АВТОМАТИЗИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Е.В. Авдеев

ОЦЕНКА КАЧЕСТВА СЕТКИ С ПОМОЩЬЮ ОЦЕНКИ ОБУСЛОВЛЕННОСТИ

(ФГБОУ ВПО «Самарский государственный аэрокосмический университет им. академика С.П. Королева (национальный исследовательский университет)»)

Существует множество задач, которые могут быть сведены к решению систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). При решении СЛАУ с помощью ЭВМ неизбежно возникает вычислительная погрешность, вызванная ограниченным числом разрядов, отводимых для хранения промежуточных результатов в памяти ЭВМ.

Влияние этой вычислительной погрешности на решение задачи различно для каждого случая и зависит не только от выбранного метода решения СЛАУ, но также и от характеристик, которыми обладает условие самой задачи.

Над данной проблемой работали такие ученые как Зенкевич и Морган [1], Роуч [6, 7], Ричардсон.

СЛАУ для решения на ЭВМ часто представляют в матричном виде

$$Ax = b, \tag{1}$$

A — квадратная матрица коэффициентов;

x — матрица-строка искомых (выходных) величин;

b — матрица-столбец известных (входных) величин.

Обычно элементы матриц образованы путем дискретизации исходных входных величин (например, в сеточных методах). От шага дискретизации зависит, насколько точно СЛАУ будет описывать реальный процесс.

Если шаг будет слишком большим, то возникнет высокая погрешность усреднения, модель не сможет отобразить микропроцессы, микроявления.

Если же шаг будет малым, то разница между значениями в соседних точках (или значительная ее часть) может оказаться за пределами числа разрядов, которое предусмотрено для хранения значения в памяти ЭВМ. При этом имеет место почти линейная зависимость векторов-строк, из которых составлена матрица A, и, как следствие, высокая погрешность решения СЛАУ.

Меру, определяющую связь между погрешностью в полученном решении СЛАУ и погрешностью во входных данных, принято называть обусловленностью.

Согласно работе Д.К. Фадеева [3] невырожденная матрица A называется хорошо обусловленной, если решение системы линейных уравнений $Ax = b$ устойчиво, т. е. мало изменяется при малом изменении элементов матрицы A и столбца свободных членов B.

В случае плохо обусловленной системы возможны два способа дальнейшего решения:

1. Изменить входные данные (метод дискретизации) для улучшения обусловленности.

2. Изменить метод решения, например, использовать метод решения с предобуславливанием, при котором левую и правую часть исходной СЛАУ домножают на легко обратимую матрицу-предобуславливатель [2]:

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

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

В данной работе рассматривается первый вариант.

Общая схема решения задачи в этом случае такова:

1. Дискретизация входных данных (построение сетки в соответствии с выбранной схемой решения).

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 происходят на этапе решения задачи (пункт 2). Если полученные результаты не проходят валидацию, то происходит возврат к пункту 1 с ужесточением требований, в нашем случае с уменьшением шага дискретизации входных данных. По схеме видно, что для уменьшения вычислительных затрат желательно добиться наименьшего количества возвратов к пункту 1.

Это возможно до решения задачи (априорная оценка). Для прогноза точности решений будет использоваться связь входных данных с обусловленностью СЛАУ.

Обусловленность СЛАУ (1) определяется обусловленностью матрицы A. Данное утверждение верно для всех итерационных методов решения СЛАУ, в которых x, вычисленная на текущей итерации является матрицей-столбцом b известных (входных) величин для следующей итерации, при этом матрица A постоянна для всех итераций.

Существует множество методов оценок обусловленности. В данной работе в качестве оценки обусловленности исследуется показатель диагонального преобладания, который вычисляется по следующей формуле (4).

$$\Phi(A) = \frac{\left(\sum a_{i,j}\right)^2}{\sum a_{i,j}^2}, \quad (4)$$

где $a_{i,j}$ – элементы матрицы A.

В работе В.А. Фурсова [4] описаны свойства и связь показателя диагонального преобладания с нормами обусловленности. Вычислительная сложность нахождения показателя диагонального преобладания меньше вычислительной сложности нахождения любой нормы обусловленности и составляет $2n + O(n^2)$. Например, вычисление такой нормы обусловленности как спектральное число обусловленности, равное отношению максимального собственного числа к минимальному:

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

зависит от используемого алгоритма и может составлять порядка $O(n^3)$ и более. В современных задачах n может составлять миллионы, десятки миллионов, поэтому вычислительная сложность является существенным критерием для определения обусловленности матрицы.

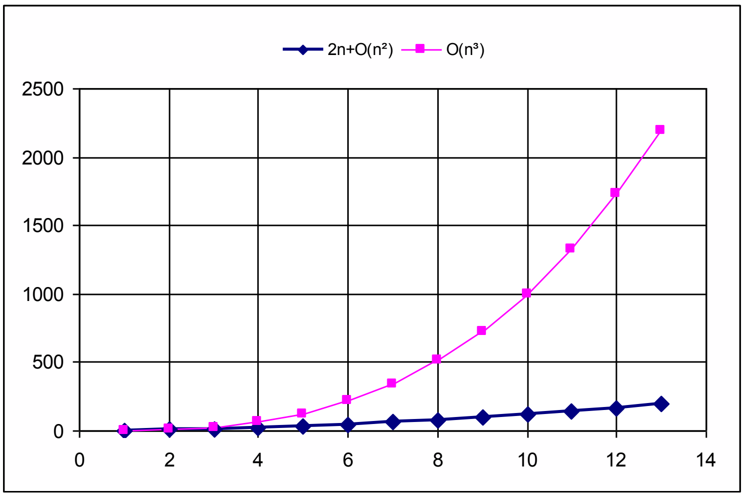

Рис. 1. Сравнение вычислительной сложности оценки обусловленности $2n + O(n^2)$ с помощью показателя диагонального преобладания $\hat{O}(\grave{A})$ и $O(n^3)$ – с помощью спектрального числа обусловленности $K(A)$

Для проверки изменения характеристик матрицы A с изменением количества ячеек сетки было выбрано несколько задач, входящих в набор примеров, распространяемых вместе с открытой интегрируемой платформой для численного моделирования задач механики сплошных сред OpenFOAM (http://www.openfoam.org/docs/), инструментарий которой был также использован для построения сеток и матрицы A. В данной работе рассматривались следующие примеры:

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.

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

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

При увеличении количества элементов сетки значение показателя диагонального преобладания уменьшается, причём нелинейно — при большем количестве элементов сетки еще большее увеличение количества элементов меньше влияет на изменение показателя диагонального преобладания, чем при меньшем количестве элементов. Похожее поведение наблюдается на графиках минимального собственного числа $\min(\lambda)$ и спектрального числа обусловленности $K(A)$.

Также по графикам видно, что «подходящее» количество ячеек для задачи находится там же, где меньшие значения $\Phi(A)/n$.

Таким образом, можно производить оценку обусловленности СЛАУ с помощью предварительной валидации входных данных с помощью показателя диагонального преобладания.

Результаты работы могут быть применены в решении СЛАУ прямыми методами с помощью ЭВМ.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 11-07-12051-офи-м).

Работа выполнена при поддержке программы «Университетский кластер» – www.unicluster.ru

Литература

1. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация / Изд-во «МИР» – М., 1986. – 319 с.
2. Марчевский И.К., Пузикова В.В. Методы решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений и их предобуславливание // Летняя суперкомпьютерная академия. – М., 2012. – 34 с.
3. Фадеев Д.К. Об обусловленности матриц. Работы по приближенному анализу // Тр. МИАН СССР, 53, М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1959. – с. 387 – 391
4. Фурсов В.А. Идентификация моделей систем формирования изображений по малому числу наблюдений. – Самара: Самар. гос. аэрокосм. ун-т., 1998. – 218 с.
5. Strang G. 18.085 Computational Science and Engineering I, Fall 2008. Massachusetts Institute of Technology: MIT OpenCouseWare, 2012
6. Roache P.J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. ASME J. Fluids Eng. 116, 1994. – pp. 405 – 413
7. Roache P.J., Knupp P.M. Completed Richardson extrapolation, Comm. Appl. Num. Methods, 1993. – 9. – pp. 365 – 374
8. Sukhinov A.A. Construction of Cartesian meshes with dynamic adaptation to the solution, Matem. Mod., 22:1. – 2010. – pp. 86 – 98
9. Zienkiewicz O.C., Zhu J.Z., Superconvergence recovery technique and a posterior error estimates. Int. J. Num. Meth. Engineer., 1992, 33. – pp. 1331 – 1364