l)h(S)] \\
s(l) &= \frac{A_N - \psi[b(l)s(B) + d(l)s(W)]}{e(l)} \\
f(l) &= \frac{A_E - \psi[b(l)f(B) + h(l)f(S)]}{e(l)} \\
h(l) &= \frac{A_F - \psi[d(l)h(W) + n(l)h(S)]}{e(l)}
\end{aligned}
\tag{ΠΠ.25}
$$

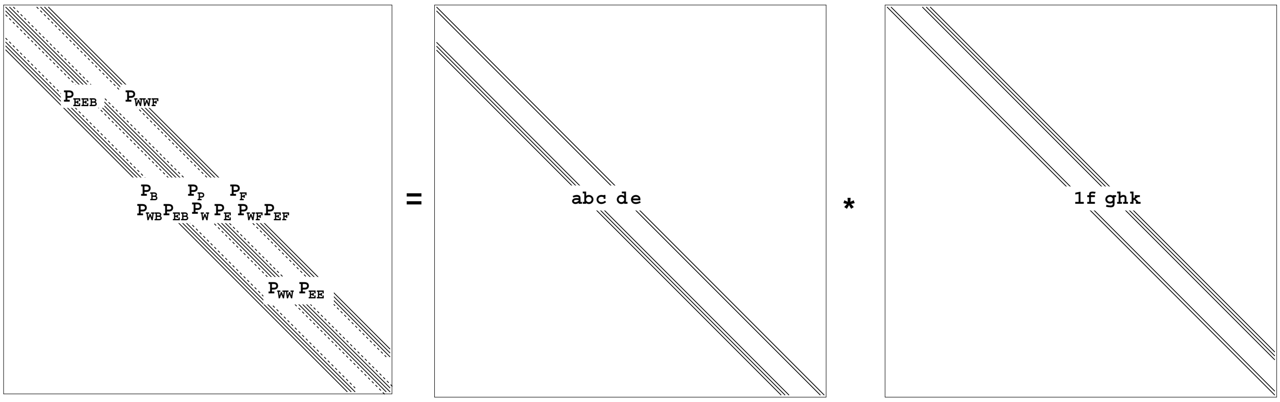
Για βαθύτερη γνώση ο φοιτητής μπορεί να ανατρέξει στις εργασίες:

Stone, H. L.,``Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations'', SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 5, pp. 530-558, (1968)

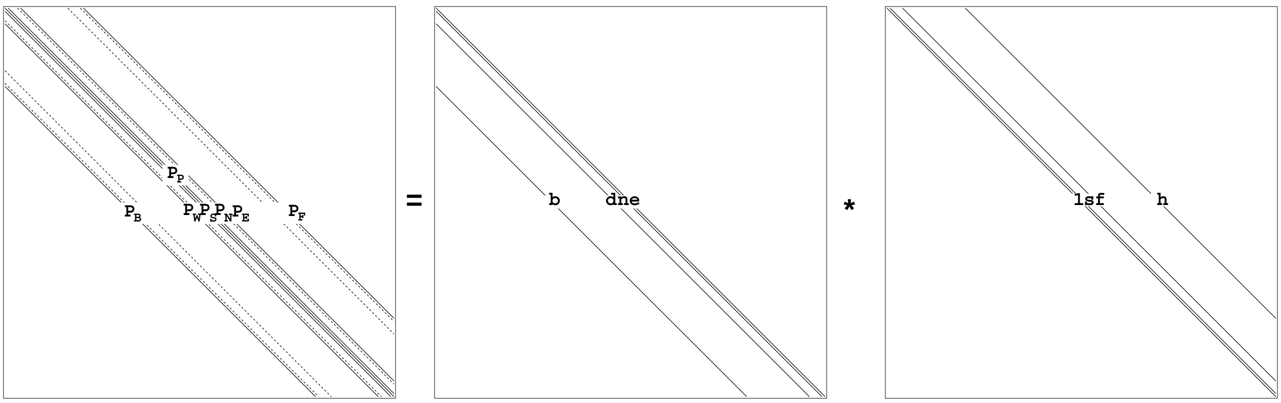
Zedan, M., and Schneider, G. E., ``A Three-Dimensional Modified Strongly Implicit Procedure for Heat Conduction'', AIAA Journal, Vol. 21, pp. 295-303.(1983).



Σχήμα ΠΠ.3



Σχήμα ΠΠ.4



Σχήμα ΠΠ.5