Nelineární optimalizace a numerické metody

(MI–NON)

Magisterský program: Informatika

Obor: Teoretická informatika

Katedra: 18101 Katedra teoretické informatiky

Jaroslav Kruis

Evropský sociální fond

Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti

Paralelní počítače

Vybrané inženýrské úlohy jsou tak náročné, že je prakticky nelze řešit na jednoprocesorových počítačích. Jedná se zejména o sdružené problémy ve třírozměrných úlohách. Např. hydro-termo-mechanická analýza reaktorových nádob.

- masivně paralelní počítače (obvykle se sdílenou pamětí a rychlým spojením procesorů),
- svazky (klastry) počítačů (obvykle distribuovaná paměť a pomalejší spojením procesorů),
- cloud computing (nevhodné pro velké úlohy, např. pro úlohy s velkými maticemi, vhodné pro menší úlohy mnohokrát řešené)

Paralelizace

Paralelizace úloh souvisejících s náplní tohoto předmětu se týká zejména řešení soustav algebraických rovnic.

Ostatní části algoritmů lze bez úprav použít v jednoproceosorovém i víceprocesorovém zpracování.

To samé platí i o částech počítačových programů.

Metody rozložení oblasti na podoblasti
(Domain Decomposition Methods)

J. Kruis. *Domain Decomposition Methods for Distributed Computing*. Saxe-Coburg Publications, Kippen, Stirling, Scotland, 2006. ISBN 978-1-874672-23-4.

Z. Dostál. *Optimal Quadratic Programming Algorithms. With Applications to Variational Inequalities*. Number 23 in Springer Optimization and Its Applications, Springer, New York, USA, 2009. ISBN 978-0-387-84805-1, DOI 10.1007/978-0-387-84806-8.

A. Toselli, O. Widlund. *Domain Decomposition Methods–Algorithms and Theory*. Volume 34 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, Germany, 2005. ISBN 3-540-20696-5.

Metody rozložení oblasti na podoblasti
(Domain Decomposition Methods)

- metody bez překryvu
  - metoda subkonstrukcí (metoda Schurových doplňků)
  - FETI (Finite Element Tearing and nterconnecting method)
  - FETI-DP - Dual-Primal FETI method
- metody s překryvem
  - Schwarzova aditivní metoda
  - Schwarzova multiplikativní metoda

Metoda subkonstrukcí (Metoda Schurových doplňků)

Základní myšlenka - dvě podoblasti

Soustava n lineárních algebraických rovnic

$$\boldsymbol{K}\boldsymbol{d} = \boldsymbol{f}$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{K}_{11} & \boldsymbol{K}_{12} \\ \boldsymbol{K}_{21} & \boldsymbol{K}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{d}_1 \\ \boldsymbol{d}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}_1 \\ \boldsymbol{f}_2 \end{pmatrix}$$

nechť je blok $\boldsymbol{K}_{11}$ regulární

$$\boldsymbol{d}_1 = \boldsymbol{K}_{11}^{-1} \left(\boldsymbol{f}_1 - \boldsymbol{K}_{12} \boldsymbol{d}_2 \right)$$

$$\left(\boldsymbol{K}_{22} - \boldsymbol{K}_{21} \boldsymbol{K}_{11}^{-1} \boldsymbol{K}_{12} \right) \boldsymbol{d}_2 = \boldsymbol{f}_2 - \boldsymbol{K}_{21} \boldsymbol{K}_{11}^{-1} \boldsymbol{f}_1$$

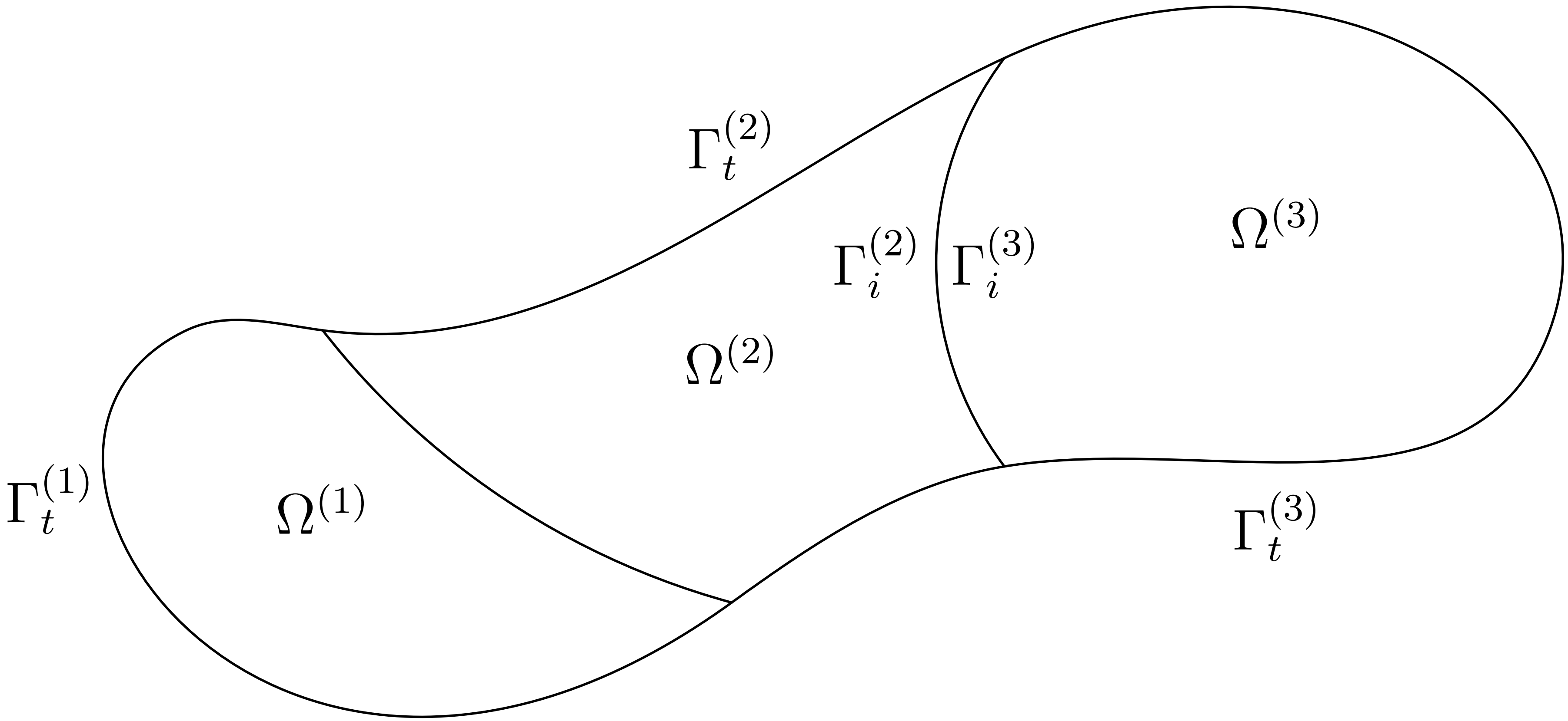
Schurův doplněk submatice $\boldsymbol{K}_{11}$ v matici $\boldsymbol{K}$

$$\boldsymbol{S} = \left(\boldsymbol{K}_{22} - \boldsymbol{K}_{21} \boldsymbol{K}_{11}^{-1} \boldsymbol{K}_{12} \right)$$

Zobecnění na m podoblastí

Je-li konstrukce/úloha rozdělena na m menších, lze vhodným číslováním neznámých získat speciální tvar matice soustavy.

$$
\begin{pmatrix}
\boldsymbol{K}_{[ii]}^{(1)} & & \mathbf{0} & & & \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(1)} \\
& \boldsymbol{K}_{[ii]}^{(2)} & & & & \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(2)} \\
\mathbf{0} & & \boldsymbol{K}_{[ii]}^{(3)} & & & \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(3)} \\
\vdots & & & \ddots & & \vdots \\
& & & & \boldsymbol{K}_{[ii]}^{(m)} & \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(m)} \\
\boldsymbol{K}_{[bi]}^{(1)} & \boldsymbol{K}_{[bi]}^{(2)} & \boldsymbol{K}_{[bi]}^{(3)} & \dots & \boldsymbol{K}_{[bi]}^{(m)} & \boldsymbol{K}_{[bb]}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\boldsymbol{d}_{[i]}^{(1)} \\ \boldsymbol{d}_{[i]}^{(2)} \\ \boldsymbol{d}_{[i]}^{(3)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{d}_{[i]}^{(m)} \\ \boldsymbol{d}_{[b]}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\boldsymbol{f}_{[i]}^{(1)} \\ \boldsymbol{f}_{[i]}^{(2)} \\ \boldsymbol{f}_{[i]}^{(3)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{f}_{[i]}^{(m)} \\ \boldsymbol{f}_{[b]}
\end{pmatrix}
$$


$\Gamma_t^{(2)}$
$\Omega^{(3)}$
$\Gamma_i^{(2)}$
$\Gamma_i^{(3)}$
$\Omega^{(2)}$
$\Gamma_t^{(1)}$
$\Omega^{(1)}$
$\Gamma_t^{(3)}$

Dolní index i označuje vnitřní neznámé, b označuje hraniční neznámé. Indexy ib a bi označují členy spojující hraniční a vnitřní neznámé.

- $\boldsymbol{d}_{[i]}^{(j)}$, kde $j \in \{1, 2, \ldots, m\}$, je vektor neznámých uvnitř j-té podoblasti,
- $\boldsymbol{d}_{[b]}$ je vektor neznámých na hranicích podoblastí,
- $\boldsymbol{f}_{[i]}^{j}$, kde $j \in \{1, 2, \ldots, m\}$, je vektor pravé strany definovaný uvnitř j-té podoblasti,
- $\boldsymbol{f}_{[b]}$ je vektor pravé strany definovaný na hranicích podoblastí.

Počet neznámých v j-tém bloku je $n_{[i]}^{(j)}$. Počet neznámých v posledním bloku je $n_{[b]}$. Je-li n počet všech neznámých v původní soustavě, platí

$$n = n_{[b]} + \sum_{j=1}^{m} n_{[i]}^{(j)}$$

$$\boldsymbol{K}_{[ii]}^{(j)} \in R^{n_{[i]}^{(j)} \times n_{[i]}^{(j)}}$$

$$\boldsymbol{K}_{[ib]}^{(j)} \in R^{n_{[i]}^{(j)} \times n_{[b]}}$$

$$\boldsymbol{d}_{[i]}^{(j)} \in R^{n_{[i]}^{(j)}} \qquad \boldsymbol{f}_{[i]}^{(j)} \in R^{n_{[i]}^{(j)}}$$

Pokud jsou všechny diagonální submatice $\boldsymbol{K}_{1}^{[ii]}$ až $\boldsymbol{K}_{m}^{[ii]}$ regulární, lze z j-té rovnice vyjádřit

$$\boldsymbol{d}_{[i]}^{(j)} = \left(\boldsymbol{K}_{[ii]}^{(j)}\right)^{-1} \left(\boldsymbol{f}_{[i]}^{(j)} - \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(j)} \boldsymbol{d}_{[b]}\right)$$

dosazením zpět do soustavy rovnic vyjde modifikovaný systém, ve kterém chybí j-tá rovnice

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{K}_{[ii]}^{(1)} & & & 0 & & & \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(1)} \\ & \ddots & & & & & \vdots \\ & & \boldsymbol{K}_{[ii]}^{(j-1)} & & & & \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(j-1)} \\ 0 & & & \boldsymbol{K}_{[ii]}^{(j+1)} & & & \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(j+1)} \\ & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & \boldsymbol{K}_{[ii]}^{(m)} & \\ \boldsymbol{K}_{[bi]}^{(1)} & & & \dots & & & \tilde{\boldsymbol{K}}_{[bb]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{d}_{[i]}^{(1)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{d}_{[i]}^{(j-1)} \\ \boldsymbol{d}_{[i]}^{(j+1)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{d}_{[i]}^{(m)} \\ \boldsymbol{d}_{[b]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}_{[i]}^{(1)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{f}_{[i]}^{(j-1)} \\ \boldsymbol{f}_{[i]}^{(j+1)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{f}_{[i]}^{(m)} \\ \tilde{\boldsymbol{f}}_{[b]} \end{pmatrix}$$

v předcházející soustavě je použito toto označení:

$$\tilde{\boldsymbol{K}}_{[bb]} = \boldsymbol{K}_{[bb]} - \boldsymbol{K}_{[bi]}^{(j)} \left(\boldsymbol{K}_{[ii]}^{(j)}\right)^{-1} \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(j)}$$

$$\tilde{\boldsymbol{f}}_{[b]} = \boldsymbol{f}_{[b]} - \boldsymbol{K}_{[bi]}^{(j)} \left(\boldsymbol{K}_{[ii]}^{(j)}\right)^{-1} \boldsymbol{f}_{[i]}^{(j)}$$

Redukovaný problém má tvar

$$\left(\boldsymbol{K}_{[bb]} - \sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{K}_{[bi]}^{(j)} \left(\boldsymbol{K}_{[ii]}^{(j)}\right)^{-1} \boldsymbol{K}_{[ib]}^{(j)}\right) \boldsymbol{d}_{[b]} = \boldsymbol{f}_{[b]} - \sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{K}_{[bi]}^{(j)} \left(\boldsymbol{K}_{[ii]}^{(j)}\right)^{-1} \boldsymbol{f}_{[i]}^{(j)}$$

Řešení redukovaného problému

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{d}_{[b]} = \boldsymbol{f}_S$$

- přímé metody - matice $\boldsymbol{S}$ a vektor $\boldsymbol{f}_S$ jsou sestaveny na master procesoru, tento způsob lze efektivně využít pro malý počet procesorů (přibližně do 20)
- iterační metody - matice $\boldsymbol{S}$ a vektory $\boldsymbol{f}_S$ se nesestavují, obvykle se použije metoda sdružených gradientů.