

1. Dekompozicija domene

1.1. Osnovno o dekompoziciji domene

Dekompozicija domene je sredstvo za rješavanje velikih šupljih sustava linearnih jednadžbi i relativno je nova tehnika. Uglavnom, u realnom svijetu problemi su daleko od idealiziranih, matematičkih. Naime, mogu biti ili vrlo velikih dimenzija, pa ne stanu cijeli u memoriju računala ili mogu nastati diskretizacijom nekog operatora na nepravilnom području.

Najbrže metode o kojima smo dosad raspravljali, a to su FFT i multigrad najbolje rade na pravilnim ‘problemima’, kao što je, recimo, Poissonova jednadžba na pravokutniku koja je diskretizirana ekvidistantnom mrežom. Osim toga, na mjestima gdje očekujemo da rješenje nije dovoljno glatko, treba staviti mnogo više čvorova mreže nego tamo gdje očekujemo glatko rješenje.

Ideja dekompozicije domene je particioniranje problema u manje, uglavnom pravilne, komadiće, a zatim lijepljenje takvih djelomičnih rješenja u rješenje cijelog problema. Naravno, postoji mnogo načina kako jedan veliki, nepravilni problem možemo podijeliti u komadiće. Jednako tako, postoji mnogo načina kako treba riješiti te ‘komadiće’ i kako nakon toga treba pospajati rješenje. Dekompozicija domene dat će nam samo razumne načine kako to treba napraviti, a na korisniku je da od mnogo mogućnosti izabere najbolju za konkretni problem. Za neke probleme, kao što je to Poissonova jednadžba, teorija daje i ‘optimalno rješenje’.

Općenito problem dekompozicije domene možemo podijeliti na dva dijela: na nepreklapajuće metode i na preklapajuće metode.

1.2. Nepreklapajuće metode

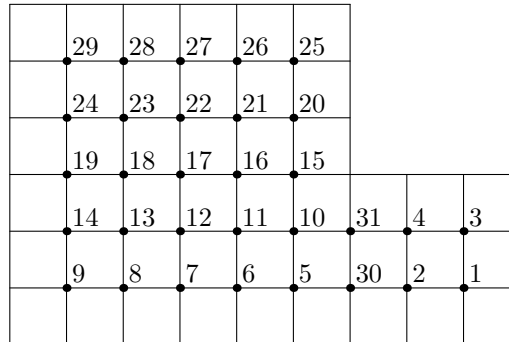
Ta metoda često se zove i metoda podstruktura ili metoda Schurovih komplementa. Metoda se desetljećima koristi kod strukturne analize konstrukcija i to da se prevelik problem stavi u memoriju.

Jednostavnosti radi, metodu ćemo ilustrirati za Poissonovu jednadžbu s Dirichletovim rubnim uvjetima (zna se funkcija na rubu), ali ne na pravokutniku, nego na nepravilnom poligonu oblika slova L. Diskretizaciju problema provest ćemo na uobičajeni način, korištenjem funkcijskih vrijednosti u određenoj točki i u njezina četiri susjeda (tj. koristit ćemo simetrične razlike za svaku aproksimaciju parcijalne derivacije). Tako ćemo, na primjer, drugu parcijalnu derivaciju po x aproksimirati s

$$\frac{\partial^2 u(ih, jh)}{\partial x^2} \sim \frac{U(i-1, j) - 2U(i, j) + U(i+1, j)}{h^2}.$$

Pravilnim numeriranjem čvorova na pravilnom području dobit ćemo tipični oblik matrice sustava (vidjeti recimo kod iterativnih metoda za linearne sustave).

Područje L podijelit ćemo na dva kvadrata, od kojih veći ima dvostruko dulju stranicu nego manji. Ako imamo brzi rješavač Poissonove jednadžbe na kvadratu, onda neće biti teško pospajati rješenje za L.



Primijetite da smo:

- (a) redom numerirali po recima čvorove unutar svakog kvadrata posebno,
- (b) numerirali čvorove na 'rubu' između dva kvadrata.

Ako tako nazovemo čvorove, diskretizirani problem ima sljedeću matricu:

4 -1 -1 -1 4 -1							-1
-1 4 -1 -1 -1 4							-1
	4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4	-1 -1 -1 -1					-1
	-1 -1 -1 -1 -1	4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4	-1 -1 -1 -1				-1
		-1 -1 -1 -1	4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4	-1 -1 -1 -1			
			-1 -1 -1 -1	4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4	-1 -1 -1 -1		
				-1 -1 -1 -1	4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4 -1 -1 4	-1 -1 -1 -1	
-1 -1	-1		-1				4 -1 -1 4

Zapišemo li tu matricu kao blok-matricu sa blokovima koji su odijeljeni između dvostrukih crta, dobivamo

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & A_{13} \\ 0 & A_{22} & A_{23} \\ A_{13}^T & A_{23}^T & A_{33} \end{bmatrix}.$$

Ovdje je

$$A_{11} = T_{2 \times 2}, \quad A_{22} = T_{5 \times 5}, \quad A_{33} = T_{2 \times 1} = T_2 + 2I_2,$$

gdje je matrica T_N dimenzije N definirana s

$$T_N = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix},$$

a

$$T_{N \times N} = \begin{bmatrix} T_N & -I_N & & \\ -I_N & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I_N \\ & & -I_N & T_N \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & A_{13} \\ 0 & A_{22} & A_{23} \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix},$$

gdje je

$$S = A_{33} - A_{13}^T A_{11}^{-1} A_{13} - A_{23}^T A_{22}^{-1} A_{23}. \quad (1.1)$$

Matrica S uobičajeno se zove Schurov komplement vodeće podmatrice koja sadrži A_{11} i A_{22} . Sada možemo odmah napisati i A^{-1}

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} A_{11}^{-1} & 0 & -A_{11}^{-1} A_{13} \\ 0 & A_{22}^{-1} & -A_{22}^{-1} A_{23} \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & S^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ -A_{13}^T A_{11}^{-1} & -A_{23}^T A_{22}^{-1} & I \end{bmatrix}.$$

Želimo li pomnožiti neki vektor matricom A^{-1} , dovoljno je njegove komponente množiti odgovarajućim komponentama faktorizirane matrice A^{-1} . Množenje s A_{13} i A_{23} ima vrlo malo operacija, jer su te matrice rijetke. Množenje s A_{11}^{-1} i A_{22}^{-1} također ne zahtijeva mnogo operacija, zato što smo te domene izabrali tako da lako iskoristimo FFT, blok-cikličku redukciju, multigrad ili neku drugu brzu metodu. Ostaje samo objasniti kako se množi sa S^{-1} .

Na rubu između dva kvadrata mnogo je manje točaka nego u unutrašnjostima kvadrata, a što je mreža finija taj omjer brže raste, pa matrice A_{11} i A_{22} imaju mnogo veću dimenziju nego A_{33} i S . Matrica S je simetrična, pozitivno definitna i nije rijetke. Da bismo je direktno izračunali, treba u (1.1) pažljivo invertirati, tj. rješavati linearne sustave. Na kraju, S treba faktorizirati faktorizacijom Choleskog za pune matrice, tako da se umjesto invertiranja S^{-1} iskoristi rješavanje linearnog sustava. Međutim, cjelokupna zamisao nije posebno privlačna jer zahtijeva previše operacija.

Međutim iterativne metode Krylovljevog tipa, kao što je metoda konjugiranih gradijenata u ovom slučaju izgledaju mnogo praktičnije za primjenu, jer zahtijevaju

samo množenje vektora s matricom S . Broj matrično-vektorskih množenja ovisi samo o uvjetovanosti matrice S . Ono što konjugirane gradijente čini privlačnima je da je matrica S mnogo bolje uvjetovana nego originalna matrica A . Uvjetovanost S približno raste kao $\mathcal{O}(N)$, a ne kao $\mathcal{O}(N^2)$, što se moglo očekivati, pa je zbog toga konvergencija konjugiranih gradijenata brza.

Općenito, ako smo naš problem podijelili na više od dvije poddomene, uz uvjet da čvorove numeriramo na sličan način kao prije: redom po recima u svaku od poddomena, a na kraju čvorove na rubu, dobivamo matricu A u obliku

$$A = \left[\begin{array}{ccc|ccc} A_{1,1} & & 0 & A_{1,k+1} & & \\ & \ddots & & \vdots & & \\ 0 & & A_{k,k} & A_{k,k+1} & & \\ \hline A_{1,k+1}^T & \cdots & A_{K,k+1}^T & A_{k+1,k+1} & & \end{array} \right]. \quad (1.2)$$

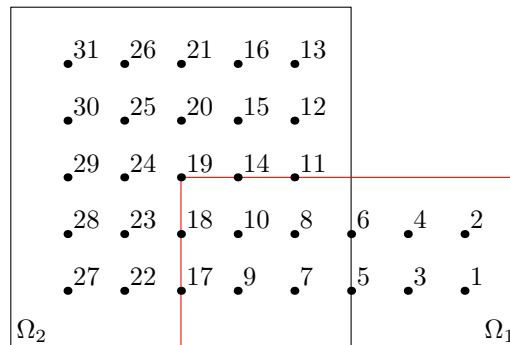
Ponovno, matricu A faktoriziramo tako da svaki od $A_{i,i}$ faktoriziramo nezavisno i oformimo Schurov komplement

$$S = A_{k+1,k+1} - \sum_{i=1}^k A_{i,k+1}^T A_{i,i}^{-1} A_{i,k+1}.$$

U tom slučaju, kad je više od jednog rubnog segmenta, S ima dodatnu strukturu koja se može iskoristiti u računanju. Ako u rubnim područjima, čvorove koji se nalaze samo u jednom rubnom području numeriramo prije čvorova koji se nalaze na presjeku rubnih područja, onda će matrica S imati sličnu strukturu kao matrica A . Dijagonalni blokovi takve matrice S imaju kompliciranu strukturu, ali se mogu aproksimirati s $T_N^{1/2}$, koja se može efikasno invertirati korištenjem FFT-a. Matrica S može se i simetrično prekondicionirati, tj. pomnožiti s nekom matricom L^{-1} slijeva, odnosno s L^{-T} zdesna, tako da $L^{-1}SL^{-T}$ ima bolju uvjetovanost od S . Izborom dobrog prekondicioniranja, može se pokazati da je broj koraka u metodi konjugiranih gradijenata neovisan o broju rubnih točaka.

1.3. Metode s preklapajućim domenama

Kod metoda s nepraklapajućim domenama, pažljivo numeriranje čvorova dovođi do matrice A sa strukturom (1.2). U ovom odjeljku dozvoljavamo preklapanje domena, kao donjoj slici. To će nam omogućiti konstrukciju metoda koje su po brzini komparabilne s multigrad metodom, a primjenjive su na mnogo široj klasi problema.



Algoritam 1.1. *Aditivna Schwarzova metoda za poboljšavanje aproksimacije x_i rješenja sustava $Ax = b$, tako da se dobije bolja aproksimacija x_{i+1} :*

$$\begin{aligned} r &:= b - Ax; && \text{(računanje reziduala)} \\ x_{i+1} &:= 0; \\ x_{i+1,\Omega_1} &:= x_{i,\Omega_1} + A_{\Omega_1,\Omega_1}^{-1} \cdot r_{\Omega_1}; && \text{(ažuriranje na } \Omega_1) \\ x_{i+1,\Omega_2} &:= x_{i,\Omega_2} + A_{\Omega_2,\Omega_2}^{-1} \cdot r_{\Omega_2}; && \text{(ažuriranje na } \Omega_2) \end{aligned}$$

Algoritam se može zapisati i ovako

$$x_{i+1} = x_i + \begin{bmatrix} A_{\Omega_1,\Omega_1}^{-1} \cdot r_{\Omega_1} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ A_{\Omega_2,\Omega_2}^{-1} \cdot r_{\Omega_2} \end{bmatrix}.$$

Drugim riječima algoritam radi na sljedeći način:

- (a) Ažuriranje s $A_{\Omega_1,\Omega_1}^{-1} \cdot r_{\Omega_1}$ odgovara rješavanju Poissonove jednadžbe korištenjem rubnih uvjeta u čvorovima 11, 14, 17, 18 i 19, koje ovisi o prijašnjem aproksimativnom rješenju x_i .
- (b) Ažuriranje s $A_{\Omega_2,\Omega_2}^{-1} \cdot r_{\Omega_2}$ odgovara rješavanju Poissonove jednadžbe korištenjem rubnih uvjeta u čvorovima 5 i 6, koje ovisi o prijašnjem aproksimativnom rješenju x_i .

U našem slučaju i Ω_1 i Ω_2 su pravokutnici, pa možemo upotrijebiti neku prije poznatu brzu metodu, kao što je multigrad za rješavanje $A_{\Omega_i,\Omega_i}^{-1} \cdot r_{\Omega_i}$. Budući da je aditivna Schwarzova metoda iterativna, nije nužno da se problem na Ω_i riješi egzaktno.

U praksi se aditivna Schwarzova metoda koristi za prekondicioniranje metoda koje dolaze iz Krylovljevih potprostora, kao što je to metoda konjugiranih gradijenata.

Koja svojstva mora zadovoljavati matrica prekondicioniranja M :

1. M je simetrična i pozitivno definitna,
2. $M^{-1}A$ je dobro uvjetovana ili ima samo malo ekstremnih svojstvenih vrijednosti,
3. $Mx = b$ se lako rješava.

Oprez, konjugirani gradijenti rade samo sa simetričnim matricama, a prekondicionirana matrica $M^{-1}A$ to nije. Zbog toga treba upotrijebiti simetrično prekondicioniranje. Neka je

$$M = Q\Lambda Q^T$$

svojstvena dekompozicija matrice M . Matrica

$$M^{1/2} = Q\Lambda^{1/2}Q^T$$

je, također, simetrična i pozitivno definitna i vrijedi

$$(M^{1/2})^2 = M.$$

Množenjem s $M^{1/2}$ slijeva na prekondicionirani sustav $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ dobivamo

$$M^{-1/2}Ax = M^{-1/2}b,$$

što drugačije možemo napisati kao

$$(M^{-1/2}AM^{1/2})M^{-1/2}x = M^{-1/2}b.$$

Označimo li $\hat{A} = M^{-1/2}AM^{1/2}$, $\hat{b} = M^{-1/2}b$, dobivamo simetrični sustav $\hat{A}x = \hat{b}$.

Ostaje još riješiti pitanje koliko je dobro prekondicioniran. Primijetite da \hat{A} i $M^{-1}A$ imaju iste svojstvene vrijednosti jer su slične (matrica sličnosti $T = M^{1/2}$). Dakle, možemo zaključiti da ako je $M^{-1}A$ dobro prekondicioniran, onda je to i \hat{A} , samo je simetriziran.

Dakle, u našem slučaju, aditivna Schwarzova metoda daje metricu prekondicioniranja

$$M^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} A_{\Omega_1, \Omega_1}^{-1} & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & A_{\Omega_2, \Omega_2}^{-1} \end{array} \right].$$

Kad se Ω_1 i Ω_2 ne bi preklapale, onda bi se M^{-1} pojednostavnio na

$$M^{-1} = \left[\begin{array}{cc} A_{\Omega_1, \Omega_1}^{-1} & 0 \\ 0 & A_{\Omega_2, \Omega_2}^{-1} \end{array} \right],$$

i mogli bismo raditi blok-Jacobijeve iteracije. Znamo da Jacobijeva metoda ne konvergira brzo, jer se informacija o rješenju s jedne domene relativno sporo prenosi preko ruba područja na druge. No, ako je prekrivanje dovoljno veliko, onda je to prenošenje mnogo brže, pa nam je osigurana relativno brza konvergencija. Naravno, prekrivanje ne smije biti preveliko, jer bi to dovelo do bitnog povećanja posla.

Gauss–Seidelova metoda uobičajeno mnogo brže konvergira nego Jacobijeva metoda. Ako aditivnu Schwarzovu metodu zamijenimo multiplikativnom Schwarzovom metodom, zapravo smo preklapajući blok-Jacobi rješavač zamijenili preklapajućim blok-Gauss–Seidelovim rješavačem. Time smo uobičajeno postupak dvostruko ubrzali.

Algoritam 1.2. *Multiplikativna Schwarzova metoda za poboljšavanje aproksimacije x_i rješenja sustava $Ax = b$, tako da se dobije bolja aproksimacija x_{i+1} :*

$$\begin{aligned} r_{\Omega_1} &:= (b - Ax_i)_{\Omega_1}; && \text{(računanje reziduala } x_i \text{ na } \Omega_1) \\ x_{i+\frac{1}{2}, \Omega_1} &:= x_{i, \Omega_1} + A_{\Omega_1, \Omega_1}^{-1} \cdot r_{\Omega_1}; && \text{(ažuriranje na } \Omega_1) \\ x_{i+\frac{1}{2}, \Omega \setminus \Omega_1} &:= x_{i, \Omega \setminus \Omega_1}; \\ r_{\Omega_2} &:= (b - Ax_{i+\frac{1}{2}})_{\Omega_2}; && \text{(računanje reziduala } x_{i+\frac{1}{2}} \text{ na } \Omega_2) \\ x_{i+\frac{1}{2}, \Omega_2} &:= x_{i+\frac{1}{2}, \Omega_2} + A_{\Omega_2, \Omega_2}^{-1} \cdot r_{\Omega_2}; && \text{(ažuriranje na } \Omega_2) \\ x_{i+\frac{1}{2}, \Omega \setminus \Omega_2} &:= x_{i, \Omega \setminus \Omega_2}; \end{aligned}$$

Algoritam prvo rješava Poissonovu jednadžbu na Ω_1 korištenjem rubnih podataka iz x_1 , slično kao kod aditivne Schwarzove metode. Zatim riješi Poissonovu jednadžbu na Ω_2 , ali korištenjem upravo ažuriranih rubnih podataka. I ova se metoda može koristiti kao prekondicioner za metode iz Krylovljevih potprostora.

U praksi, upotrebljava se više od dvije domene Ω_1 i Ω_2 . To se radi ako je imamo paralelna računala koja mogu nezavisno rješavati probleme $A_{\Omega_i, \Omega_i}^{-1} \cdot r_{\Omega_i}$.

Evo i analize brzine konvergencije za multiplikativnu Schwarzovu metodu. Neka je h udaljenost čvorova mreže po svakoj od osi. Teorija predviđa koliko mnogo iteracija u funkciji od h trebamo za konvergenciju metode, ako h teži prema 0. Za

dvije poddomene, ako je područje preklapanja nezanemariv dio ukupne domene, broj koraka ne ovisi o h , ako h ide u 0, što je vrlo atraktivno svojstvo. Međutim, potprobleme na Ω_1 i Ω_2 bi trebalo riješiti egzaktno, što po duljini računa može biti usporedivo s duljinom računa na Ω . Jedina nada je da je računanje potproblema na Ω_1 i Ω_2 jeftino, kao što je to bilo kod L područja.

Sada pretpostavimo da imamo mnogo poddomena Ω_i , svaka dimenzije $H \gg h$, tj. smatramo da je domena Ω_i ograđena grubom mrežom s udaljenostima čvorova H plus nešto dodatnih ćelija iz fine mreže koje se nalaze iza te granice.

Neka je $\delta < H$ veličina preklapanja susjednih domena. Sada, neka δ , h i H teže k 0, uz uvjet da je omjer δ/H konstantan i da je $H \gg h$. Tada broj iteracija potrebnih za konvergenciju raste kao $1/H$, tj. nezavisno o finoj podjeli h . To je prilično dobro, ali nije tako dobro kao što je multigrid.

Da bi se dostigla brzina multigrida, potrebna je još jedna ideja koja je vrlo slična multigridu. Iskoristimo aproksimaciju A_H problema na gruboj mreži s korakom H da bismo dobili grubi prekondicioner, uz fini prekondicioner $A_{\Omega_i, \Omega_i}^{-1}$. Potrebne su nam još tri dodatne matrice da bismo opisali algoritam. Neka je matrica A_H matrica početnog problema, ali diskretizirana uz grubu podjelu H . Operator restrikcije R uzima rezidual na finoj mreži i restringira ga na rezidual na gruboj mreži (isto kao kod multigrida). Konačno, trebamo i operator interpoliranja koji će vrijednosti na gruboj mreži interpolirati tako da se dobiju vrijednosti na finoj mreži. Kao i kod multigrida, taj je operator R^T . Sada možemo mapisati aditivnu Schwarzovu metodu u dva nivoa.

Algoritam 1.3. *Aditivna Schwarzova metoda u dva nivoa za poboljšavanje aproksimacije x_i rješenja sustava $Ax = b$, tako da se dobije bolja aproksimacija x_{i+1} :*

```

 $x_{i+1} := x_i;$ 
for  $i = 1$  to broj poddomena  $\Omega_i$  do;
  begin
     $r_{\Omega_i} := (b - Ax_i)_{\Omega_i};$ 
     $x_{i+1, \Omega_i} := x_{i, \Omega_i} + A_{\Omega_i, \Omega_i}^{-1} \cdot r_{\Omega_i};$ 
  end;
 $x_{i+1} := x_i + R^T A_H^{-1} R \cdot r;$ 

```

I ova se metoda uobičajeno uzima kao prekondicioner za metode proizašle iz Krylovljevih potprostora.

Teorija konvergencija za ovaj problem, koji se može upotrijebiti u mnogo općenitijim slučajevima no što je to Poissonova jednažbica, kaže da ako h , H i δ teže k 0, uz uvjet da je δ/H fiksna, broj iteracija potreban za konvergenciju ne ovisi o δ , h i H . To znači dokle god je vrijeme potrebno za rješavanje potproblema $A_{\Omega_i, \Omega_i}^{-1}$ i A_H^{-1} proporcionalno broju nepoznanica, složenost ovog algoritma jednako je dobra kao i složenost multigrida.

Ipak, primijetite da je prekična primjena ove metode na realnom problemu prilično složena.