Multigrid Methods

- A translation to: Chapter 7-3 of Strang, Gilbert. Computational Science and Engineering
- Translator: Adversarr

背景问题

考虑如下的两点边值问题:

$$\begin{cases} -u''(x) = f(x) & \forall x \in (0,1) \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases}$$
 (1)

我们使用有限差分法进行求解,对于空间采用N+1点均匀划分:

$$x_0 = 0, \dots, x_n = i/N, \dots, x_N = 1$$
 (2)

二阶导数用如下的公式近似:

$$f(x_j) = u''(x_j) pprox rac{2u(x_j) - u(x_{j-1}) - u(x_{j+1})}{(1/N)^2}$$
 (3)

这转化为求解如下的线性方程组求解问题:

$$\frac{1}{h^{2}} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(x_{1}) \\ u(x_{2}) \\ u(x_{3}) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_{1}) \\ f(x_{2}) \\ f(x_{3}) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \end{bmatrix}$$
(4)

我们将方程组的求解问题写成 Ax = b 的形式。

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$
 (5)

这是一个稀疏矩阵的求解问题,我们先不考虑使用直接求解器(三对角矩阵有很好的求解方法,但是对于2维的情况,构建出的矩阵不是三对角的),而使用迭代求解器进行求解。

Note: 这里使用有限差分法是可以收敛到精确解的,可以考虑在使用等距网格的情况下的有限元方法,它们诱导了相同的线性方程组求解问题。

我们一般将这里的求解选取的 $x_j, j=0,\ldots,N$ 看作一个网格。等距网格的粗细指的是 h=1/N的大小。越小的h能够得到越精确的结果,但求解点数的N也会随之上升,计算量 随之增大。

引入

Jacobi 和 Gauss- Seidel 迭代都能够产生"光滑"的误差:误差向量 e 的高频分量在很少次的迭代后消失,但是低频分量很少衰减。迭代收敛需要 $O(N^2)$ 次,对于实际问题是不可接受的。

Background: 考虑线性方程组 Ax = b 的求解, 使用迭代求解。

- x₀ 为迭代初值;
- $e_i = A^{-1}b x_i$, 表示当前解与真解的误差;
- $r_i = Ae_i = b Ax_i$ 表示当前解表达方程组的误差

Multi Grid方法最常见的可以用于求解Poisson问题的解。均匀网格下的有限差分法将这样的Poisson问题变成线性方程组的求解问题。

多重网格法(MultiGrid)可以极大的解决迭代求解器的效率问题,其思想是将原本网格上的线性方程求解问题转化到一个更粗的网格上,在更粗的网格上施用迭代求解器(例如 Jacobi/GS求解器),细网格上的低频分量转化为了粗网格上的高频分量,粗网格求解器消除的高频分量实则就是细网格上的低频分量。

Recall: 例如间隔为 Δx 的网格上 $e^{i\omega\cdot n\Delta x}$ 分量,在 $2\Delta x$ 上对应 $e^{i2\omega\cdot n\Delta x}$,频率也提升了一倍。

在粗网格上,原本的低频分量很快就被"干掉"了。而且,我们在粗网格上只需要很少次数的 迭代,就能够使得这些分量消失。这样的性质使得多重网格法能够使用固定次数的迭代,就 能较精确地求解现实中很多的稀疏方程组(这里的次数不随着矩阵规模而变大)。

多重网格法一般用于对称的矩阵求解问题。它的最核心要素是用两个矩阵 R 和 I 来在不同的网格上进行切换。

- 1. 限制矩阵(Restriction Matrix) $R=R_{2h}^h$: 把向量从细网格传到粗网格上;
- 2. 插值矩阵(Interpolation matrix) $I=I_{2h}^h$:将粗网格上的结果传到细网格上
- 3. 原始矩阵在粗网格上的近似 $A_{2h} = RA_hI$

Note: 这里用h, 2h 这样的记号是参考了有限差分求解的网格粗细记号,用来表征从一个粒度为h 的细网格,和另一个粒度为2h 的粗网格。

我们先考虑这些矩阵的定义: 假设粗网格上有3个点,

$$v = (v_1, v_2, v_3)^T (6)$$

我们希望得到细网格上的数值,可以用线性插值得到,写成矩阵形式可以得到上面定义的插值矩阵如下。注意到u 的2/4/6行恰好是 v_1,v_2,v_3 ,而1/3/5/7行就是从 $0,v_1,v_2,v_3$,0进行的线性插值。另外我们观察I矩阵,在奇数行的元素值为1/2,这样很容易计算,我们也几乎只用 $h,2h,4h,\ldots$ 这样的网格。使用别的插值方法也是可行的,但是线性插值易于实现。

$$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ 2 & & & \\ 1 & 1 & & \\ & 2 & & \\ & 1 & 1 \\ & & 2 \\ & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_1/2 + v_2/2 \\ v_2 \\ v_2/2 + v_3/2 \\ v_3 \\ v_3/2 + 0/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \end{bmatrix}$$
(7)

Note: 利用两点边值问题的边界条件。

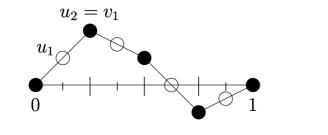
考虑v是粗网格上的一个谐波,尽管v可能是粗网格上的高频分量,但它对应了细网格上的低频分量,我们的插值操作能够将它很好地反映在细网格上。

Note: 这一段说的有点奇怪,简而言之就是,在细网格上的任何一个低频误差分量都能在粗网格上有一一的体现。(Recall: 高频误差分量都能够被迭代求解器很好的处理)

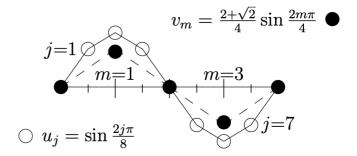
反过来,我们可以从细网格限制到粗网格上(类似于一个"平均")。它将u从一个细网格传递到粗网格上。一种可能的是直接令 $v_i=u_{2i+1}$,这样就忽略了 u_{2i} 的影响。我们可以用一种加权平均的方法,下面的公式说明了这个方法(Full weighting operator)。

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \underbrace{\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & & & \\ & 1 & 2 & 1 & & \\ & & 1 & 2 & 1 \\ & & & 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}}_{R_h^{2h} = \frac{1}{2} (I_{2h}^h)^T} \underbrace{\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \end{bmatrix}}_{(8)}$$

限制矩阵将细网格的低频分量的频率翻倍传递到粗网格上, 画出图像更好理解这个过程:



(a) Linear interpolation by $u = I_{2h}^h v$



(b) Restriction by $R_h^{2h}u = \frac{1}{2}(I_{2h}^h)^{\mathrm{T}}u$

二维空间中的插值和限制矩阵

二维空间中,粗网格到细网格的插值是通过双线性插值得到。双线性插值可以通过x,y两个方向上分别进行线性插值得到。

水平方向的插值:

 $\bullet \ \ u_{2i,2j}=v_{i,j}$

$$ullet u_{2i,2j+1} = rac{1}{2}(v_{i,j} + v_{i,j+1})$$

竖直方向的插值:

 $ullet u_{2i+1,2j} = (v_{i,j} + v_{i+1,j})/2$

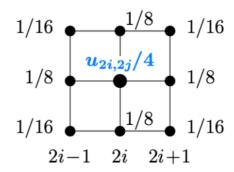
$$ullet u_{2i+1,2j+1} = (v_{i,j} + v_{i+1,j} + v_{i,j+1} + v_{i+1,j+1})/4$$

我们不给出插值算子 I2D 的矩阵形式。

Recall: 有限维线性空间到有限维线性空间的线性映射,选取一个合适的基的情况下可以表达为一个矩阵。

反过来,从细网格到粗网格的算子 $R2D=\frac{1}{4}I2D^T$ (1/4的常数使得 $1\to 1$)。这个矩阵的稀疏由 $\frac{1}{4},\frac{1}{8},\frac{1}{16}$ 组成,每一个粗网格点都是对于细网格的9点加权平均:

Restriction matrix $R=\frac{1}{4}\,I^{\mathrm{T}}$ Row i,j of R produces $v_{i,j}$ $v_{i,j}$ uses $u_{2i,2j}$ and 8 neighbors The nine weights add to 1



其实你不难发现这些稀疏的由来,原本一维情况下加权平均系数是 $(\frac{1}{4},\frac{1}{2},\frac{1}{4})$ 。R2D在这一个局部上的系数正是这个小的向量的外积。而R2D正是R与自身的Kronecker Product。

Note:考虑3x3的网格和,标号为

1 1 2 3

2 4 5 6

3 7 8 9

它拍平后为

1 1 2 3 4 5 6 7 8 9

Kronecker积恰好对应了这样的变换。简单验证下,R为3x7的矩阵,R2D 是 9x49的矩阵,维数也是相对应的。

Recall: 矩阵的 Kronecker 积对应了 Tensor Product

现在,我们能够在网格之间相互传递向量,这就是几何理解的多重网格法,我们能在网格基于间距h,2h和4h的情况下进行计算。这个想法可以延伸到三角形元素(每个三角形自然地分成四个三角形)。实际计算的几何形状可以比我们在一个正方形网格考虑的模型更加复杂。

当几何上的多重网格变得较为复杂,或者我们只是获得了一个矩阵,而没有相应的"网格"概念,这是我们可以使用Algebraic multigrid(AMG)。它也是基于多尺度求解的思想,可以直接应用在Ax = b问题上,而不依赖于具体的网格。

两个网格的 V-Cycle (v-cycle)

Jacobi Iteration:

$$x_{n+1} = D^{-1}(b - Rx_n)$$
 where $A = D + R$ (9)

我们先考虑只使用两个网格进行求解的过程。在每个网格内的迭代,我们考虑使用 Jacobi 格式或者GS格式求解。我们前面多次指出,对于一个较大规模的问题,在细网格上的迭代 法对于低频误差去除得很慢(也就是原文说的"对于精确解的低频分量收敛很慢")。多重网格法将细网格的残差 $r_h=b-Au_h$ 传到粗网格上 r_{2h} ;然后在粗2h网格上求解 $A_{2h}E_{2h}=r_{2h}$;然后将 E_{2h} 传到细网格上为 E_h ,并且修正 $u_h'=u_h+E_h$,然后再次执行这个流程。

这样的循环就是一个两网格的 V-cycle。我们将其称之为一个 v-cycle(小v),以下是它的步骤(残差是指 $r_h=A_h(u-u_h)=b_h-A_hu_h$):

- 1. **Iterate**(迭代):在细网格上迭代,求解 $A_hu_h=b_h$ (例如使用3次的Jacobi或GS迭代)
- 2. **Restrict**(限制):将残差传递到粗网格上, $r_{2h}=R_h^{2h}r_h$
- 3. **Solve** (求解): 在粗网格上迭代,求解修正项 $A_{2h}E_{2h} = r_{2h}$ (例如,从E = 0 开始3次迭代,在更进一步的方法中,这个方程的求解方法是任意的)
- 4. Interpolate (插值): 修正项从粗网格上传到细网格上, $E_h=I_{2h}^hE_{2h}$,将 E_h 加到 u_h 上

5. **Iterate**(迭代):以 $u_h + E_h$ (消除了部分低频分量)为初值迭代,类似第一步的过程

Note:

- \overrightarrow{GE} $\overrightarrow{$
- 误差e是指当前解和真实解的误差, $e = A^{-1}b x$
- 误差和残差相比,要求知道真实解的值(知道真解的值时,已经解决了矩阵求解问题)但残差只需要计算b-Ax,这里面每一项都是已知的。

我们希望修正项 $E_h = I_{2h}^h E_{2h}$ 能够尽可能好的表达 e_h , 即 $E_h \approx e_h$, 这样:

$$u_{h} + I_{2h}^{h} E_{2h} \approx u_{h} + e_{h} = A^{-1}b$$

$$\Longrightarrow A_{h} I_{2h}^{h} E_{2h} \approx b - A_{h} u_{h} = r_{h}$$

$$\Longrightarrow \underbrace{R_{h}^{2h} A_{h} I_{2h}^{h}}_{A_{2h}} E_{2h} \approx R_{h}^{2h} r_{h}$$

$$(10)$$

上面的最后一步给出了多重网格第三步的解释。

2-3-4 步给出的 限制-粗解-插值 过程是多重网格法的核心。回忆我们定义的三个矩阵:

$$A = A_h = \text{original matrix}$$
 $R = R_h^{2h} = \text{restriction matrix}$
 $I = I_{2h}^h = \text{interpolation matrix}$

$$(11)$$

第三步需要第四个矩阵 A_{2h} ,可以从上面的式子中定义(如下)。 A_{2h} 是一个比原本的 A_h 更小的方阵。换言之,我们希望将更大的矩阵 A_h 投影到一个粗网格上。这样的投影由一个相当自然的选择,变分正确(Variationally Correct,不知道翻译的对不对)的 A_{2h} 可以从R,A,I 直接得到:

$$A_{2h} = RAI \tag{12}$$

例如、细网格上有7个数据点、粗网格有3个数据点、我们求得的矩阵恰好是 3×3 的。

在一维情况下, $A=A_h$ 可能是一个二阶差分矩阵 K/h^2 。我们之前的例子中, $h=\frac{1}{8}$,现在为了方便起见,我们考虑 $h=\frac{1}{6}$ 的情况,这样多重网格法实现在5点和2点的粗细网格上的插值和限制($I\in\mathbb{R}^{5\times 2}$, $R\in\mathbb{R}^{2\times 5}$)。将 K_5/h^2 代入 RA_h 中可得:

$$RA = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & & \\ & 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{(2h)^2} \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$
(13)

对于 A_{2h} 的一个自然的选择是(直接用前文中的插值矩阵 I_{2h}^h 代入也是相同的结果):

$$A_{2h} = RAI = \frac{1}{(2h)^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \tag{14}$$

不难看出,这恰好是2h的网格上的二阶差分矩阵(因为网格为2h宽,分母自动放大)。

Note: 差分算子K\$的定义从两点边值问题的矩阵求解形式中得到。

Recall: 之前定义的两点边值问题,Poisson方程(微分方程)被转化为线性方程组(差分方程)。写出网格h=1/3的矩阵,恰好是这里的 A_{2h} 。

Note: 我的理解是,用相同的数值方法,但用不同的网格密度求解同一个方程,粗网格的解 u_{2h} 插值到细网格上,应该"接近"细网格的解 u_h 。

我们选取的 $R=\frac{1}{2}I^T$ 还有一个很好的性质: 如果原先的矩阵 A 是对称、正定的,那么 $RAI=\frac{1}{2}I^TAI$ 也是对称正定的。

读者自证不难。

A的正定性通常由数值方法的推导得到,特别是Galerkin方法中非常常见(有限元法是Galerkin法的代表)。

Note: 对于Poisson 问题的有限元法,

- 除去纯Neumann边值问题,其他的情况下由双线性形式诱导的矩阵都是正定的;
- 纯Neumann边值问题添加 $\int_{\Omega} u \mathrm{d}x = 0$ 的条件后,诱导的矩阵也是正定的;

尽管第一步和第五部不是多重网格法的核心,但第一步和第五步是必要的:第一步(smoother)将原本误差中的高频分量消除,而第五步(post-smoother)将粗网格插值引入的一小部分高频误差消除。在实现上,各种Jacobi和GS求解器都是可行的。

Note: 这里杂糅了一些自己的理解, 原文为

Steps 1 and 5 are necessary, but they are really outside the essential multigrid idea. The **smoother** is step 1, the post-smoother is step 5. Those are normal iterations for which weighted Jacobi or Gauss-Seidel is satisfactory.

误差分析

假设在第三步我们精确地求出了粗网格上的误差方程。多重网格误差修正项 E_h 是否能等于 $e_h = u - u_h$ 呢?这种期望显然是不切实际的!毕竟我们只是在一个粗网格上求解了这个问题,并不是整个问题。但是,在多重网格法中, E_h 和 e_h 之间的联系是最关键的。对 E_h 和 e_h 的分析过程很简单,我们一步一步的来看。

Note: 看之前的步骤部分后面给的一段分析。

在这里,方便起见,在不引起歧义的情况下省略了一部分上下标(公式打得我好累)

作用在e上的四个矩阵:

- 第二步,残差计算涉及了e: $r_h = b A_h u_h = Ae$;
- 第二步, 传到粗网格时, 限制矩阵作用在其上: $r_{2h} = RA_h e$
- 第三步,假设精确地求解2h上的方程: $E_{2h}=A_{2h}^{-1}r_{2h}=(RAI)^{-1}RA_{h}e$
- 第四步,传回细网格,插值矩阵作用在其上,最终形式如下

$$E = (IA_{2h}^{-1}RA_h)e =: Se (15)$$

Note: 不能将 $A_{2h}^{-1}=(RAI)^{-1}$ 拆开,这应该很显然。

当 $I \in \mathbb{R}^{5 \times 2}$, $R \in \mathbb{R}^{2 \times 5}$ 时,等式右侧的S依然是 5×5 的矩阵。S 不可能是单位阵/恒等矩阵(Identity Matrix),这是因为RAI是 2×2 的矩阵(rank = 2)。但S具有性质 $S^2 = S$,这说明S限制在其列空间(Column Space)上是恒等矩阵。与此同时,在它的零空间(右零空间)上是零矩阵。 $S^2 = S$ 是容易验证的:

$$S^{2} = (I(RAI)^{-1}RA)(I(RAI)^{-1}RA) = I(RAI)^{-1}RA = S$$
(16)

Note: 列空间上恒等的说明。S的列空间是说

 $\{Su: u \in \mathbb{R}^n\}$, 在列空间中的任一向量Su, 因为S\$幂等, 所以

$$S(Su) = S^2 u = Su \tag{17}$$

这就说明S在列空间上的矩阵是恒等矩阵。

Note: 其实有一个挺常见的结论,矩阵若满足幂等条件 $S^2=S$,那么S是投影矩阵。(并不是正交投影)

因此,多重网格法求出的的修正项 E=Se 并不是整个误差 e,而是e在S的列空间上的投影,修正项和误差之间的差为 e-E=(I-S)e。我们将矩阵I-S定义为网格算子(原文为Two-Grid Operator,我的翻译水平实在是太烂了)。在分析步骤1、5时,矩阵 $M=I-P^{-1}A$ 起到了重要的作用,而在分析和描述多重网格的步骤2-4时,I-S起到了举足轻重的作用。

v-cycle matrix =
$$I - S$$

iteration matrix = $I - P^{-1}A$ (18)

Note: 第一步和第五步分析实际上是指对于Jacobi、GS格式的分析,迭代法的误差通常都能写成

$$e_{n+1} = e_n - P^{-1}Ae_n (19)$$

的形式,例如 Jacobi 迭代($D = \operatorname{diag} A$):

$$x_{n+1} = D^{-1}(b - Rx_n)$$
 where $A = D + R$ (20)

"简单"计算可得:

$$e_{n+1} = (I - D^{-1}A)e_n (21)$$

例子(续)

我们直接给出之前例子的S矩阵如下:

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{bmatrix}$$
 (22)

该矩阵的特征值是 1,1,0,0,0,也很容易验证 $S^2=S$ 。S有三列为0,这说明S的零空间包含了具有形式 $(e_1,0,e_3,0,e_5)$ 的细网格向量。这些向量不会出现在粗网格上。如果误差e有这种形式,那么E=Se=0,即多重网格法不能消除这样的误差。但是这样的误差实际上是高频的,它很容易在细网格上使用迭代求解器消除。

Note: 这里的"这样的向量不会出现在粗网格上"原文为"Those are vectors that don't appear on the coarse grid."

作者表达的意思并不是说这些误差向量不会体现到粗网格上,而是说粗网格是无法消除这些误差向量。这听起来很奇怪是吧?

S 的列空间由S的第二、四列的向量张成,即(1/2,1,1/2,0,0)和(0,0,1/2,1,1/2)。它们是"混合频率"的分量,这些分量在第一步(Smooth Step,即细网格上的迭代求解步)不能很好的从误差中消除,从而会在e中出现。但这些向量被E=Se=e"捕捉"到,在第四步更新解后被消除。

多重网格对高/低频分量的影响

我们换一种说法来表述这个过程。因为 $S^2=S$,因此特征值只有 $\lambda=0,\lambda=1$ 。我们的例子中, $\lambda=1,1,0,0,0$,而I-S 的特征值为 0,0,1,1,1(S和I-S有相同的特征向量)下面讨论多重网格法对某个特征向量e的操作。

Note:特征向量组就是原本空间的一组基,误差可以在这组基下分解,然后考虑各个分量在多重网格法下如何变化。

对于 E = Se = 0 的特征向量: 多重网格法并不能解决误差中的这些分量。这些误差分量对应的修正项E为零。在上面的例子中,对应了 $e = (e_1, 0, e_3, 0, e_5)$ 的情况,多重网格计算的修正项E = 0,也就是无法修正这些误差分量。

对于 E=Se=e 的特征向量:多重网格法对于这种向量能够"完美地"消除。在算法的第四步中E=e 添加到 u_h 上,这些误差被完全消除了!在我们的例子中,这对应了 e=(1,2,2,2,1) 和 120-21 。这些都具有较大的低频的分量,只上下"摆动"一两次。它们位于 I_{2h}^h 的列空间中。它们不完全是低频率的正弦函数(不单纯是一个谐波),但作为低频误差的一个重要部分,被捕获并消除。

Se = e的解空间维数是粗网格点的数量(在这里为 2)。它表征了第三步求解的 A_{2h} (的规模)。它是S的秩,也是 I_{2h} ^h的秩。其他5 - 2个网格点组成了S 的零空间,如上文分析的,E = Se = 0\$ 表明多重网格并不消除这些分量,即对这些误差分量 没有改进(改进解的精确程度)。

放下原文体会一下: The other 5-2 grid points account for the nullspace of S, where E=Se=0 means no improvement from multigrid.

备注:满足Su=0的"高频分量" $(u_1,0,u_3,0,u_5)$ 并不是三个离散正弦序列(这在后面的 Fourier分析会考虑)。严谨的说法是, I_{2h}^h 的列空间等于 S的列空间,而S的零空间是RA的零空间。尽管我们分析的向量是混合频率的,但这并不影响多重网格法核心出发点:用迭代器求解消除高频分量,用多重网格法消除低频分量。

Recall: 多重网格法将低频分量转化为粗网格上的高频分量,再迭代求解器消除。

如果我们的迭代求解器能够完美地消除误差的高频分量,而多重网格能够消除剩下的低频分量,那么一个v-cycle就会求出精确解!但这再现实中显然是不可能的。幸运的是如果我们仔细分析可以发现,一次v-cycle能够将误差固定地缩小一个常数倍,并且这个常数是与网格密度h无关的:

$$||e'|| \le \rho ||e|| \quad \rho < 1 \tag{23}$$

通常这里的 $\rho=0.1$ (类似数量级),相比的Jacobi迭代只能做到 $\rho=0.99$ 。这简直是数值分析的峰顶(Holy Grail of numerical analysis)!多重网格法方法的收敛因子 ρ 与 h 的选取无关,这说明它不会像别的方法一样有 $\rho \to 1$, $(h \to 0)$ 。我们可以在固定次数的循环后,就能达到给定的相对误差(事先估计)。因为每一步都只需要O(n)次数的迭代(,因此它总体是O(n)复杂度的,它并不直接随着*矩阵维数*的上升而上升。

收敛因子: 迭代矩阵的谱半径 (a spectral radius of the overall iteration matrix)

Note: 不管是插值、限制, 还是Jacobi迭代、GS的迭代的一步, 都是O(n)的, 这里的n说的是稀疏系统的规模, 例如非零元素个数。

Note: 网络点数为n的情况下,矩阵规模是 $n \times n$ 的($有n^2$ 个自由度,这里的矩阵维数说的是 n^2),但实际上非零元素的个数是O(n)的(不管是有限元还是有限差分法都是)

Recall: Jacobi 迭代对于 $n \times n$ 矩阵是需要 $O(n^2)$ 次收敛。

关于迭代次数和精度的关系还有一点可以补充。用户可能希望数值解的误差和方程离散引入的误差相同。之前的例子中,我们的二阶差分是2阶精度的,因此希望 $e=O(h^2)=O(N^{-2})$ 。这意味着我们多次(而非固定次数)的v-cycle来达到精度要求。为了达到 $\rho^k=O(N^{-2})$ 的精度,通常需要 $k=O(\log N)$ 次循环(执行 k 次 v-cycle,总复杂度为 $O(N\log N)$)。多重网格法也能很好地处理这个问题。

除了多次执行v-cycle,或者将他们嵌套在一起称为 V-Cycle 或 W-Cycle,一种更好的方案是使用全多重网格(Full Multigrid, i.e. FMG)。这些循环都在下一章中介绍。对于我们需要的 $O(h^2)$ 精度,FMG方法的复杂度是O(n)的。

V-Cycles/W-Cycles/FMG

我们之前对于第三步的求解方法不加以限制。显而易见的是我们可以在原本的v-cycle第三步也执行类似的多重网格法。举个栗子,我们在第三步仅仅使用了Jacobi迭代,原本的最低频分量的频率(尽管频率提升了一倍)还是低的。但如果不断地进行v-cycle,那么这些分量能在4h、8h等等,以至于非常粗的网格上得到消除(例如512h)。

我们有一个很自然的选择,将多层网格划分为多层的(例如3层,左下图),它先不断加粗 网格到(2h,4h,8h)上,然后直接逐层返回到(4h,2h,h)上。这个嵌套的 v-cycle 序列就是一个V-cycle(大写V)。需要注意的是,在更粗的网格上的矩阵求解是更快的。一些分析指 出,我们可以花费稍多一点的时间在粗网格上是值得的。我们构造了如下中图的W-cycle,它能够消除更多的低频分量,通常相较于V-cycle有更好的结果。

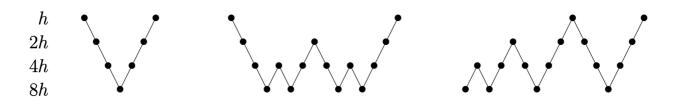


Figure 6.11: V-cycles and W-cycles and FMG use several grids several times.

FMG方法"渐进"地优于的V/W-cycle,如右上图所示。它从最粗的网格出发,先算出8h上的解,然后插值到4h上,来获得4h上的一个求解初值,这个初值应当接近于4h 的解。然后执行一次4h和8h的v-cycle,来提升4h网格上解的精确性。然后再将4h的解插值到2h上,进行相同的过程,直到得到我们所需要的解。我们得到了h的求解初值后,只需要执行一次V-cycle,这是因为FMG的前序计算给了它一个很好的初值。

Note: 联系微分方程的数值解, 粗网格上的解为细网格上的求解提供了良好的初值。

Note: 从FMG计算的流程不难推断, 其为h网格提供的初值, 相应的低频误差很 "少"。

尽管V-cycle(或其他的两个算法,但我们只分析V-cycle)总操作数多于v-cycle,但它们只相差一个常数倍。这是因为每当我们切换到更粗一倍的网格的时候,我们求解的规模也随之降低一半。对于一个维度为d的微分方程,粗网格上的问题规模是细网格的 $1/2^d$ 。下面的公式大致估计了V-cycle的复杂度:

$$V < (1 + \frac{1}{2^d} + \left(\frac{1}{2^d}\right)^2 + \cdots)v < \frac{2^d}{2^d - 1}v$$
 (24)

其中的V表示V-cycle的操作数,v表示v-cycle的操作数。使用类似的记号,用F表示FMG的操作数,类似的有:

$$F < \frac{2^d}{2^d - 1}V < \left(\frac{2^d}{2^d - 1}\right)^2 v \tag{25}$$

顺便一提的是, FMG方法在实际应用的多, 但需要你有比较好的编程能力。

多重网格法的矩阵

原本一次v-cycle的我们给出了矩阵S来刻画误差的变化,对于一个三层的V-cycle,我们也希望有一个相应的矩阵 S_3 来刻画误差的变化。在这里分析时,我们不考虑平滑

(Smoothing)的影响。S和 S_3 只是将原本的问题投影到更粗的网格上而已。就其本身而言,如果没有平滑步的情况下 S_3 并不是一个好的求解器。

Note:解释一下这里的平滑(Smoothing)的含义。考虑一个三层的V-Cycle:

1. h-Iterate

- 2. $h \rightarrow 2h$ -Restrict:
- 3. 2h-Solve(also a v-cycle):
 - a. 2h-Iterate Smoothing
 - b. $2h \rightarrow 4h$ -Restrict
 - c. 4h Solve
 - d.~4h
 ightarrow 2h-Interpolate
 - e. 2h-Iterate Smoothing
- 4. $2h \rightarrow h$ -Interpolate
- 5. h-Iterate

我们在分析的时候,为了方便起见,认为误差并没有经过2h-Iterate的两步,否则整个分析过程会变的相当复杂。与此同时,如果我们考虑的是那些非常低频的分量(因为只有这些分量会被更粗的网格解决),2h-Iterate也几乎不对这些分量产生影响。

在最外层的第三步求解的问题实际上是 $A_{2h}E_{2h}=r_{2h}$,我们只需要重新利用 $A_{2h}^h=RA_hI$ 这样的公式就能得到:

$$A_{4h} = R_{2h}^{4h} A_{2h} I_{4h}^{2h} (26)$$

其中的 R_{2h}^{4h} 将2h网格点限制到4h上,反过来, I_{4h}^{2h} 将4h网格点插值到2h上。如果我们选择的网格密度为h=1/16,那么这个矩阵乘法是 $(3\times7)(7\times7)(7\times3)$ 的。在4h的网格上,求解规模为 3×3 的问题 $A_{4h}E_{4h}=r_4h$ 。然后再进行插值回到2h,h的网格上。这一整套的*两次限制、求解、两次插值*用矩阵 $S_3=S_3^2$ 表示(引入的修正项为 $E_{4h}=S_3e_h$)。

$$S_3 = I_{2h}^h I_{4h}^{2h} A_{4h}^{-1} R_{2h}^{4h} R_h^{2h} A (27)$$

和之前相同的分析,在一次不考虑平滑过程的V-cycle下,误差为 $(I-S_3)e$ 。在h=1/16的网格上,一共有15个不同的频率分量,只有最低的3个被 S_3e (大致上)消除。我们现在仅仅是求解了一个 3×3 的问题,考虑到在h网格和2h网格上的迭代步(Iterate),高频的和中间频率的误差分量都被这些迭代求解器消除了。

TODO: 这里省去了原文的"数值试验"这一小节。

特征值分析

读者可能已经意识到,一个矩阵(例如v-cycle的I-S)就足以描述多重网格法中的一个步骤。而对于FMG方法,尽管我们希望能得到它的特征值和特征向量,但它们通常实在是难以求出。先前的数值试验的结果让我们对多重网格法充满信心。计算和实验给我们一种分析、改进(Diagnostic)的手段,来发现在哪里收敛得慢,需要作出一些改变(通常在边界条件上需要特殊处理)。我们也需要一个先验的预测工具,最好的就是模态分析(Modal Analysis)。

本文分析的核心是观察 Fourier 谐波在多重网格求解时的变化。在我们的例子中,考虑到零编制条件,我们选取离散的正弦波来分析。我们一直使用Poisson方程导出的问题(Model Problem),来观察多重网格法矩阵I-S对这些正弦波进行了如何的作用。这一小节的最终结果(从数学上)说明了为何多重网格法是有效的,也说明了两种频率分量是如何被混合的。即I-S的特征向量是由两个谐波混合而来。

Note: 频率为k的正弦波是指:

$$y(i) = \sin 2\pi \frac{ik}{N} \tag{28}$$

它能满足我们的零边值条件

我们直接指出,混合在一起的分量是频率为k和N-k的(我们只考虑 $k \leq N-k$ 的情况,这样k始终是频率更低的)。写出两个频率的正弦波

$$y_k = \left(\sin\frac{k\pi}{N}, \sin\frac{2k\pi}{N}, \cdots\right)$$

$$Y_k = \left(\sin\frac{(N-k)\pi}{N}, \sin\frac{2(N-k)\pi}{N}, \cdots\right)$$
(29)

其中 y_k 在 $0,\ldots,N$ 中经历了k个周期,而 Y_k 经历了N+1-k个周期。列出这些值后,你不难发现一些有趣的现象(There is something neat you have to see)。 Y_k 和 y_k 的数字是相等的,不过是相差了一个符号:

$$Y_{k} = \left(\sin\left(\pi - \frac{-k\pi}{N}\right), \sin 2\left(2\pi - \frac{-k\pi}{N}\right), \cdots\right)$$

$$= \left(\sin\frac{k\pi}{N}, -\sin\frac{2k\pi}{N}, \cdots\right)$$
(30)

对于我们的问题(二阶差分算子矩阵求解),我们可以观察它们乘以 $S=I(RAI)^{-1}RA$ 后的情况。但事实上,多重网格法对应的矩阵实际上是(I-S),它给出了经过234步后误差和修正项之间的差e-E=(I-S)e。所以我们直接观察I-S的在低频正弦波 y_k 和高频正弦波 y_k 上的作用:

$$(I-S)y_k = \frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{k\pi}{N}\right)(y_k + Y_k)$$

$$(I-S)Y_k = \frac{1}{2}\left(1+\cos\frac{k\pi}{N}\right)(y_k + Y_k)$$
(31)

对于v-cycle,我们能直接分析得到这个美妙的结果(Beautiful formula),但在更复杂的问题中是很难直接分析得到的。在此我们指出多重网格法的四个关键点:

- 1. 误差的低频分量被多重网格很好地去除(例子中k=1,2,3): 在上面的公式中, cos项是很接近1的(因为低频分量 $k \ll N$),它大致是 $O((k/N)^2)$ 的。这说明多 重网格法几乎消除了误差中所有的低频分量。这些分量就是在细网格上Jacobi/GS 迭代器难以去除的部分。
- 2. 一对正弦波被多重网格法混叠:混叠是由R, I矩阵带来的。它们不像A, A是方阵(Square Matrix),它能够将不同的频率分量分开(因为正弦波就是二阶差分算子的特征向量,就如正弦波是二阶导数算子的特征值一样)。对于一般的矩阵,会将不同的分量混叠在一起。
- 3. 两个频率混合得到的 $e = y_k + Y_k \neq I S$ 的特征向量,对应的特征值为1: 我们将上面的式子直接相加就能得到这个结果。因为 Y_k 和 y_k 的唯一区别就是符号,那么 $y_k + Y_k$ 有 $(e_1, 0, e_3, 0, ...)$ 这样的形式。它们正是我们在之前找到的S的零空间中的向量。因为Se = 0,这些分量不被多重网格法解决。
- 4. I-S的其他的特征向量是 Sy_k ,对应特征值为0: 之前我们指出 $S^2=S$,因此有 $(I-S)Sy_k=0$ 。在我们的例子中,我们显式地求出了 Sy_1 和 Sy_2 ,它们分别是 (1,2,2,2,1)和(1,2,0,-2,1)的倍数。它们大多是一些低频分量,并且多重网格 法将这些分量从误差中去除。

根据这个公式,我们还能得到 Sy_k 不过是 y_k 和 Y_k 的组合。为了找到更好的组合 e^* (这个 e^* 被多重网格法完全消除)我们将这两个式子两边分别乘以 $(1+\cos\frac{k\pi}{N})$ 和 $(1-\cos\frac{k\pi}{N})$ 后相减,得到 $Se^*=e^*$

$$(I-S)e^* = (I-S)\left[\left(1+\cos\frac{k\pi}{N}\right)y_k - \left(1-\cos\frac{k\pi}{N}\right)Y_k\right] = 0 \qquad (32)$$

这个混合频率分量 e^* 被多重网格法完全消除了(这对于所有的 $k \leq N - k$ 都成立)。

总的来说,由第一步计算后得到的光滑的误差向量 e_h 在 $y_k + Y_k$ 这个方向上只有一些很小的分量(因为细网格上的Jacobi迭代能够有效得消除误差的高频分量)。多重网格法并不会改变这个(小的)分量。更大的分量是沿着 e^* 的,这些分量能被多重网格法完全消除。

Note: $为何在y_k + Y_k 上 只有很小的分量, 而沿着e*由更大的分量?$

需要注意 e^* 的表达式中, y_k 和 Y_k 的系数。当 $k \ll N$ 时,有 $\cos \approx 1$,那么这个 $e^* \approx 2y_k$ 。如果考虑误差向量 $y = \lambda_1 y_k + \lambda_2 Y_k \pi y_k + Y_k$, e^* 表示,那么 $y \approx \frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2)e^* + \lambda_2 (y_k + Y_k)$,于此同时,我们知道误差中的高频分量少,即 λ_2 是很小的,这就能够印证上面的说法。

限制矩阵导致混叠

为了让以上的分析更加完整,我们下面来看看一对频率分量是如何被混叠在一起的。这样的混叠现象产生于限制矩阵 $R=R_h$,它将 y_k^h 和 Y_k^h 映射到"相同"的向量(两向量是线性相关的)。

$$Ry_k^h = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\frac{k\pi}{N}\right)y_k^{2h}$$

$$RY_k^h = \left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\frac{k\pi}{N}\right)y_k^{2h}$$
(33)

Note: 这里的上标表示的是不同网格下的正弦波。

上面的公式直接指出了R对不同频率的混叠。我们无法仅仅从输出中分析原本输入的向量是 y_k 还是 Y_k (方程组欠定)。另一方面,如果我们直接观察R的行、列数,这样的"欠定现象"对于一个矮、胖的矩阵是再常见不过的。在粗网格上的不同频率分量数目大致上只有细网格的一半。

Note: 这里说的不同频率分量的数目也就是其线性空间的维数。

反过来, R^T 对输入的向量有与R相反的作用。当R将两个分量混合为一个的时候,插值矩阵以(混合后的)这一个频率分量作为输入,输出两个频率分量:

$$2I_{2h}^{h}y_{k}^{2h} = \left(1 + \cos\frac{k\pi}{N}\right)y_{k}^{h} - \left(1 - \cos\frac{k\pi}{N}\right)Y_{k}^{h} \tag{34}$$

从这个公式中我们还能够看出,对一个粗网格上的一个向量插值会额外产生一个细网格上的高频分量。但是这个高频分量的振幅很小,因为 $\cos k\pi/N \approx 1$ 。

Recall: 这说明为何算法的第五步是必要的,为消除低频误差而采用的多重网格法(第2-4步)还会额外引入一个很小的高频分量,第五步就能够将这些分量再去除掉。下面对例子的分析也说明了这一点。

例子(续)

我们直接指出,如果我们没有第1、5步的光滑过程,而反复执行第2-4步是没有任何作用的!考虑 $e=y_k+Y_k$ 误差,(I-S)e=e 说明了它在整个2-4步的迭代后没有产生任何变化。只有在1、5步的光滑作用(Smoothing Matrix,即前文提到的 $M=I-P^{-1}A$)能够很好的将这些高频误差分量消除。

假设在第1、5步采用(单步的)加 $w=\frac{2}{3}$ 权的Jacobi迭代,即 $M=I-\frac{1}{3}A$,那么整个1-5步对应的矩阵为 M(I-S)M,这个矩阵的特征值会决定了整个多重网格法的好坏。出乎意料的是(当然也是情理之中的),原本的例子中的 5×5 矩阵 M(I-S)M 有三个特征值为1/9!

Note: 矩阵特征值绝对值的最大值决定了其最多能将向量放大多少倍, 也能说明至少缩小多少倍。

Recall: 矩阵的谱半径

Note: (I-S)的秩仅仅为3,所以剩下的特征值为0,整个矩阵的谱半径就是1/9。

Note: 这里的矩阵M(I-S)M是作用在误差上的,即经过完整的1-5步后,误差e降低为M(I-S)Me。

这说明,原本I-S矩阵 $\lambda=1$ 的三个特征方向对应了M(I-S)M矩阵的 $\lambda=1/9$ 的特征方向。

如果我们不用多重网格法,M的最大特征值(谱半径)为0.91。这还只是在第1、5步只进行了一次光滑的效果(只进行了一次Jacobi迭代),采用更多次的光滑会带来更好的效果。

Fourier 模态分析

这一节的分析,我们忽略零边界条件,而考虑更一般的情况。与此同时,我们考虑一个无穷大的网格。之前的问题中,零边界条件让我们只考虑了正弦波,而当边界条件消失,研究对象从原本的有限长的正弦波 y_k 向量,变为无限长、任意频率的简谐波向量 y_ω 。通常用连续频率 ω 的复指数函数来表示(连续频率是指 ω 不必再是整的或是有理的):

$$y_{\omega} = (\dots, e^{-2i\omega}, e^{-i\omega}, 1, e^{i\omega}, e^{2i\omega}, \dots)$$
(35)

我们需要一个"无穷维的矩阵" K_{∞} 来作用在这些无穷维的向量上。二阶差分格式 -1,2,-1 永远会出现在每一行上。我们分析的关键是这样一个 K_{∞} 矩阵的的特征向量就是 y_{ω} ,而与 之对应的特征值是 $\lambda=2-2\cos\omega$:

$$K_{\infty}y_{\omega} = (2 - 2\cos\omega)y_{\Omega} \tag{36}$$

对于 K_{∞} 的作用的分析为我们提供了 A_h 的作用的信息。同时,当我们切换到粗网格上, K_{∞} 也告诉我们 A_{2h} 的信息。

(在这种更广义的情况下)限制矩阵R也会产生频率混叠,不同的是,现在混合的频率分量是 Ω 和 $\Omega+\pi$ 。这两个频率分量之间仅仅相差了一个符号,即 $e^{i\pi n}=(-1)^n$ 。这与我们之前对 y_k,Y_k 的分析是一致的。

本节采用的Fourier分析自始至终都会对无穷序列 $(I-S)y_{\omega}$ 和 $(I-S)y_{\omega+\pi}$ 进行分析,整个过程在有穷维的情况是相仿的。对于有穷维情况的分析说明了为何多重网格法是有效的,这些推导过程对于无穷维的情况也是成立的。

你可能觉得这一节是不重要的,因为实际求解过程中不可能出现无穷维、没有边界的情况。但为何纯模态分析依然是重要的?这是因为这样的分析中,我们包含了所有的Fourier序列(原文:It allows Fourier to work freely)!Poisson方程 $\operatorname{div}(c \cdot \nabla u) = f$ (例如守恒型方程的微分形式)在更一般的区域上是相当复杂的。但如果我们将c限制维一个常数并且忽略所有的边界条件,这些"内部的特征向量"(Interior Eigenvectors)就是这些 $y_{\omega}, y_{\omega+\pi}$ 的组合。Fourier方法并不擅长求解带边值条件的问题,这为我们也留下了一个难题,即如何正确地处理边界。

AMG方法

作为本章节(也是本文)的结尾,我们花一小部分介绍下代数多重网格法(Algebraic Multigrid, AMG)。先前我们从一个实际的Poisson问题出发,研究了如何对于二阶差分方程采用多重网格进行求解。更一般的Au=b问题中并不涉及"网格"的概念(There is no grid in the background)。原本多重网格法的一些重要概念需要在一般的问题中被定义出:*光滑向量、节点的邻接关系、粗网格*。前两个概念是显而易见的,但是由于我们没有网

格,从 A_h 得到 A_{2h} 的方法是比较模糊的。

Note: 看作图的邻接矩阵,每一个非零的i,j元素一定程度上表明节点i和j的"亲密程度"或是"流量"。

- 1. 光滑向量(Smooth vectors):是指那些||u||和||Au||是同数量级(comparable)的向量。u中的高频分量会被A放大,就如同二阶微分/差分算子对于 $\sin kt$ 放大了 k^2 倍那样。
- 2. 节点的邻接关系(Connected nodes):在网格上,节点的邻接关系是由A的非零元描述的。如果没有网格,我们直接观察矩阵,那些有较大影响的(significant)元素告诉我们 i 和 j 之间是"邻接"的(例如 $|A_{ij}| > |A_{ii}|/10$)
- 3. 粗网格(Coarse subset of nodes C):每一个有较大影响的 A_ij 都说明了 u_j 对于 u_i 有较大的影响。这意味着, e_j 和 e_i 有很大概率是可比的的(comparable,同数量级的含义)。因此,对于 e_i 和 e_j 而言,我们不需要它们都出现在粗网格上。假设在细网格上两个点是邻接的,那么它们很可能不会都在出现在粗网格C中。例如,如果节点i不在粗网格C中,那么每一个、或至少一个对i有很强影响的节点j都应当在粗网格中。有一系列的启发式的规则、算法来选择粗网格中包含的节点。但总体上说,使用包含较多节点的粗网格通常优于包含较少节点的粗网格。

书()中还给出了AMG方法的插值函数。它从在C中的节点j的误差 E_j 开始分析,并使它们保持不变。如果i不在C中,则多重网格法第二步插值时将会从对其有很大影响的节点j处的 E_j 加权组合获得。在我们的Poisson问题中,这样的加权组合就是节点两个邻居的平均值。这是因为我们的问题是有网格的!

对 e_j 的插值组合方法会将最大的权重赋予对i有最大影响的j。但较小的那些元素也不能被完全忽略。换言之,最终采用插值的方法并不是简单的平均。这也说明AMG方法在计算成本比一般的多重网格法上是更加昂贵,但它能够适合更一般的稀疏矩阵求解(并且有软件可以控制AMG的行为,不需要我们烦心)。我们仍然希望"光滑+多重网格"的强强联手能够让AMG方法在O(n)内收敛到Au=b的精确解。

在此说一些题外话,对于固体力学和流体力学的计算之间有一个显著的差异:对于固体,原本的有限元网格相对而言是较粗的,通常我们寻求的是"工程上的精确"(Engineering Accuracy),并没有很细节上的运动现象需要考虑。对结构问题而言,多重网格法并不是一个常用的方法(消元法更简单)。但流体力学不一样,流体通常有很多细小的运动(例如高雷诺数情况下的湍流)。不仅是从数值方法上还是物理含义上,多重网格法都成为了一个自然的选择。尽管由于对流项的存在、有限元方法的"迎风修正"(Upwind adjustment),一般的流体并不产生一个对称的矩阵。特别是当我们应用多尺度方法的时候,多重网格法的收敛分析随之变得更为复杂。