

Анализ эффективности методов решения систем линейных алгебраических уравнений, реализованных в пакете OpenFOAM

Марчевский И. К., Пузикова В. В.



Итерационные методы решения СЛАУ

Пусть необходимо решить СЛАУ

$$Ax = b, \quad x, b \in \mathbb{R}^{N_d}, \quad A \in M(\mathbb{R})_{N_d \times N_d}, \quad \det A \neq 0 \quad (1)$$

- Итерационные методы, основанные на расщеплении.

$$(M - N)x = b \Rightarrow Mx = Nx + b \Rightarrow Mx^{n+1} = Nx^n + b$$

- Итерационные методы вариационного типа.

$$Ax = b \Rightarrow \|Ax - b\| \rightarrow \min$$

- Итерационные методы проекционного типа.

$$Ax = b \Rightarrow (Ax, m) = (b, m) \quad (\forall m \in \mathcal{L})$$

OpenFOAM: методы решения СЛАУ

- релаксационные методы: GS, DIC / DILU, GS + DIC / GS + DILU
- проекционные методы: CG / BiCG, BiCGStab, GMRES
- GAMG
- диагональный решатель (для диагональных систем)

Итерационные методы, основанные на расщеплении

Расщепление — представление матрицы A в виде $M - N = A$, причём матрица M должна быть невырожденной и легко обратимой.

$$Mx^{n+1} = Nx^n + b, \quad M - N = A, \quad (2)$$

x^n — n -е итерационное приближение к искомому решению x ,

$$r^n = b - Ax^n - \text{вектор невязки},$$

$$z^n = x - x^n - \text{итерационная ошибка},$$

$$p^n = x^{n+1} - x^n - \text{вектор коррекции}.$$

Легко заметить, что выполняются следующие соотношения:

$$r^n = b - Ax^n = Ax - Ax^n = A(x - x^n) = Az^n,$$

$$r^n = b - Ax^n = M(x^{n+1} - x^n) = Mp^n,$$

$$z^{n+1} = M^{-1}Nz^n.$$

Сходимость итерационных методов

Поскольку $z^{n+1} = M^{-1}Nz^n$, скорость сходимости определяется нормой¹ матрицы $M^{-1}N$, при этом

$$\|M^{-1}N\| \leq \|M^{-1}\| \cdot \|N\|.$$

Один из способов выбора: $M \approx A$, тогда $N = M - A$,

$$\|M\| \approx \|A\|, \quad \|M^{-1}\| \approx \|A^{-1}\|, \quad \|N\| \ll \|A\|.$$

Чем точнее M приближает A , тем меньше $\|N\|$
 \Rightarrow тем выше скорость сходимости.



„Оптимальный“ численный метод строится для каждой задачи по-своему (т.е. метод подстраивается под задачу).

¹Норму матрицы можно оценить как $\|K\| \leq \max_j |\lambda_j^K|$, где λ_j^K — j -е собственное число матрицы K .

Предобуславливание

$$Ax = b \Leftrightarrow M^{-1}Ax = M^{-1}b, \quad M \in M(\mathbb{R})_{N_d \times N_d}, \quad \det M \neq 0.$$

Предобуславливание — процесс перехода от исходной системы к предобусловленной с целью улучшения характеристик матрицы для ускорения сходимости к решению.

Идея предобуславливания: модификация исходной задачи с целью её «оптимального» решения фиксированным численным методом.

Пусть $A = M - N$, $M \approx A$, тогда, решая систему $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ методом простой итерации, получаем:

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \Rightarrow x^{n+1} = (I - M^{-1}A)x^n + M^{-1}b \Leftrightarrow x^{n+1} = M^{-1}Nx^n + M^{-1}b.$$

Мы получили тот же самый «оптимальный» итерационный метод.

\Rightarrow реализация любого итерационного метода, основанного на расщеплении, эквивалентна применению метода простой итерации к решению предобусловленной системы.



Вместо метода простой итерации может применяться любой другой итерационный метод.

Пример²

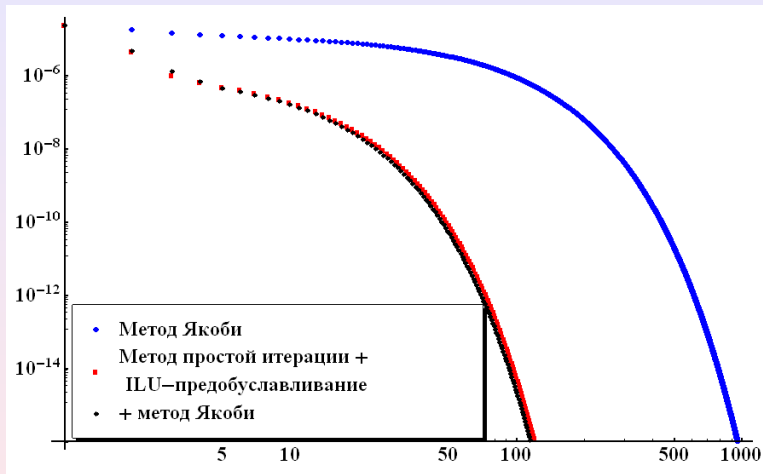


Рис. 1. Убывание норм невязок

²Решение разностного аналога уравнения Пуассона, $N_d = 16$, $\varepsilon = 10^{-16}$.

Метод BiCGStab

1931 г.: Алексей Николаевич Крылов

- ✓ Предложил метод проецирования на подпространства Крылова^a
- ✓ Впервые осветил вопрос эффективности вычислений и подсчитал вычислительные затраты как количество «отдельных операций перемножения»

c 1931 г.: Развитие методов крыловского типа (методы Арнольди, Ланцоша, CG, GMRES, BiCG, QMR, ...)

1992 г.: Хенк ван дер Ворст — BiCGStab^b



Наиболее быстрая и гладкая^c сходимость из всех методов крыловского типа



Не требует симметричности и положительной определённости матрицы СЛАУ

^aКрылов А.Н. О численном решении уравнения, которым в технических вопросах определяются частоты малых колебаний материальных систем. — 1931.

^bVan der Vorst H. A. Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for solution of non-symmetric linear systems// SIAM J. Sci. Stat. Comp. — 1992. — № 2 (13). — P. 631–644.

Данная статья стала самой цитируемой статьёй по математике в 1990-е гг.

^cПодразумевается отсутствие сильных колебаний нормы невязки.



Рис. 2. А. Н. Крылов



Рис. 3.
Хенк ван дер Ворст

Алгоритм BiCGStab

$r^0 = b - Ax^0$, $p^0 = r^0$, $\forall r_*^0 : (r_*^0, r^0) \neq 0$
for $n = 0, 1, \dots$, until $(\|r^n\|_2 \geq \varepsilon)$, do

$$\alpha_n = \frac{(r_*^0, r^n)}{(Ap^n, r_*^0)}, \quad s^n = r^n - \alpha_n Ap^n$$

$$\omega_n = \frac{(As^n, s^n)}{(As^n, As^n)}$$

(3)

$$x^{n+1} = x^n + \alpha_n p^n + \omega_n s^n$$

$$r^{n+1} = s^n - \omega_n As^n$$

$$\beta_n = \frac{\alpha_n (r^{n+1}, r_*^0)}{\omega_n (r^n, r_*^0)}$$

$$p^{n+1} = r^{n+1} + \beta_n (p^n - \omega_n Ap^n).$$

Предобуславливание метода BiCGStab

Алгоритм BiCGStab с предобуславливанием

$$r^0 = b - Ax^0, p^0 = r^0, \forall r_*^0: (r_*^0, r^0) \neq 0$$

for $n = 0, 1, \dots$, until $(\|r^n\|_2 \geq \varepsilon)$, do

$$\text{solve}(My^n = p^n), \alpha_n = \frac{(r_*^0, r^n)}{(Ay^n, r_*^0)}, s^n = r^n - \alpha_n Ay^n,$$

$$\text{solve}(Mz^n = s^n), \omega_n = \frac{(Az^n, s^n)}{(Az^n, Az^n)}$$

(4)

$$x^{n+1} = x^n + \alpha_n y^n + \omega_n z^n$$

$$r^{n+1} = s^n - \omega_n Az^n$$

$$\beta_n = \frac{\alpha_n (r^{n+1}, r_*^0)}{\omega_n (r^n, r_*^0)}$$

$$p^{n+1} = r^{n+1} + \beta_n (p^n - \omega_n Ay^n).$$

СЛАУ «Тест 1»³

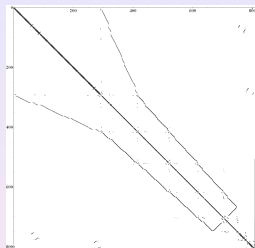


Рис. 4. Портрет матрицы СЛАУ

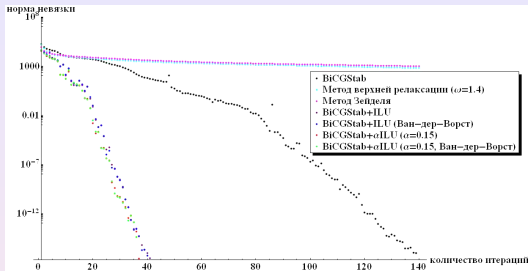
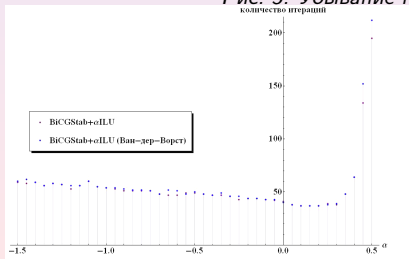


Рис. 5. Убывание норм невязок



³ Точность $\epsilon = 10^{-16}$ выбрана исключительно в учебных целях; $N_d = 809$.

СЛАУ «Тест 2»

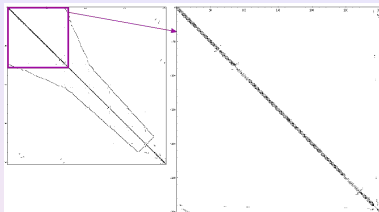


Рис. 6. Портрет матрицы СЛАУ

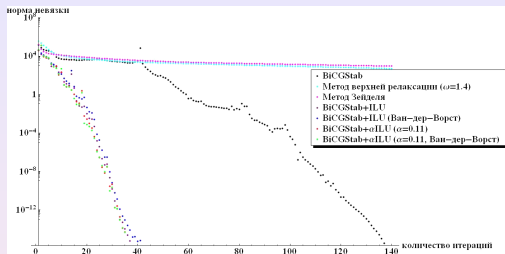
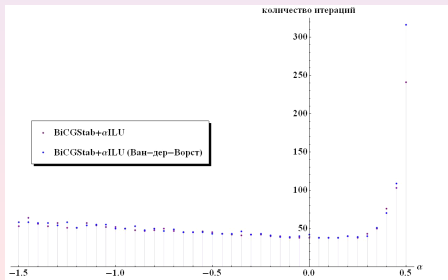


Рис. 7. Убывание норм невязок



СЛАУ «Тест 3»

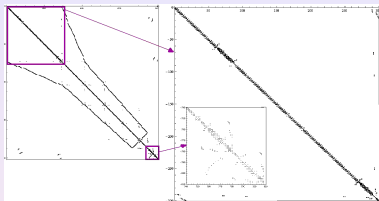


Рис. 8. Портрет матрицы СЛАУ

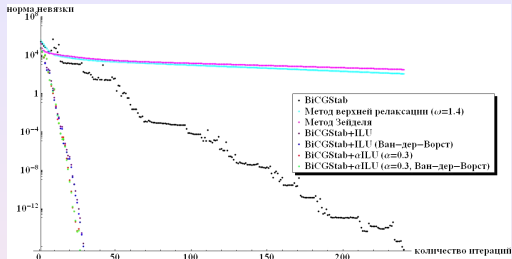
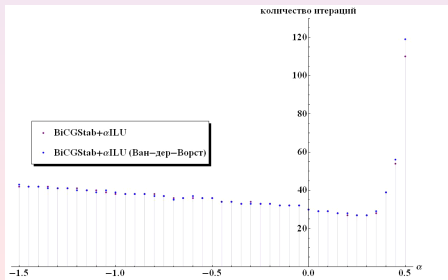


Рис. 9. Убывание норм невязок



СЛАУ «Тест 4»

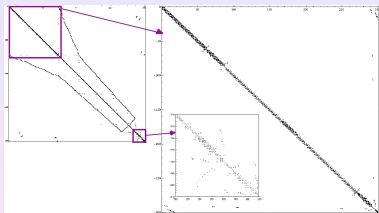


Рис. 10. Портрет матрицы СЛАУ

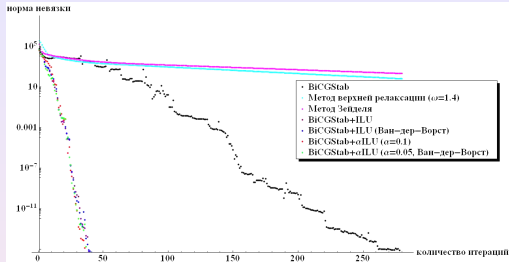
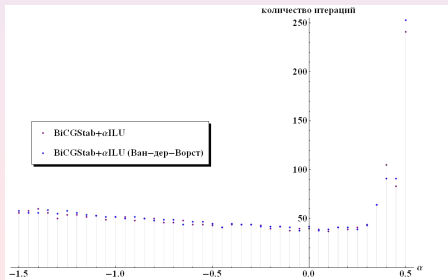


Рис. 11. Убывание норм невязок



Сравнение методов

Метод	Количество итераций			
	«Тест 1»	«Тест 2»	«Тест 3»	«Тест 4»
Gauss-Seidel	3313	3069	2987	3015
SOR ($w=1.4$)	2384	2241	2168	2219
BiCGStab	139	138	240	283
BiCGStab+ILU	41	38	30	40
BiCGStab+ILU (v. d. V.)	40	42	30	42
BiCGStab+ α ILU	37 ($\alpha=0.15$)	36 ($\alpha=0.11$)	27 ($\alpha=0.3$)	37 ($\alpha=0.1$)
BiCGStab+ α ILU (v. d. V.)	37 ($\alpha=0.15$)	36 ($\alpha=0.11$)	27 ($\alpha=0.3$)	38 ($\alpha=0.05$)

Скорость сходимости BiCGStab

- \approx в 20 раз выше скорости сходимости Gauss-Seidel и SOR
- \approx в 3.5 раз ниже скорости сходимости его предобусловленных вариантов

Метод	Количество умножений				
	в 1 итерацию	«Тест 1»	«Тест 2»	«Тест 3»	«Тест 4»
Gauss-Seidel	M	17 754 367	16 152 147	14 388 379	15 038 820
SOR ($w=1.4$)	M	12 775 856	11 794 383	10 443 256	11 068 372
BiCGStab	$2M + 11N$	2 726 763	2 680 650	4 447 920	5 341 625
BiCGStab+ILU	$4M + 9N$	1 177 397	1 076 654	796 470	1 089 320
BiCGStab+ILU (v. d. V.)	$5M + 7N$	1 298 320	1 343 076	892 440	1 285 326
BiCGStab+ α ILU	$4M + 9N$	1 062 529	1 019 988	716 823	1 007 621
BiCGStab+ α ILU (v. d. V.)	$5M + 7N$	1 200 946	1 151 208	803 196	1 162 914

При этом умножений выполняется в среднем

- в 3.5 раз меньше по сравнению с Gauss-Seidel и SOR
- в 3.5 раз больше по сравнению с предобусловленными вариантами

Анализ итерационной ошибки

$$z^{n+1} = M^{-1}Nz^n, \quad M^{-1}N\psi^k = \lambda_k\psi^k, \quad k = \overline{1, N_d}, \Rightarrow z^0 = \sum_{p=1}^{N_d} a_p\psi^p, \dots,^4$$
$$z^n = \sum_{p=1}^{N_d} a_p(\lambda_p)^n\psi^p = \sum_{k=1}^{N_d} b_k \left(\sum_{p=1}^{N_d} \lambda_p |\dot{\Psi}_k^p| \right)^n \Omega^k = \sum_{k=1}^{N_d} b_k (g_k)^n \Omega^k.$$

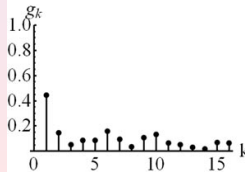
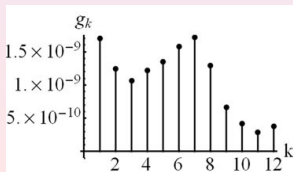
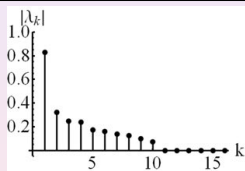
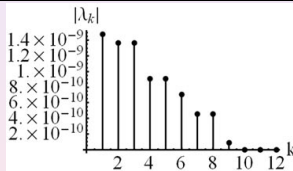
Характеристики итерационного метода для рассматриваемой задачи:

- g_k — коэффициент усиления гармоника Ω^k , $\Omega_p^k = \cos \frac{\pi k(p-1)}{N_d+1}$, $p = \overline{1, N_d}$
- $k = \overline{1, [0.5N_d]}$ — номера низкочастотных (длинноволновых) гармоник, $k = [0.5N_d] + 1, N_d$ — высокочастотных (коротковолновых)
- $\rho_{sm} = \max_k g_k$, $k = \overline{[0.5N_d] + 1, N_d}$ — коэффициент сглаживания
- $\beta = \frac{\max_{k=1, [0.5N_d]} g_k}{\rho_{sm}}$ — показатель «затратности» итерационного метода для рассматриваемой задачи
- $\rho(M^{-1}N) = \max_k |\lambda_k|$, $k = \overline{1, N_d}$ — спектральный радиус матрицы перехода от итерации к итерации — показатель скорости сходимости метода

⁴ λ_k — собственные значения, ψ^k — собственные векторы матрицы $M^{-1}N$, $\dot{\Psi}^k$ — ДПФ вектора ψ^k , a_p и b_k — некоторые константы. Полагаем, что векторы ψ^k образуют полную систему, т. е. базис в \mathbb{R}^{N_d} .

BiCGStab с ILU-предобуславливанием

Разностный аналог уравнения	Гельмгольца ($(\Delta + k^2)v_y = f_1$)			Пуассона ($\Delta p = f_2$)		
	N_d	12	56	240	16	64
M_A	1.00	1.00	1.00	85.88	589.89	3292.74
$\rho(M^{-1}N)$	$1.5 \cdot 10^{-9}$	$2.8 \cdot 10^{-8}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$	0.82	0.97	0.99
ρ_{sm}	$1.7 \cdot 10^{-9}$	$7.3 \cdot 10^{-8}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	0.13	0.24	0.30
β	1.01	1.14	1.09	3.34	3.25	3.32



Идея многосеточного метода

Необходим метод, который достаточно быстро устранил компоненты ошибки, связанные с низкочастотными гармониками.

Однако, половина этих гармоник отображается в высокочастотные гармоники на более грубой сетке.

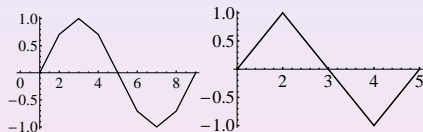


Рис. 12. Гармоника Ω^k , $k = 2$ на подробной ($N_d = 8$, слева) и грубой сетках ($N_d = 4$, справа)

Многосеточная стратегия

- Шаг 1.** Сглаживающие итерации \Rightarrow устранение компонент ошибки, связанных с высокочастотными гармониками
- Шаг 2.** Переход на более грубую сетку \Rightarrow половина низкочастотных гармоник перейдёт в высокочастотные
- Шаг 3.** Если требуемая точность не достигнута, перейти к шагу 1

Многосеточное предобуславливание

Алгоритм BiCGStab с многосеточным предобуславливанием

$$r^0 = b - Ax^0, p^0 = r^0, \forall r_*^0 : (r_*^0, r^0) \neq 0$$

for $n = 0, 1, \dots$, until $(\|r^n\|_2 \geq \varepsilon)$, do

$$\text{MG}(Ay^n = p^n), \alpha_n = \frac{(r_*^0, r^n)}{(Ay^n, r_*^0)}, s^n = r^n - \alpha_n Ay^n,$$

$$\text{MG}(Az^n = s^n), \omega_n = \frac{(Az^n, s^n)}{(Az^n, Az^n)} \quad (5)$$

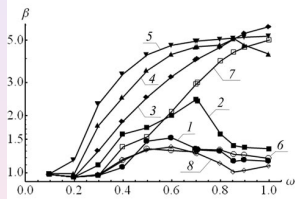
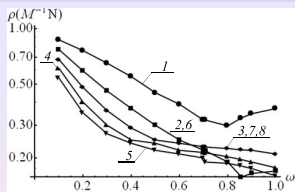
$$x^{n+1} = x^n + \alpha_n y^n + \omega_n z^n$$

$$r^{n+1} = s^n - \omega_n Az^n$$

$$\beta_n = \frac{\alpha_n (r^{n+1}, r_*^0)}{\omega_n (r^n, r_*^0)}$$

$$p^{n+1} = r^{n+1} + \beta_n (p^n - \omega_n Ay^n).$$

BiCGStab с многосеточным предобуславливанием⁶



Уравнение Пуассона, $N_d = 16$:

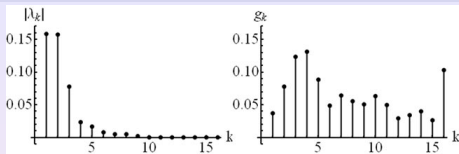
1 — $n_{pre} = 0, n_{post} = 1$; 2 — $n_{pre} = 0, n_{post} = 2$; 3 — $n_{pre} = 0, n_{post} = 3$; 4 — $n_{pre} = 0, n_{post} = 4$;
 5 — $n_{pre} = 0, n_{post} = 5$; 6 — $n_{pre} = 1, n_{post} = 1$; 7 — $n_{pre} = 1, n_{post} = 2$; 8 — $n_{pre} = 2, n_{post} = 1$

⁵

Van Kan J., Vuik C., Wesseling P. Fast pressure calculation for 2D and 3D time dependent incompressible flow// Numer. Linear Algebra Appl. — 2000. — № 7. — P. 429–447.

⁶

Пузикова В. В. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом BiCGStab с предобуславливанием// Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. — 2011. — Спец. выпуск «Прикладная математика». — С. 124–133.

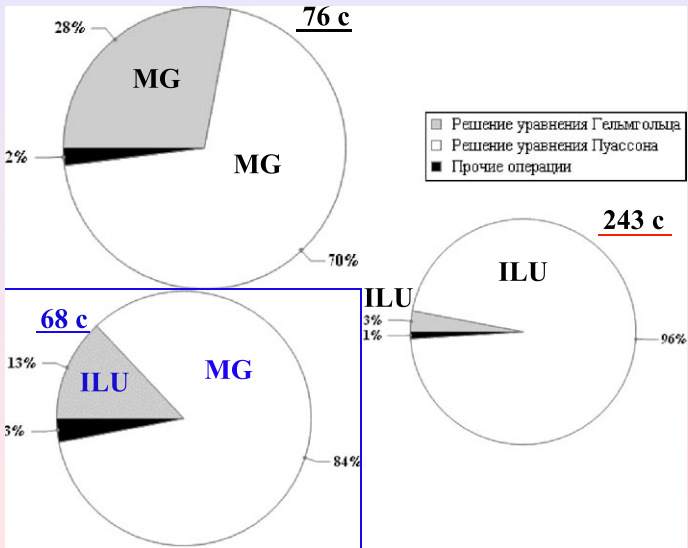


$\omega = 0.8559, n_{pre} = 1, n_{post} = 1$

$N_d = 17760, \varepsilon = 10^{-6}$

Предобуславливатель	Число итераций
ILU	158
MG ($\omega = 0.1, n_{pre} = 0, n_{post} = 2$)	23
MG ($\omega = 0.7085, n_{pre} = 0, n_{post} = 2$)	11
MG ($\omega = 0.8559, n_{pre} = 1, n_{post} = 1$)	9

Решение тестовой задачи о каверне методом BiCGStab с разными предобуславливателями



Заключение

- Определение коэффициентов усиления гармоник позволяет получить некоторые характеристики итерационного метода, по которым можно судить о его эффективности при решении задачи.
- Для определения коэффициентов усиления гармоник предлагается использовать дискретное преобразование Фурье.
- Анализ спектрального радиуса и отношения наибольшего коэффициента усиления низкочастотной гармоники к наибольшему коэффициенту усиления высокочастотной гармоники (показателя «затратности») позволяет определить оптимальные параметры многосеточного предобуславливателя.
- Показано, что показатель «затратности» определяется видом дискретизируемого оператора и мало зависит от N_d .