Multirooster en multischaal oplossingsmethoden

Project 2023-2024: Multigrid voor het oplossen van complex-waardige Helmholtz problemen

Dr. Siegfried Cools

Deadline verslag: dinsdag 19 december 2023, 24u00.

In dit project bestuderen we de numerieke eigenschappen van de Multigrid methode voor Helmholtz problemen. De d-dimensionale Helmholtz vergelijking op een eenheidsvierkant is

$$(-\Delta + \sigma)\, u(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in [0,1]^d. \tag{1}$$

We onderstellen het gebruik van Dirichlet randvoorwaarden doorheen dit project. Stel $d = 1$. Na discretizatie via bvb. eindige differenties op een plaatsrooster $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ met $x_0 = 0$ en $x_n = 1$ leidt deze 1-dimensionale vergelijking tot een stelsel lineaire vergelijkingen

$$H^h u^h = (A^h + \sigma I^h) u^h = f^h, \tag{2}$$

met $H^h \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$, waarbij A^h de discretizatie van de negatieve Laplaciaan $-\Delta$ voorstelt, en I^h een eenheidsmatrix is. De parameter $\sigma \in \mathbb{R}$ wordt (het kwadraat van) het golfgetal genoemd, en is voor de eenvoud plaatsonafhankelijk in dit project. De 1D Helmholtz discretizatiematrix H^h (tweede orde centrale differenties) wordt expliciet gegeven als

$$H^h = \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{bmatrix} + \sigma \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & \cdot & & & \\ & & & \cdot & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Indien $\sigma \geq 0$ leidt de Helmholtz vergelijking zoals geweten tot een symmetrische en positief definiete discretizatiematrix H^h, zie *'A Multigrid Tutorial'*, Henson, Briggs & McCormick, Chapter 1 (referentie [1]).

1 De indefiniete Helmholtz vergelijking

1.1 Discretizatie

Bij discretizatie van de Helmholtz vergelijking willen we fysisch gezien garanderen dat de golffunctie (oplossing) numeriek voldoende nauwkeurig wordt voorgesteld, *i.e.* met genoeg roosterpunten per golflengte λ. De golflengte is gedefinieerd als $\lambda = 2\pi/\sqrt{|\sigma|}$, waarbij $\sqrt{|\sigma|}$ het golfgetal is.

(a) Een veelgebruikte fysische vuistregel eist minstens 10 roosterpunten per golflengte om de oplossing voor te stellen. Leidt hieruit het criterium $\sqrt{|\sigma|}\, h \lesssim 0.625$ af, dat in de Helmholtz literatuur wordt gebruikt.

(b) Voor de numerieke voorbeelden in dit project kiezen we vaak $\sigma = -600$. Wat is het minimale aantal roosterpunten dat we hierbij volgens de vuistregel uit (a) moeten nemen?

1.2 1D modelprobleem

Beschouw een 2^{de} orde eindige differentie discretizatie van het 1-dimensionele Helmholtz probleem (1) met golfgetal $\sigma = -600$ en $n = 64$ roosterpunten. Neem als rechterhand de puntbron

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{als } x = \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{als } x \in [0,1] \backslash \{\frac{1}{2}\}. \end{cases}$$

Noot: het is handig om f (net als H^h) te schalen met de roosterafstand, *i.e.* $f(n/2) = 1/h^2$.

(a) Schrijf een functie `helmholtz.m` die de Helmholtz matrix genereert. Pas dan je 1D multigrid code `vcycle.m` aan zodat het oplossen van (2) mogelijk wordt. Let op met het aanmaken van de coarse grid matrix! Toon theoretisch aan dat de Galerkin voorstelling $H^{2h} = I_h^{2h} H^h I_{2h}^h$ *niet* meer geldig is voor Helmholtz problemen met $\sigma \neq 0$.

Hint: in je code zal je de coarse grid matrix H^{2h} dus moeten definiëren via de `helmholtz.m` functie. Dit impliceert dat je de parameter σ moet meegeven als input aan `vcycle.m`.

(b) Los het bijhorende stelsel op gebruikmakende van Matlab backslash (dit levert de exacte oplossing u_{ex}) en een reeks V(1,1)-cycles. Start van een initiële schatting

$$v^{(0)} = \frac{1}{2}\left[\sin\left(\frac{j16\pi}{n}\right) + \sin\left(\frac{j40\pi}{n}\right)\right], \qquad (j = 1, \ldots, 63).$$

zoals in practicum 2. Plot het multigrid convergentiegedrag met de error $e^{(k)} = \|v^{(k)} - u_{ex}\|_2$ na elke iteratie. Wat constateer je?

Hint: voor het plotten van error-/residu-normen doorheen dit project: gebruik een $\log_{10}$-schaal om het convergentieverloop weer te geven.

(c) Bepaal analytisch de eigenwaarden en eigenvectoren van H^h. Wat gebeurt er met de eigenwaarden voor $\sigma < 0$ als je deze vergelijkt met het Poisson probleem waarbij $\sigma = 0$?

(d) Plot de (numerieke) eigenwaarden van de discretizatiematrix H^h. Welke belangrijke conditie op de matrix H^h wordt er geschonden indien $\sigma < 0$?

1.3 LFA analyse van de ω-Jacobi smoother

Voer een LFA analyse uit op de gewogen Jacobi smoother met iteratiematrix $R_\omega = I - \omega D^{-1} H^h$.

(a) Bereken analytisch de amplificatiefactor $G(\theta)$ van de ω-Jacobi smoother voor de 1D Helmholtz vergelijking.

(b) Plot de amplificatiefactor $G(\theta)$ in functie van $\theta \in [-\pi, \pi]$ voor de parameters van het 1D modelprobleem. Je mag uitgaan van $\omega = 2/3$. Wat merk je op in vergelijking met de amplificatiefactor bij $\sigma = 0$ betreffende de amplificatie van de meest gladde modes?

(c) Bereken numeriek de eigenwaarden van de iteratiematrix R_ω voor het modelprobleem en plot deze bij op de figuur gemaakt in (b).

Hint: herinner je dat $\lambda_k = G(\theta_k) = G(k\pi/n)$.

(d) Bepaal analytisch een uitdrukking voor de *convergentiefactor*

$$\rho = \max_{-\pi \leq \theta \leq \pi} |G(\theta)|$$

en bereken deze daarna voor de parameters uit het 1D modelprobleem. Wat stel je vast? Wat betekent dit voor de werking van de smoother?

Noot: Door het maximum over $\theta \in [-\pi, \pi]$ kijken we hier naar *alle* modes.

1.4 Spectrale analyse van het two-grid correctieschema

Analyseer nu de tweede multigrid component, de two-grid correctie $TG = I - I_{2h}^{h}(H^{2h})^{-1}I_h^{2h}H^h$.

(a) Ga na dat voor zeer gladde eigenmodes w_k, dus met $k \ll n/2$, benaderend geldt dat

$$TG\, w_k \approx \left[1 - \frac{\lambda_k(H^h)}{\lambda_k(H^{2h})}\right] w_k = \left[1 - \frac{\lambda_k(A^h) + \sigma}{\lambda_k(A^{2h}) + \sigma}\right] w_k.$$

Leidt hiertoe eerst algemeen de werking van TG op de mode w_k af, zie referentie [1], p. 80-83. Gebruik dan de benaderingen $c_k = \cos^2(\frac{k\pi}{2n}) \approx 1$ en $s_k = \sin^2(\frac{k\pi}{2n}) \approx 0$ voor $k \ll n/2$. We noemen

$$\tilde{\rho}_k = \left|1 - \frac{\lambda_k(H^h)}{\lambda_k(H^{2h})}\right|, \qquad k < n/2,$$

de *benaderende amplificatiefactor* van het TG schema voor de k-de gladde mode.

(b) Bepaal een analytische uitdrukking voor $\tilde{\rho}_k$ voor $k < n/2$. Plot $\tilde{\rho}_k$ in functie van k voor de parameters uit het 1D modelprobleem. Wat kan je concluderen voor de convergentie van het two-grid correctieschema?

(c) Plot de numerieke eigenwaarden van de matrices H^h en H^{2h} op éénzelfde figuur. Wat gebeurt er met de benaderende amplificatiefactor $\tilde{\rho}_k$ uit (b) wanneer voor zekere $k < n/2$ geldt dat $\lambda_k(H^h)$ en $\lambda_k(H^{2h})$ een verschillend teken hebben? Voor welke index k doet deze situatie zich hier voor? Lost de smoother dit probleem op? (zie Sectie 1.3, (b) en (c))

Verklaar aan de hand van je analyse in Sectie 1.3-1.4 het divergente gedrag van multigrid voor de Helmholtz vergelijking. Zijn smoother en coarse grid correctie voor dit probleem complementair?

2 De complexwaardige Helmholtz vergelijking

We beschouwen nu het Complex Shifted Helmholtz probleem

$$(-\Delta + (1 + \beta i)\,\sigma)\, u(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in [0,1]^d. \tag{3}$$

We noteren het overeenkomstige discrete stelsel lineaire vergelijkingen als

$$M^h u^h = f^h. \tag{4}$$

Dit probleem wordt *Complex Shifted Laplacian (CSL)* genoemd, omdat de Laplaciaan Δ nu niet enkel reëelwaardig (met shift σ) maar ook complexwaardig (met shift $\beta i \sigma$) wordt verschoven. De *shift parameter* $\beta \in \mathbb{R}^+$ bepaalt de grootte van de complexe shift. Indien $\beta \equiv 0$ reduceert het CSL probleem tot (1). Merk op dat de oplossing van (3) een reëel en een imaginair deel heeft.

2.1 1D modelprobleem

Los het CSL probleem (3) op, gebruikmakende van dezelfde setting als in het eenvoudige 1D modelprobleem uit Sectie 1.2. De complexe shift parameter wordt verondersteld $\beta = 0.5$ te zijn.

(a) Los het stelsel (4) exact op via backslash en benaderend aan de hand van een reeks V(1,1)-cycles. Plot het convergentiegedrag. Wat stel je vast betreffende de multigrid convergentie?

(b) Vergelijk de oplossing voor het originele Helmholtz probleem (1) met (het reële deel van) je oplossing voor het CSL probleem (3). Plot hiertoe beide oplossingen op eenzelfde figuur. Waarom wordt de CSL oplossing ook wel een *gedempte* Helmholtz oplossing genoemd?

(c) Bepaal een analytische uitdrukking voor de eigenwaarden van M^h van het CSL probleem. Plot de numerieke eigenwaarden van M^h. Plot de eigenwaarden van H^h op dezelfde figuur ter vergelijking. Wat gebeurt er met het spectrum bij het invoeren van een complexe shift?

Hint: voor het plotten: plot de eigenwaarden in het complexe vlak, *i.e.* plot het reële deel van de eigenwaarden op de horizontale as en het imaginaire deel op de vertical as.

2.2 LFA analyse van de ω-Jacobi smoother

Voer opnieuw een LFA analyse uit van de ω-Jacobi smoother voor het 1D modelprobleem.

(a) Bereken een analytische uitdrukking voor amplificatiefactor $G(\theta)$ en convergentiefactor ρ.

(b) Plot $G(\theta)$ in functie van $\theta \in [-\pi, \pi]$ voor de parameters van het CSL modelprobleem ($\omega = 2/3$). Wat concludeer je omtrent de stabiliteit van de smoother op de eigenmodes in de error?

Hint: aangezien het spectrum van M^h complexwaardig is, kan je de modulus $|G(\theta)|$ plotten. Deze stelt voor complexwaardige functies de amplitude voor.

(c) Bepaal een analytische uitdrukking voor de *smoothing factor*

$$\mu = \max_{\pi/2 \leq |\theta| \leq \pi} |G(\theta)|.$$

(d) Onderzoek de optimale relaxatieparameter voor het modelprobleem, i.e. de parameter $\omega \in [0, 1]$ waarvoor μ minimaal is, zodat oscillatorische modes sterk worden gedempt.

Hint: Kijk in referentie [2] voor een theoretische uitwerking van de optimale ω. Je hoeft de uitwerking zelf niet over te nemen. Verifieer numeriek (toon bvb. een figuur) dat deze keuze van ω inderdaad optimaal is.

2.3 Spectrale analyse van het two-grid correctieschema

De LFA analyse van de smoother (Sectie 2.2) alleen biedt geen sluitende verklaring voor de werking van multigrid op het CSL probleem. Een spectrale analyse van het TG schema brengt meer inzicht.

(a) Plot de benaderende amplificatiefactor $\tilde{\rho}_k$ van het TG schema voor gladde modes in functie van $k = 1, \ldots, \frac{n}{2} - 1$. Gebruik hiervoor de numerieke eigenwaarden van M^h en M^{2h}.

(b) Wat gebeurt er met de factor $\tilde{\rho}_k$ indien je de parameter β groter/kleiner kiest. Waarom lost een voldoende grote shift β de instabiliteit van het TG schema (zie Sectie 1.4) op?

Hint: Wat gebeurt er met de eigenwaarden van het CSL probleem uit Sectie 2.1 (c)? Doet het probleem dat je observeerde in Sectie 1.4 (c) voor de indefiniete Helmholtz vergelijking zich nog voor indien β groot genoeg wordt gekozen?

2.4 2D modelprobleem

Pas je 2D multigrid code `vcycle2D.m` uit practicum 4 aan zodat ze geschikt is voor het oplossen van 2D Complex Shifted Laplacian problemen.

(a) Los een Complex Shifted probleem met $n_x = n_y = 64$, $\sigma = -600$ en $\beta = 0.5$ op gebruikmakende van je 2D multigrid code. Voer hierbij voldoende V(1,1)-cycles uit om de error te reduceren tot de orde van de discretizatiefout. Plot het convergentieverloop en de oplossing.

(b) Verdubbel nu het aantal roosterpunten in elke richting en plot opnieuw de convergentie tot op discretizatiefout op dezelfde figuur als in (a). Herhaal dit een aantal keer voor $n_x = n_y = 64, 128, 256, 512, \ldots$ Wat kan je zeggen over het benodigde aantal iteraties in functie van het aantal discretizatiepunten? Verklaar aan de hand van de theorie.

2.5 Aggressief coarsenen

Pas je 1D code nu aan zodat je zogenaamd "aggressive coarsening" toelaat. Dat wil zeggen: in plaats van van het h-rooster naar het $2h$ rooster te gaan, ga je ineens naar een $4h$-rooster met maar een vierde van de roosterpunten (in 1D), en dan naar een $16h$-rooster, *etc.* Je slaat dus telkens een rooster over.

(a) Leidt theoretisch de TG operator af bij aggressief coarsenen. Kan je de eigenmode analyse uit de cursus en Sectie 2.3 veralgemenen naar de nieuwe operator? Welke complementaire eigenmodes op het h rooster worden er bij een LFA analyse op dezelfde mode op het $4h$ rooster afgebeeld?

(b) Bekijk de convergentie van je V-cycles met aggressive coarsening, en vergelijk met de convergentie van standaard V-cycles die je eerder in deze sectie gebruikte. Welke van beide methoden is efficienter? Welke is accurater? Verklaar aan de hand van de theorie in vraag (a).

Noot: in het vervolg van het project hieronder zullen we terug gewoon op standaard coarsening overschakelen.

3 Krylov deelruimte methoden en multigrid preconditioning

Sectie 1 toonde aan dat multigrid onstabiel is voor het Helmholtz probleem (1). Daarom zullen we de *Krylov deelruimte methode* GMRES (zie Matlab help bij `gmres.m`) gebruiken. Ook GMRES heeft echter moeilijkheden met indefiniete matrices. Om het aantal Krylov iteraties laag te houden, wordt er typisch gebruik gemaakt van een preconditioner M^h. We lossen dus het equivalente stelsel

$$(M^h)^{-1} H^h u^h = (M^h)^{-1} f^h$$

op. Deze preconditioning techniek heet *left preconditioning*, aangezien de preconditioning operator langs links wordt toegepast in bovenstaande vergelijking.

Indien de preconditioner M^h zo wordt gekozen dat $(M^h)^{-1}H^h$ een kleiner conditiegetal heeft dan de oorspronkelijke matrix H^h zal de Krylov convergentie verbeteren. Zoals opgemerkt in Sectie 2.1 (b) is de oplossing van het CSL probleem (3) niet gelijk aan de oplossing van het oorspronkelijke Helmholtz probleem (1). Als de shift parameter β echter niet te groot is, zijn beide oplossingen toch gelijkaardig. Het zou dus een goed idee kunnen zijn om als preconditioner $(M^h)^{-1}$ de (benaderde) inverse van de CSL operator te nemen.

Uit Sectie 2 weten we dat het CSL probleem efficient kan worden opgelost aan de hand van multigrid. Met andere woorden: het volstaat om de preconditioner inverse $(M^h)^{-1}$ benaderend te berekenen aan de hand van slechts één V-cycle.

Om een preconditioner mee te geven in Matlab kan je een *function handle* meegeven aan de bestaande Matlab functie `gmres.m`. Je 1D code ziet er dan bijvoorbeeld als volgt uit:

```
A = helmholtz(64,sigma);
v0 = zeros(63,1);
f = zeros(63,1);
f(32) = 1*64^2;
MG = @(x) vcycle(v0,x,A,1,1);        % preconditioner in de vorm van een function handle
v = gmres(A,f,[],10^(-6),100,MG);
```

3.1 MG-GMRES voor het indefiniete Helmholtz probleem

(a) Beschouw de discretizatie van het 2D modelprobleem (1) met parameters $n_x = n_y = 128$ en $\sigma = -600$. Los dit probleem eerst op met GMRES zonder preconditioner (via Matlab `gmres.m`). Plot het convergentieverloop van de GMRES solver.

Hint: plot hier het residuverloop dat `gmres.m` output als de variabele `resvec`. Gebruik uiteraard weer een $\log_{10}$-schaal om de convergentie weer te geven zoals eerder.

(b) Los hetzelfde modelprobleem nu op gebruikmakende van GMRES met één V(1,1)-cycle op het CSL probleem (3) (met $\beta = 0.5$) als preconditioner in elke GMRES iteratie. We noemen dit ook wel *multigrid-preconditioned GMRES* (MG-GMRES). Plot en vergelijk het convergentiegedrag van MG-GMRES met dat van GMRES zonder preconditioner uit vraag (a).

(c) Ga na wat er gebeurt met de Krylov convergentie indien je de complexe shift β groter/kleiner kiest. Waarom is het aangewezen om de complexe shift parameter β niet al te klein of te groot te kiezen?

Nuttige referenties

[1] W.L. Briggs, W.L., V.E. Henson and S.F. McCormick. *A Multigrid Tutorial.* Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.

[2] O.G. Ernst and M.J. Gander *Why it is difficult to solve Helmholtz problems with classical iterative methods.* Numerical analysis of multiscale problems. Springer Berlin Heidelberg (2012): 325-363.

[3] Y.A. Erlangga, C.W. Oosterlee, and C. Vuik. *A novel multigrid based preconditioner for heterogeneous Helmholtz problems.* SIAM Journal on Scientific Computing 27.4 (2006): 1471-1492.

[4] S. Cools and W. Vanroose. *Local Fourier analysis of the complex shifted Laplacian preconditioner for Helmholtz problems.* Numerical Linear Algebra with Applications 20.4 (2013): 575-597.