Základní pojmy a principy FEM (finite element methods)

referenze: Vitásek; Numerické metody
C. Johnson: Num. solution of PDE by the FEM

úvodní poznámky:

- zde hlavně pro eliptické (konvexní) okrajové úlohy tj. prostor. diskretizace též poč. úloh
- hlavní myšlenka:
  jiná reprezentace řešení .. rozvoj do báze .. v nějakém aprox. prostoru fcí $V_n \xrightarrow[n\to\infty]{} V$

  ukazuje se že lepší i jiná repres. úlohy ... variační / slabá formulace

  řešení minimalizuje vhodný funkcionál — nepoč. splnění D. fce, ale její projekce na fce z vhodného prostoru test. fcí — sobolevovy prostory

- spektrální metody × FEM
  rychlá konverg., ale husté matice (pro hladké úlohy) ← pomalejší konverg., ale řídké matice + vhodné pro nehladké úlohy

modelový příklad (1D)

opět Poisson: $-u''(x) = f(x)$ $x \in \langle 0,1\rangle$ (D_a) } úloha (D) (diferenciální formulace)

BÚNO: $u(0) = u(1) = 0$ (D_b)

pozn: $u(0) = a$, $u(1) = b$ lze převést na ↺ zavedením $\tilde{u}(x) = u(x) - (a + (b-a)x)$
potom $\tilde{u}$ splňuje (D) ... obecně modifik. pravá strana

uvažujme prostor (testovací funkce):

$V = \{ v(x) :$ v spojité na $\langle 0,1\rangle$; v' po část. spoj., omezené na $\langle 0,1\rangle$; $v(0) = v(1) = 0 \}$

~~uvažujme následující úlohy~~:

uvažujme projekci (D_a) na v

$$-\int_0^1 u'' v \, dx = \underbrace{\int_0^1 u' v' \, dx}_{\text{bilineární forma } a(u,v)} = \int_0^1 f(x) v(x) \, dx$$

bilineární forma $a(u,v)$; symetrická pozit. definitní

def funkcionál energie $F[v] \equiv \frac{1}{2} a(v,v) - \langle f, v\rangle$ potom podmínka minimalizace je

uvažujme násl. úlohy (Fyzikálně .. minim. energie & princip virtuál. práce)

(V) nalezněte $u \in V$: $F[u] \leq F[v]$; $\forall v \in V$ (Variační formulace)

(S) nalezněte $u \in V$: $a(u,v) = \langle f, v\rangle$; $\forall v \in V$ (Slabá formulace)

Potom platí $(D) \Rightarrow (S) \Leftrightarrow (V)$ (dokáz. výše $\Leftarrow$)

DK: založený na relaci $F[v] = F[u] + \underbrace{a(u,w)}_{\text{užití symetrie}} - \langle f, w\rangle + \underbrace{\tfrac{1}{2} a(w,w)}_{\geq 0 \text{ pozit. definitnost}}$

$\Leftarrow$ $v = u + w$

poznámka: na předp. že řešení (S) je 2x spoj. diferencovatelné lze per-partesit zpět $\rightarrow \int (u'' + f) v \, dx = 0 \quad \forall v \Rightarrow (D)$

pak jsou $\forall 3$ formulace ekvivalentní.

OBECNĚ: – slabá formulace obecnější ... slabší požadavky na řešení u (nemusí $\exists\, u''$, f může být distribuce)

– variační formulace vyžaduje positivní definitnost. $a(u,v)$

– obecně stačí menší DK $\exists$ a jednoznačnost řešení (S) a dodatečné (větší) DK že řešení je C^2 tj. platí (D)

– aproximace řešení ~~lze~~ lze (s výhodou) hledat mimo C^2 např. po částech lineární funkce (viz níže).

PŘÍKLADY SLABÉ A VARIAČNÍ FORMULACE jiných úloh

PŘ 1: (Sturm-Liouville)

$$\mathcal{D} u \equiv -\frac{d}{dx}\left[p(x) \frac{d}{dx} u(x)\right] + q(x)\, u(x) = f(x) \quad \text{na } x \in \langle a,b \rangle \quad (D_a)$$

kde p, q, f spojité p' spojitá; $\exists p_0 > 0: p(x) \geq p_0$

okrajové podm. (bino): $u(a) = u(b) = 0 \quad (D_b)$

$\Big\}$ (D)

násobení test. fcí: $a(v,u) = \int_a^b \left[-v \frac{d}{dx}(p u') + v q u\right] dx$

posit. def. sym. funkcionál $= \int_a^b (p\, v' u' + q\, v u) dx$

$\rightarrow$ slabá formulace $\quad a(u,v) = \langle f, v \rangle \quad \forall v \in V \quad (S)$

což je podm. minima funkcionálu $\quad P[u] \equiv \frac{1}{2} a(u,v) - \langle f, v\rangle \rightarrow (V)$

PŘ 2: (rovnice vyššího řádu)

$$\mathcal{D} u \equiv [p(x) u'']'' - [q(x) u']' + r(x) u(x) = f(x)$$

$$\rightarrow \quad a(u,v) = \int_a^b (p\, u'' v'' + q\, u' v' + r\, u v) dx \quad \Rightarrow (S) \text{ a } (V)$$

PŘ 3: (nelineární úloha)

$$\mathcal{D} u \equiv -\frac{d}{dx}[p u'] + q u = f(x,u) \quad (D_a)$$

$a(u,v) \equiv \int (p u' v' + q u v) dx$ jako PŘ 1, ale

(S): $\quad a(u,v) = \int_a^b f(x,u)\, v(x)\, dx$

což je podm. extrému funkcionálu (V)

$$F[u] \equiv \int_a^b \left\{ \frac{1}{2}\left[p u'^2 + q u^2\right] - \int_a^{u(x)} f(x,t)\, dt \right\} dx$$

pro $\frac{\partial}{\partial u} f(x,u) \leq 0$ jde o minimum

PŘ3: obecná okrajová podmínka: $+\alpha_1 p(a) u'(a) + \beta_1 u(a) = 0$
$-\alpha_2 p(b) u'(b) + \beta_2 u(b) = 0$ (D_a)

(D_b): ~~stav~~ jako PŘ1

integrace s test fcí (+per partes):

$$\int_a^b [q u v + p u' v'] dx + \frac{\beta_2}{\alpha_2} v(b) u(b) + \frac{\beta_1}{\alpha_1} v(a) u(a) = \int_a^b v f dx$$

tj funkcionál $a(u,v) = \int_a^b [p u' v' + q u v] dx + \frac{\beta_2}{\alpha_2} v(b) u(b) + \frac{\beta_1}{\alpha_1} v(a) u(a)$

(S): $a(u,v) = \langle v | f \rangle$ .. opět. sym. fcionál, posit. definitní

$\forall$ test fce bez podmínky ~~v≠0~~ $v=0$ na krajích

→ (V) .. jako obvykle: $F[u] = \frac{1}{2} a(u,u) - \langle f | u \rangle$ .. minimum na

PŘ4: formulace eliptické rovnice ve více dimenzích

$$\mathcal{D} u \equiv -\partial_x (p \partial_x u) - \partial_y (p \partial_y u) + q u = f \quad (D_a)$$

$$\text{tj} \quad -\nabla \cdot (p \nabla u) + q u = f \quad \text{na } \Omega \qquad (D)$$

+ Dirichletova podmínka $u = 0$ pro $(x,y) \in \partial\Omega$ (D_b)

pozn: Green věta: $\int \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega = \int u \nabla v \cdot d\vec{s} - \int u \Delta v \, d\Omega$ spíš potřebuju $\int u \nabla \vec{F} d\Omega = \int u \vec{F} \cdot d\vec{s} - \int \nabla u \cdot \vec{F} d\Omega$

+ násobení test. fcí $v \in V = \{ v$ spoj na Ω, v' po č. spoj omez. na Ω, v spl. $(D_b) \}$

→ (S) $a(u,v) \equiv \int_\Omega (p \nabla u \cdot \nabla v + q u v) d\Omega = \int_\Omega f v \, d\Omega \equiv \langle f | v \rangle \quad \forall v \in V$

(V) $F[u] \equiv \frac{1}{2} a(u,u) - \langle f | u \rangle$ nabývá minima přes $u \in V$

PŘ5: stejná úloha, ale (D_b): $p \, \vec{n} \cdot \nabla u = -k u$ na $\partial\Omega$

modifikace $a(u,v) = \int_\Omega p \nabla u \cdot \nabla v + q u v \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} k u v \, ds$

Trochu víc matematiky: Prostory pro slabou form. PDE:

.. V byl zbytečně restriktivní

OBECNĚ:

$a(u,v)$ je symetrická bilineární forma na V

+ positivně definitní → skalární součin na V ... Hilbertův prostor

(přesněji: ještě úplnost .. tj $\forall$ cauchy posl. v_j konverguje ve V)

základní prostor $L_2(\langle a,b \rangle) = \{ v : \int_a^b v^2 dx < \infty \}$ se skalárním součinem

$\langle u | v \rangle \equiv \int_a^b u v \, dx$ .. pozn: $|\langle u | v \rangle| \leq \|u\| \cdot \|v\| < \infty$ ... ok pro $u,v \in L_2$

nyní potřebujeme trochu menší prostor ... $a(u,v)$

$H^1(\langle a,b\rangle) = \{v : v, v' \in L_2\}$

se skalárním součinem $(u,v)_H = \int_a^b uv + u'v'\,dx$ a normou $\|u\|_H \equiv \sqrt{(u,u)_H}$

pozn: H^1 je větší než V které jsme používali

okraj. podm.: $H^1_0(\langle a,b\rangle) = \{v \in H^1;\ v(a) = v(b) = 0\}$

---

ve více dim. potřebujeme:

$L_2(\Omega) = \{v,\ \int_\Omega v^2\,dx < \infty\}$ $\qquad \langle u,v\rangle = \int_\Omega uv\,d\Omega$

$H^1(\Omega) = \{v \in L_2(\Omega);\ \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L_2(\Omega)\ \forall i = 1,\dots,d\}$; $(u,v)_H = \int_\Omega (uv + \nabla u \cdot \nabla v)\,d\Omega$

$H^1_0(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega);\ v = 0 \text{ na } \partial\Omega\} \subset H^1(\Omega)$

Pro úlohy s více derivacemi potřebujeme $H^2(\Omega)$ .. též druhé derivace L_2

v 1.D skalár. součin $\int (uv + u'v' + u''v'')\,dx$ .. více dim.. součet ∀ indexy

---

.. speciální případ Sobolevových prostorů $W^{k,p}(\Omega)$

vycházejících z $L_p(\Omega)$ ... norma $\left(\int v^p\,dx\right)^{1/p} \equiv \|v\|$

... zúplnění → Banachův prostor; jen pro $p=2$ skalár. součin → Hilbert.

Ritzova variační a Galerkinova metoda

aneb použití (V) a (S) formulací pro přibližné řešení PDE

Obecná formulace:

- nechť V je Hilbertův prostor se skal. souč. $\langle\cdot,\cdot\rangle$ a $\|\cdot\| = \sqrt{\langle\cdot,\cdot\rangle}$
- nechť a je bilineární forma na V splňující
  - symetrická $a(u,v) = a(v,u)$
  - spojitá, tj. $\exists \gamma > 0 : |a(u,v)| \le \gamma \|u\| \cdot \|v\| \quad \forall u,v$

    (v ~~∞~~ dim ∀ lin je spojitá; zde ohled na [illegible] ve ∀ směrech)
  - a je eliptická na V, tj. $\exists \alpha > 0 : a(v,v) \ge \alpha \|v\|^2 \quad \forall v \in V$

    .. podobně .. pozit. definitní tvar v ∞ dim (ne semi definit)
- nechť L je spojitý lin. ~~funkcionál~~ forma na V, tj. $\exists \Lambda > 0 : |L(v)| \le \Lambda \|v\| \quad \forall v \in V$

→ dá se DK: (S) nalezněte $u \in V$: $a(u,v) = L(v) \quad \forall v \in V$

(V) nalezněte $u \in V$: $F(u) \le F(v) \quad \forall v \in V$, kde

$$F(u) \equiv \tfrac{1}{2} a(u,v) - L(V)$$

jsou ekvivalentní a že $\exists!$ řešení $u \in V$; navíc $\|u\| \le \frac{\Lambda}{\alpha}$

pozn (S) má smysl i pro nesymetrické $a(\cdot,\cdot)$

Diskretizace problému

nechť $V_n \subset V$ je konečně ~~dim~~ rozměrný s bází $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots \varphi_n\}$

tj $\forall v \in V_n \ \exists \eta_i \in \mathbb{R}: v = \sum_i \eta_i \phi_i$

Ritzův variační princip .. minimalizujeme $F[v]$ na V_n

$\equiv$ minimalizace funkce n proměnných η_i

vede na stejnou rovnici jako

Galerkinova metoda ... splnění (S) na V_n

tj hledáme $u_n \in V$ (nejlepší odhad řešení u ve $V_n \subset V$)

tak, že $a(u_n, v) = L(v) \quad \forall v \in V_n$

tj (linearita): $a(u_n, \phi_j) = L(\phi_j) \quad \forall j = 1, \dots n$

+ dosazení $u_n = \sum \xi_i \phi_i \longrightarrow A\xi = b$, kde $A_{ij} = a(\varphi_i, \varphi_j)$, $b_j = L(\varphi_j)$

terminologie: A .. matice tuhosti, b .. vektor zatížení } motivace teor. elasticity

pozn: eliptičnost ... $a(v,v) = a(\sum \eta_i \phi_i, \sum \eta_i \phi_i) = \eta^T A \eta$

$\Rightarrow$ A je symetrická positivně defin. matice $\Rightarrow$ regulární

$\Rightarrow \exists!$ řešení $\xi = A^{-1} b$

stabilita metody pro $n \to \infty$ ... platí $\|u_n\| \le \frac{\Lambda}{\alpha}$

neboť $\alpha \|u_n\|^2 \underset{\text{eliptič.}}{\le} a(u_n, u_n) = L(u_n) \le \Lambda \|u_n\| \Rightarrow$

Metoda konečných prvků (FEM)

.. metoda jak systematicky konstruovat V_n -- rozdělení Ω na malé oblasti ω_k

Požadavky (výhody FEM):

- co nejlepší pokrytí $V_\infty \supset V_n$ (.. systematická konstr. bazí $n \to \infty$ .. polynomy na podoblastech Ω)
- Efektivní algoritmus řešení $A\xi = b$ (zde řídká matice .. ϕ_i mají malý support a jen mat. elementy pro překrývající supp nenulové)
- snadná rekonstrukce řešení ~~u~~ $\sum \xi_j \phi_j(x)$ ... ($x \in \omega_k$ a jen několik ϕ_j nenulových na ω_k, navíc většinou $\phi_j(x) = 1$, $= 0$ ve význačných bodech sítě)

Příklad

Implementace FEM pro 1D problém

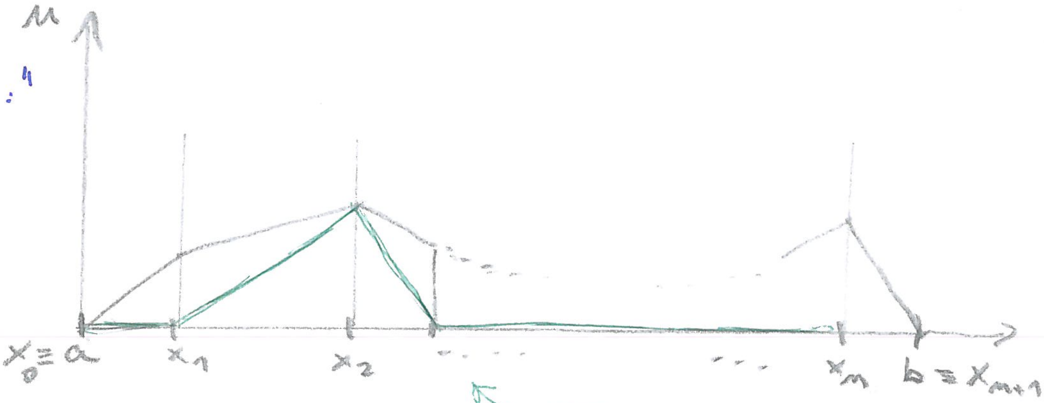
$\Omega = \langle a,b \rangle$

"triangulace oblasti:"

$\omega_j = \langle x_{j-1}, x_j \rangle$

V_h = prostor ∀ spoj. po částech lin. fcí

$V_h \subset V$



počet volných parametrů = n .. vhodná báze $\boxed{\phi_i(x_j) = \delta_{ij}}$ supp $\phi_i = \omega_i \cup \omega_{i+1}$

v rozkladu $v(x) = \sum_{j=1}^{n} \eta_j \phi_j(x)$ jsou rovnou $\eta_j \equiv v(x_j)$

matice tuhosti (Gramova matice) $A_{ij} \equiv a(\phi_i, \phi_j)$

... nenulová jen pokud $i = j$ nebo i a j nejbliž. sousedi

např. pro $a(u,v) = \int (p\, u' v' + q\, u v)\, dx$ stačí int. poly 2. ř.

tj znát $\int_{\omega_j} p$, $\int_{\omega_j} q$, $\int_{\omega_j} qx$, $\int_{\omega_j} qx^2$

speciální příklad: Poisson rce na rovnoměrné síti: $-\Delta u = f$

vyjde $\frac{1}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & \ddots & \ddots \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$ kde $b_j = \int_a^b f(x) \phi_j(x)\, dx \approx h f(x_j)$

→ přejde na rovnici co jsme odvodili pro koneč. diference

rozdíl: tato formulace má smysl i pro δ-pravou stranu

Odhad chyby

.. pro aprox. po částech lin. fcí

① ověříme spojitost $a(u,v) \equiv \int_I u' v'\, dx \le \|v'\|_{L_2} \cdot \|u'\|_{L_2} \le \|v\|_{H^1} \cdot \|u\|_{H^1}$

tj spojitá s konst $\gamma = 1$

② ověříme elipticitu tj. $\exists \alpha: a(v,v) \ge \alpha \|v\|_{H^1}$

platí $a(v,v) = \int (v')^2 dx$

víme $\int_0^1 (v')^2 dx$ přičemž $v(x) = 0 + \int_0^x v'\, dx$ → $\cancel{|v(x)| \le \int_0^x |v'|\, dx \le \int_0^1 |v'|}$

$\Rightarrow |v(x)| \le \int_0^x |v'|\, dy \le \int_0^1 |v'|\, dx \le \sqrt{\int 1\, dx} \sqrt{\int |v'|^2 dx} \Rightarrow |v|^2 \le \int (v')^2 dx$

$\Rightarrow \boxed{\int |v|^2 \le \int |v'|^2 dx}$

tj $a(v,v) = \frac{1}{2} \int v'^2 dx + \frac{1}{2} \int v'^2 dx \ge \frac{1}{2} \int (v^2 + v'^2)\, dx = \frac{1}{2} \|v\|_{H^1}$

tj $\alpha = \frac{1}{2}$

③ platí, že řešení u_n na model. podprostoru V_n je ze $\forall$ vektorů $v \in V_n$ nejblíže správnému řešení

podrobněji: $\|u-u_n\| \le \frac{\gamma}{\alpha}\|u-v\| \quad \forall v \in V_n$

DK: slabá formulace: $a(u-u_n, w) = 0 \quad \forall w \in V_n$

$$\Rightarrow \alpha\|u-u_n\|_V^2 \le a(u-u_n, u-u_n) = a(u-u_n, u-u_n+w)$$
$$= a(u-u_n, u-v) \le \gamma\|u-u_n\|_V\|u-v\|_V$$

v našem případě: $\|u-u_n\|_{H^1} \le 2\|u-v\|_{H^1}$

+ chyba interpolace .. dá se DK: $|u'(x)-\tilde{u}_n'(x)| \le h\max_I|u''|$

$|u(x)-\tilde{u}_n(x)| \le \frac{h^2}{8}\max|u''|$

$\Rightarrow \|u-u_n\|_{H^1} \le Ch$

+ ukázat podrobněji hladší elementy

+ ukázat elementy ve 2D

P2 v 1D: $A+Bx+Cx^2$

Příklady hladších prvků v 1D:

Hermiteový prvek: .. Hermite aprox: ve dvou bodech známe $f(x_i)$ a $f'(x_i)$

→ 4 podmínky → jednoznačný polynom st 3

prostor: $\forall$ po částech kubické fce, spojité $f(x), f'(x)$ v bodech x_i

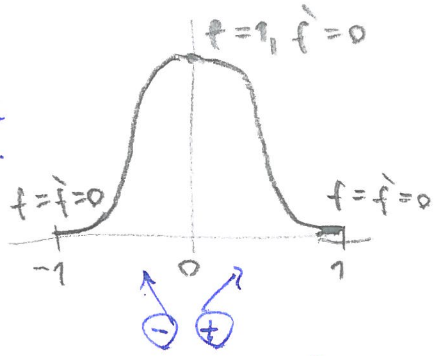
pro 

.. + $f(0)=f(x_{N+1})=0$ → $4(N+1)-2$ param

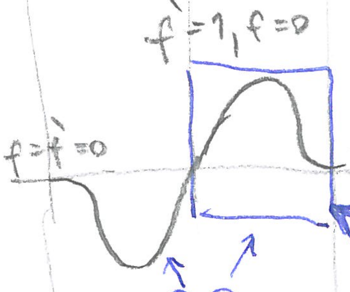
spojitost v $x_1, \dots, x_N$ ... 2N podmínek → 2N+2 vol. param.

navíc f'' po částech spoj ... leží v H^2 .. lze užít pro úl. 4ř. nebo přidat 2 fce na okrajích

Báze: (škálování rovnoměr. síť)



$1-3x^2 \mp 2x^3$



$x \pm 2x^2 + x^3$

← 2 fce na interval

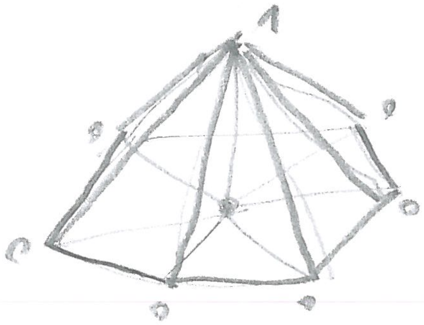
dodatečná báz. fce pro úlohy 2. ř. na okraji integ. oblasti

Zobecnění do více Dim:

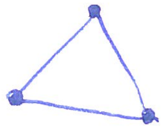
triangulace + po částech lin fce … 3 parametry na jeden Δ + spojitost

$\Longrightarrow$ tolik param. kolik vnitřních bodů

báze:



$\to$ zadání



poly 2. ř ve 2D:

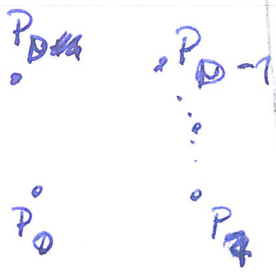
$A + Bx + Cy$
$+ Dx^2 + Ey^2 + Fxy$

$\to$ 6 param,

$\to$ vrcholy a

Lagrange interpolace ve více D:

vrcholy simplexu



$$P_i = (x_1^{(i)} \dots x_D^{(i)})$$

Lineární fce $\Phi(\vec{x})$ taková, že $\Phi(\vec{x}^{(m)}) = 0 \quad \forall m = 0, \dots D-1$

$$\Phi(\vec{x}^{(D)}) = 1$$

uvažujme:

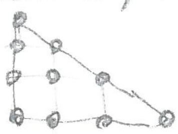
$$\Pi(\vec{x}) = \begin{vmatrix} x_1^{(0)} - x_1, & x_1^{(0)} - x_1^{(1)}, & \dots, & x_1^{(0)} - x_1^{(D-1)} \\ \vdots & \vdots & & \\ x_D^{(0)} - x_D, & x_D^{(0)} - x_D^{(1)}, & \dots, & x_D^{(0)} - x_D^{(D-1)} \end{vmatrix}$$

pak $\Phi(\vec{x}) = \Pi(\vec{x}) / \Pi(\vec{x}^{(D)})$

Další typ prvky:

$\boxed{P3}$ ve 2D: P2 (6 param) $+ ax^3 + bx^2y + cxy^2 + dy^3$ (4 param)

celkem 10:



– pro P4 přibude 5 param atd … aritm. posl.

Gradientní iterační metody

Základní formulace: najít x : $Ax = b$

kde A je symetrická, positivně definitní matice

převedení na minimalizaci kvadratické formy: $\phi(x) = \frac{1}{2} x^T A x - x^T b$

$\nabla\phi(x) = \frac{1}{2}\left(\nabla x^T A x + \nabla x^T A x\right) - b = \frac{1}{2}\, 2\, \nabla_x\, x^T A x - b$ díky symetrii

neboť $\nabla\phi(x) = Ax - b$ tj. $\nabla\phi = 0 \iff Ax = b$

pozitivní definitnost $\hookrightarrow$ je minimum

poznámka: pro obecné x je $-\nabla\phi(x)$ residuum $r \equiv \cancel{Ax}\, b - Ax$

metoda přímek:
- zvolíme x_0, a směr p_0
- každé další x_{k+1} hledáme jako minimum funkce $f(\alpha_k) \equiv \phi(x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k)$

... různé metody podle volby p_k

Metoda největšího spádu (steepest descent meth.)

pouze pedagog. význam → abychom viděli, že to co nás první napadne není vždy nejlepší a pochopili obec. vlastn. grad. metod

~~...~~ volba $p_k = -\nabla\phi = r_k$

→ lokálně nejvíce zmenšujeme ϕ; navíc v $\forall$ kroku alespoň trochu poklesne

... nalezení α_k : $\phi(x_k + \alpha_k r_k) = \frac{1}{2}(x+\alpha r)^T A (x + \alpha r) - (x + \alpha r)^T b$

$$\frac{\partial\phi}{\partial\alpha} = r^T A(x+\alpha r) - r^T b = \alpha r^T A r + r^T(\underbrace{Ax - b}_{-r}) = \alpha r^T A r - r^T r = 0$$

$$\Rightarrow \alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{r_k^T A r_k}$$

shrnutí:

$$r_k = b - A x_k$$
$$\alpha_k = r_k^T r_k / r_k^T A r_k$$
$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k r_k$$

dvě matic. násobení na jeden krok metody. Možno lépe:

$$r_{k+1} = b - A x_{k+1} = b - A(x_k + \alpha_k r_k) = r_k - \alpha_k A r_k$$

Algoritmus: volba x_0; $r_0 = b - A x_0$

$k = 0, 1, \dots$: $w_k = A r_k$ ← jediné matic. násob. na iteraci; navíc málo operací pro řídkou matici

$\alpha_k = r_k^T r_k / r_k^T w_k$

$x_{k+1} = x_k + \alpha_k r_k$

$r_{k+1} = r_k - \alpha_k w_k$

pokud $\| r_{k+1} \| \leq \varepsilon$ konec

→ obecný algoritmus; je třeba dodat proceduru nalezení Ar (resp. $-\nabla\phi$ pro obec. funkcionál) poznámky: pro analýzu konvergence je vhodné diagonalizovat A:

symetrická matice → $A = \sum_i v_i \lambda_i v_i^T$

pozitivně definitní → $\lambda_i > 0 \ \forall i$

pro chybu řešení platí: $e_k \equiv x_k - x$ ... $A e_k = -r_k$

- pokud e_0 je vl. vektorem ... konv. po jedné iteraci

- pokud A iso~~morfní~~tropní ; tj. $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots$
  → konvergence po jedné iteraci

- ale obecně může být špatná pro špatně podmíněnou matici $\lambda_{min} \ll \lambda_{max}$

.. vč. ve 2D: můžeme potřebovat dost iterací .. dobré si uvědomit:

$r_{k+1} \perp r_k$

(obecně v metodě přímek $r_{k+1} \perp p_k$)

OBECNĚ .. analýza konvergence: $e_k = \sum_i \xi_i v_i$

$$e_{k+1} = x_{k+1} - x = x_k - x + \alpha_k r_k = e_k + \alpha_k r_k$$

konvergence v A-normě ... $\|e\|_A \equiv \sqrt{e^T A e}$

$$\|e_{k+1}\|_A^2 = (e_k + \alpha_k r_k)^T A (e_k + \alpha_k r_k) = \|e_k\|_A^2 + 2\alpha_k r_k^T \underbrace{A e_k}_{-r_k} + \underbrace{\alpha_k^2 r_k^T A r_k}_{\frac{(r_k^T r_k)^2}{r_k^T A r_k}}$$

$$-2\frac{(r_k^T r_k)^2}{r_k^T A r_k}$$

$$= \|e_k\|_A^2 - \frac{(r_k^T r_k)^2}{r_k^T A r_k}$$ ← skončit už tady

$$= \|e_k\|_A^2 \left(1 - \frac{\left(\sum \xi_i^2 \lambda_i^2\right)^2}{\sum \xi_i^2 \lambda_i^3 \ \sum \xi_i^2 \lambda_i}\right)$$

w_1 $\quad$ w_2

tohle je menší než 1: skalární součin vektorů $(\xi_i \lambda_i^{3/2}, \dots) \cdot (\dots \xi_i \lambda_i^{1/2})$ $\equiv \sum \xi_i^2 \lambda_i^2 \le \|w_1\| \|w_2\|$

w_1 a w_2 kolineární jen pro $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots$ (jen tehdy rovnost)

Vylepšení → lepší volba p_k

Podstata problému .. v největším spádu se opakují stejné směry

.. ve 2D je vidět $r_{k+1} \perp r_k \perp r_{k-1}$

řešení .. zaručit, aby se "každý směr prohledával jednou"

obecně: minimum ve směru p: $\phi(x + \alpha p) = \frac{1}{2}(x + \alpha p)^T A (x + \alpha p) - p^T b$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \alpha} = p^T A (x + \alpha p) - p^T b = p^T (Ax - b) + \alpha p^T A p = -p^T r + \alpha p^T A p = 0$$

$$\Rightarrow \alpha = \frac{p^T r}{p^T A p}$$

dále jsem nemačil bisdružené grad. → rozebrat lépe

+ použití na minimalizaci obecně

-- najít co přesně zaměnit v algoritmu

Metoda sdružených gradientů

Klíčový trik: vzorec $\alpha = \dfrac{p^T r}{p^T A p} = \dfrac{-p^T A e}{p^T A p}$ je vzorec pro složku vektoru pokud máme skal. součin s metrikou danou A

Tj. je potřeba najít řadu A-ortogonálních (sdružených) směrů:

$$p_k^T A p_{k'} = \delta_{kk'} \qquad \dots \quad e_k = \sum_j \beta_j p_j \equiv x_k - x$$

tedy
$$\alpha_k \equiv \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k} = -\frac{p_k^T A e_k}{p_k^T A p_k} = -\beta_k \frac{p_k^T A p_k}{p_k^T A p_k} = -\beta$$

tj. $x_{k+1} = x_k + \alpha p_k = x + \sum_j \beta_j p_j - \beta_k p_k$

→ každý krok odečte jeden člen sumy) ... konvergence po N krocích

<u>konstrukce p_k</u>? z gradientů $\phi(x)$ pomocí Gram-Schmidtova.

<u>Algoritmus:</u> ① Volba x_0

$r_0 = b - A x_0$

$p_0 = r_0 \; ; \; \gamma_0 = r_0^T r_0$

pro $k = 0, 1, \dots$:

$$\left.\begin{aligned} w_k &= A p_k \\ \alpha_k &= \gamma_k / (p_k^T w_k) \\ x_{k+1} &= x_k + \alpha_k p_k \\ r_{k+1} &= r_k - \alpha_k w_k \end{aligned}\right\} \text{minimalizace podél přímky } x_k + \alpha_k p_k$$

$$\left.\begin{aligned} \gamma_{k+1} &= r_{k+1}^T r_{k+1} \\ \beta_k &= \gamma_{k+1} / \gamma_k \\ p_{k+1} &= r_{k+1} + \beta_k p_k \end{aligned}\right\} \text{konstrukce nového směru}$$

<u>poznámky:</u> • je opět jen jedno násobení na jednu iteraci

navíc jak r_k tak p_k leží v Krylovově prostoru

$\mathcal{L}(r_0, A r_0, A^2 r_0, \dots, A^{k-1} r_0)$

$\mathcal{L}(A e_0, \dots, A^k e_0)$

• platí: 1) $p_k^T A p_j = 0 \quad \forall j = 0, 1, 2, \dots, k-1$ konjugovanost směrů

2) $r_k^T r_j = 0 \quad \forall j = 0, \dots, k-1$ ortogonalita rezidui

3) $r_k^T p_j = 0 \quad \forall j = 0, \dots, k-1$

tohle by chtělo rozebrat

Vlastnosti metody CG:

→ $x_k, p_k, r_k \in \mathcal{L}\{b, Ab, \dots, A^m b\} \equiv K_{m+1}$ $m = \begin{cases} k & r, p \\ k-1 & x \end{cases}$

→ "optimálnost CG":

x_m minimalizuje $\|x_m - x\|_A$ v K_m a tedy $\|x_m - x\|_A \leq \|x_{m-1} - x\|_A$

$\|x_m - x\|_A = 0$ pro nějaké $m \leq N \equiv \dim A$

→ Rychlost konvergence CG:

nechť A posit. def., symetrická; $\varkappa$ = č. podmíněnosti $A = \frac{\|A\|_2}{\|A^{-1}\|_2}$

pak: $$\frac{\|x_m - x\|_A}{\|x_0 - x\|_A} \leq \frac{2}{\left(\frac{\sqrt{\varkappa}+1}{\sqrt{\varkappa}-1}\right)^m + \left(\frac{\sqrt{\varkappa}+1}{\sqrt{\varkappa}-1}\right)^{-m}} \leq 2\left(\frac{\sqrt{\varkappa}-1}{\sqrt{\varkappa}+1}\right)^m$$

"PRECONDITIONING" .. předpodmínění

- Formulace problému jiným způsobem, aby matice kterou iterujeme měla lepší vlastnosti (→ rychlejší konvergence)

PŘ: $Ax = b$; M regulární matice

$\Leftrightarrow$ $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ ... iterujeme $(M^{-1}A)$ místo A

terminologie: $M \equiv$ preconditioner

- musíme umět rychle počítat M^{-1} (resp. řešit $My = c$)
- typicky výhodné, aby $\|M^{-1}A - I\|_2$ malá

Trefethen: "rule of thumb":

M is good if $M^{-1}A$ not far from normal and its eigvals are clustered.

symetrický "PRECONDITIONING"

$M = CC^+$ → $M^{-1} = (C^{-1})^+ C^{-1}$

tj. $M^{-1}Ax = M^{-1}b \Leftrightarrow \underbrace{[C^{-1}A(C^{-1})^+]}_{\text{nová matice k iterování}} C^+ x = C^{-1}b$

OBLÍBENÉ ZPŮSOBY:

- Diagonál matice $A = M$
- Incomplete LU .. jako LU ale nechávám jen prvky, které nulové v M (nebo Cholesky) R^+R
- Hrubší grid
- Fyzikál. aprox.
- Period. aprox.
- Lokální aprox.
- Blok. prekond.
- Disker nižšího řádu
- Část matice $A = A_1 + A_2$
- střídavé směry

DALŠÍ KRYLOVOVSKÉ METODY

- CGN – CG aplikované na normální matici

  $Ax = b \longrightarrow A^+ A x = A^+ b$

  → problém ... zhorší číslo podmíněnosti, ale někdy snesitelné

- BCG – Biconjugate Gradients

  – zavádí levé a pravé směry

  Algoritmus:

$$
\begin{aligned}
& x_0 = 0 \\
& p_0 = r_0 = b \\
& q_0 = s_0 = \text{libovol.} \\
& \text{for } n = 1, 2, 3 \dots \\
& \quad \alpha_n = s_{n-1}^+ r_{n-1} / q_{n-1}^+ A p_{n-1} \\
& \quad x_n = x_{n-1} + \alpha_n [redacted] p_{n-1} \\
& \quad r_n = r_{n-1} - \alpha_n A p_{n-1} \\
& \quad s_n = s_{n-1} - \alpha_n^* A^+ q_{n-1} \\
& \quad \beta_n = (s_n^+ r_n) / (s_{n-1}^+ r_{n-1}) \\
& \quad p_n = r_n + \beta_n p_{n-1} \\
& \quad q_n = s_n + \beta_n^* q_{n-1}
\end{aligned}
$$

→ platí: $s_n^+ r_j = q_n^+ A p_j = 0$ pro $j < n$

- Lanczos & Arnoldi

  → hledá bázi $v_0, v_1, \dots v_{n-1}$ v K_n tak, že $\langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}$

  a $\langle v_i | A | v_j \rangle$ je 3-diagonální (upper Hessenberg)

- GMRES: minimalizuje $\|r_n\|_2$ v K_n

  → ale plná rekurence při ortogonalizaci na předch.