ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΑΚΑΔ. ΕΤΟΣ 2002-2003

ΠΡΟΧΩΡΗΜΕΝΕΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΚΑΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ

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

ΠΡΩΤΗ ΕΝΟΤΗΤΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ

Η ΧΡΗΣΗ ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

- Σύνδεση-διαφοροποιήσεις με την ύλη του πρώτου τμήματος του μαθήματος που διδάσκεται από τον Καθ. Κ. Παπαδρακάκη.
- Διαφορικοί τελεστές. Γραμμικοποίηση και διακριτοποίηση. Εισαγωγή στη χρήση αριθμητικών πλεγμάτων, με έμφαση στα δομημένα πλέγματα, και συσχέτιση με τη μορφή του προκύπτοντος μητρώου.
- Βασικά στοιχεία πεπερασμένων διαφορών και πεπερασμένων όγκων. Προβλήματα με μη-συμμετρικά και διαγώνιας μορφής μητρώα συντελεστών.
- Ανάγκη χρήσης επαναληπτικών μεθόδων. Σφάλμα και υπόλοιπο. Συσχέτιση σφάλματος και νόρμας υπολοίπου.
- Συστήματα εξισώσεων σε κακή κατάσταση. Αριθμός κατάστασης.
- Βασικές επαναληπτικές μέθοδοι.Jacobi, Gauss-Seidel, χαλάρωση.
- Διερεύνηση της σύγκλισης του βασικού επαναληπτικού σχήματος $v^{n+1} = Gv^{n} + b$. Φασματική ακτίνα του G. Σχετικά θεωρήματα. Συσχέτιση του ιδιοπροβλήματος με το ρυθμό σύγκλισης μιας γραμμικής ή γραμμικοποιημένης εξίσωσης. Εκφράσεις για τη μέτρηση της σύγκλισης επαναληπτικών σχημάτων.
- Διάφοροι χρήσιμοι ορισμοί: μη-αρνητικά μητρώα, μειούμενα μητρώα, Μ-μητρώα. Κανονικές διασπάσεις μητρώων. Πρακτική χρήση των παραπάνω σε θέματα σύγκλισης επαναληπτικών σχημάτων.
- Ένα παράδειγμα ανάλυσης της σύγκλισης σε 1Δ πρόβλημα. Υψίσυχνες και χαμηλόσυχνες συνιστώσες σφάλματος. Η ιδέα της τεχνικής του πολυπλέγματος (multigrid)
- Η έννοια της προδιάθεσης (ή προσταθεροποίησης, preconditioning) στα επαναληπτικά σχήματα. Αριστερή και δεξιά προδιάθεση, διαφορές τους.

ΣΚΟΠΟΣ ΤΗΣ "ΔΕΥΤΕΡΗΣ" ΕΝΟΤΗΤΑΣ ΤΟΥ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

• Σκοπός τής δεύτερης ενότητας του μαθήματος "Προχωρημένες Υπολογιστικές Τεχνικές και Αλγόριθμοι επίλυσης" είναι νά εστιάσει στίς επαναληπτικές μεθόδους που κυρίως χρησιμοποιούνται γιά τήν επίλυση γραμμικών ή γραμμικοποιημένων προβλημάτων τής γενικής μορφής $\boxed{Au=f}$, όταν

(α) τό μητρώο A, διάστασης $n \times n$, είναι μή-συμμετρικό

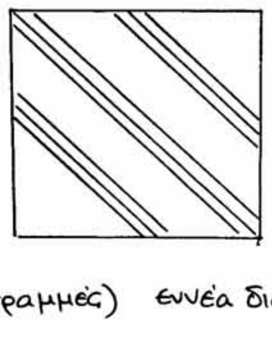
(β) Το μητρώο A είναι μεγάλης διάστασης ($n \gg$), γεγονός που υπαγορεύει τήν ανάγκη χρήσης επαναληπτικής μεθόδου επίλυσης αντί τής απευθείας αντιστροφής του A

(γ) Τό μητρώο A έχει δομή, υπό τήν έννοια ότι τά μη-μηδενικά στοιχεία του αραιού (sparse) A είναι διατεταγμένα σε συγκεκριμένες διαγωνίους.

• Οί παραπάνω ιδιότητες του A, καί κυρίως ή (γ), είναι πρακτικά αυτό πού θά προκύψει από τή χρήση μεθόδων όπως οί πεπερασμένες διαφορές (finite differences, FD) ή οί πεπερασμένοι όγκοι (finite volumes, FV) όταν χρησιμοποιούνται γιά τήν επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων (μ.δ.ε.). Τυπικό, αλλά όχι αποκλειστικό παράδειγμα, είναι ή αριθμητική επίλυση τών εξισώσεων Navier-Stokes, γιά όσους ασχολούνται με τή μηχανική τών ρευστών.

• Ενδεικτική μορφή μητρώου A που θά κληθούμε νά επιλύσουμε-αντιστρέψουμε είναι τό:

A =



όπου φαίνονται (ως πλάγιες γραμμές) εννέα διαγώνιοι – συμμετρικά τοποθετημένες ως πρός τήν κύρια διαγώνιο – με μη-μηδενικά στοιχεία. Σημειώνουμε ότι, γιά διάφορους λόγους, είναι δυνατόν κάποια (λίγα) στοιχεία πάνω στίς εννέα διαγωνίους νά είναι μηδενικά, αλλά εντούτοις θα θεωρούνται πρακτικά ως μη-μηδενικά, αφού είναι στοιχεία τής μη-μηδενικής διαγωνίου.

• Τό σκαρίφημα που δείχνει τίς εννέα διαγωνίους με τά μη-μηδενικά στοιχεία (βλ. προηγούμενη σελίδα) θά ονομάζεται <u>οδηγός ή αποτύπωμα μή-μηδενικών στοιχείων</u> (non-zero pattern) του μητρώου A και θά χρησιμοποιηθεί στή συνέχεια.

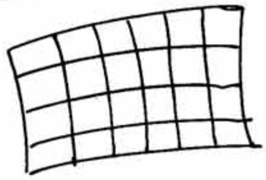
<u>ΑΠΑΡΑΙΤΗΤΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ - ΣΧΟΛΙΑ</u>

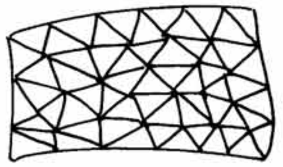
• Η γνώση, ως κάποιο βαθμό τουλάχιστον, των αρχών της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών ή πεπερασμένων ογκων είναι βοηθητική και χρήσιμη, οχι ως πρός τίς επαναληπτικές μεθόδους αυτές καθαυτές αλλά γιά την κατανόηση τής μορφής του μητρώου A.

• Η <u>ενότητα ΠΔ</u> και οι <u>ενότητα ΠΟ</u> των σημειωσεων που μοιράζονται από το διδάσκοντα εχουν στόχο νά βοηθήσουν τήν εξοικείωση του μεταπτυχιακού φοιτητή μέ αντίστοιχα θέματα. Γιά περαιτέρω εμβάθυνση στίς μεθόδους FD και FV, ο φοιτητής παραπέμπεται στήν πλουσια σχετική βιβλιογραφία.

• Κάθε αναφορά σε αριθμητική επίλυση πεδιακού (field) προβλήματος που διέπεται από μ.δ.ε (έστω διακριτοποιημένες μέ τεχνικές FD ή FV) και πού καταλήγει σέ γραμμικά-γραμμικοποιημένα συστήματα μέ μητρώα συντελεστών συγκεκριμένης μορφής πρέπει κανείς νά τα εξετάζει πάντοτε σέ σχέση με τά <u>αριθμητικά πλέγματα</u> (computational grids ή meshes) που χρησιμοποιούνται. Στο μάθημα σχολιάζονται λίγα βασικά θέματα γιά πλέγματα, συζητούνται δομημένα (structured) και μη-δομημένα (unstructured) πλέγματα και κυρίως σχολιάζεται ή μορφή του μητρώου A που αναμένεται ανάλογα με τόν τύπο πλέγματος που θα επιλέξουμε. Περισσότερα γιά πλέγματα δίνονται στό σχετικό μάθημα "Γένεση και Διαχείριση Αριθμητικών Πλεγμάτων" (2ο εξάμηνο - Διδάσκων: Κ. Γιαννάκογλου).

• Ενδεικτικά :

 (α)

 (β)

(α) Δομημένο πλέγμα σε υπολογιστικό χωρίο. Το πλέγμα είναι καμπυλόγραμμο (curvilinear) και οριόδετο (body-fitted). Με αυτό μπορούν νά εφαρμοστούν τεχνικές FD ή FV (προφανώς και πεπερασμένα στοιχεία, finite elements, FE), στα FE γενικά δέν θα αναφερόμαστε. Με FD ή FV καταλήγουμε σέ μητρώα A μέ οδηγό μη-μηδενικών στοιχείων που αποτελείται απο συγκεκριμένες διαγωνίους ("πολυδιαγώνια", λχ. 5-διαγώνια, 9-διαγώνια, 27-διαγώνια μητρώα)

(β) Μή-δομημένο πλέγμα τριγωνικών στοιχείων. Σέ αυτό εφαρμόζονται τεχνικές FV ή FE, όχι όμως FD. Δεν προκύπτουν πολυδιαγώνια μητρώα, λόγω της έλλειψης δομής στή θέση και γειτνίαση των κόμβων του πλέγματος. Τα μητρώα πού προκύπτουν είναι αραιά καί μέ μή-δομημένο (= ακατάστατο) οδηγό μή-μηδενικών στοιχείων. Γενικά, δέν συσχετίζονται με τις μεθόδους που θα διδαχθούμε εδώ – αν εξαιρέσουμε τις "γενικές" όπως είναι η Jacobi, ή Gauss-Seidel κλπ. Περισσότερα για τό θέμα αυτό στο μάθημα.

• Το αν, χρησιμοποιώντας 2Δ ή 3Δ δομημένα πλέγματα για τήν αριθμητική επίλυση μιάς μ.δ.ε., θά καταλήξουμε σέ κ-διαγώνιο ή λ-διαγώνιο μητρώο (τυχαία κ, λ, μέ κ≠λ) εξαρτάται από τήν ακρίβεια της διακριτοποίησης, ιδιότητες του πλέγματος όπως είναι λ.χ. η ορθογωνιότητα των πλεγματικών γραμμών, κά.

• Ανάλογα με τις μη-μηδενικές διαγωνίους του A (πόσες; ποιές;) ενδεχόμενα συμφέρει νά επιλέξουμε διαφορετικό επιλύτη και, γενικά, το ποιός είναι ο βέλτιστος επιλύτης γιά λ.χ. διαγώνια μητρώα, δεν είναι εύκολο νά απαντηθεί.

• Η σημερινή ανάπτυξη και διάδοση των παράλληλων υπολογιστών έχει επανακαθορίσει τήν "αξία" των μεθόδων πού αναπτύσσουμε. Περισσότερα σχόλια στό μάθημα.

ΣΦΑΛΜΑ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΙΠΟ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ

- Γιά τήν εξίσωση $Au=f$, οπου u ή ακριβής λύση και v ή προσεγγιστική λύση, τό σφάλμα (error, e) ορίζεται ως $e=u-v$ καί τό υπόλοιπο (residual, r) ορίζεται ως $r=f-Av$.
- Τυπικές νόρμες σφάλματος είναι οι $\|e\|_\infty = \max\limits_{1\le j\le n} |e_j|$, $\|e\|_2=\sqrt{\sum\limits_{j=1}^{n} e_j^2}$ οπου n είναι ό αριθμός των στοιχείων του διανύσματος u (αρα $A=n\times n$)
- Δέλτα διατυπώσεις (delta formulations) για τήν επίλυση γραμμικών συστημάτων. Τό βημα $v^n \to v^{n+1}$ συντελείται σέ δύο φάσεις

$$\left.\begin{aligned} A\,\delta v &= f - Av^n = r^n \\ v^{n+1} &= v^n + \delta v \end{aligned}\right\}$$ Τα πλεονεκτήματα συζητούνται στό μάθημα.

- Από την "ακριβή" εξίσωση $Au=f$, αφαιροπροσθέτοντας τό Av σε κάθε μελος, προκύπτει ή <u>εξίσωση του υπολοιπου</u> (residual equation):

$$\boxed{Ae=r} \qquad \text{ή} \qquad A(u-v)=r$$

ΓΡΑΜΜΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΣΕ ΚΑΚΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ

- Το σύστημα είναι σε κακή κατάσταση (ill-conditioned) οταν μικρές αλλαγές στα δεδομένα προκαλούν μεγάλες αλλαγές στα αποτελέσματα
- Η κατάσταση του μητρώου συντελεστών A μετράται με τους αριθμούς κατάστασης (condition numbers). Τρείς τυπικοί αριθμοί κατάστασης είναι οι:

(α) Ο αριθμός κατάστασης Hadamard. Ορίζεται ως $K_H(A)=\dfrac{|\det(A)|}{\underset{\sim}{a}_1\underset{\sim}{a}_2\cdots\underset{\sim}{a}_n}$, οπου $\underset{\sim}{a}_i=\sqrt{(a_{i1}^2+a_{i2}^2+\dots+a_{in}^2)}$ (ανά γραμμή)

(β) Ο αριθμός κατάστασης $\mathrm{cond}(A)=\|A\|_2\cdot\|A^{-1}\|_2$, οπου ή νόρμα-2 ορίζεται ως $\|A\|_2=\left\{\sum\limits_{i=1}^{n}\sum\limits_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right\}^{1/2}$

(γ) ο φασματικός (spectral) αριθμός κατάστασης $\rho_A=\dfrac{\max\limits_i|\lambda_i|}{\min\limits_i|\lambda_i|}$, οπου λ_i οι ιδιοτιμές του A.

- Τό μητρώο A είναι σέ κακή κατάσταση όταν $K_H(A) \ll 1$, ή $\text{cond}(A) \gg$, ή $\mu(A) \gg$. Σχόλια γιά τη χρήση τους και το υπολογιστικό κόστος πού συνεπάγονται δίνονται στό μάθημα.
- Η ορίζουσα $\det(A)$ <u>δεν</u> αποτελεί μέτρο της κατάστασης ενός μητρώου.
- Παράδειγμα:

$$\begin{bmatrix} 0.913 & 0.659 \\ 0.780 & 0.563 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.254 \\ 0.217 \end{bmatrix}$$

Το σύστημα έχει ακριβή λύση $(u_1, u_2) = (1, -1)$. Διαταράξτε "κατά ϵ" τό δεξιό μέλος και καταλάβετε γιατί είναι σέ κακή κατάσταση. Πιστοποιείστε το με τους αριθμούς κατάστασης που μάθατε.

ΣΥΣΧΕΤΙΣΗ ΣΦΑΛΜΑΤΟΣ ΚΑΙ ΝΟΡΜΑΣ ΥΠΟΛΟΙΠΟΥ

- Ο αριθμός κατάστασης $\text{cond}(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2$ δείχνει τό πόσο "καλά" το υπόλοιπο r μετρά τό σφάλμα e της εξίσωσης.
- Αποδείξτε ότι

$$\boxed{\frac{1}{\text{cond}(A)} \cdot \frac{\|r\|_2}{\|f\|_2} \leqslant \frac{\|e\|_2}{\|u\|_2} \leqslant \text{cond}(A) \frac{\|r\|_2}{\|f\|_2}}$$

- Βοήθεια γιά την απόδειξη: Ισχυει ότι $\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$

Απο τίς $\left\{ \begin{array}{l} r = Ae \\ u = A^{-1} f \end{array} \right\}$ δείξτε ότι $\dfrac{\|r\|_2}{\|f\|_2} \leq \text{cond}(A) \dfrac{\|e\|_2}{\|u\|_2}$

Απο τίς $\left\{ \begin{array}{l} Au = f \\ e = A^{-1} r \end{array} \right\}$ δείξτε ότι $\dfrac{\|e\|_2}{\|u\|_2} \leq \text{cond}(A) \dfrac{\|r\|_2}{\|f\|_2}$

- Μικρή τιμή υπόλοιπου r δέν σημαίνει αναγκαστικά μικρή τιμή σφάλματος e. Φυσική σημασία , σχόλια γιά τό ρόλο του $\text{cond}(A)$ δίνονται στό μάθημα
- Ενδεικτικό παράδειγμα: Τα δύο συστήματα

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 21 & -20 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -19 \end{bmatrix} \quad , \quad \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 3 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

εχουν κοινή ακριβή λύση τη $(u_1, u_2) = (1,2)$. Εξετάστε και σχολιάστε τις τιμές $\|e\|_2$ και $\|r\|_2$, για το καθένα, που αντιστοιχουν στην προσεγγιστική λυση $(v_1, v_2) = (1.93, 3)$

ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

- Τα παρακάτω θεωρούνται γνωστά και η αναφορά είναι σύντομη και μόνο για λόγους πληρότητας.
- Στο σύστημα $\boxed{Au=f}$, θεωρούμε οτι $\boxed{A = D-L-U}$, οπου D = διαγώνιο μητρώο, U = άνω τριγωνικό μητρώο (αυστηρά, με μηδενική την κύρια διαγώνιο, L = αυστηρά κάτω τριγωνικό μητρώο.
- Μεθοδος Jacobi:

$$v^{n+1} = G_J v^n + D^{-1} f$$

οπου $\boxed{G_J = D^{-1}(L+U)}$ = Jacobi iteration matrix.

- Μέθοδος Jacobi με χαλάρωση:

Διατύπωση σε δύο βήματα: $\begin{cases} v^* = G_J v^n + D^{-1} f \\ v^{n+1} = \omega v^* + (1-\omega) v^n \end{cases}$

οπου ω = συντελεστής χαλαρωσης (relaxation factor).

Ενιαία διατύπωση $\quad v^{n+1} = G_{J\omega} v^n + \omega D^{-1} f$

οπου $\boxed{G_{J\omega} = (1-\omega) I + \omega G_J}$

Αποδείξτε οτι η δελτα διατύπωση καταλήγει στο σχήμα $v^{n+1} = v^n + \omega D^{-1} r^n$

- Μέθοδος Gauss-Seidel:

Ξεκινώντας από την $(D-L) v^{n+1} = U v^n + f$, δείξτε οτι

$v^{n+1} = (D-L)^{-1} U v^n + (D-L)^{-1} f$, ή $\quad v^{n+1} = G_{GS} v^{n+1} + (D-L)^{-1} f$

οπου $\boxed{G_{GS} = (D-L)^{-1} U}$

- Υλοποιείστε μόνοι σας τη Gauss-Seidel με χαλάρωση, βρείτε το $G_{GS\omega}$!

ΓΕΝΙΚΟ ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΟ ΣΧΗΜΑ

- Θα τό διατυπώνουμε στή μορφή $\boxed{v^{n+1} = Gv^n + b}$, ή εναλλακτικά στη μορφή $\boxed{Mv^{n+1} = Nv^n + f}$, με Μ κατάλληλο εύκολα αντιστρέψιμο μητρώο.
- Η δεύτερη γραφή προϋποθέτει ότι $\boxed{A = M - N}$, ενώ ή συσχέτιση των δύο ορίζει ότι $\boxed{G = M^{-1}N}$
- Το επαναληπτικό σχήμα $v^{n+1} = Gv^n + b$, αν συγκλίνει σε μια τιμή, έστω την $\bar{v}$, αυτή είναι ή ακριβής λύση u του συστήματος.
(απόδειξη $M\bar{v} = N\bar{v} + f \Rightarrow (M-N)\bar{v} = f \Rightarrow \dots$)
- Μελετείστε τίς συνθήκες κάτω από τίς οποίες το επαναληπτικό σχήμα $v^{n+1} = Gv^n + b$ συγκλίνει. Δείξτε αρχικά ότι

$$\left.\begin{array}{l} v^{n+1} = Gv^n + b \\ u = Gu + b \end{array}\right\} \Rightarrow \quad e^{n+1} = Ge^n$$

Εύκολα πλέον καταλήξτε στή σχέση $\boxed{e^{n+1} = [G]^{n+1} e^0}$

οπου e^0 είναι τό σφάλμα τής αρχικής λύσης v^0.

- Η <u>φασματική ακτίνα</u> του G ορίζεται ως

$$\boxed{\rho(G) = \max\left(|\lambda|, \lambda \in \lambda(G)\right)} \quad , \lambda(G) = \text{σύνολο ιδιοτιμών}$$

- Αν $\boxed{\rho(G) < 1}$, το επαναληπτικό σχήμα $v^{n+1} = Gv^n + b$ συγκλίνει (στή σωστή λύση / βλ. προηγουμένως)
- <u>Θεώρημα:</u> Η σειρά $(I, G, G^2, G^3, \dots)$ συγκλίνει στό μηδέν όταν καί μόνο όταν $\rho(G) < 1$.
- <u>Θεώρημα:</u> Τό άθροισμα $\sum_{k=0}^{\infty} G^k$ συγκλίνει όταν καί μόνο όταν $\rho(G) < 1$
Υπό τους όρους αυτούς εξασφαλίζεται (α) ότι τό μητρώο $(I-G)$ είναι ομαλό, δηλ. αντιστρέψιμο, μητρώο καί (β) ότι το άθροισμα τής σειράς $\sum_{k=0}^{\infty} G^k$ θα συγκλίνει στο $(I-G)^{-1}$.
- Σχόλια, αποδείξεις, φυσική σημασία τών παραπάνω δίνονται στό μάθημα.

ΠΕΡΙ ΣΥΓΚΛΙΣΗΣ ΤΟΥ ΓΕΝΙΚΟΥ ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΟΥ ΣΧΗΜΑΤΟΣ

- Σύνοψη: Το επαναληπτικό σχημα $v^{n+1} = Gv^{n} + b$ συγκλίνει γιά οποιαδήποτε αρχική τιμή v^{0}, αν και μόνο αν $\rho(G) < 1$

- Φυσική σημασία τής φασματικής ακτίνας $\rho(G)$ (= asymptotic convergence rate): είναι "περίπου" ό χειρότερος παράγοντας με τόν οποίο ελαττώνεται τό σφάλμα από επανάληψη σέ επανάληψη.

  Περισσότερες διευκρινίσεις στό μαθημα.

- Καθορίζοντας (ό χρήστης) ότι μετά από n επαναλήψεις είναι επιθυμητή μείωση του σφάλματος κατά d τάξεις, δηλαδή:

$$\frac{\|e^{n}\|_2}{\|e^{0}\|_2} \leq 10^{-d}$$

υπολογίζουμε εύκολα τόν ελάχιστο αριθμό επαναλήψεων που χρειάζονται.

Είναι:

$$\boxed{n \geq \frac{d}{\log_{10}[\rho(G)]}}$$

- $-\log_{10}(\rho(G))$ = asymptotic convergence rate.

- Τρείς τροποι μέτρησης του ρυθμού σύγκλισης ενός επαναληπτικού σχήματος.

(α) Παράγοντας σύγκλισης:

$$\rho = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{\|e^{n}\|_2}{\|e^{0}\|_2}\right)^{1/n}$$

(β) Ειδικός ρυθμός σύγκλισης:

$$\Phi = \log_{10}\left(\frac{1}{\rho}\right) = -\log_{10}(\rho)$$

Τά (α) και (β) εξαρτώνται από τήν αρχική λύση v^{0}.

(γ) Γενικός ρυθμός σύγκλισης:

$$\varphi = \lim_{n\to\infty}\left(\max_{v^{0}\in R^{K}}\frac{\|e^{n}\|_2}{\|e^{0}\|_2}\right)^{1/n}$$

- Ισχύει ότι:

$$\varphi = \lim_{n\to\infty}\left(\max_{v^{0}\in R^{K}}\frac{\|G^{n}e^{0}\|_2}{\|e^{0}\|_2}\right)^{1/n} = \lim_{n\to\infty}\left(\|G^{n}\|\right)^{1/n} = \rho(G)$$

ΧΡΗΣΙΜΟΙ ΟΡΙΣΜΟΙ ΑΠΟ ΤΗ ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΑΛΓΕΒΡΑ - ΘΕΩΡΗΜΑΤΑ

- Ένα μητρώο A ονομάζεται μη-αρνητικό όταν για κάθε στοιχείο του είναι $a_{ij} \geq 0$.
- Ένα μητρώο A λέγεται θετικό όταν $a_{ij} > 0$.
- Συμβολίζουμε ότι $A \leq B$ όταν και μόνο όταν $a_{ij} \leq b_{ij}$, $\forall i, \forall j$
- Το μητρώο A ονομάζεται μειούμενο (reducible) όταν μπορεί να βρεθεί ένα άλλο μητρώο $\mathbb{P}$ έτσι ώστε το μητρώο $\mathbb{P}A\mathbb{P}^T$ να είναι άνω τριγωνικό
- Το μητρώο A έχει ασθενή διαγώνια κυριαρχία (weak diagonal dominance) όταν για κάθε γραμμή του ($\forall i \in [1,n]$) ισχύει ότι

$$|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{j=n} |a_{i,j}|$$

- Το μητρώο A έχει αυστηρή διαγώνια κυριαρχία αν

$$|a_{i,i}| > \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{j=n} |a_{i,j}| \qquad , \forall i \in [1,n]$$

- Το μητρώο A θα λέγεται μη-μειούμενο μητρώο διαγώνιας κυριαρχίας (irreducibly diagonally dominant matrix) όταν είναι μη-μειούμενο και ισχύει η προηγούμενη ανισότητα (πιθανόν ως ανισο-ισότητα για όλες τις γραμμές εκτός από μια τουλάχιστον όπου θα ισχύει ως ανισότητα, αυστηρά!).
- Αν ένα μητρώο έχει αυστηρή ή μη-μειούμενη διαγώνια κυριαρχία τότε είναι ομαλό (=αντιστρέψιμο).
- Στο σύστημα γραμμικών εξισώσεων $Au = f$, με το μητρώο A να έχει αυστηρή ή μη-μειούμενη διαγώνια κυριαρχία, οι μέθοδοι Jacobi και Gauss-Seidel συγκλίνουν για οποιαδήποτε αρχικοποίηση u^0.

ΧΡΗΣΙΜΟ ΘΕΩΡΗΜΑ ΓΙΑ ΤΗ ΣΥΓΚΛΙΣΗ ΤΟΥ ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΟΥ ΣΧΗΜΑΤΟΣ

- Αν G είναι μη-αρνητικό μητρώο, τότε αναγκαία και ικανή συνθήκη ώστε $\rho(G)<1$ είναι να ισχύουν τα εξής δύο:

  (α) το $(I-G)$ είναι ομαλό μητρώο

  (β) το $(I-G)^{-1}$ είναι μη-αρνητικό μητρώο

- Η απόδειξη υπάρχει σε βιβλία γραμμικής άλγεβρας.
- Η χρησιμότητα του θεωρήματος φαίνεται από την απαίτηση $\rho(G)<1$ για τη σύγκλιση επαναληπτικών σχημάτων της γενικής μορφής $v^{n+1}=Gv^n+b$.

Μ-ΜΗΤΡΩΑ

- Ένα μητρώο A ονομάζεται <u>Μ-μητρώο</u> (M-matrix) αν ικανοποιεί τις:

  (α) $a_{i,i}>0$, $\forall\ i\in[1,n]$

  (β) $a_{i,j}\leq 0$, $\forall i, \forall j$ με $i\neq j$

  (γ) A = ομαλό μητρώο

  (δ) A^{-1} είναι μη-αρνητικό μητρώο $(A^{-1}\geq 0)$

- Οι ιδιότητες (α) και (β) "ταιριάζουν" με διακριτοποιήσεις F.D. Για παράδειγμα, για την εξίσωση Laplace σε δομημένο πλέγμα με ορθογώνιες και κατακόρυφες πλεγματικές γραμμές και παντού $\Delta x=\Delta y=1$, η διακριτοποίηση δίνει συντελεστή 4 στην κύρια διαγώνιο και άλλες 4 διαγωνίους με τιμή -1 !
- Αν D είναι διαγώνιο μητρώο που ταυτίζεται με τη διαγώνιο του μητρώου A, τότε: $A=D-(D-A)=D-(I-(I-D^{-1}A))$.

  Ορίζουμε $G=I-D^{-1}A$ ή $D^{-1}A=I-G$

- Έχω A=ομαλό $\Rightarrow D^{-1}A$=ομαλό $\Rightarrow (I-G)$=ομαλό μητρώο και $(I-G)^{-1}=A^{-1}D\geq 0$ (μη-αρνητικό μητρώο, αφού το A^{-1} είναι μη-αρνητικό και $a_{i,i}>0$). Το G είναι μη-αρνητικό μητρώο (γράψτε ότι $G=I-D^{-1}A$ και αναλύστε), οπότε από το προηγούμενο θεώρημα προκύπτει ότι:

$$\rho(G)<1 .$$

- Συνεπώς, επαναδιατυπώνεται εναλλακτικά ο ορισμός του <u>Μ-Μητρώου</u>. Έτσι, το A είναι Μ-μητρώο αν ικανοποιεί τις τρείς συνθήκες:

  (α) $a_{i,i} > 0 \quad , \forall\, i \in [1,n]$

  (β) $a_{i,j} \leq 0 \quad , \forall\, i,j$ με $i \neq j$

  (γ) $\rho(G) < 1$, οπου G ορίζουμε το $G = I - D^{-1}A$

- Σημαντική είναι η κατανόηση της «χρησιμότητας» των Μ-μητρώων. Πά παράδειγμα, η μέθοδος Jacobi γράφεται:

$$D v^{n+1} = (D-A)\, v^{n} + f \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad v^{n+1} = (I - D^{-1}A)\, v^{n} + D^{-1} f \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad v^{n+1} = G\, v^{n} + b$$

όπου $G = I - D^{-1}A$, $b = D^{-1} f$. Εύλογα καταλήγουμε στο ότι:

Πά να συγκλίνει η μέθοδος Jacobi για οποιαδήποτε αρχικοποίηση v^0 πρέπει $\rho(G) < 1$ κάτι που εξασφαλίζεται <u>αν το A είναι Μ-μητρώο.</u>

<u>ΚΑΝΟΝΙΚΕΣ ΔΙΑΣΠΑΣΕΙΣ ΜΗΤΡΩΩΝ</u>

- <u>Ορισμός</u>: η διάσπαση $\boxed{A = M - N}$ ονομάζεται <u>κανονική</u> αν τα μητρωα M^{-1} και N είναι μη αρνητικά. (κανονική διάσπαση = regular splitting).

- Ασχολούμαστε με κανονικές διασπάσεις, στα πλαίσια της εμβάθυνσης στη σύγκλιση των επαναληπτικών μεθόδων, ώστε να γράφουμε:

$$Au = f \quad \Rightarrow \quad M v^{n+1} = N v^{n} + f \quad \Rightarrow \boxed{v^{n+1} = M^{-1} N v^{n} + M^{-1} f}$$

και να διερευνούμε πότε συγκλίνει το σχήμα αυτό.

- <u>Θεώρημα:</u> Ας είναι M και N τα μητρώα μιάς κανονικής διάσπασης του A, δηλαδή $A = M - N$. Τότε εξασφαλίζεται ότι $\rho(M^{-1}N) < 1$ όταν και μόνο όταν

  (α) A = ομαλό μητρώο

  (β) A^{-1} = μη-αρνητικό μητρώο.

- Η απόδειξη δίνεται στο μάθημα.

- Σχόλιο : Σχετίστε το $v^{n+1} = M^{-1} N v^{n} + M^{-1} f$ με τη γνωστή γραφή $v^{n+1} = G v^{n} + b$ και καταλάβετε το "ενδιαφέρον" μας για τη συνθήκη $\rho(M^{-1}N) < 1 \Rightarrow \rho(G) < 1$.

• Σύνοψη : Τα παραπάνω θεωρήματα και οι ορισμοί καταλήγουν στην υιοθέτηση επαναληπτικών σχημάτων της μορφής $Mv^{n+1} = Nv^{n} + f$ πού συγκλίνουν πάντοτε αρκεί τα M,N να αποτελούν κανονική διάσπαση του A, ενώ τό A είναι ένα M-μητρώο.

• Γενικεύσετε τα προηγούμενα συμπεράσματα όταν υιοθετείται ή δέλτα διατύπωση του προβλήματος. Αντί της :

$$Mv^{n+1} = Nv^{n} + f$$

χρησιμοποιείστε τη γραφή (όπου $\delta v = v^{n+1} - v^{n}$) :

$$\underbrace{M}_{\text{NUMERICS!}}\,\delta v = \underbrace{-Av^{n} + f = -r^{n}}_{\text{PHYSICS}} \quad , \quad r^{n} = \text{υπόλοιπο } n^{\text{ιοστής}} \text{ επανάληψης}$$

και συνηθίστε γενικευμένες διατυπώσεις της μορφής :

$$\boxed{\left[\text{NUMERICS}\right] \cdot \delta v = \left[\text{PHYSICS}\right]}$$

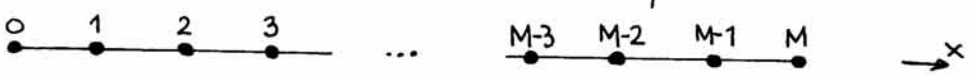
Σχόλια - κατανόηση του ρόλου του [NUMERICS] (δηλ. μητρώο M) και του [PHYSICS] (δηλ. μητρώο A από διακριτοποίηση) δίνονται στο μάθημα. Επιγραμματικά, τό [PHYSICS] σχετίζεται με την ακρίβεια και τη μέθοδο διακριτοποίησης του προβλήματος, ενώ ή επιλογή του [NUMERICS] σχετίζεται αποκλειστικά με τις ιδιότητες σύγκλισης που θα έχει ή επαναληπτική μέθοδος επίλυσης πού διαλέξαμε.

• Συνήθης και προφανής επιλογή είναι τό [NUMERICS], δηλ. τό μητρώο M, να είναι μια <u>"εύκολα αντιστρέψιμη εκδοχή τού A"</u> !

Η ΤΕΧΝΙΚΗ ΤΟΥ ΠΟΛΥΠΛΕΓΜΑΤΟΣ – MULTIGRID

- Η τεχνική του πολυπλέγματος (multigrid) είναι μια ευρύτατα χρησιμοποιούμενη τεχνική πού καταφέρνει να μειώσει τόν υπολογιστικό χρόνο-κόστος που απαιτούν οἱ επαναληπτικές μέθοδοι.
- Στά περιορισμένα χρονικά πλαίσια ενός τέτοιου μαθήματος επιχειρείται απλά μιά πρώτη γνωριμία με τις βασικές ιδέες (τό "concept") τής τεχνικής τού πολυπλέγματος. Ουσιαστικά, θα φθάσουμε νά αναγνωρίσουμε τήν ανάγκη μιάς τέτοιας τεχνικής και εκεί θά σταματήσουμε. Με τήν ευκαιρία θά ασχοληθούμε μέ τήν αριθμητική επίλυση ενός απλού μονοδιάστατου παραδείγματος-εξίσωσης, που είναι πολύ καλό ως παράδειγμα και συνιστάται νά προσπαθήσετε νά τό προγραμματίσετε (είναι απλό, μέχρι και γι' αυτούς με λίγες γνώσεις προγραμματισμού — ξεκινήστε με ενα τέτοιο παράδειγμα).
- Η τεχνική του πολυπλέγματος εφαρμόζεται μέ πολλούς τρόπους και ό αναγνώστης παραπέμπεται στή βιβλιογραφία.
- Τό 1Δ παράδειγμα:

Στήν αλληλουχία $M+1$ κόμβων πού σχεδιάζονται παρακάτω:



(ισαπέχουν κατά Δx, ή τιμή του Δx είναι αδιάφορη)

Επιλύεται ή εξίσωση $\quad \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad$ (1Δ Laplace)

με Dirichlet οριακές συνθήκες – μηδενικές.

Με διακριτοποίηση FD, το επιλυόμενο πρόβλημα γράφεται:

$$\boxed{\begin{array}{c} -u_{j-1} + 2u_j - u_{j+1} = 0 \quad , \quad 1 \le j \le M-1 \\ u_0 = u_M = 0 \end{array}}$$

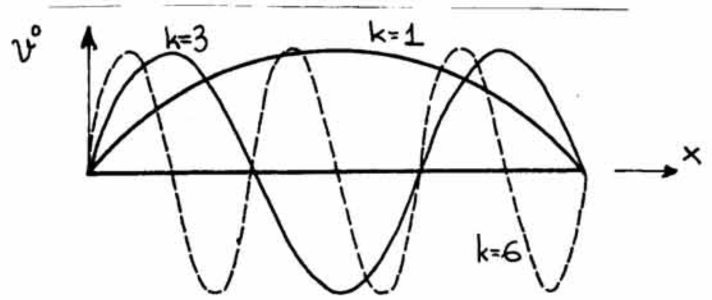
Προφανής λύση είναι ή $\quad u_j \equiv 0 \quad , \quad 0 \le j \le M.$

- Παρόλο που ένα τέτοιο πρόβλημα θα λύνονταν εύκολα με τη χρήση αλγόριθμου Thomas γιά επίλυση τριδιαγώνιου μητρώου, αξίζει νά προσπαθήσουμε νά τό λύσουμε επαναληπτικά.

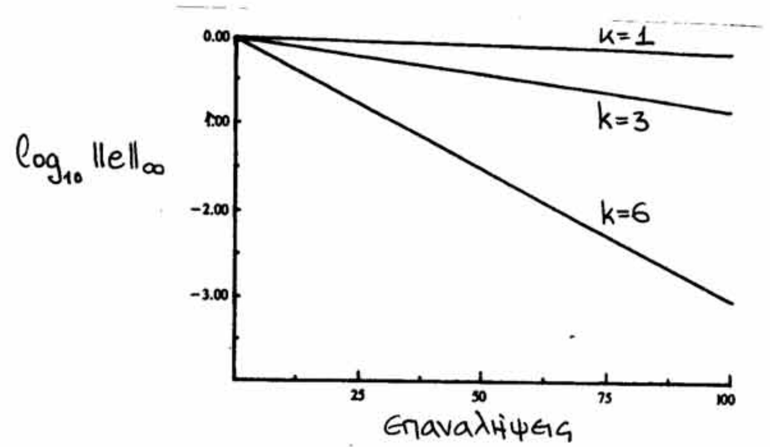
- Υιοθετώντας επαναληπτική επίλυση, σημασία έχει ή αρχική λύση. Κατά τό πρότυπο της κυματικής (μετάδοση κύματος) επιλέγω αρχικοποίηση

$$\boxed{v_j^0 = \sin\left(\frac{jk\pi}{M}\right) \quad , \quad 0 \le j \le M}$$

όπου k = κυματικός αριθμός (wavenumber). Ανάλογα μέ τήν τιμή του k που θά διαλέξουμε ή αρχικοποίηση θά "μοιάζει" μέ (γιά $k=1,3,6$):



- Με 64 κόμβους ($M=63$, $0 \le j \le 63$) ή σύγκλιση πού δίνει ή μέθοδος Jacobi μέ (υπο)χαλάρωση, $\omega = 2/3$, παρουσιάζεται παρακάτω:



, e = σφάλμα

Παρατηρείστε τή γραμμική σύγκλιση του $\log_{10}$ του σφάλματος e (δηλ. της $\|e\|_\infty$ νόρμας του σφάλματος) αλλά και το διαφορετικό ρυθμό σύγκλισης των διαφορετικών αρχικοποιήσεων (γρήγορη σύγκλιση αν $k=6$, αργή αν $k=1$). Καλυτερεύει ο ρυθμός σύγκλισης μεγαλώνοντας το k της αρχικοποίησης.

• Διερεύνηση της γραμμικής σύγκλισης του $\log_{10}\|e\|_\infty$:

Αν η σύγκλιση είναι γραμμική, ισχύουν :

$$\left.\begin{aligned} \log_{10}\|e^n\|_\infty &= \alpha n + \beta \\ \log_{10}\|e^{n+1}\|_\infty &= \alpha (n+1) + \beta \end{aligned}\right\} \quad \alpha, \beta = \text{συντελεστές}$$

$$\Rightarrow \log_{10}\|e^{n+1}\|_\infty - \log_{10}\|e^n\|_\infty = \alpha \Rightarrow \log_{10}\frac{\|e^{n+1}\|_\infty}{\|e^n\|_\infty} = \alpha \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\|e^{n+1}\|_\infty}{\|e^n\|_\infty} = 10^{\alpha} = C_k$$

(C_k = ο δείκτης k δείχνει απλά την εξάρτηση από την αρχικοποίηση)

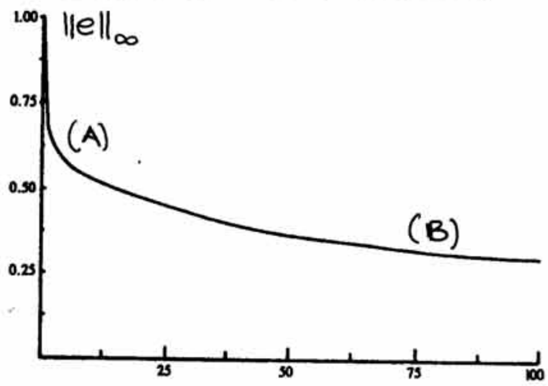
Αναδρομικά :
$$\boxed{\|e^n\|_\infty = (C_k)^n \|e^0\|_\infty}$$

• Η παραπάνω σχέση παραπέμπει στη γνωστή $e^n = [G]^n e^0$!

• Ας υιοθετήσουμε τώρα μια πιό σύνθετη αρχικοποίηση:

$$\boxed{v_j^0 = \frac{1}{3}\left[\underbrace{\sin\left(\frac{j\pi}{M}\right)}_{\substack{\text{ορος} \\ \text{ΧΑΜΗΛΗΣ} \\ \text{ΣΥΧΝΟΤΗΤΑΣ} \\ (k=1)}} + \underbrace{\sin\left(\frac{6j\pi}{M}\right)}_{\substack{\text{ορος} \\ \text{ΜΕΣΗΣ} \\ \text{ΣΥΧΝΟΤΗΤΑΣ} \\ (k=6)}} + \underbrace{\sin\left(\frac{32j\pi}{M}\right)}_{\substack{\text{ορος} \\ \text{ΥΨΗΛΗΣ} \\ \text{ΣΥΧΝΟΤΗΤΑΣ} \\ (k=32)}}\right]}$$

Ο ρυθμός σύγκλισης θα είναι ο :



επαναλήψεις

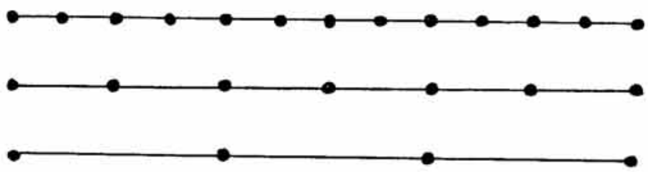
Αναγνωρίζουμε δυο περιοχές στην καμπύλη σύγκλισης:

Περιοχή (A), στίς αρχικές επαναλήψεις, γρήγορη "εξαφάνιση" του σφάλματος που οφείλεται στους όρους ΥΨΗΛΗΣ ΣΥΧΝΟΤΗΤΑΣ της αρχικοποίησης.

Περιοχή (B), στίς επόμενες επαναλήψεις, αργή "εξαφάνιση" του σφάλματος που οφείλεται στους όρους ΥΨΗΛΗΣ ΣΥΧΝΟΤΗΤΑΣ της αρχικοποίησης.

- Συμπέρασμα: Ενώ τά υψίσυχνα σφάλματα "εξαφανίζονται" εύκολα κατά τήν επαναληπτική τεχνική, τά χαμηλόσυχνα σφάλματα παραμένουν και "εξαφανίζονται" δυσκολότερα.

- Η ιδέα στήν οποία βασίζεται ή τεχνική του πολυπλέγματος (multigrid) είναι ή χρήση διαφορετικών διακριτοποιήσεων (= πλεγμάτων). Πχ. αντί νά λύνουμε "πάντα" στό πλέγμα (α) με $\Delta x=1$, περιοδική ή επαναληπτική επίλυση



(α) $\Delta x = 1$

(β) $\Delta x = 2$

(γ) $\Delta x = 4$

πραγματοποιείται στά πλέγματα (β)-διπλάσιο Δx και (γ) τετραπλάσιο Δx. Ο λόγος που εισάγονται τά επόμενα πλέγματα, (β) και (γ), είναι ότι ένα χαμηλόσυχνο σφάλμα στό πλέγμα (α) καταλήγει νά είναι μέσης ή υψηλής συχνότητας από τή σκοπιά των αραιότερων πλεγμάτων!

- Τονίζεται ξανά ότι σκοπός ήταν να δοθεί ή ιδέα-αφετηρία για τήν ανάπτυξη τεχνικών πολυπλέγματος. Σέ καμία περίπτωση το κείμενο αυτό δέν διαπραγματεύεται τήν ίδια τή μέθοδο.