



**زیربرنامه:**

GMRES\_ST

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **توسعه دهندگان** | مرتضی نامور |  |
| سعید شیخی |  |
| **تهیه کنندگان مستند** | سعید شیخی | |
| **تاییدکنندگان** | مرتضی نامور | |
| **تاریخ تنظیم سند** | 12/12/1394 | |
| **شناسه سند** | **MCF116F1** | |
| **زبان برنامه‌نویسی** | **Fortran 90/95** | |

1. وظایف

در این زیربرنامه یک دستگاه معادله خطی با استفاده از روش GMRES حل می شود.

1. توضیحات و تئوری­ها

جهت توضیحات بیشتر در مورد روش GMRES به سایر گزارشات که این روش رو بطور مفصل بیان کرده اند مراجعه شود. زیرا در اینجا با ارائه یک مثال کاربردی در حوزه CFD این روش توضیح داده شده است.

1. بخش­های زیربرنامه

در زیربرنامه‌ای که جهت اجرای روش GMRES ایجاد شده‌ است پارامترها و آرایه‌های لازم همانطور که در قسمت راهنمای کاربری گفته شد تعریف می‌گردند و ورودی‌های مورد نیاز از برنامه اصلی دریافت می‌گردد. در ادامه چگونگی پیاده شدن الگوریتم روش GMRES، آورده می­شود. تمام این مراحل در زیربرنامه‌ی GMRES\_ST در داخل برنامه پیاده‌سازی شده‌است.

1. مقداردهی اولیه به پارامتر شمارش تعداد تکرارها

برای شمارش تعداد تکرارهای روش GMRES تا رسیدن به همگرایی باید متغیر مربوط به این کار برابر صفر قرار داده شود.

1. پیاده‌سازی روش تا رسیدن به همگرایی یا رسیدن به حداکثر تکرار

در این روش در صورتی که تا حداکثر تکراری که از کاربر دریافت می‌گردد به همگرایی نرسیدیم روش متوقف می‌شود. بنابراین تکرارها تا رسیدن به همگرایی یا حداکثر تکرار مورد نظر کاربر انجام می‌شود.

1. محاسبه 

با توجه به نوع ذخیره‌سازی ماتریس ضرایب اگر ماتریس ضرایب به روش مختصاتی ذخیره شده باشد با فراخوانی زیربرنامه‌ی AX\_st، اگر به روش سطر فشرده ذخیره شده باشد با فراخوانی زیربرنامه AX\_cr و اگر با روش ستون فشرده ذخیره شده باشد با فراخوانی زیربرنامه AX\_cc مقدار  محاسبه می‌شود.

1. محاسبه باقیمانده اولیه

مقدار باقیمانده اولیه طبق رابطه‌ی (4) محاسبه می‌شود.

1. محاسبه نرم باقیمانده‌ها

برای تعیین بردارهای پایه برای زیرفضای  باید نرم باقیمانده محاسبه شود. در اینجا با استفاده از رابطه‌ی زیر نرم بردار باقیمانده محاسبه می‌شود:

1. 
2. محاسبه تلورانس نسبی

از آنجا که برای رسیدن به همگرایی باید مقدار **** کمتر از تلورانس نسبی باشد، در اینجا با استفاده از مقدار نرم باقیمانده محاسبه شده در قسمت قبل و خطای نسبی که توسط کاربر تعیین شده است، مقدار تلورانس نسبی محاسبه می‌شود. این فرایند فقط در تکرار اول انجام می‌شود و تا رسیدن به همگرایی عوض نمی‌گردد. باید توجه شود که تلورانس نسبی، نسبت باقیمانده در هر تکرار را به باقیمانده اولیه نشان می‌دهد. در واقع در صورتی که حدس اولیه خیلی خوب باشد که باقیمانده اولیه کوچک شود، لازم نیست خطای نسبی کوچک باشد چون در این صورت مقدار تلورانس بسیار کوچک می‌شود.

1. محاسبه اولین پایه‌ی زیرفضای جستجو

در این مرحله با استفاده از بردار باقیمانده و نرم آن اولین پایه تشکیل دهنده‌ی زیرفضای  یا همان بردار  به شکل  محاسبه می‌شود.

1. تعیین بردار 

برای محاسبه‌ی بردار  که مقدار **** را مینیمم می‌کند بردار  با استفاده از نرم باقیمانده اولیه و رابطه‌ی (27) تعیین می‌گردد.

1. مقداردهی اولیه با ماتریس هسنبرگ

از آنجا که اگر روش GMRES بعد از چند تکرار داخلی به همگرایی نرسید روش دوباره راه‌اندازی می‌شود و ماتریس هسنبرگ و پایه‌های زیرفضای جستجو مجدداً به کمک آخرین جواب بدست آمده ایجاد می‌شوند، در این مرحله ماتریس هسنبرگ با توجه به تعداد تکرار داخلی ایجاد می‌گردد و برابر صفر قرار داده می‌شود.

1. مقداردهی اولیه پایه‌های زیرفضای 

از آنجا که پایه‌های زیرفضای جستجو باید بر یکدیگر عمود باشند در اینجا ابتدا این پایه‌ها به شکل  مقداردهی اولیه می‌شوند تا طبق الگوریتم آرنولدی بر پایه‌ی قبلی عمود شوند. برای مقداردهی اولیه‌ی پایه‌ی جدید زیرفضا بسته به نوع روش ذخیره‌سازی ماتریس ضرایب یکی از زیربرنامه‌های AX\_st، AX\_cc و AX\_cr فراخوانی می‌شود.

1. پیاده‌سازی حلقه‌ی آرنولدی

در این مرحله با اعمال حلقه‌ی آرنولدی بردار جدید که به عنوان پایه‌ی جدید زیرفضای کرایلف می‌باشد بر پایه‌های قبلی عمود می‌شود و ماتریس هسنبرگ محاسبه می‌گردد.

1. محاسبه ماتریس هسنبرگ مربوط به پایه‌های قبلی

در این مرحله مولفه‌های ماتریس هسنبرگ که مربوط به پایه‌های قبلی زیرفضای جستجو هستند به شکل  محاسبه می‌شوند.

1. عمودسازی پایه‌ی زیرفضای جستجو

با استفاده از ماتریس هسنبرگ پایه‌ی جدید زیرفضای  به شکل  بر پایه‌های قبلی متعامد می‌شود. که در آن زیرنویس  نشان دهنده‌ی پایه‌های قبلی و زیرنویس  نشان دهنده‌ی پایه‌ی جدید است.

1. محاسبه مولفه ماتریس هسنبرگ مربوط به پایه جدید

مولفه‌ی جدید ماتریس هسنبرگ نرم پایه‌ی جدید می باشد که در این مرحله محاسبه می‌شود.

1. دوران ماتریس هسنبرگ

هر ستون ماتریس هسنبرگ با فراخونی زیربرنامه‌ی mult\_givens دوران داده می‌شود تا کل ماتریس با یک دوران دیگر به شکل بالا مثلثی تبدیل شود. از آنجا که سطر اول ماتریس هسنبرگ با یک دوران بالامثلثی می‌شود، لازم نیست در این قسمت دوران شود.

1. محاسبه پارامترهای جدید ماتریس دوران

پارامترهای ماتریس دوران یعنی  و  طبق رابطه‌ی (29) محاسبه می‌شوند.

1. بالامثلثی کردن ماتریس هسنبرگ

با ضرب پارامترهای جدید ماتریس دوران در ماتریس هسنبرگ این ماتریس بالامثلثی می‌شود و عناصر زیر قطر اصلی صفر قرار داده می‌شود.

1. دوران بردار 

با فراخوانی زیربرنامه mult\_givens ماتریس g دوران داده می‌شود.

1. محاسبه نرم خطا

همانطور که گفته شد نرم خطا برابر آخرین مولفه‌ی ماتریس  پس از دوران می‌باشد که در این مرحله نرم خطا با استفاده از این مولفه محاسبه می‌شود.

1. بررسی شرط خروج از حلقه تکرار داخلی

با مقایسه‌ی نرم خطا با تلورانس خطای نسبی و خطای مطلق در صورت همگرایی از حلقه‌ی تکرار داخلی خارج می‌شویم.

1. محاسبه‌ی بردار 

با استفاده از رابطه‌ی  بردار  که مقدار نرم خطا را مینیمم می‌کند محاسبه می‌شود. که  نشان‌دهنده‌ی ماتریس هسنبرگ دوران‌یافته با حذف سطر آخر آن در تکرار  ام است.

1. بروز رسانی مقدار 

پس از محاسبه‌ی بردار  مقدار  با استفاده از رابطه‌ی (33) به روز می‌شود.

1. بررسی شرط خروج از حلقه تکرار خارجی

با مقایسه‌ی نرم خطا با تلورانس خطای نسبی و خطای مطلق در صورت همگرایی از حلقه‌ی تکرار خارجی خارج می‌شویم.