Numerikus elektromágneses modellezés lineáris egyenletrendszereinek megoldása

*STEINER TIBOR**

A dolgozat numerikus elektromágneses modellezési feladatokkal kapcsolatos lineáris egyenletrendszerek megoldási módszereivel foglalkozik. Elemzi az egyes eljárásokat, azok előnyeit különböző szituációkban.

В статье описывается метод решения линейной системы уравнений, связанной с задачами численного электромагнитного моделирования. Характеризуются отдельные способы и их преимущества в различных ситуациях.

The paper deals with the solution methods of linear equations systems related to numerical electromagnetic modelling studies. Various methods are discussed their advantages in various situations.

1. Bevezetés

Az elektromágneses *(EM)* terepi adatok értelmezése a mért és az elméletileg számolt értékek összehasonlításával történik. A szükséges elméleti mennyiségek kiszámítása lehet egyszerű (mint például egy-dimenziós geoelektromos szerkezetek fölött) vagy nagyon bonyolult (mint a három-dimenziós szerkezetek többségénél).

A *2D* és *3D* szerkezetek numerikus modellezése vagy a differenciálegyenletek *(DE)* vagy az integrálegyenletek *(IE)* módszerével történik. Mindkét módszer lineáris egyenletrendszer megoldásához vezet. A *DE* módszer nagy, ritka szalagmátrixokat állít elő, mivel az ismeretlen térértékeket egy az egész síkot *(2D)*, ill. teret *(3D)* lefedő háló minden egyes csomópontjára meg kell határozni. Az *IE* módszernél az ismeretlen térértékekre vonatkozó lineáris egyenletrendszert csak az inhomogenitást tartalmazó tartományra kell felállítani. Így az *IE* módszer mátrixai nem ritkák, de kis méretűek, ezáltal a számítógép memóriaigénye is kisebb mint a *DE* módszereknél.

Bonyolult geológiai szerkezetek modellezése a *DE* módszerrel célszerű. A véges differenciák módszere *(FD)* volt az első, amelyet numerikus *MT* modellezésre használtak. A módszer népszerűségéről tanúskodik számos szerző írása: *Brewitt–Taylor* és *Weaver (1976)*, *Praus (1976)*, *Tátrallyay (1977)*, *Jones* és *Vozoff (1978)*, *Zdanov et al. (1982)*.

A másik *DE* lehetőség a véges elemek *(FE)* módszere. A módszert az *50*-es és *60*-as években mérnökök alkalmazták először több műszaki területen a differenciálegyenletek megoldására (elaszticitási egyenletek stb., *Bank, 1981*). A módszert a *60*-as években általánosították úgy, hogy alkalmas lett általánosságban differenciálegyenletek numerikus megoldására.

EM problémák megoldására az *FE* módszert *Coggon (1971)* alkalmazta először. Ezt követően számos tanulmány jelent meg az *FE* módszerről (pl. *Silvester* és *Haslam 1972*, *Kaikkonen 1977*, *Wannamaker et al. 1986*). A módszer használata egyre jobban terjed mind *EM* feladatok, mind egyéb nem geofizikai problémák megoldására.

* MTA GGKI, Sopron.

Egy *EM FE* módszer leírása az alábbi részekből áll:

- a fizikai háttér ismertetése
  - megoldandó egyenletek
  - határfeltételek
- a szoftver leírása
  - hálókészítés
  - a lineáris egyenletrendszer felállításának leírása
  - az eredmények bemutatása

Az *EM FE* modellezési módszerekkel foglalkozó tanulmányok a fizikai háttér ismertetésével foglalkoznak behatóan és kevésbé részletesen a szoftver leírásával, még akkor is ha több *FE* szoftver forráskódja hozzáférhető a kutatók számára. Ezen belül is különösen kevés figyelmet szentelnek a felállított lineáris egyenletrendszer megoldására, holott a szoftver futási idejének *80*%-át (kis háló esetén) vagy akár *98*%-át (*közepes* méretű háló esetén) ez a lépés emészti fel. Ugyanakkor egy *EM* indukciós probléma megoldása nemcsak a választott módszertől függ (*IE, FD, FE* stb.) hanem legalább ilyen mértékben a választott egyenletmegoldási módszertől.

Az alábbiakban összefoglaljuk, milyen módszerek lehetségesek egy differenciálegyenlet *FE* módszerrel történő kiszámításánál előálló lineáris egyenletrendszer megoldására. A módszerek általános jellegűek, azaz nem korlátozódnak az *EM*-modellezésnél előálló lineáris egyenletrendszerek megoldására. Egyúttal rávilágít a módszerek összehasonlítása arra is, hogy a megfelelő lineáris egyenletrendszer-megoldó módszer kiválasztása gondos tervezést igényel. Csak így biztosítható a megfelelő összhang a kívánt pontosságú eredmény és az elfogadható költség között.

Az *FE* módszerekkel előálló lineáris egyenletrendszereket alapvetően két módon lehet megoldani: direkt és iteratív módszerekkel. A főbb módszerek (melyek közül néhányat használtak *EM* feladatok megoldására is):

- direkt módszerek:
  - Cholesky módszere
  - frontális módszer
  - „nested dissection" módszere
- iteratív módszerek:
  - gradiens módszer
  - konjugált gradiens módszer
  - prekondicionált konjugált gradiens módszer
  - szukcessív túlrelaxáció
  - multigrid módszerek

2. Cholesky módszere

A módszer lényege, hogy a feladat diszkretizálásánál előálló szimmetrikus, ritka **A** szalagmátrixot $\mathbf{A}=\mathbf{L}\mathbf{L}^T$ alakban faktorizáljuk, ahol $\mathbf{L}_{nxn}$ alulról, $\mathbf{L}^T$ felülről trianguláris szalagmátrix.

Ha az **A** mátrix sávszélességét

$$nband = \max_{i=1,\dots,n} \{k \mid a_{i,\,i+k} \neq 0,\, k \geq 0\}$$

definiálja, akkor $\mathbf{L}$ ill. $\mathbf{L}^T$ sávszélessége szintén *nband*. Az *MT FE* módszereknél előálló tipikus szimmetrikus szalagmátrixnak az alábbi *átlói* tartalmaznak nemzérus elemeket:

- főátló
- főátló feletti és alatti átlók
- főátlótól $\sigma(NDZ)$ távolságra levő átlók, ahol *NDZ* a *Z* irányú hálószemek száma, $\sigma(NDZ)$ *NDZ* nagyságrendje,
- esetleg $\sigma(NDZ)-1$, $\sigma(NDZ)-2, \ldots$ átlók.

Így az $\mathbf{A}$ mátrix sávszélessége $\sigma(NDZ)$, míg csupán *3–5* átlója tartalmaz nem zérus elemeket. Azonban a Cholesky-dekompozíció eredményeként előálló $\mathbf{L}$ mátrix olyan helyeken is tartalmaz nem-zérusokat, ahol $\mathbf{A}$ zérus elemeket tartalmazott, sőt tipikusan: $\mathbf{L}$ teljes $nband = \sigma(NDZ)$ sávszélességében nemzérusokat tartalmaz. A fenti jelenség (ún. fill-in) az oka annak, hogy az *MT FM* módszerrel történő modellezés nagyon memóriaigényes.

Példa:

NDY (*y* irányú hálószemek száma)	*80*
NDZ (*z* irányú hálószemek száma)	*60*
$M = NDY * NDZ$ (összes hálószemek száma)	*4 800*
A nem-zérus elemeinek a száma: $\approx 5 * M$	*24 000*
L nem-zérus elemeinek a száma: $\approx NDZ * M$	*288 000*
L tárolásához szükséges memória egyszeres pontosságú ($REAL*4$) aritmetika esetén	1,1 *MB*

Tehát egy $NDY * NDZ$ méretű háló alkalmazásánál előálló mátrix tárolására kb. $NDY * NDZ * NDZ$ tárolóhely szükséges. A fill-in az oka, hogy *FE* módszerrel történő modellezés eddig jobbára csak nagy számítógépeken történhetett.

Az $M * M$-es *nband* sávszélességű $\mathbf{A}$ mátrix Cholesky-dekompozíciójának műveletigénye (azaz a szükséges szorzások és osztások száma) $\sigma(M * nband^2)$. Azaz, ha az *y* irányú hálószemek számát duplájára növeljük, a dekompozícióhoz szükséges idő is duplázódik, míg ha csak a *z* irányú hálószemek számát növeljük duplájára, a futási idő *8*-szorosára nő. Ezért a dekompozíció lassú.

Ha már előállt az $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ dekompozíció, akkor az $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ megoldása igen gyorsan előáll.

Mivel az *MT FE* módszerrel történő modellezés esetén az egyéb műveletek elhanyagolható futási idővel rendelkeznek, a futási időt szinte kizárólag a dekompozíció időigénye adja meg.

Ezen hátrányok ellenére a Cholesky-dekompozíciót használja több *MT FE* modellező program tekintettel a módszer egyszerűségére és numerikus stabilitására, azaz a kerekítési hibákkal szembeni viszonylagos érzéketlenségére (például: *Rijo, 1977*).

3. Frontális módszer

Ennél a módszernél az egyenletrendszer összeállítása és az elimináció párhuzamosan történik. Sőt nem szükséges az egész mátrixot a memóriában tárolni, hanem az egész mátrix másodlagos tárolón van és mindig csak az éppen szükséges rész van a memóriában.

4. „Nested dissection" módszere

Ebben a módszerben a csomók számozására alapvetően más módszert használnak, mint a Cholesky-dekompozícióval történő megoldás esetén:

1	*6*	*11*	*16*	*21*	*10*	*11*	*12*	*13*	*14*
2	*7*	*12*	*17*	*22*	*15*	*1*	*5*	*2*	*16*
3	*8*	*13*	*18*	*23*	*17*	*7*	*9*	*8*	*18*
4	*9*	*14*	*19*	*24*	*19*	*3*	*6*	*4*	*20*
5	*10*	*15*	*20*	*25*	*21*	*22*	*23*	*24*	*25*

Hagyományos (Cholesky-dekompozíció, frontális módszer) — *Nested dissecton*

Az eliminációs sorrend:

1– *4* csomók
5– *6* csomók
7– *9* csomók
10–*25* csomók

A *nested dissection* módszere azért hatékonyabb a hagyományos módszereknél, mert kevesebb fill-in-t generál.

5. Iteratív módszerek

Az iteratív módszerek közös jellemzője, hogy az $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ egyenlet megoldását ($\mathbf{A}$ szimmetrikus, ritka, pozitív definit) az $f(\mathbf{x}) = \mathbf{xAx}/2 - \mathbf{bx}$ függvény minimalizálására vezeti vissza. Az iteratív módszernek lényege az eliminációs módszerekkel szemben, hogy az előbbieknél az $\mathbf{A}$ mátrix nem változik, míg az utóbbiaknál igen és ezáltal fill-in-t produkálnak. Az iteratív módszereknél memóriaprobléma kevésbé jelentkezik, helyette belép a konvergenciasebesség problémája. Be lehet bizonyítani, hogy az $f(\mathbf{x}) = \mathbf{xAx}/2 - \mathbf{bx}$ minimumát megkereső

$$\xi^{k+1} = \xi^k + \alpha_k \mathbf{d}^k \quad k = 0, 1, \ldots$$

iteráció (ahol ξ^0 valamely kezdeti közelítés a megoldásra, ξ^k az egymás után közelítéseket, d^k az egymás utáni keresési irányokat, α_k pedig a keresési irány menti elmozdulást jelenti) konvergenciájának sebessége az $\mathbf{A}$ mátrix

$$\varkappa(\mathbf{A}) = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$$

kondíciószámától, azaz a maximális és minimális sajátérték arányától függ. Mégpedig $\varkappa(\mathbf{A})$ minél kisebb (minél közelebb van *1*-hez), annál gyorsabb a konvergencia. Ha $\varkappa(\mathbf{A}) \gg 1$, akkor azt mondjuk, hogy A rosszul kondicionált. Sajnos a tipikus *FE* módszerrel adódó (és az *MT FE* módszerrel előálló) mátrixok is rosszul kondicionáltak, sőt minél finomabb a hálóbeosztás (így minél több a hálószem), annál rosszabbul kondícionált a mátrix. Míg a kondiciószám romlása a véges (direkt, eliminációs) módszereknél csak a pontosságot rontja esetleg (de a Cholesky-dekompozícióét alig, mivel a módszer numerikusan igen stabil), addig iterációs módszereknél divergenciához is vezethet a pontosságromlás mellett.

6. Gradiens módszer

A legegyszerűbb iteratív módszer a gradiens módszer (legmeredekebb lejtő módszere), azaz a

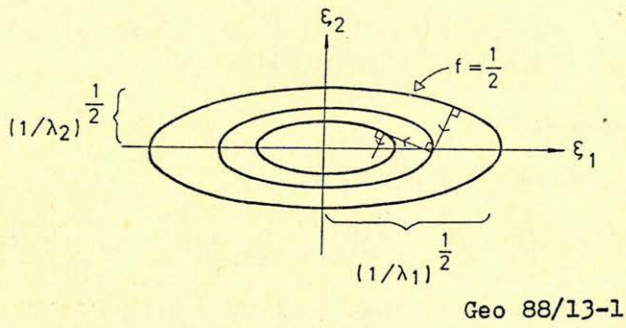
$$\boldsymbol{\xi}^{k+1} = \boldsymbol{\xi}^k + \alpha \mathbf{d}^k$$

$$\mathbf{d}^k = -\mathbf{f}'(\xi k) = -(\mathbf{A}\boldsymbol{\xi}^k - \mathbf{b}) \quad k = 0, 1, \ldots$$

iteráció alkalmasan megválasztott (kicsi) pozitív konstans α-val.
Példa: legyen

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

és $0 < \lambda_1 < \lambda_2$, $\mathbf{b} = \mathbf{0}$. Vegyük az $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\mathbf{x} = (\lambda_1 x_1^2 + \lambda_2 x_2^2)/2$ minimalizálási problémát. f szintvonalai elnyújtott ellipszisek, féltengelyeik $1/\lambda_1$ és $1/\lambda_2$ Az iterációban előálló ξ-ket mutatja az *1. ábra*. Látjuk, hogy amint nő $\varkappa(\mathbf{A}) = \lambda_2/\lambda_1$, úgy lesznek egyre elnyúltabbak az ellipszisek, a ξ_0, ξ_1, ... sorozat annál jobban *ide-oda ugrál* és a konvergencia egyre lassabb.



1. ábra. Gradiens módszer iterációja rosszul kondícionált mátrix esetén
Рис. 1. Итерация метода градиентов в случае плохо обусловленной матрицы
Fig. 1. Iteration of the gradient method in the case of illconditioned matrix

7. Konjugált gradiens módszer

Ebben a módszerben az α_k lépésközöket optimálisaknak, a $\mathbf{d}^k$ keresési irányokat konjugáltaknak választjuk, azaz

$$\mathbf{d}^i\mathbf{A}\mathbf{d}^j = \mathbf{0} \quad i \neq j$$

A konjugált gradiens módszer a következő: keressük $\boldsymbol{\xi}^k$-t és $\mathbf{d}^k$-t ($k = 1, 2, \ldots$) úgy, hogy

$$\boldsymbol{\xi}^{k+1} = \boldsymbol{\xi}^k + \alpha_k \mathbf{d}^k$$

$$\alpha_k = -\frac{\mathbf{r}^k\mathbf{d}^k}{\mathbf{d}^k\mathbf{A}\mathbf{d}^k}$$

$$\mathbf{d}^{k+1} = -\mathbf{r}^{k+1} + \beta_k \mathbf{d}^k \tag{1}$$

$$\beta_k = \frac{\mathbf{r}^{k+1}\mathbf{A}\mathbf{d}^k}{\mathbf{d}^k\mathbf{A}\mathbf{d}^k}$$

Tehát a módszerben (1) szerint az új keresési irány ($\mathbf{d}^{k+1}$) a gradiens ($\mathbf{r}^{k+1}$) és a régi keresési irány ($\mathbf{d}^k$) kombinációja. Ezáltal az 1. ábrán látható cikk-cakk-szerű konvergencia lényegesen gyorsabb. Azonban a konvergenciasebesség itt is alapvetően a kondíciószámtól függ, ami *MT FE* módszereknél még mindig esetleg elfogadhatatlanul lassú konvergenciához vezet.

8. Prekondicionált konjugált gradiens módszer

A módszerben egy $\mathbf{C}$ nemszinguláris szimmetrikus mátrixot alkalmazunk úgy, hogy $\mathbf{A}' = \mathbf{C}^{-T}\mathbf{A}\mathbf{C}^{-1}$-nek jobb legyen a kondíciószáma mint $\mathbf{A}$-nak. A konjugált gradiens módszert az

$$\mathbf{A}'\mathbf{x}' = \mathbf{b}'$$

egyenletrendszerre alkalmazzuk, ahol

$$\mathbf{A}' = \mathbf{C}^{-T}\mathbf{A}\mathbf{C}^{-1}$$
$$\mathbf{b}' = \mathbf{C}^{-T}\mathbf{b}$$
$$\mathbf{x}' = \mathbf{C}\mathbf{x}$$

Az $\mathbf{M} = \mathbf{C}^T\mathbf{C}$ mátrixot prekondícionáló mátrixnak nevezzük. Jól megválasztott $\mathbf{M}$ mátrix igen gyors konvergenciához vezet.

9. Szukcesszív túlrelaxáció

Az $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ egyenlet megoldható az

$$\mathbf{x}_i^{(k+1)} = \omega\left(\mathbf{b}i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\mathbf{x}_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\mathbf{x}_j^{(k)}\right)/a_{ii} + (1-\omega)x_i^{(k)}$$

iterációval, amelyet szukcesszív túlrelaxációnak nevezünk ω-vel mint relaxációs faktorral. A módszer gyors konvergenciához vezethet, ha ω-t alkalmasan választjuk, de abszolút értékéhez képest több nagyságrenddel kisebb mennyiséggel való megváltoztatása is az optimálishoz képest a konvergenciasebesség nagy mértékű romlásához vezet.

Ezt a módszer használja *Jugyin M. N.* és *Ananevics B. A. (1987)* programja.

10. Multigrid módszerek

Újabban olyan *FE* megoldási módszereket fejlesztettek ki, amelyek optimálisak az általuk szükséges műveletek számában, ami $\sigma(M)$, ahol M a változók száma. Ezek az ún. multigrid módszerek iteratív módszert használnak, ahol fokozatosan térnek rá egyre durvább elemű hálókra. Egy tipikus multigrid módszer egy lépése (ξ^k-ból ξ^{k+1} kiszámítása) a következőkből áll:

– simítási lépés, amely m közönséges gradiens lépés
– hálókorrekció.

A multigrid módszerek azért olyan hatékonyak, mert a simítási lépésben a hiba nagyfrekvenciás komponensei, a hálókorrekció alatt a kisfrekvenciás hibakomponensek csökkennek nagy mértékben. Ezt a módszert használja *Varga (1988)* programja.

11. Direkt és iteratív módszerek hatékonysága

Alapvető összefüggés néhány fent tárgyalt *FE* módszer hatékonysága között nem *MT* módszerek esetén (*MT* módszerek hatékonyságának összevetése még nem történt meg) az alábbi (*Johnson, 1987*). Aszimptotikusan a megoldás műveletigénye $\sigma(M_\alpha)$ (M a hálószemek száma), ahol α-t az alábbi táblázat tartalmazza:

Módszer	2 dim	3 dim
Cholesky-dekompozíció	*2*	*2.33*
„Nested dissection"	*1.5*	*2*
Konjugált gradiens	*1.5*	*1.33*
Prekondícionált konjugált gradiens	*1.25*	*1.17*
Multigrid	*1*	*1*

Látszik, hogy különösen nagy M-re a prekondícionált konjugált gradiens és a multigrid módszer jobb a Cholesky-dekompozíciónál vagy a *nested dissection*-nál. Másrészt a multigrid módszer bonyolult programot igényel sok belső munkamezővel, míg a Cholesky-módszer kevés egyéb mezőt kíván. Így sem az *MT* modellezésben, sem a differenciálegyenletek általános numerikus elméletében nem eldöntött kérdés még, melyik módszer egyértelműen jobb a másiknál.

12. Összefoglalás

Láttuk, hogy számos módszer létezik lineáris egyenletrendszerek megoldására és ezek közül már használtak többet numerikus elektromágneses modellezési feladatok megoldására is. A módszerek közül aszerint kell választani, mi a fontos szempont. Ha az egyenletmegoldási lépéssel nem kívánunk különösebben foglalkozni, akkor a standard Cholesky-dekompozíció a legegyszerűbb. Ha a memóriafoglalás csökkentése fontos cél, akkor valamely egyszerű iterációs módszer a legjobb (pl. szukcesszív túlrelaxáció), mivel ezeknél kevés egyéb változóra van szükség magán az egyenleten kívül, az egyenlet pedig tömörítve tárolható. Az iteratív módszerek (különösen a prekondícionált konjugált gradiens és a multigrid) jelentősége növekvőben van, mivel többnyire jól egyesítik a helyfoglalás, az elfogadható futási idő és a bonyolultság csökkentésének követelményét. Olyan problémákban azonban, ahol az egyenlet együtthatói gyorsan változnak, nehéz lehet a megfelelő iteratív módszer megkeresése. Ilyenkor a véges módszerek kínálják a lehetséges alternatívát jelenleg.

IRODALOM

Bank, R. E. and Dupont, T.: An Optimal Order Process for Solving Elliptic Finite Element Equations, Math. Comp. 36 (1981), 35–51.

Brewitt-Taylor, C. R. and Weaver, T.: On the Finite Difference Solution of Two-Dimensional Induction Problems, Geophys. J. R. Astr. Soc. 47, 1976, 375–396.

Coggon, J. H.: 1971, Electrimagnetic and Electrical Modeling by the Finite Element Method, Geophysics 36, 132–155.

Concus, P., Golub, G. H. and O'Leary, D. P.: A Generalized Conjugate Gradient Method for thes Numerical solution of Elliptic Partial Differential Equations in Sparse Matrix Computations ed. J. R. Bunch and D. J. Rose, Academic Press, New York, 1976.

George, A.: Nested Dissection of Regular Finite Element Mesh, Siam J. Num. Anal. 11, 1973, 345–363.

Hackbusch, W.: Multigrid Methods and Applications, Springer Series in Computational Mathematics 4, Springer, 1985.

Johnson, C.: Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method, Studentliteratur, Lund 1987.

Jones, F. W. and Vozoff, K.: The Calculation of Magnetotelluric Quantities for Three-Dimensional Conductivity Inhomogeneities, Geophysics 43, 1978. 1167–1175.

Jugyin, M. N., Ananevics, B. A.: Két- és háromdimenziós MT számító program, kézirat, 1987.

Kaikkonen, P.: A Finite Element Program Package for Electromagnetic Modeling, J. Geophys. 43, 1977, 179–192.

Praus, O.: Numerical Solutions of the MT Field in Inhomogeneous Structures, in A. Ádám (ed)., Geoelectric and Geothermal Studies, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976, 231–144.

Rijo, L.: Modelling of Electric and Electromagnetic Data; Ph. D. Thesis, Univ. of Utah, 1977.

Silvester, P. and Haslam, C. R. S.: Magnetotelluric Modeling by the Finite Element Method, Geophys, Prospecting 20, 1972, 872–891.

Tátrallyay M.: Változó elektromágneses terek meghatározása kétdimenziós szerkezetekben a véges differenciák módszerével, Kandidátusi értekezés, MTA GGKI, 1977.

Varga M.: Két-dimenziós modellező program multigrid módszerrel, szóbeli közlés, 1988.

Wannamaker, P. E., Stodt, J. A. and Rijo, L.: Two-Dimensional Topographic Rosponses in Magnetotellurics Modeled Using Finite Elements, Geophysics 51, 1986, 2131–2144.

Zhdanov, M. S., Golubev, N. G., Spichak, V. V. and Varentsov, Iv. M.: The Construction of Effective Methods for Electromagnetic Modeling, Geophys, J. R. Astr. Soc. 68, 1982, 589–607.