

УДК 519.688

К ВОПРОСУ ВЫБОРА ПАРАМЕТРОВ РАЗБИЕНИЯ В СЕТОЧНЫХ ЗАДАЧАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОЦЕНОК ОБУСЛОВЛЕННОСТИ

© 2013 Е. В. Авдеев, В. А. Фурсов

Самарский государственный аэрокосмический университет
имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет)

Рассматривается зависимость показателей обусловленности матрицы и показателей мультиколлинеарности от размерности исходной сетки задачи. В работе используются примеры из открытой интегрируемой платформы для численного моделирования задач механики сплошных сред OpenFOAM. Показывается одинаковое поведение показателей обусловленности и показателя диагонального преобладания. Приведён пример определения размерности сетки с помощью показателя диагонального преобладания.

Система линейных алгебраических уравнений, обусловленность матрицы, показатели мультиколлинеарности.

Постановка задачи

Существует множество прикладных задач математической физики, для решения которых используют сеточные методы. Несмотря на большое разнообразие способов формирования сеток, в конечном итоге задача обычно сводится к необходимости решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), которая представляется в матричном виде:

$$Ax = b, \quad (1)$$

где A – квадратная $n \times n$ -матрица коэффициентов; x – $n \times 1$ -вектор, компонентами которого являются искомые (выходные) величины; b – $n \times 1$ -вектор известных (входных) величин.

Элементы матриц в этих методах формируются путём дискретизации исходных входных величин. От шага дискретизации зависит, насколько точным будет искомое решение. Эта проблема имеет большую историю. Ей посвящены основополагающие работы, например, [1–5]. Если шаг будет слишком большим, то возрастает погрешность усреднения, т.к. модель становится слишком «грубой» для её точного описания. Если же шаг будет малым, то число точек сетки

возрастёт, разница между значениями в соседних точках может оказаться сравнимой с ценой младшего разряда. При этом имеет место почти линейная зависимость векторов-строк, из которых составлена матрица системы, и, как следствие, высокая погрешность решения СЛАУ.

Меру, определяющую связь между погрешностью решения СЛАУ и погрешностью входных данных, принято называть обусловленностью. Если невырожденная матрица A хорошо обусловлена, решение системы линейных уравнений (1) устойчиво [6], т.е. мало изменяется при малом изменении элементов матрицы A и столбца свободных членов b .

Если система плохо обусловлена, можно применить один из следующих способов, которые могут привести к повышению точности решения:

1. Изменение параметров разбиения (шаг дискретизации), приводящее к улучшению обусловленности задачи [7].

2. Изменение метода решения, например, использование схемы решения с преобуславливанием, при котором левую и правую части исходной СЛАУ доумножают на легко обратимую матрицу-преобуславливатель [8]:

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b, \quad (2)$$

$$M \approx A, \det M \neq 0. \quad (3)$$

Во втором варианте фактически решается другая задача. Поэтому даже при достижении хорошей обусловленности могут иметь место значительные ошибки в решениях вследствие неудачного выбора матрицы M в соответствии с приближенным равенством в (3).

В первом варианте улучшение обусловленности обычно достигается путём уменьшения размерности матрицы A за счёт укрупнения сетки. Это приводит к более «грубой» модели и, как следствие, к снижению точности решений, поскольку модель не способна отобразить микропроцессы, микроявления.

Общая схема решения задачи в этом случае такова:

1. Дискретизация входных данных (построение сетки).

2. Решение задачи (получение выходных данных).

3. Валидация выходных данных. Если результат неудовлетворителен, то возврат к пункту 1.

Основные вычислительные затраты в рамках этой схемы существуют на этапе решения задачи (пункт 2). Если полученные результаты не проходят валидацию, то происходит возврат к пункту 1 с ужесточением требований, в данном случае уменьшение шага дискретизации входных данных. Для уменьшения вычислительных затрат желательно добиться наименьшего количества возвратов к пункту 1. Поэтому актуальна задача разработки простой вычислительной схемы оценки качества разбиения на основе прогнозирования обусловленности задачи без проведения тестовых решений задачи.

Для прогноза точности решений необходимо установить связь степени валидации входных данных с параметрами дискретизации, которые, в свою очередь, определяют степень

обусловленности СЛАУ. Для характеристики степени обусловленности матриц наиболее широко [9, 10] используются следующие меры мультиколлинеарности:

минимальное собственное значение матрицы A

$$\lambda_{\min}(A) = \min_{\forall i} \lambda_i(A) \quad (4)$$

и спектральное число обусловленности матрицы A

$$K(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}. \quad (5)$$

В работах [4, 8, 9, 11] для контроля степени обусловленности в задачах идентификации моделей систем формирования изображений, наряду с указанными выше, предложено применять так называемый показатель диагонального преобладания матрицы A :

$$\hat{O}(A) = \frac{\left(\sum a_{i,j}\right)^2}{\sum a_{i,j}^2} = \frac{\left(\sum_{i=1}^n I_i(A)\right)^2}{\sum_{i=1}^n I_i^2(A)}, \quad (6)$$

где $a_{i,j}$ – элементы матрицы A , а $\lambda_i(A)$, $i = \overline{1, n}$ – собственные значения матрицы A .

В настоящей работе установлена зависимость между показателем диагонального преобладания и точностью решения задачи и разработан алгоритм выбора параметров сетки на основе показателя диагонального преобладания.

Построение оценок обусловленности в одномерной задаче

Рассмотрим процесс перехода к матрице вида $KU = F$ на примере использования метода Галёркина для следующего дифференциального уравнения:

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{du}{dx} \right) = f(x), \tag{7}$$

где u - искомая функция $u(x)$, $f(x)$ - известная функция.

Пусть $u(1) = 0$, $u'(0) = 0$.

Приближённое решение уравнения разыскивается в виде

$$u(x) = \sum_{i=0}^n U_i j_i(x), \tag{8}$$

где $j_i(x)$ - функции формы, U_i - коэффициенты.

Пусть $j_i(0) = 0$.

Умножив обе части на $j_i(x)$ и проинтегрировав, получим:

$$\int_0^1 \frac{du}{dx} \frac{dj_i}{dx} = \int_0^1 f(x) j_i(x) dx. \tag{9}$$

Правую часть обозначим за F_i :

$$F_i = \int_0^1 f(x) j_i(x) dx. \tag{10}$$

Пусть $i = 0 \dots 4$. Тогда для $i = 0$ левая часть выражения (9) с учётом (8) примет вид

$$\int_0^1 (U j'_0 + U j'_1 + K + U j'_4) \frac{dj_0}{dx} dx = F_0 = \Delta x. \tag{11}$$

В свою очередь элементы матрицы K определяются из выражения

$$K_{ij} = \int_0^1 \frac{dj_i}{dx} \frac{dj_j}{dx} dx. \tag{12}$$

Вычислив элементы матриц, запишем выражение для $KU = F$:

$$\frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_0 \\ U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{bmatrix} = \Delta x \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \tag{13}$$

Если взять шаг $\frac{\Delta x}{2}$, то система

примет вид

$$KU = \frac{2}{\Delta x} \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & & & & & \\ -1 & 2 & & & & & & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ & & & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & & & -1 & 1 & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_0 \\ U_1 \\ \dots \\ U_8 \\ U_9 \end{bmatrix}. \tag{14}$$

Погрешность при этом изменится с Δx до $\frac{\Delta x}{2}$ [12]. Показатель диагонального

преобладания \hat{O} понизится с $\frac{1}{\Delta x \cdot 125}$ до $\frac{1}{\Delta x \cdot 225}$.

Результаты экспериментов на тестовых задачах в среде OpenFOAM

Проведены расширенные эксперименты по исследованию связи мер мультиколлинеарности с числом узлов сетки и точностью решения в задачах, используемых в качестве тестовых в среде OpenFOAM. Для сравнимости показателей мультиколлинеарности вначале проведём модификацию этих мер, заключающуюся в приведении их к одинаковому диапазону [0;1] путём следующих преобразований:

1. Нормировка информационной матрицы A такая, что $trA = M$ (для этого матрица A слева и справа умножается на диагональную матрицу $D = \{d_{ii}\}$, где $d_{ii} = 1/\sqrt{a_{ii}}$).

2. Вместо спектрального числа обусловленности вводится в рассмотрение обратное спектральное число обусловленности: $K^{-1}(A) = I_{\min} / I_{\max}$. Близость этого числа к 0 свидетельствует о плохой обусловленности матрицы A .

3. Вместо показателя диагонального преобладания (6) рассматривается приведённый к интервалу $[0;1]$ показатель диагонального преобладания

$$\hat{O}^{-1} = 1/\hat{O}. \quad (15)$$

Для исследования зависимости указанных приведённых к интервалу $[0;1]$ мер мультиколлинеарности матрицы A от количества ячеек сетки было выбрано несколько примеров, входящих в набор примеров, распространяемых вместе с открытой интегрируемой платформой для численного моделирования задач механики сплошных сред OpenFOAM.

Пример 1.

\$TUTORIALS/incompressible/pimpleFoam/t-junction/ – течение несжимаемой жидкости в трубе-тройнике (один вход, два выхода) под действием разности давлений на входе и выходах трубы, задача решается в нестационарной постановке с использованием алгоритма (Pressure Implicit with Splitting of Operators – Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) PISO-SIMPLE.

Пример 2.

\$TUTORIALS/incompressible/pisoFoam/ras/cavity/ – вращение несжимаемой жидкости в ёмкости, порождаемое скользящей верхней стенкой ёмкости, задача решается в нестационарной постановке с использованием алгоритма PISO и с моделированием турбулентности с помощью RAS (Reynolds-Averaged Simulation) модели.

Пример 3.

\$TUTORIALS/incompressible/icoFoam/cavity/ – вращение несжимаемой жидкости в ёмкости, порождаемое скользящей верхней стенкой ёмкости, задача решается в нестационарной постановке без моделирования турбулентности.

Построение матрицы A для таких задач происходит на основе параметров дискретизации и граничных условий, т.е. без непосредственного решения задачи.

На рис. 1-3 показана зависимость показателей обусловленности \hat{O}^{-1} , $K^{-1}(A)$, I_{\min} от количества n ячеек сетки. Жирными точками отмечены значения «эталонные», рекомендованные разработчиками пакета OpenFOAM [13], как доставляющие наиболее высокую точность при приемлемых вычислительных затратах. Нетрудно заметить, что зависимости мер обусловленности I_{\min} , $K^{-1}(A)$, \hat{O}^{-1} от n имеют одинаковый характер.

При этом вычислительная сложность нахождения показателя диагонального преобладания существенно меньше вычислительной сложности нахождения любой нормы обусловленности и составляет $2n + O(n^2)$. Для сравнения, вычислительная сложность спектрального числа обусловленности (5) зависит от используемого алгоритма и может составлять порядка $O(n^3)$ и более. В современных задачах n может достигать значений 10^6 - 10^7 . Поэтому вычислительная сложность является существенным доводом для выбора в качестве критерия оценки обусловленности матрицы и прогнозирования точности решений показателя диагонального преобладания.

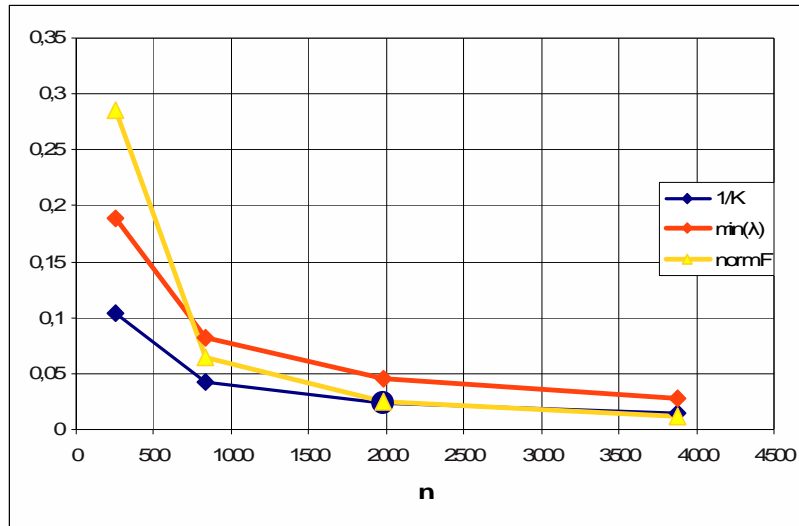


Рис. 1. Зависимость мер обусловленности I_{\min} , $K^{-1}(A)$, \hat{O}^{-1} от количества ячеек n для примера 1

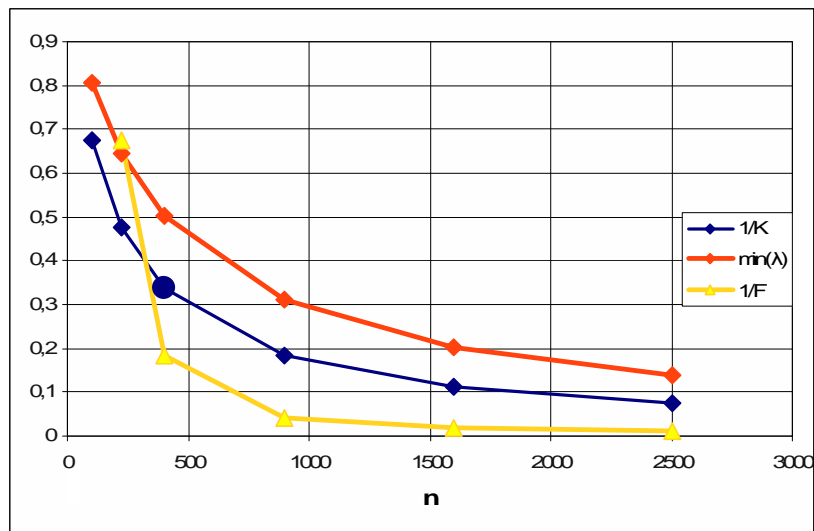


Рис. 2. Зависимость мер обусловленности I_{\min} , $K^{-1}(A)$, \hat{O}^{-1} от количества ячеек n для примера 2

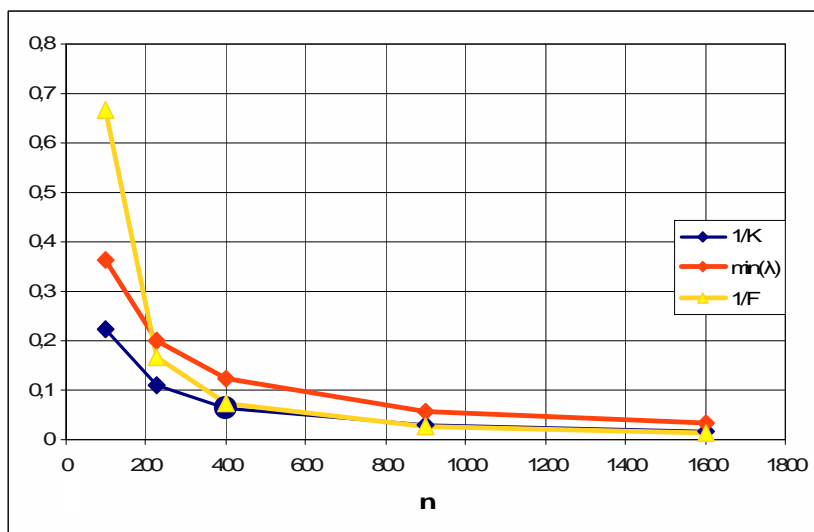


Рис. 3. Зависимость мер обусловленности I_{\min} , $K^{-1}(A)$, \hat{O}^{-1} от количества ячеек n для примера 3

Как видно из графиков, при увеличении количества элементов сетки значение показателя диагонального преобладания уменьшается. Значения показателя диагонального преобладания, соответствующие диапазону размеров сетки, рекомендованных разработчиками для данного класса задач, находятся в интервале [0.085;0.095]. Заметим, что за пределами этого интервала при дальнейшем увеличении количества узлов сетки показатель диагонального преобладания принимает крайне малые значения, которые свидетельствуют о плохой обусловленности задачи. Таким образом, показано, как производить оценку обусловленности СЛАУ с помощью предварительной валидации входных данных с помощью \hat{O}^{-1} .

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 11-07-12051-офи-м). Работа выполнена при поддержке программы «Университетский кластер» – www.unicluster.ru.

Библиографический список

1. Зенкевич, О. Конечные элементы и аппроксимация [Текст] / О. Зенкевич, К. Морган – М.: Изд-во МИР, 1986. – 319 с.
2. Roache, P.J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies [Text] / P.J. Roache // ASME J. Fluids Eng. – 1994. - №116. – P. 405-413.
3. Roache, P.J. Completed Richardson extrapolation [Text] / P.J. Roache, P.M. Knupp // Comm. Appl. Num. Methods – 1993. - №9. – P. 365-74.
4. Richardson, L.F. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations with an application to the stresses in a masonry dam [Text] / L.F. Richardson // Trans. R. Soc. London Ser. A – 1911. - №210. – P. 307-57.
5. Richardson, L.F. The deferred approach to the limit [Text] / L.F. Richardson // Trans. R. Soc. London Ser. A – 1927. - №226. – P. 229-361.
6. Фадеев, Д.К. Об обусловленности матриц [Текст] / Д.К. Фадеев // Работы по приближенному анализу. – 1959. – №53. – С. 387-391.
7. Bathe, K.J. Finite Element Procedures for Solids and Structures [Text] / K.J. Bathe – Boston: MIT OpenCourseWare, 2012. – 526 p.
8. Марчевский, И.К. Методы решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений и их предобуславливание [Текст] / И. К. Марчевский, В.В. Пузикова / Летняя суперкомпьютерная академия. – М., 2012. – 34 с.
9. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач [Текст] / А.Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. – М.: Наука, 1974. – 223 с.
10. Демиденко, Е.З. Линейная и нелинейная регрессии [Текст] / Е.З. Демиденко / Финансы и статистика. – М., 1981. – 303 с.
11. Фурсов, В.А. Идентификация моделей систем формирования изображений по малому числу наблюдений [Текст] / В.А. Фурсов. — Самара: Самар. гос. аэрокосм. ун-т, 1998. – 218 с.
12. Strang, G. Computational Science and Engineering [Text] / G. Strang – Boston: MIT OpenCourseWare, 2008. – 486 p.
13. OpenFOAM Documentation [Электронный ресурс] / Режим доступа: <http://www.openfoam.org/docs>, свободный. – Загл. с экрана.

CHOICE OF PARAMETERS OF MESHING USING ESTIMATES OF CONDITIONALITY

© 2013 E. V. Avdeev, V. A. Fursov

Samara State Aerospace University named after academician S.P. Korolyov
(National Research University)

The paper shows the dependence of matrix condition indicators and multicollinearity indicators on the dimension of the original problem mesh. Examples from an open integrated platform for the numerical simulation of continuum mechanics OpenFOAM tasks are given. The behavior of conditionality indicators and that of the diagonal dominance indicator are shown to be the same. An example of determining mesh dimensions with the help of the diagonal dominance indicator is given.

System of linear algebraic equations, matrix condition, multicollinearity indicators.

Информация об авторах

Фурсов Владимир Алексеевич, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой общей информатики, Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С. П. Королёва (национальный исследовательский университет). E-mail: fursov@ssau.ru. Область научных интересов: теория и методы идентификации по малому числу наблюдений, анализ, распознавание и обработка изображений, высокопроизводительные параллельные и распределённые вычисления на многопроцессорных вычислительных системах.

Авдеев Евгений Владимирович, аспирант кафедры общей информатики, Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С. П. Королёва (национальный исследовательский университет). E-mail: j-avdeev@yandex.ru. Область научных интересов: вычислительная гидродинамика, механика сплошных сред, высокопроизводительные параллельные и распределённые вычисления на многопроцессорных вычислительных системах.

Fursov Vladimir Alekseevich, doctor of engineering, professor, head of the department of general information science, Samara State Aerospace University named after academician S.P. Korolyov (National Research University). E-mail: fursov@ssau.ru. Area of research: development of the theory of identification based on a small number of observations, image processing, pattern recognition, development of high-performance parallel and distributed computing using multiprocessor computing systems.

Avdeev Evgeny Vladimirovich, postgraduate student of the department of general information science, Samara State Aerospace University named after academician S.P. Korolyov (National Research University). E-mail: j-avdeev@yandex.ru. Area of research: computational fluid dynamics, continuum mechanics, development of high-performance parallel and distributed computing using multiprocessor computing systems.