

Лекция 1: ‘Происхождение систем уравнений’

Кирилл Терехов

ИВМ РАН, ВТМГБ ФПМИ МФТИ, ВТМ ВМК МГУ, Университет Сириус

<https://dodo.inm.ras.ru/terekhov/lect1/01/presentation.pdf>

19 апреля 2024 г.

1 Лекция 1:

Происхождение систем уравнений

- Системы линейных уравнений
 - Разреженные системы
 - Форматы хранения
 - Свойства систем
 - Свойства M -матриц
 - Свойства седловых систем
 - Граф матрицы
- Задачи математической физики
 - Типы уравнений
 - Расчетные сетки
 - Уравнение Пуассона
 - Уравнение Стокса
 - Уравнение Био
 - Уравнение двухфазной фильтрации
 - Бигармоническое уравнение
- Сложность решения систем
- Пакеты программ

Лекция 1:
Происхождение систем уравнений

Система линейных алгебраических уравнений

Система линейных алгебраических уравнений - одновременное выполнение нескольких условий.

Пример (три условия и три неизвестных)

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3. \end{cases} \implies \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix},$$

можно записать в виде

$$Ax = b, \quad A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}.$$

обозначим $A = \{a_{ij}\}_{1 \leq i, j \leq 3} \in \mathcal{R}^{3 \times 3}$ - матрица вещественных чисел размера 3 на 3, $x, b \in \mathcal{R}^3$ - вектора длины 3.

Разреженные системы

Для произвольного N : $Ax = b$, где
 $A = \{a_{ij}\}_{1 \leq i, j \leq N} \in \mathcal{R}^{N \times N}$, $x, b \in \mathcal{R}^N$.

В дальнейшем нас будут интересовать разреженные системы.

Определение (Число ненулевых)

В строке i : $M_i = |\{j | a_{ij} \neq 0\}|$.

Определение (Разреженная система)

Если $\forall i \in \{1, N\} : M_i \ll N$.

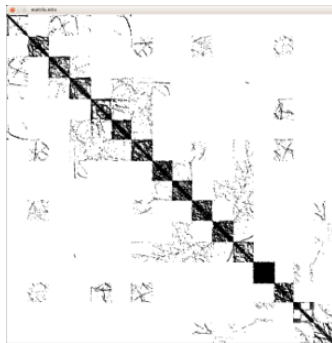
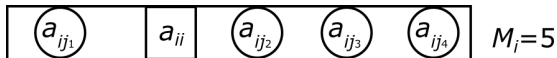


Рис. 1: $N \approx 3 \cdot 10^6$, $M \leq 4$.



Форматы хранения разреженных матриц

Пример (CSR-формат)

CSR: *compressed sparse row*. Состоит из трех массивов: ia - индекс начала и конца каждой строки, ja - номера столбцов, a - значения.

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -2 & & -1 \\ -2 & 9 & -7 & \\ & -4 & 6 & -2 \\ -2 & & -3 & 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{array}{l} ia : [0, 3, 6, 9, 12] \\ ja : [1, 2, 4, 1, 2, 3, 2, 3, 4, 1, 3, 4] \\ a : [4, -2, -1, -2, 9, -7, \\ -4, 6, -2, -2, -3, 5] \end{array}$$

Удобно проходить по строкам матрицы, а по столбцам - не удобно. По аналогии с CSR существует формат CSC: *compressed sparse column*.

Форматы хранения разреженных матриц

Пример (COO-формат)

COO: coordinate list. Состоит из трех массивов: ia - индексы строки, ja - индексы столбца, a - значения.

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -2 & & -1 \\ -2 & 9 & -7 & \\ & -4 & 6 & -2 \\ -2 & & -3 & 5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{array}{l} ia : [1, 2, 3, 4, 1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4] \\ ja : [1, 2, 3, 4, 2, 4, 1, 3, 2, 4, 1, 3] \\ a : [4, 9, 6, 5, -2, -1, -2, -7, \\ -4, -2, -2, -3] \end{array}$$

Стандартный файловый формат `.mtx` называемый *Matrix Market* используется для обмена разреженных матриц и соответствует COO-формату хранения. Большое число разреженных матриц в данном формате по адресам: <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>, <https://sparse.tamu.edu/>.



A visual repository of test data for use in comparative studies of algorithms for numerical linear algebra, featuring nearly 500 sparse matrices from a variety of applications, as well as matrix generation tools and services.

Browse

[by collection](#)
[by matrix name](#)
[by generator name](#)
[the top ten](#)

Interactive Generation

[via Java \(the Deli\)](#)

Search

[by matrix properties](#)
[by application area](#)
[by contributor](#)

Software

Matrix Market I/O:
... in [C](#), [Fortran](#), [Matlab](#)
Harwell-Boeing I/O:
... in [C](#), [Fortran](#), [Matlab](#)

Background

[Welcome](#)
[What's New](#)
[What's Coming](#)
[Credits](#)

Sponsors

[NIST](#)
[ITL](#)
[TEMSS](#)

Рис. 2: Страницка с матрицами

Определение (симметричная матрица)

Матрица *симметричная*, если $A = A^T$ или $\forall i, j : a_{ij} = a_{ji}$

Определение (положительно определенная)

Симметричная матрица называется *положительно определенной* ($A > 0$), если $x^T A x > 0, \forall x \neq 0 \in \mathcal{R}^N$

Свойство (положительно определенная)

Если $A = E \Lambda E^T$ - спектральное разложение, $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ - собственные значения, то $\forall i : \lambda_i > 0 \in \mathcal{R}$

Определение (диагонально-доминантная)

Матрица является *диагонально-доминантной*, если $\forall i : |a_{ii}| \geq \sum_{i \neq j} |a_{ij}|$

Свойство (Число обусловленности)

Для некоторой матричной нормы число обусловленности определяется по формуле $\mu(A) = \|A^{-1}\| \|A\| \geq 1$. При использовании 2-нормы и сингулярного разложения $\mu(A) = \sigma_{\max} / \sigma_{\min}$.

Число обусловленности влияет на точность итерационных методов решения систем и арифметическую сложность достижения указанной точности.

Для понижения числа обусловленности систем применяются предобуславливатели (preconditioner).



Рис. 3: Предобуславливатель :)

Свойства M -матриц

Определение (Z -матрица)

Назовем матрицу Z -матрицей, если $\forall i : a_{ii} > 0$ и $\forall i \neq j : a_{ij} \leq 0$

Определение (M -матрица)

Z -матрица называется M -матрицей, если $A = s\mathbb{I} - B$, где \mathbb{I} - единичная матрица, $B = \{b_{ij}\}$, $\forall i, j : b_{ij} \geq 0$, $s \geq \max_i (\lambda_i(B))$

Определение (Слабо диагонально-доминантная M -матрица)

M -матрица называется слабо диагонально-доминантной, если $\forall i : \sum_j a_{ij} \geq 0$

Пример (Слабо диагонально-доминантная M -матрица)

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -2 & & -1 \\ -2 & 9 & -7 & \\ & -4 & 6 & -2 \\ -2 & & -3 & 5 \end{bmatrix} \rightarrow A^{-1} = \frac{1}{76} \begin{bmatrix} 76 & 60 & 97 & 54 \\ 76 & 84 & 132 & 68 \\ 76 & 80 & 142 & 72 \\ 76 & 72 & 124 & 80 \end{bmatrix}$$

Обратная матрица к слабо диагонально-доминантной M -матрице имеет все положительные значения, следовательно, если $\forall i : b_i \geq 0$, то $\forall i : x_i \geq 0$, где $x = A^{-1}b$ (дискретный аналог принципа максимума).

Обращение *разреженной* матрицы приводит к *плотной* матрице!

Понятие M -матриц ввел Александр Островский в 1937 г. в честь Германа Минковского, который первым исследовал свойства подобных Z -матриц.



Рис. 4: Александр Островский

Определение (Дополнение по Шуру)

Представим $A \in \mathcal{R}^{N \times N}$ в блочном виде и определим *дополнение по Шуру* S_C на правый-нижний блок C :

$$A = \begin{bmatrix} B & F \\ E & C \end{bmatrix} \rightarrow S_C = C - EB^{-1}F$$

где $B \in \mathcal{R}^{K \times K}$ - невырожденная, $F, E^T \in \mathcal{R}^{K \times L}$, $C \in \mathcal{R}^{L \times L}$, $N = K + L$

Определение (Симметричная квазиопределенная система)

Назовем симметричную матрицу A квази-определенной, если она представима в блочном виде с блоками $B > 0$, $C \geq 0$:

$$A = \begin{bmatrix} B & F \\ F^T & -C \end{bmatrix} \quad \text{либо} \quad A = \begin{bmatrix} B & F \\ F^T & F \end{bmatrix}$$

Свойство (Симметричная квази-определенная система)

Пусть блоки $B > 0 \in \mathcal{R}^{K \times K}$ и $C \geq 0 \in \mathcal{R}^{L \times L}$, тогда квази-определенная система A имеет K положительных действительных собственных значений и L отрицательных собственных значений:

$$A = \begin{bmatrix} B & E \\ E^T & -C \end{bmatrix} \rightarrow S_C = -C - E^T B^{-1} E < 0$$

Многие эффективные подходы оказываются не применимы к подобным системам “в лоб”.

Свойства седловых систем

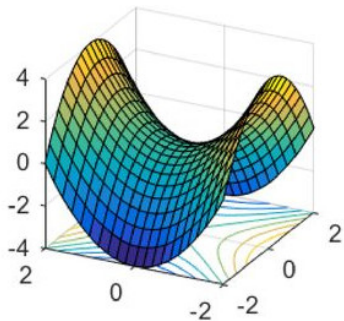
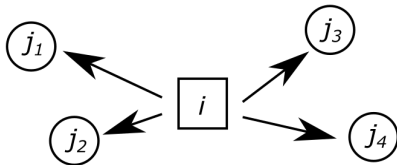
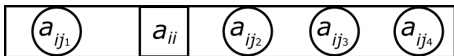


Рис. 5: Гессиан от поверхности на “седле” - квази-определенная матрица.

Граф матрицы

Определение (граф матрицы)

Граф $G = (V, E)$ задается набором вершин V и ребер E . Для разреженной матрицы $A = \{a_{ij}\} \in \mathcal{R}^{N \times N}$ набором вершин будем считать числа от 1 до N : $V = \{1, N\}$, а ребра из вершины i определяются по всем ненулевым элементам матрицы: $E_i = \{j | a_{ij} \neq 0\}$.



Ряд методов основан на анализе графа матрицы и перепорядочивании системы.

Задачи математической физики

$$-\Delta p = b \quad (\text{задача Пуассона})$$

$$\partial_t T - \kappa \Delta T = b \quad (\text{теплопроводность})$$

$$(\vec{u} \cdot \nabla) C = b \quad (\text{перенос вещества})$$

$$\begin{cases} -\mu \Delta \vec{u} + \nabla p = b \\ \operatorname{div}(\vec{u}) = 0 \end{cases} \quad (\text{система Стокса})$$

$$\begin{cases} -\mu \Delta \vec{u} - (\mu + \lambda) \nabla \operatorname{div}(\vec{u}) + \alpha \nabla p = b \\ \partial_t (\zeta p + \alpha \operatorname{div}(\vec{u})) - \kappa \Delta p = q \end{cases} \quad (\text{система Био})$$

$$\begin{cases} \phi \partial_t S - \operatorname{div}(S \kappa \nabla p) = q_o \\ \phi \partial_t (1 - S) - \operatorname{div}((1 - S) \kappa \nabla p) = q_w \end{cases} \quad (\text{двухфазная фильтрация})$$

$$-\Delta^2 p = b \quad (\text{бигармоническое уравнение})$$

+ граничные и начальные условия.

Типы уравнений

$$-\Delta p = b \quad (\text{эллиптические})$$

$$\partial_t T - \kappa \Delta T = b \quad (\text{параболические})$$

$$(\vec{u} \cdot \nabla) C = b \quad (\text{гиперболические})$$

$$\begin{cases} -\mu \Delta \vec{u} + \nabla p = b \\ \operatorname{div}(\vec{u}) = 0 \end{cases} \quad (\text{седловые})$$

$$\begin{cases} -\mu \Delta \vec{u} - (\mu + \lambda) \nabla \operatorname{div}(\vec{u}) + \alpha \nabla p = b \\ \partial_t (\zeta p + \alpha \operatorname{div}(\vec{u})) - \kappa \Delta p = q \end{cases} \quad (\text{седловые})$$

$$\begin{cases} \phi \partial_t S - \operatorname{div}(S \kappa \nabla p) = q_o \\ \phi \partial_t (1 - S) - \operatorname{div}((1 - S) \kappa \nabla p) = q_w \end{cases} \quad (\text{блочные})$$

$$-\Delta^2 p = b \quad (\text{эллиптические})$$

+ граничные и начальные условия.

Задачи математической физики



Рис. 6: Пьер Симон
Лаплас 1749–1827.



Рис. 7: Симеон
Дени Пуассон
1781–1840.

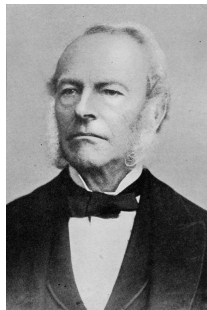


Рис. 8: Джордж
Габриэль Стокс
1819–1903.



Рис. 9: Маурис
Энтони Био
1905–1985.

Для решения уравнения необходимо ввести **сетку** для области Ω , определить на сетке степени свободы - **неизвестные**, применить **метод** дискретизации уравнений в частных производных.

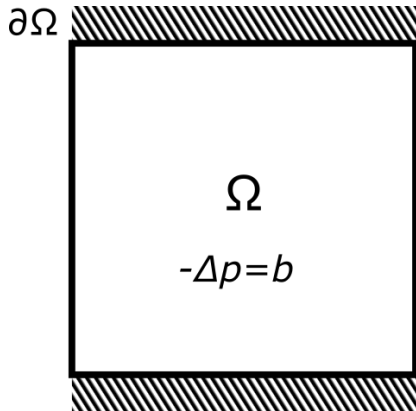


Рис. 10: Область Ω и её граница $\partial\Omega$.

Типы расчетных сеток (структурированные)

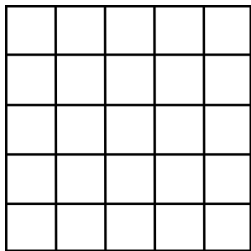


Рис. 11:
Прямоугольная

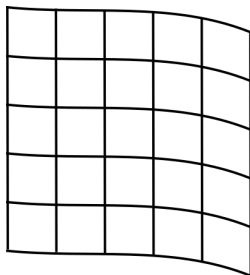


Рис. 12:
Криволинейная

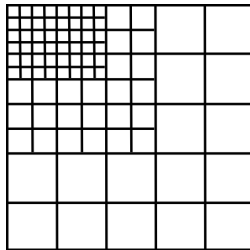


Рис. 13: Адаптивная

Типы расчетных сеток (неструктурированные)

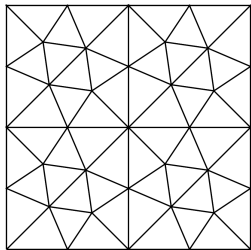


Рис. 14: Треугольная

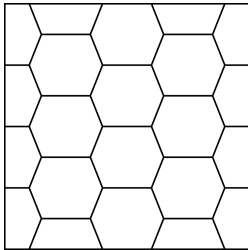


Рис. 15: Многогранная

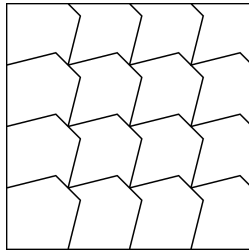


Рис. 16: Невыпуклая

Расположение степеней свободы

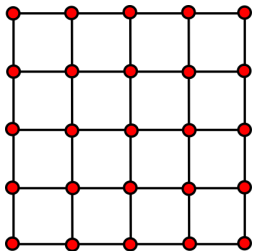


Рис. 17: В узлах

Метод конечных разностей, метод конечных элементов

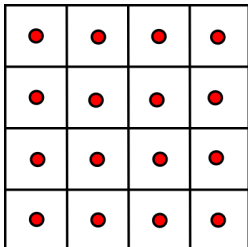


Рис. 18: В ячейках

Метод конечных объемов

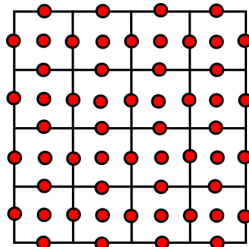


Рис. 19: Смешанно

Смешанный МКЭ, метод опорных операторов

Расположение степеней свободы условно связано с применяемым методом дискретизации.

Уравнение Пуассона (МКР)

- Введем неизвестные на узлах прямоугольной сетки с шагом h .
- Уравнения:

$$-\Delta p = -\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = b$$

- Требуется аппроксимация второй производной

$$\frac{\partial^2 p_{i,j}}{\partial x^2} \approx ?$$

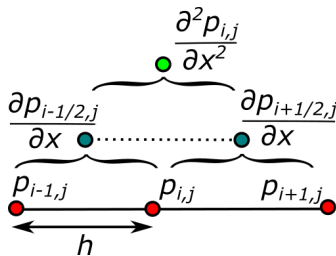


Рис. 20: Шаблон

Уравнение Пуассона (МКР)

- Первая производная

$$\frac{\partial p_{i+1/2,j}}{\partial x} \approx \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{h}$$

- Вторая производная

$$\frac{\partial^2 p_{i,j}}{\partial x^2} \approx \frac{1}{h} \left(\frac{\partial p_{i+1/2,j}}{\partial x} - \frac{\partial p_{i-1/2,j}}{\partial x} \right)$$

- Вторая производная

$$\frac{\partial^2 p_{i,j}}{\partial x^2} \approx \frac{p_{i-1,j} - 2p_{i,j} + p_{i+1,j}}{h^2}$$

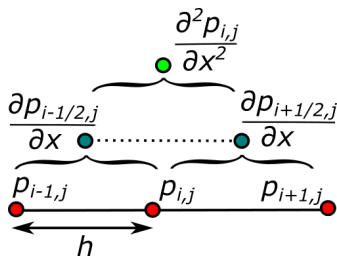


Рис. 21: Шаблон

Уравнение Пуассона (МКР)

- Получим 5-точечный шаблон для $-\Delta p = b$:

$$4p_{i,j} - p_{i-1,j} - p_{i,j-1} - p_{i+1,j} - p_{i,j+1} = h^2 b_{i,j}$$

- На границе типа Дирихле $p_{i-1,j} = p_b$:

$$4p_{i,j} - p_{i,j-1} - p_{i+1,j} - p_{i,j+1} = h^2 b_{i,j} + p_b$$

- На границе типа Неймана $\partial p / \partial x = 0$:

$$3p_{i,j} - p_{i,j-1} - p_{i+1,j} - p_{i,j+1} = h^2 b_{i,j}$$

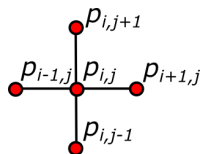


Рис. 22: Шаблон

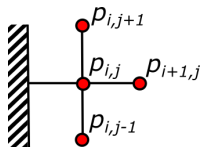


Рис. 23: Граница

Уравнение Пуассона (МКР)

Получим 5-точечный шаблон для $-\Delta p = b$:

$$4p_{i,j} - p_{i-1,j} - p_{i,j-1} - p_{i+1,j} - p_{i,j+1} = h^2 b_{i,j}$$

В матричном виде:

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{i,j} \\ p_{i-1,j} \\ p_{i,j-1} \\ p_{i+1,j} \\ p_{i,j+1} \end{bmatrix} = h^2 b_{i,j}$$

Уравнение Пуассона (МКР)

На границе типа Дирихле $p_{i-1,j} = p_b$:

$$4p_{i,j} - p_{i,j-1} - p_{i+1,j} - p_{i,j+1} = h^2 b_{i,j} + p_b$$

В матричном виде:

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{i,j} \\ p_{i,j-1} \\ p_{i+1,j} \\ p_{i,j+1} \end{bmatrix} = h^2 b_{i,j} + p_b$$

Уравнение Пуассона (МКР)

На границе типа Неймана $\partial p / \partial x = 0$:

$$3p_{i,j} - p_{i,j-1} - p_{i+1,j} - p_{i,j+1} = h^2 b_{i,j}$$

В матричном виде:

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{i,j} \\ p_{i,j-1} \\ p_{i+1,j} \\ p_{i,j+1} \end{bmatrix} = h^2 b_{i,j}$$

Уравнение Пуассона (МКР)

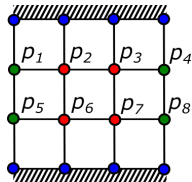


Рис. 24: Красные круги - неизвестные, синие - условия типа Дирихле, зеленые - типа Неймана.

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & & & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & & & & \\ & -1 & 4 & -1 & & & & \\ & & -1 & 3 & & & & -1 \\ -1 & & & & 3 & -1 & & \\ & -1 & & & -1 & 4 & -1 & \\ & & -1 & & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & & & -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \\ p_5 \\ p_6 \\ p_7 \\ p_8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \\ b_6 \\ b_7 \\ b_8 \end{bmatrix} h^2$$

Симметричная диагонально-доминантная M -матрица!

Уравнение Пуассона (МКО)

- Уравнение в дивергентной форме:

$$-\Delta p = -\operatorname{div}(\nabla p) = b$$

- Проинтегрируем по объему ω :

$$-\int_{\omega} \operatorname{div}(\nabla p) dV = \int_{\omega} b dV$$

- Используем теорему Остроградского-Гаусса:

$$-\oint_{\partial\omega} dS \cdot \nabla p = \int_{\omega} b dV$$

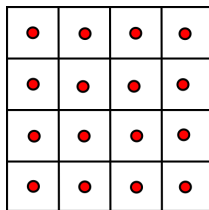


Рис. 25: В ячейках

Уравнение Пуассона (МКО)

- Используем теорему Остроградского-Гаусса:

$$-\oint_{\partial\omega} dS \cdot \nabla p = \int_{\omega} b dV$$

- Аппроксимируем со вторым порядком:

$$-\sum_{\sigma \in \partial\omega} |\sigma| n \cdot \nabla p = |\omega| b$$

- Требуется определить поток: $q = n \cdot \nabla p$.

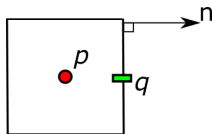


Рис. 26: Поток

Уравнение Пуассона (МКО)

- Требуется определить поток: $q = n \cdot \nabla p$.
- На регулярной сетке с шагом h :

$$q = n \cdot \nabla p = \frac{\partial p}{\partial x} \approx \frac{p_2 - p_1}{h}$$

- На границе типа Дирихле:

$$q \approx 2 \frac{p_b - p_1}{h}$$

- На границе типа Неймана $q = 0$.
- Площадь грани $|\sigma| = h$, объем ячейки $|\omega| = h^2$.

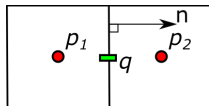


Рис. 27: Поток

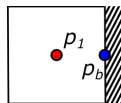


Рис. 28: Граница

Уравнение Пуассона (МКО)

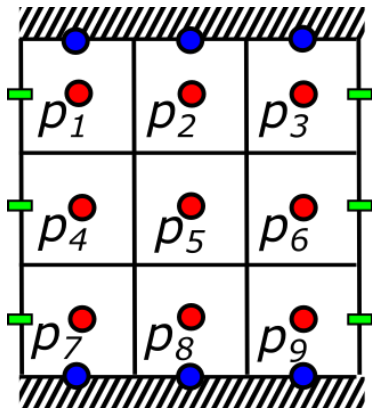


Рис. 29: Красные круги - неизвестные, синие круги - условия типа Дирихле, зеленые прямоугольники - типа Неймана.

Уравнение Пуассона (МКО)

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & & -1 & & & & & & & \\ -1 & 5 & -1 & & -1 & & & & & & \\ & -1 & 4 & & & -1 & & & & & \\ -1 & & & 3 & -1 & & -1 & & & & \\ & -1 & & -1 & 4 & -1 & & -1 & & & \\ & & -1 & & -1 & 3 & & & -1 & & \\ & & & -1 & & & 4 & -1 & & & \\ & & & & -1 & & -1 & 5 & -1 & & \\ & & & & & -1 & & -1 & 4 & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \\ p_5 \\ p_6 \\ p_7 \\ p_8 \\ p_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \\ b_6 \\ b_7 \\ b_8 \\ b_9 \end{bmatrix} h^2$$

Симметричная диагонально-доминантная М-матрица!

Уравнение Пуассона (МКО)

- Требуется определить поток: $q = n \cdot \nabla p$.
- На нерегулярной сетке?
- Нужна аппроксимация в поперечном направлении:

$$q \approx \frac{p_2 - p_1}{h} + \left(n - \frac{x_2 - x_1}{h} \right) \cdot \nabla p$$

- Легко нарушить симметрию и свойства M -матрицы.

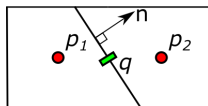


Рис. 30: Поток

Уравнение Пуассона (МОО)

- Аппроксимация дивергенции

$$-\sum_{\sigma \in \partial\omega} |\sigma| n \cdot \nabla p = -\sum_{\sigma \in \partial\omega} q_{\sigma_i} = |\omega| b$$

- Потoki через грани

$$q_{\sigma_i} = |\sigma| n_i \cdot \nabla p$$

- Конечные разности

$$(x_{\sigma_i} - x_1) \cdot \nabla p = p_{\sigma_i} - p_1$$

- Уравнения на гранях: равенство потоков.

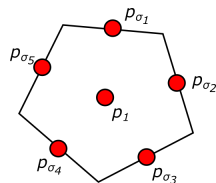


Рис. 31: Смешанно

Уравнение Пуассона (МОО)

- Потоки в матричном виде:

$$Q = \begin{bmatrix} q_{\sigma_1} \\ \vdots \\ q_{\sigma_m} \end{bmatrix}, \quad N = \begin{bmatrix} |\sigma_1| n_1^T \\ \vdots \\ |\sigma_m| n_m^T \end{bmatrix}, \quad Q = N \nabla p$$

- Дивергенция:

$$-1^T Q = |\omega| b$$

- Разности в матричном виде:

$$P_\sigma = \begin{bmatrix} p_{\sigma_1} \\ \vdots \\ p_{\sigma_m} \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} x_{\sigma_1}^T - x_1^T \\ \vdots \\ x_{\sigma_m}^T - x_1^T \end{bmatrix}, \quad R \nabla p = P_\sigma - 1 p_1$$

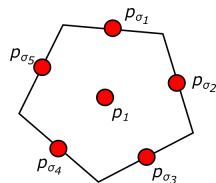


Рис. 32: Смешанно

Уравнение Пуассона (МОО)

Запишем все условия в виде системы:

$$\begin{bmatrix} -R & & \mathbb{I} & -1 \\ -N & & & \\ & \mathbb{I} & & \\ & -1^T & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla p \\ Q \\ P_\sigma \\ p_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ |\omega|b \end{bmatrix}$$

Пусть $\exists W \in \mathcal{R}^{m \times m} : WR = N$, исключим ∇p и вынесем Q в правую часть:

$$\begin{bmatrix} W & -W1 \\ -1^T W & 1^T W1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_\sigma \\ p_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q \\ |\omega|b \end{bmatrix}$$

Если W - симметрично, то в итоге получим симметричную систему, но не обязательно М-матрицу.

Уравнение Пуассона (МОО)

- Выбор симметричной матрицы $WR = N$:

$$W = N \left(N^T R \right)^{-1} N^T + \mu \left(\mathbb{I} - R \left(R^T R \right)^{-1} R^T \right)$$

- Второе слагаемое - дополнение до полного ранга.
- Геометрическое соотношение:

$$N^T R = \sum_{\sigma_i \in \partial\omega} |\sigma_i| n_{\sigma_i} (x_{\sigma_i} - x_1)^T = |\omega| \mathbb{I} \quad \left(\approx \oint_{\omega} dS x^T = \int \nabla_x^T dV \right)$$

Уравнение Пуассона (свойства)

- Задача эллиптического типа
- Будем обозначать дискретный оператор как \mathcal{L} , например $\mathcal{L}p = b$
- Для системы характерна симметрия
- На “хороших” сетках и методах выполняются свойства слабо диагонально-доминантной М-матрицы: принцип максимума
- Число обусловленности \mathcal{L} растет как $O(1/h^2)$

Уравнение теплопроводности

- Уравнение вида $\partial_t T - \kappa \Delta T = b$.
- Аппроксимация производной по времени методом Эйлера:

$$\partial_t T \approx \frac{T_{ij}^{n+1} - T_{ij}^n}{\Delta t},$$

- Сдвиг диагонали системы на $1/\Delta t$:

$$\left(\frac{1}{\Delta t} + \kappa \mathcal{L} \right) T^{n+1} = b + \frac{1}{\Delta t} T^n$$

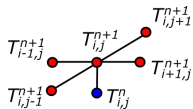


Рис. 33: Шаблон

- Задачу легче решать при малых шагах по времени - число обусловленности уменьшается

Уравнение переноса (МКР)

- Введем неизвестные в узлах на сетке с шагом h .
- Для заданного вектора скорости \vec{u} :

$$(\vec{u} \cdot \nabla)C = u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = b, \quad \vec{u} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}$$

- Используем направленные разности:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} \approx \frac{u}{h} \begin{cases} C_{i,j} - C_{i-1,j} & u > 0 \\ C_{i+1,j} - C_{i,j} & u < 0 \end{cases} \quad (1)$$

- Положительный коэффициент при диагональном элементе, отрицательные при вне-диагональных элементах: несимметричная слабо диагонально-доминантная M -матрица.

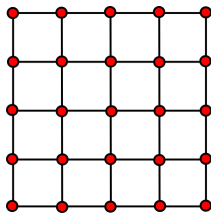


Рис. 34: В узлах

Уравнение переноса (МКО)

- В дивергентной форме:

$$\operatorname{div}(\vec{u}C) = b \quad (= (\vec{u} \cdot \nabla)C + C\operatorname{div}(\vec{u}))$$

- Проинтегрируем по объему ω :

$$\int_{\omega} \operatorname{div}(\vec{u}C) dV = \int_{\omega} b dV$$

- Используем теорему Остроградского-Гаусса:

$$\oint_{\partial\omega} dS \cdot \vec{u}C = \int_{\omega} b dV$$

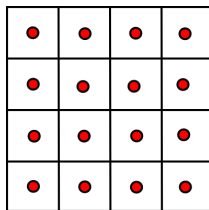


Рис. 35: В ячейках

Уравнение переноса (МКО)

- Используем теорему Остроградского-Гаусса:

$$\oint_{\partial\omega} dS \cdot \vec{u}C = \int_{\omega} b dV$$

- Аппроксимируем со вторым порядком:

$$\sum_{\sigma \in \partial\omega} |\sigma| n \cdot \vec{u}C = |\omega| b$$

- Требуется определить поток: $q = n \cdot \vec{u}C$.

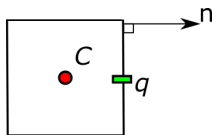


Рис. 36: Поток

Уравнение переноса (МКО)

- Требуется определить поток: $q = n \cdot \vec{u}C$.
- Схема против потока первого порядка:

$$q \approx \begin{cases} n \cdot \vec{u}C_1 & n \cdot \vec{u} > 0 \\ n \cdot \vec{u}C_2 & n \cdot \vec{u} < 0 \end{cases}$$

- На границе типа Дирихле:

$$q \approx \begin{cases} n \cdot \vec{u}C_1 & n \cdot \vec{u} > 0 \\ n \cdot \vec{u}C_b & n \cdot \vec{u} < 0 \end{cases}$$

- На границе типа Неймана $q = n \cdot \vec{u}C_1$. Вток из границы типа Неймана физически не корректен.

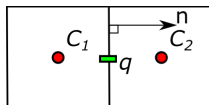


Рис. 37: Поток

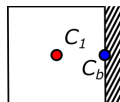


Рис. 38: Граница

Уравнение переноса (свойства)

- Задача гиперболического типа
- Обозначим дискретный оператор \mathcal{C}
- Для системы не характерна симметрия
- При условии $\operatorname{div}(\vec{u}) = 0$ выполняются свойства слабо диагонально-доминантной М-матрицы: нет новых экстремум
- Число обусловленности \mathcal{C} растет как $O(1/h)$.

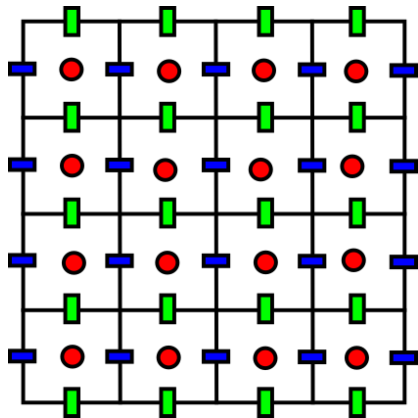


Рис. 39: Разнесенная сетка

Сетка Лебедева (1964), Harlow-Welch (1965), Arakawa C-grid (1977)

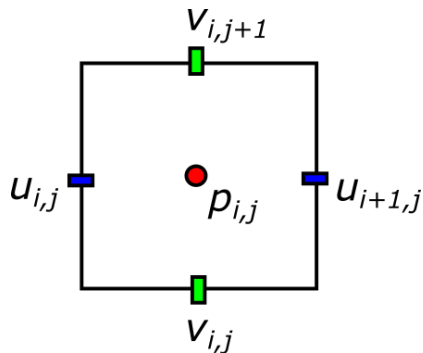


Рис. 40: Степени свободы

Расположение степеней свободы



Рис. 41: Вячеслав
Лебедев, 1930-2010

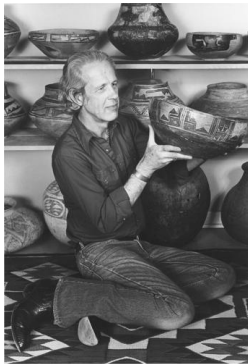


Рис. 42: Фрэнсис
Харлоу, 1928-2016



Рис. 43: Акио Аракава,
1927-2021

Уравнение Стокса

- Описывает течение вязкой несжимаемой жидкости
- Неизвестные: скорость жидкости $\vec{u} = [u, v]^T$ и давление p .
- Система уравнений:

$$\begin{aligned} -\mu\Delta\vec{u} + \nabla p &= \mathbf{b} \\ \operatorname{div}(\vec{u}) &= 0 \end{aligned}$$

- μ - вязкость жидкости.

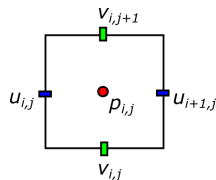


Рис. 44: Степени свободы

Уравнение Стокса

- Векторный оператор Лапласа:

$$-\Delta \vec{u} = - \begin{bmatrix} \partial_{xx} u + \partial_{yy} u \\ \partial_{xx} v + \partial_{yy} v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{L}u \\ \mathcal{L}v \end{bmatrix}$$

- Градиент давления ∇p для $u_{i,j}$, $v_{i,j}$:

$$\partial_x p \approx \frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{h}, \quad \partial_y p \approx \frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{h}$$

- Дивергенция:

$$\operatorname{div}(\vec{u}) = \partial_x u + \partial_y v \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{h}$$

- Граничные условия: прилипание, скольжение, заданное давление.

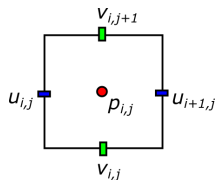


Рис. 45: Степени свободы

Уравнение Стокса

Получим квази-определенную систему с отрицательной последней строкой:

$$\begin{bmatrix} \mu\mathcal{L} & & \mathcal{G} \\ & \mu\mathcal{L} & \mathcal{G} \\ -\mathcal{G}^T & -\mathcal{G}^T & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_u \\ b_v \\ 0 \end{bmatrix}.$$

В этой записи \mathcal{G} - шаблон градиента.

Число обусловленности диктуется эллиптической частью, но до нее надо добраться!

Уравнение Био

- Описывает взаимодействие жидкости и вмещающей упругой среды.
- Неизвестные: смещение породы $\vec{u} = [u, v]^T$ и давление жидкости p .
- Система уравнений:

$$-\mu\Delta\vec{u} - (\mu + \lambda)\nabla\text{div}(\vec{u}) + \alpha\nabla p = \mathbf{b}$$
$$\partial_t(\zeta p + \alpha\text{div}(\vec{u})) - \kappa\Delta p = q$$

- μ, λ - параметры Ламэ, κ - проницаемость среды, α - коэффициент Био, ζ - ёмкость породы, $\theta = \zeta p + \alpha\text{div}(\vec{u})$ - пористость.
- Граничные условия на жидкость: непротекание
- Граничные условия на породу: фиксация, роллер, отсутствие трения

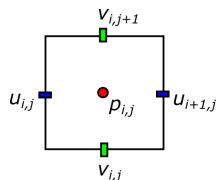


Рис. 46: Степени свободы

Уравнение Био

Получим квази-определенную систему с отрицательной и масштабированной строкой:

$$\begin{bmatrix} (\mu + \lambda)\mathcal{L}_{xx} + \mu\mathcal{L} & (\mu + \lambda)\mathcal{L}_{yx} & \alpha\mathcal{G} \\ (\mu + \lambda)\mathcal{L}_{xy} & (\mu + \lambda)\mathcal{L}_{yy} + \mu\mathcal{L} & \alpha\mathcal{G} \\ -\frac{\alpha}{\Delta t}\mathcal{G}^T & -\frac{\alpha}{\Delta t}\mathcal{G}^T & \left(\frac{\zeta}{\Delta t} + \kappa\mathcal{L}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_u \\ b_v \\ \tilde{q} \end{bmatrix}$$

Правая часть (про скважину далее):

$$\tilde{q} = q + \frac{\zeta}{\Delta t}p^n - \frac{\alpha}{\Delta t} \left(\mathcal{G}^T u^n + \mathcal{G}^T v^n \right)$$

Число обусловленности диктуется эллиптической частью, но до нее надо добраться!

Уравнение двухфазной фильтрации

- Описывают вытеснение нефти водой.
- Неизвестные: $S \in [0, 1]$ - насыщенность нефти, p - давление воды.
- Система уравнений:

$$\begin{cases} \phi \partial_t S - \operatorname{div}(S \kappa \nabla p) = q_o \\ \phi \partial_t(1 - S) - \operatorname{div}((1 - S) \kappa \nabla p) = q_w \end{cases}$$

- Граничные условия: непротекание.
- Скважина радиуса r с забойным давлением p_{bhp} :
 $q = 2\pi\kappa(p - p_{bhp}) / \log\left(\frac{14\sqrt{2}h}{100r}\right)$, $q_o = Sq$, $q_w = (1 - S)q$.

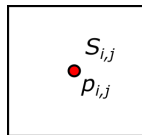


Рис. 47: Степени свободы

Уравнение двухфазной фильтрации

Получим блочную систему с эллиптическими и гиперболическими блоками:

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\phi}{\Delta t} + c\right) & S\kappa\mathcal{L} \\ -\left(\frac{\phi}{\Delta t} + c\right) & (1-S)\kappa\mathcal{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_o + \frac{\phi}{\Delta t} S^n \\ q_w - \frac{\phi}{\Delta t} S^n \end{bmatrix}$$

Число обусловленности диктуется эллиптической частью, но до нее надо добраться!

Бигармоническое уравнение

- Описывает эластичную пластинку
- Уравнение:

$$\Delta^2 p = \partial_{xxxx} p + 2\partial_{xxyy} p + \partial_{yyyy} p = b$$

- Система симметричная, но не M -матрица
- Число обусловленности растет как $O\left(\frac{1}{h^4}\right)$.
Легко упереться в предел машинной точности

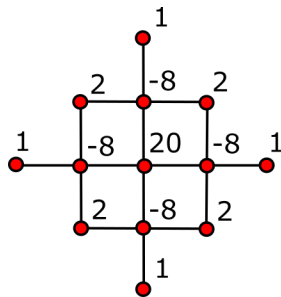


Рис. 48: Шаблон

- Можно сделать систему уравнений:

$$\begin{bmatrix} \Delta & \\ -\mathbb{I} & \Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Тогда число обусловленности растет как $O\left(\frac{1}{h^2}\right)$ и применимы подходы для решения эллиптических систем.

- Сложность решения методом Гаусса: $O(N^3)$.
- Сложность итерационных методов зависит от заданной точности и числа обусловленности системы. Число обусловленности возможно снизить. Оценки на следующей лекции.
- Для эллиптических систем существуют реализации многосеточных методов с асимптотикой $O(N)$.
- Метод не применим к системам общего вида, необходимо выделять эллиптическую часть!

Пакеты программ

	Прямые	Итерационные	Многосеточные
Открытые	SuperLU, MUMPS	Petsc [†] , Trilinos [†]	Hypre, AMGCL
Закрытые	Pardiso	ILUPACK , Paralution [†]	SAMG

Таблица 1: Пакеты. [†]Включают многосеточные подходы.

- *Прямые*: всегда решат систему, но небольших размеров, возможно быстрее, чем итерационные. Основная проблема - объем требуемой памяти.
- *Итерационные*: менее надежные, но применимы к большим системам.
- *Многосеточные*: в первую очередь для эллиптических систем.
- **SAMG**: многосеточный метод и стратегии для блочных систем
- **ILUPACK**: неполная факторизация и многоуровневый метод
- Многое доступно из python: scipy, numumps, petsc4py, pyamg

Пример (Команды в python)

- `scipy.sparse.csr_matrix` – создать матрицу в формате CSR;
- `scipy.sparse.coo_matrix` – создать матрицу в формате COO;
- `scipy.io.mmread` – считать файл формата *it MatrixMarker*;
- `matplotlib.pyplot.spy` – отрисовать “след” матрицы;
- `scipy.linalg.solve` – решить систему (по умолчанию используется пакет *UMFPACK*).

Общий план лекций

- Итерационные методы
- Методы неполной факторизации
- Масштабирование и переупорядочивание
- Многосеточный метод
- Многоуровневый метод
- Методы решения седловых и блочных задач
- Методы решения нелинейных систем
- Поиск нескольких решений нелинейных систем

Варианты заданий

- Простое задание:
 - Собрать статистику по каждому из методов решений на системах с ростом N ;
 - Пример пороупругости: марш по времени.
- Сложное задание:
 - 2-фазная фильтрация на данных SPE10;
 - 2-фазная пороупругость на данных SPE10.

- <http://dodo.inm.ras.ru/terekhov/lect1/>
- <https://github.com/kirill-terekhov/mipt-solvers>
- <https://www.spe.org/web/csp/datasets/set02.htm#download>

Эта презентация:

<https://dodo.inm.ras.ru/terekhov/lect1/01/presentation.pdf>

Конец