Теоретические основы технологий компьютерного моделирования
Лекция 12

Е.А. Яревский

Санкт-Петербургский Государственный Университет

24 мая 2016

Заполненные и разреженные матрицы

МКЭ приводит к системе базисных функций с малым перекрытием.

Большинство матричных элементов в глобальных матрицах равны нулю.

Такие матрицы называют **разреженными**.

Хранение и операции: для числа неизвестных $N = 10^5$ (весьма умеренное значение в современных приложениях!):

число операций для обращения матрицы (без учета разреженности) $\sim 10^{15}$ (280 часов на 1Гфлопс).

минимальный объем памяти – около (80 Гбайт).

Необходимы более экономичные подходы!

Разреженный строчный формат

Для некоторых специальных типов матриц существуют простые способы экономного хранения.
(Ленточные матрицы – хранение по диагоналям.)
Для произвольной разреженной матрицы нужен универсальный подход.
Распространенный метод хранения:
разреженный строчный формат, РСФ.
(the compressed sparse row (CSR) data format).

Разреженный строчный формат

Размерность матрицы S равна N, количество ее ненулевых элементов равно NNZ.

РСФ представление матрицы S состоит из трех массивов:

- Массив A длины NNZ. Вещественный массив, содержащий все ненулевые элементы матрицы по порядку слева направо, начиная с первой строки до последней.
- Массив IA длины N+1. Целый массив, такой что $IA(1) = 1$, $IA(k+1) = IA(k) + nnz_k$, где nnz_k – число ненулевых элементов в k-ой строке.
- Массив JA длины NNZ. Это целый массив, содержащий номера столбцов для каждого элемента массива A.

В зависимости от того, как записываются номера столбцов в массиве JA, по порядку или нет, различают **упорядоченное** и **неупорядоченное** представления, соответственно.
Неупорядоченные представления нужны для алгоритмического удобства.
Результат матричных операций – неупорядоченное представление, его упорядочение требует дополнительного времени, но большинство алгоритмов не требует упорядоченности представления.
Иногда для представления разреженных матриц используется **разреженный столбцовый формат (РСтФ)**, который конструируется аналогично РСФ.

Умножение матрицы в формате РСФ на вектор

$$y = A \cdot x$$

Умножение матрицы в стандартном формате:

$$y(i) = \sum_{j=1}^{N} A(i,j)\; x(j)$$

Умножение матрицы в формате РСФ на вектор

$$y = A \cdot x$$

Умножение матрицы в стандартном формате:

$$y(i) = \sum_{j=1}^{N} A(i,j)\; x(j)$$

Умножение матрицы в РСФ

$$y(i) = \sum_{j=IA[i]}^{IA[i+1]-1} A[j]\; x(JA[j])$$

Число обусловленности матрицы

Точность решения системы линейных уравнений и скорость сходимости итерационных методов решения зависит от числа обусловленности матрицы.

Определение: Число обусловленности. *Пусть задана обратимая матрица S размерности N. Тогда*

$$\kappa(S) = ||S||\,||S^{-1}||,$$

где $||.||$ – некоторая матричная норма, называется числом обусловленности матрицы S по отношению к норме $||.||$.

Число обусловленности матрицы

Для вычисления числа обусловленности можно использовать, например, спектральную норму:

$$||S||_* = \max_{x \neq 0} \frac{||Sx||}{||x||},$$

где $||Sx||$ – Эвклидова норма вектора.
Спектральное число обусловленности,

$$\kappa^*(S) = ||S||_* \, ||S^{-1}||_* = \frac{\max_{\lambda \in \sigma(S)} |\lambda|}{\min_{\lambda \in \sigma(S)} |\lambda|},$$

обладает следующим минимальным свойством:

$$1 \leq \kappa^*(S) \leq \kappa(S),$$

где $\kappa(S)$ – число обусловленности для любой другой нормы.

Число обусловленности матрицы

Следующие параметры МКЭ существенно влияют на число обусловленности глобальной матрицы:

- дискретизованный дифференциальный оператор,
- качество построенной триангуляции области,
- выбор базисных функций.

Прямые и итерационные методы решения СЛАУ

Решаем систему

$$Ax = b.$$

1. Прямые методы:

$$x = A^{-1}b.$$

Достоинства:

– гарантированный результат.

– известное время вычислений, независимое от значений элементов матрицы.

Недостатки:

– большие требования к памяти и времени.

2. Итерационные методы:

$$x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)} \text{ .... такие что } \lim_{i\to\infty} x^{(i)} = x.$$

Достоинства:

– малые требования к памяти.

Недостатки:

– возможные проблемы со сходимостью (медленная или ее отсутствие).

– зависимость вычислений от значений матрицы и правой части.

Прямые методы для заполненных матриц

Возможно, необходимы перестановки.

Метод Гаусса, LU-разложение:

$$A = LU, \tag{1}$$

где

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ L_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ L_{n1} & L_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \cdots & U_{1n} \\ 0 & U_{22} & \cdots & U_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & U_{nn} \end{pmatrix}$$

Решение уравнения (1) – две подстановки:

$$Ly = b, \quad Ux = y.$$

Прямые методы для заполненных матриц

$$y_1 = b_1, \quad y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} L_{ij} y_j, \quad i = 2 \dots n,$$

$$x_n = \frac{y_n}{U_{nn}}, \; x_i = \frac{1}{U_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} U_{ij} x_j \right), \; i = n-2 \dots 1.$$

Кол-во операций для факторизации $\sim N^3$.
Кол-во операций для решения СЛАУ $\sim N^2$.

Прямые методы для заполненных матриц

$$y_1 = b_1, \quad y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} L_{ij} y_j, \quad i = 2 \dots n,$$

$$x_n = \frac{y_n}{U_{nn}}, \; x_i = \frac{1}{U_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} U_{ij} x_j \right), \; i = n - 2 \dots 1.$$

Кол-во операций для факторизации $\sim N^3$.
Кол-во операций для решения СЛАУ $\sim N^2$.
$LDL^\top$-разложение (тройная факторизация):

$$A = LDU$$

если A-симметричная, то

$$A = LDL^\top$$

Прямые методы для разреженных матриц

Перестановка строк/столбцов – матрицы перестановок:

$$PAQ\ Q^\top x = Py.$$

Простейший случай: **ленточный метод**

Ленточная матрица: ширина ленты

$$\beta(A) = \max\{|i-j| : a_{ij} \neq 0\}.$$

Лента:

$$Band(A) = \{\{i,j\} : 0 \leq |i-j| \leq \beta(A)\}.$$

Хранение: по столбцам в прямоугольном массиве с размерами: $N \times (2\beta(A)+1)$.

Число операций для разложения матрицы: $\sim \beta^2 N$.

Число операций для решения системы: $\sim \beta N$.

Прямые методы для разреженных матриц

Профильный метод:

Определим

$$f_i = \min\{j : a_{ij} \neq 0\}, \quad \beta_i(A) = i - f_i(A).$$

Оболочка A:

$$Env(A) = \{\{i,j\} : 0 < i - j \leq \beta_i(A)\}.$$

Профиль A:

$$|Env(A)| = \sum_{i=1}^{N} \beta_i(A).$$

Число операций для разложения матрицы: $\sim \sum_{i=1}^{N} \beta_i^2(A)$.
Число операций для решения системы: $\sim |Env(A)|$.
Нужен алгоритм упорядочения, уменьшающий профиль. (методы теории графов).

Итерационные методы решения систем

Выбираем x_0 и строим

$$x_{k+1} = x_k + H_k(b - Ax_k). \tag{2}$$

Различные матрицы H_k – различные итерационные процессы.
Точное решение - неподвижная точка (2).
Приближение к решению оценивают по невязке:

$$r_k = b - Ax_k.$$

Стационарные процессы: $H_k = H$ не зависит от k.
Эквивалентен решению системы

$$HAx = Hb,$$

симметричный вариант:

$$HAH^\top y = Hb, \quad H^\top y = x.$$

Итерационные методы решения систем

Сходимость метода: необходимо и достаточно

$$T_k = (I - H_k A)(I - H_{k-1} A) \dots (I - H_1 A) \to 0 \quad \text{при} \quad k \to \infty.$$

В стационарном случае

$$||I - HA|| < 1.$$

Для стационарного случая:

$$||B|| = \max_i |\lambda_i(B)|.$$

Итерационные методы решения систем

Если A – положительно определена, пусть $||A|| = \beta$,

$$H = \tau I,$$

$$0 < \tau < \min_n \frac{2}{\lambda_n} = \frac{2}{\beta}.$$

$$x_{k+1} = (I - \tau A)x_k + \tau b = Bx_k + g.$$

Собственные значения B - в (-1,1) - процесс сходится.

$$\tau_{opt} = 2/(\alpha + \beta), \quad \alpha = \min_n \lambda_n.$$

Итерационные методы решения систем

Скорость сходимости

$$q_{opt} = \frac{\beta - \alpha}{\beta + \alpha} = \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1},$$

где $\kappa = \kappa^*(A) = \beta/\alpha$ – число обусловленности.
Число итераций N_{iter}

$$N_{iter} \sim \frac{1}{-\ln q}.$$

При $\kappa \gg 1$, $N_{iter} \sim \kappa$.
Для задачи Дирихле (Неймана): $\beta \sim N_{DOF}^2$.

Итерационные алгоритмы решения систем

- Метод Якоби
- метод Гаусса-Зейделя
- метод последовательной верхней релаксации (SOR)
- градиентные методы: метод наискорейшего спуска, метод сопряжённых градиентов
- мультисеточные методы (MG, AMG, ...)
- ...

Чебышевский итерационный процесс

$$H_k = \tau_k I.$$

Задача – оптимальный выбор τ_k.
Рассматриваем циклический процесс длины s ($\tau_{k+s} = \tau_k$), тогда

$$\tau_k = 1/\lambda_{\sigma_k}, \quad k = 1, ..., s,$$

где

$$\lambda_i = (1/2)[(\beta + \alpha) - (\beta - \alpha)x_i], \quad k = 1, ..., s,$$

x_i – корни полинома Чебышева

$$T_s(x) = \cos(s \arccos(x)),$$

α, β – границы спектра A, σ_k – перестановка порядка s.
Оптимальный выбор:

$$s \sim \sqrt{\kappa}, \quad \text{тогда} \quad N_{iter} \sim \sqrt{\kappa}.$$