Moderní počítačová fyzika I (NEVF160)

Modelování systémů mnoha částic – molekulární dynamika

Štěpán Roučka

MFF UK

ZS2022

Částicové modely plazmatu
Výpočet síly

Částicové modelování - úvod

Modelování pohybu N_p částic se započtením vzájemného silového působení
Řešíme rovnice

Pohybové

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v}_i; \qquad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{a}_i; \qquad i = 1 \ldots N_p$$

Silové působení

$$\boldsymbol{a}_i = \frac{1}{m}\boldsymbol{F}_i$$

- Astrofyzika - pohyb hvězd v galaxii - gravitace
- Molekulární dynamika - atomy v molekulách / molekuly v látce – Lennard Jones a složitější potenciály
- Modelování plazmatu - nabité částice v plazmatu - elektrostatická interakce

Částicové modelování - úvod

Obvykle nás nezajímají přesné trajektorie, ale statistický popis
Přesným popisem je tedy Boltzmannova kinetická rovnice

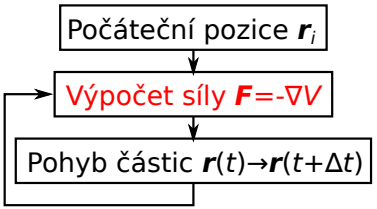
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla f + \boldsymbol{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{v}} f = \frac{\delta f}{\delta t}$$

Lze interpretovat jako Monte-Carlo řešení Boltzmannovy rovnice - náhodné vzorkování rozdělovací funkce pomocí "částic„

$$f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t) \rightarrow \sum_{i=1}^{N_p} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_i)$$

Molekulárně dynamická simulace - struktura výpočtu

Ekvivalentní výpočtu potenciálu: $\boldsymbol{F} = -\nabla V$



- Typicky dvoučásticový potenciál

$$V(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N_p} V_2(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)$$

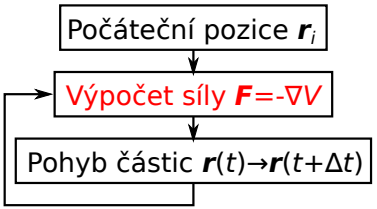
- Možné i vícečásticové interakce - polarizace
- Obvykle mnoho částic (N_s) v jedné superčástici
- Speciálně pro elstat interakci, $V = q\phi$

$$\Delta\phi = -\rho/\epsilon_0 \tag{1}$$

- Cílem je efektivní řešení Poissonovy rovnice (2).

Metody výpočtu síly

Ekvivalentní výpočtu potenciálu: $\boldsymbol{F} = -\nabla V$



- Typicky dvoučásticový potenciál

$$V(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N_p} V_2(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)$$

- Možné i vícečásticové interakce - polarizace
- Obvykle mnoho částic (N_s) v jedné superčástici
- Speciálně pro elstat interakci, $V = q\phi$

$$\Delta\phi = -\rho/\epsilon_0 \tag{2}$$

- Cílem je efektivní řešení Poissonovy rovnice (2).

Klasifikace metod I

PP – particle-particle

- Přímý výpočet potenciálu resp. síly

$$\boldsymbol{F}_j = \sum_{i \neq j} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{\boldsymbol{r}_{ji}^2} \frac{\boldsymbol{r}_{ji}}{|\boldsymbol{r}_{ji}|}; \quad \boldsymbol{r}_{ji} = \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j$$

- Ekvivalentní řešení Poissonovy rce. metodou Greenových funkcí

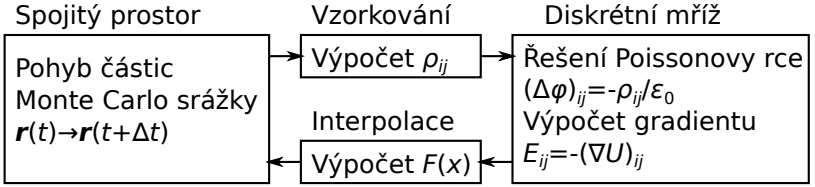
$$\boldsymbol{F} = -q\nabla\phi; \quad \phi(\boldsymbol{r}) = \int G(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\rho(\boldsymbol{r}')\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

- Výpočetně náročné – $O(N_p^2)$
- Vhodné pro krátkodosahové síly $O(N_p)$

Klasifikace metod II

PM – particle-mesh

- Výpočet potenciálu na mříži metodami pro řešení PDE
- Metoda PIC – Particle-In-Cell



- Prostorové rozlišení určené váhovými funkcemi W
- Konvoluční metody

Klasifikace metod III

P3M – particle-particle—particle-mesh

- Ewaldova sumace
- Rozdělení interakce na krátkodosahovou a dalekodosahovou "hladkou„ složku

$$\boldsymbol{f} = \boldsymbol{f}^{\mathrm{sr}} + \boldsymbol{f}^{\mathrm{lr}}$$

- Krátkodosahová síla - stačí sečíst příspěvky částic v okolí
- Dalekodosahová síla - stačí sečíst nízkofrekvenční členy Fourierovy řady - hrubá mříž
- Př.: Částice konečné velikosti

Klasifikace metod IV

Stromové (hierarchické) algoritmy
Barnes-Hut a rychlá multipólová metoda (FMM)

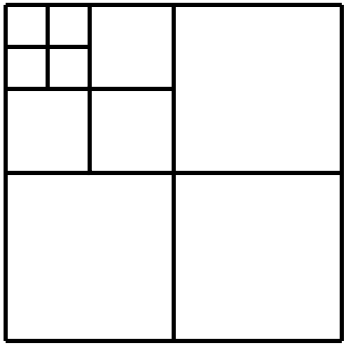
- Částice uloženy v listech stromové struktury
- Blízké částice jsou započítány přesně
- Vzdáleděné částice jen přibližne ve skupinách - nadřazené uzly stromu
- Barnes-Hut - každý uzel má jenom "těžiště„ $O(N_p \log(N_p))$
- FMM - multipólový rozvoj potenciálu v každém bodě $O(N_p)$

Stromový algoritmus Barnes-Hut

Barnes-Hut

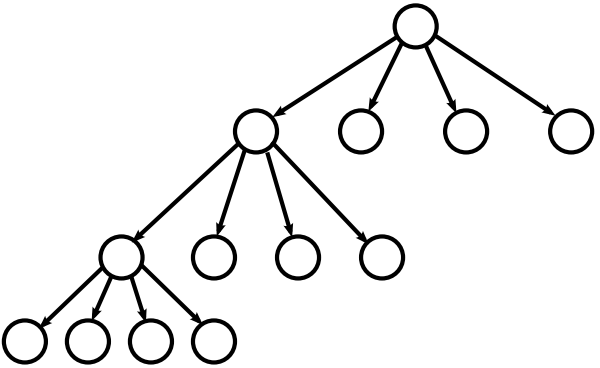
Datová struktura

- 1D Binární strom
- 2D Quadtree
- 3D Octree



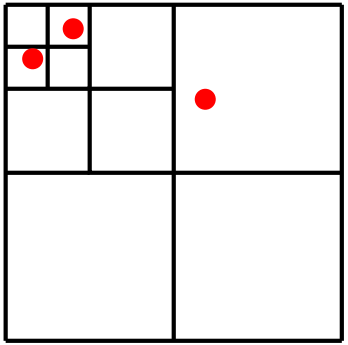
Příklad: 2D Barnes-Hut

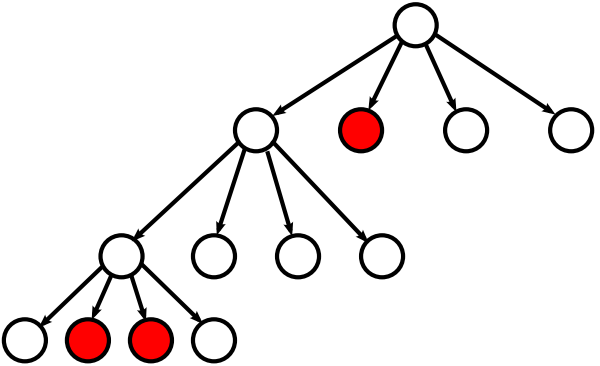
- Kořen stromu - pracovní oblast
- 4 potomci uzlu - 4 kvadranty dané oblasti



Konstrukce stromu

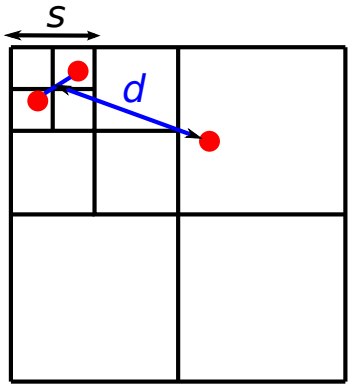
- Tvar stromu určen rozložením častic
- Každý list obsahuje maximálně jednu částici
- Každý uzel obsahuje informaci o své hmotnosti a poloze svého těžiště

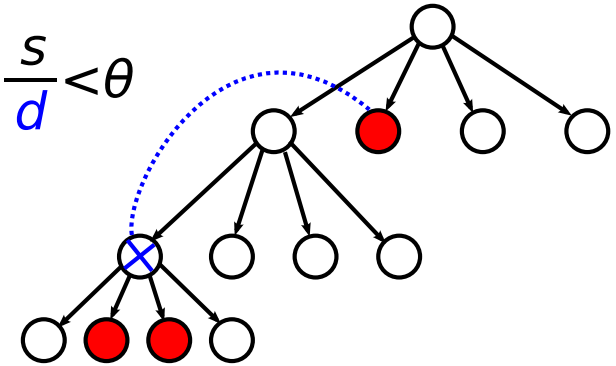




Výpočet síly I

- Začíná se od kořenu
- Pokud Rozměr uzlu s/ vzdálenost uzlu $d > \theta \Rightarrow$
  - Vypočti síly od jeho potomků
- Jinak započti sílu od těžiště uzlu





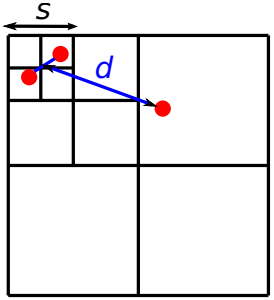
Výpočet síly II

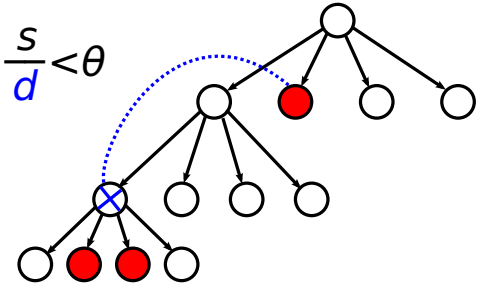
Přesnost určena parametrem θ (opening angle):

- $\theta = 1$ originální Barnes-Hut
- $\theta \to 0$ konverguje k přímému výpočtu **PP** algoritmem

Při použití makročástic se používá "změkčení„ silové interakce - vyhlazování: 1 částice $\sim$ hvězdokupa

- Potenciál $1/r \to 1/\sqrt{r^2 + \epsilon^2}$, částice o poloměru ϵ
- Zamezuje vzniku nefyzikálních "dvojhvězd„
- Snižuje nefyzikální ohřev





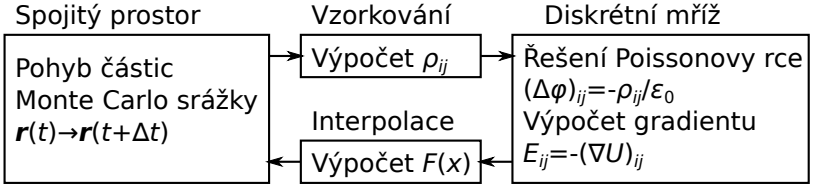
Poznámky

- Přirozené jsou "otevřené„ okrajové podmínky: $\phi(\boldsymbol{x}) \xrightarrow{|x|\to\infty} 0$
- Jiné okrajové podmínky - komplikované, ale možné s využitím fiktivních nábojů a dipólů na okrajích - boundary integral
- Výpočetní náročnost $O(N_p \log(N_p))$
- Rychlá multipólová metoda uchovává v každém uzlu víc informace - multipólový rozvoj potenciálu - náročnost $O(N_p)$

PM particle-mesh algoritmy (PIC)

Připomenutí Particle-In-Cell

- Diskretizace v prostoru poloh – částice mají efektivně konečný rozměr daný váhovou funkcí
- Mohou být různé dimenze modelu v polohách a rychlostech, např 1D1V, 1D3V, 2D3V,...



Terminologie

- Dimenze mříže d
- Počet uzlů mříže $N_g = n^d$
- Počet částic plazmatu N_{plasma}
- Počet částic v simulaci $N_p = N_{\text{plasma}}/W_p$
- Vzdálenost uzlů h
- Objem Buňky V_h
- Jednotková matice I

Příklad: 1D PIC algoritmus pro výpočet síly

- Vzorkování $\rho(x) \to \rho_i$

$$\rho_i^n = \frac{W_p}{V_h} \sum_{k=1}^{N_p} q_k S_{\text{samp}}(x_k^n - x_i)$$

- Poissonova rovnice

$$\frac{\phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n}{h^2} = -\frac{\rho_i^n}{\epsilon_0}$$

$$E_i^n = -\frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{h}$$

- Interpolace

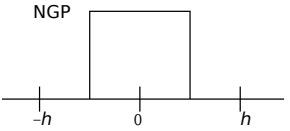
$$F(x_k^n) = q_k \sum_{i=1}^{N_g} S_{\text{inter}}(x_k^n - x_i) E_i^n$$

PIC algoritmus - Váhové (tvarové) funkce

Hierarchie váhových funkcí $W = \Pi(x/h) * S(x)$
Obdélníková funkce $\Pi(x) = 1$ pro $x \in [-1/2, 1/2]$, jinak 0

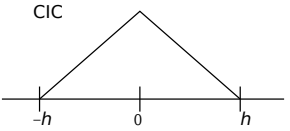
- Nearest grid point (NGP)

$$W(x) = \Pi\left(\frac{x}{h}\right)$$



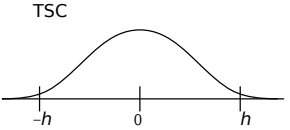
- Cloud in cell (CIC)

$$W(x) = \frac{1}{h}\Pi\left(\frac{x}{h}\right) * \Pi\left(\frac{x}{h}\right)$$



- Triangular shaped cloud (TSC)

$$W(x) = \frac{1}{h^2}\Pi\left(\frac{x}{h}\right) * \Pi\left(\frac{x}{h}\right) * \Pi\left(\frac{x}{h}\right)$$



PM algoritmus - Volba váhové funkce

Požadujeme zachování hybnosti: $F_{\text{self}} = 0$, $F_{12} = -F_{21} \Rightarrow$

- Stejné schéma pro interpolaci a vzorkování $W_{\text{samp}} = W_{\text{inter}}$
- Symetrické diferenční schéma pro aproximaci derivací
- Funkce vyšších řádů mají nižší rozlišení a menší šum

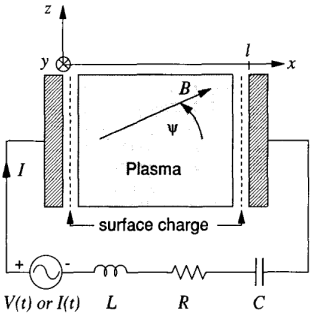
Alternativně - metoda konečných prvků (Minimalizace akce)

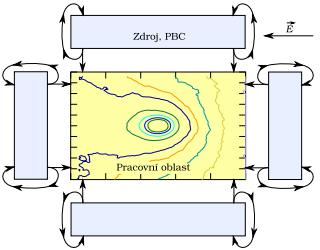
- Funkce vyššího řádu pro vzorkování než pro interpolaci
- Exaktní zachování energie, ale nezachovává hybnost
- Částice působí sama na sebe

PIC algoritmus - okrajové podmínky

- Vodič
  - Dirichletovy O.P. na potenciál
  - Neutralizuje/pohlcuje nabité částice
  - simulace obvodu
- Plazma
  - Mohou být Dirichletovy O.P. na potenciál
  - Injekce nabitých částic - ze známého rozdělení nebo z nezávislé simulace objemu
  - Lze realizovat zrcadlovými nebo periodickými podmínkami
- Dielektrikum
  - Plovoucí potenciál
  - Akumulace nabitých částic na povrchu

[Birdsall 1991]

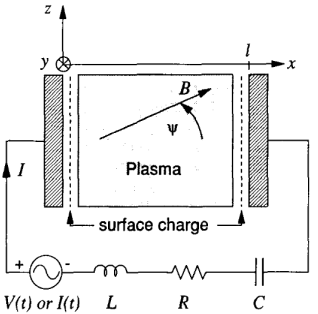


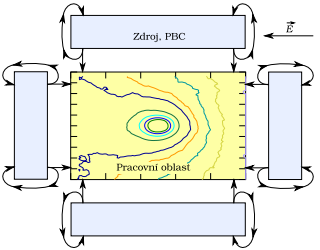


PIC algoritmus - diagnostika

- Nelze zaznamenat kompletní vývoj modely
- Nutné předem specifikovat sledované veličiny
  - Toky částic vybranými plochami - např. proud na elektrodu
  - Rychlostní / energetická rozdělení ve vybraných oblastech
  - Snapshoty / snímky simulace - kompletní stav systému ve vybraných časech

[Birdsall 1991]





PIC algoritmus - Další komentáře

- Srážky s neutrály - MC simulace, spojitá pozaďová koncentrace
- Coulombické srážky nabitých částic - vzájemné, lokální
- Využití symetrie - výpočty ve válcových / sférických souřadnicích.
- Elektromagnetické kódy - plné řešení MXW rovnic na rozdíl od elstat výše

Řešení Poissonovy rovnice

- Uvažujeme metodu konečných diferencí

$$\frac{\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}}{h^2} = -\frac{\rho_i}{\epsilon_0}$$

- Lze zapsat jako $KU = F$

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_N \end{bmatrix} = -\frac{h^2}{\epsilon_0} \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \vdots \\ \rho_{N-1} \\ \rho_N \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \phi_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \phi_{N+1} \end{bmatrix}$$

- Ve 2D bloková matice K_{2D}

$$\begin{bmatrix} K-2I & I & & & \\ I & K-2I & I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & I & K-2I & I \\ & & & I & K-2I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_n \end{bmatrix}$$

Obecné metody: přímé / iterační

Gaussova eliminace

- Použitelné pouze v 1D - Thomasův algoritmus $O(N_g)$
- Ve 2D - náročnost $O(N_g^2)$ - nevhodné

Relaxační metody

- Počáteční odhad ϕ^0
- Jacobiho metoda (J)

$$\phi_i^{n+1} = \frac{\phi_{i-1}^n + \phi_{i+1}^n}{2} + \frac{h^2 \rho_i}{2\epsilon_0}$$

- Gauss Seidelova metoda (GS)

$$\phi_i^{n+1} = \frac{\phi_{i-1}^{n+1} + \phi_{i+1}^n}{2} + \frac{h^2 \rho_i}{2\epsilon_0}$$

Princip relaxační metody

- Systém $KU = F$, preconditioner $P \approx K$
- P takové, aby šlo invertovat, Jacobi - diagonála, GS - dolní trojúhelník

$$PU = (P - K)U + F$$

- Iterace (iterační matice $M = P^{-1}(P - K)$)

$$PU_{k+1} = (P - K)U_k + F$$

$$U_{k+1} = MU_k + P^{-1}F$$

- Redukce chyby $e_k = U - U_k$:

$$Pe_{k+1} = (P - K)e_k$$

$$e_{k+1} = Me_k$$

- Metoda konverguje, pokud spektrální poloměr $\rho(M) < 1$

Superrelaxační metoda (SOR) I

- Jacobi i GS jsou pomalé - počet iterací $\sim N_g^{2/d}$
- Successive OverRelaxation - SOR
- Lze urychlit relaxaci zvětšením relaxačního kroku faktorem ω

$$r = \frac{\phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n}{2} + h^2 \frac{\rho_i}{2\epsilon_0}$$

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \omega r$$

- Volba ω - Čebyševovo urychlení

$$\omega^{(0)} = 1$$
$$\omega^{(1/2)} = 1/(1 - \rho^2/2)$$
$$\omega^{(t+1/2)} = 1/(1 - \rho^2\omega^{(t)}/4)$$
$$\omega^{(\infty)} \to 2/(1 + \sqrt{1 - \rho^2})$$

- Šachovnicový vzor (odd-even ordering)
- Spektrální poloměr (J) $\rho = \cos(\pi/n)$
- Zabraňuje poč. překmitnutí

Superrelaxační metoda (SOR) II

- Potřebný počet iterací $\sim N_g^{1/d}$
- *By overcorrecting from x_k to x_{k+1}, hand calculators noticed that they could finish in a few weeks.*
- Stále pomalé, ale již použitelné pro 2D PIC, kde je dobrý poč. odhad.

Blokové metody

- Successive Line OverRelaxation - SLOR
- Namísto bodu řeší celý řádek (i několik řádků) najednou (Thomasův algoritmus)
- Urychlení konvergence o malý konstantní faktor ~ 2

Cyklická redukce

- Na rozdíl od předchozích metod využívá speciálních vlastností Poissonovy rovnice
- 1D příklad - rovnice pro 3 sousední body

$$\begin{aligned} \phi_{i-2} - 2\phi_{i-1} + \phi_i &= F_{i-1} && \text{(a)} \\ \phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1} &= F_i && \text{(b)} \\ \phi_i - 2\phi_{i+1} + \phi_{i+2} &= F_{i+1} && \text{(c)} \end{aligned}$$

- Sečtením řádků $(a) + 2 \times (b) + (c)$ dostaneme

$$\phi_{i-2} - 2\phi_i + \phi_{i+2} = F_{i-1} + 2F_i + F_{i+1}$$

- Redukujeme množství rovnic na polovinu
- Redukované rovnice mají stejný tvar a redukci lze opakovat
- Náročnost $O(N_g \log(N_g))$

Cyklická redukce 2D

- Stejný postup lze aplikovat na blokovou matici ve 2D

$$\begin{bmatrix} A & I & & \\ I & A & I & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & I & A \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_n \end{bmatrix} ; \quad A = K - 2I$$

- Sečtením řádků (a) $- A \cdot$ (b) $+$ (c) dostaneme

$$U_{i-2} - (A^2 - 2I)U_i + U_{i+2} = F_{i-1} + AF_i + F_{i+1}$$

- Matice $(A^2 - 2I)$ už je 5-diagonální a dalšími iteracemi roste zaplnění
- Lze faktorizovat $(A^2 - 2I) = (A - \sqrt{2}I)(A + \sqrt{2}I)$

Odbočka - vlastní čísla matice K

- Analogicky ke spojitému případu v 1D
- 0 Dirichletovy o.p. vlastní funkce jsou sin
- Okrajové podmínky splňují: $z_k(p) = \sin(\frac{pk\pi}{N+1})$
- Lze ověřit a získat vlastní čísla dosazením do diferenčního vztahu:
  $z_k(p-1) - 2z_k(p) + z_k(p+1) = \sin(\frac{pk\pi}{N+1}) \left[2\cos(\frac{k\pi}{N+1}) - 2\right]$
- Potom vlastní čísla
$$\lambda_k = 2\cos(\frac{k\pi}{N+1}) - 2$$
- Normované vlastní vektory
$$z_k(p) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin(\frac{pk\pi}{N+1})$$

Rozšíření do 2D

- Kroneckerův součin $A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}B & \cdots & a_{nn}B \end{bmatrix}$
- Matici 2. derivací ve 2D (na čtverci) lze zapsat jako $K_{2\mathrm{D}} = K \otimes I + I \otimes K$
- Potom vlastní čísla

$$\lambda_{kl} = \lambda_k + \lambda_l$$

- Vlastní vektory

$$z_{kl}(p, q) = z_k(p) z_l(q)$$

Metoda Fourierovy transformace I

Ve spojitém případě:

- $\hat{f}(k) = \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-2\pi\imath kx} \mathrm{d}x, \qquad \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \to 2\pi\imath k \hat{f}(k)$
- Poissonova rce:

$$-4\pi^2(k_x^2 + k_y^2)\hat{\phi} = -\frac{\hat{\rho}}{\epsilon_0}$$

Funguje to i v diskrétním případě? DFT

- Potenciál lze rozložit do Fourierovy ř.:

$$\phi_p = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{n} \hat{\phi}_k e^{2\pi\imath pk/N}$$

- Speciálně pro 0 Dirichletovy o.p. lze použít DST:

$$\phi_p = \frac{2}{N+1} \sum_{k=1}^{N} \hat{\phi}_k \sin(\tfrac{pk\pi}{N+1})$$

Metoda Fourierovy transformace II

- DST ve vektorovém zápisu s užitím bázových vektorů DST:

$$\phi = \frac{2}{N+1} \sum_{k=1}^{N} \hat{\phi}_k s_k \; ; \quad s_{k,p} = \sin(\tfrac{pk\pi}{N+1})$$

- Vidíme, že bázové funkce DST s_k jsou shodné s vlastními vektory λ_k odpovídající matice druhých derivací K. Proto:

$$K\phi = \frac{2}{N+1} \sum_{k=1}^{N} \hat{\phi}_k K s_k = \frac{2}{N+1} \sum_{k=1}^{N} \hat{\phi}_k \lambda_k s_k$$

- Fourierova transformace matice K je matice vlastních čísel Λ

Metoda Fourierovy transformace III

- Fourierova transformace matice K je matice vlastních čísel Λ
- Diskrétní Poissonovu rovnici lze transformovat:

$$K\phi = F \quad \xrightarrow{\text{FT}} \quad \hat{K}\hat{\phi} = \hat{F} \quad \rightarrow \quad \Lambda\hat{\phi} = \hat{F}$$

- Inverze Λ je triviální a dostáváme řešení v k-prostoru

$$\hat{\phi}_k = \hat{\rho}_k \Big/ \left[2\cos\left(\tfrac{k\pi}{N+1}\right) - 2\right]$$

Metoda Fourierovy transformace IV

- Výpočetní náročnost odpovídá náročnosti FFT: $O(N \log(N))$
- Snadné zobecnění do 2D a 3D
- Jde o speciální případ spektrální metody
  - Transformace soustavy do báze vlastních vektorů—obecně pomalé, ale FFT je rychlé

FACR

- Fourierovu transformaci lze kombinovat s cyklickou redukcí
- l kroků cyklické redukce následovaných FT – metoda FACR(l)
- V 1D má redukovaný systém stejnou strukturu $\rightarrow$ jednoduché
- Ve 2D, např. po jedné iteraci je rovnice pro x řádek mříže

$$U_{i-2} - (A^2 - 2I)U_i + U_{i+2} = F_i'$$

- Matice $L = (A^2 - 2I)$ má diagonální FT $\rightarrow$ lze převést na

$$\hat{U}_{i-2} - \hat{L}\hat{U}_i + \hat{U}_{i+2} = \hat{F}_i'$$

- Jde o nezávislý tridiagonální systém pro každou frekvenci ve směru y
- Rychlé řešení Thomasovým algoritmem

FACR(*)

- Existuje ideální volba počtu iterací CR – minimalizace počtu operací
- Přibližně $r \approx \log_2 \log_2 n$
- Počet operací

$$4.5 N_g \log_2 \log_2 N_g$$

- Značení FACR(*)

Multigridy – konvergence Jacobiho metody

Problém Jacobiho metody – pomalá konvergence. Např v 1D:

- Preconditioner – diagonální matice $P = -2I$
- Iterační matice $M = P^{-1}(P - K) = I + K/2$
- Připomínka – vlastní čísla K: $\lambda_k(K) = 2\cos(\frac{k\pi}{N+1}) - 2$
- Vl. č. iterační matice
$$\lambda_k(M) = \cos(\frac{k\pi}{N+1})$$
- Nízkofrekvenční, ale i vysokofrekvenční chyby konvergují pomalu

Multigridy – vyhlazování

- Vyhlazování - smoothed Jacobi (SJ),
  $M = I - \omega D^{-1} K = I + \omega K/2, \quad 0 < \omega < 1$
- Vl. č. (SJ) (obrázek)
  $$\lambda_k(M) = 1 + \omega \cos(\tfrac{k\pi}{N+1}) - \omega$$
- Pro obvyklou volbu $\omega = 2/3$, vyhlazovací faktor $1/3$
  $$\phi_i^{n+1} = \frac{\phi_{i-1}^n + \phi_i^n + \phi_{i+1}^n}{3} + \frac{h^2 \rho_i}{3\epsilon_0}$$
- Kvalitní vyhlazení je zabraňuje aliasingu (!)

Multigridy – princip

- Konvergenci lze urychlit přechodem na hrubší mříž
  - Vyskofrekvenční chyby se vyhlazují na jemné mříži
  - Nízkofrekvenční chyby se odstraňují na hrubé mříži
- Přechody s pomocí operátorů restrikce R a prolongace P
- Hierarchie mříží, vzorkování h, $2h$, $4h, \ldots$

Příklad v 1D

$$P_{2h}^{h} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & & \\ 2 & & \\ 1 & 1 & \\ & 2 & \\ & 1 & 1 \\ & & 2 \\ & & 1 \end{bmatrix} \; ; \qquad R_{h}^{2h} = \frac{1}{2}(P_{2h}^{h})^{T} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & & & & \\ & & 1 & 2 & 1 & & \\ & & & & 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

Multigridy – v-cyklus

Postup řešení soustavy $Au = b$

1. Několik iterací vyhlazování (proti aliasingu)
2. Restrikce residua $r_h = b - Au_h$ na mříž $2h$ podle $r_{2h} = R_h^{2h} r_h$
3. Výpočet chyby v potenciálu $A_{2h} E_{2h} = r_{2h}$ (přímý nebo iterační)
4. Prolongace $E_h = P_{2h}^h$ a korekce potenciálu $u_h \to u_h + E_h$
5. Vyhlazování

Redukovaná matice

$$A_{2h} = R_h^{2h} A_h P_{2h}^h$$

Multigridy

- Složitější cykly - V-cyklus, W-cyklus, FMG
- Pracuje se s korekcemi E namísto potenciálu u
- Lze ukázat redukci chyby v jedné iteraci $\approx 1/10$
  - Nezávisle na velikosti mříže
  - Iterace na hrubých mřížích jsou levné
  - Náročnost $O(N)$ pro dosažení dané chyby
- Důležitou součástí MG je přímý řešič na hrubé mříži
- Použitelné pro obecné operátory a libovolné geometrie

Metody pro řídké matice

- Obecné maticové metody
- Vhodné jako přímý solver pro multigridy (také zvládají obecné geometrie a typy rovnic)
- Minimum degree algoritmy - hledají permutaci A tak, aby počet nenulových prvků pod diagonálou byl minimální

Knihovna UMFPACK

- Transformuje matici $A' = PRAQ$, P, Q: permutační matice, R: diagonální škálovací matice
- Minimalizuje počet nenulových prvků v $LU = A'$

Knihovna UMFPACK

Postup řešení

1. Analýza struktury matice, P, R, Q
2. Výpočet rozkladu LU
3. Vyřešení rovnice $Ax = b$ – rychlé

Datové struktury – row-indexed storage (Yale format)

- `Ax`: hodnoty nenulových prvků
- `Ai`: řádkové indexy i
- `Ap[j]`: počet nenulových prvků v prvních j řádcích – index j-tého řádku v polích Ax, Ai

Knihovna UMFPACK

Příklad 2D Poissonova rovnice v UMFPACKu

```
l = 0;
Ap[0] = 0;
for(i=0; i<param.x_sampl; i++)                //cislo radku
for(j=0; j<param.z_sampl; j++)       //cislo sloupce
{
    k = j + param.z_sampl*i;
    if(grid.mask[i][j]==FIXED || grid.mask[i][j]==FIXED_RF)
    // elektrody a okraje
    {
        Ax[l] = 1;
        Ai[l] = k;
        Ap[k+1] = Ap[k]+1;
        l++;
    }
    else
    {
        Ax[l] = Ax[l+1] = Ax[l+3] = Ax[l+4] = 1.0;
        Ax[l+2] = -4;
        Ai[l] = k-param.z_sampl;
        Ai[l+1] = k-1;
        Ai[l+2] = k;
        Ai[l+3] = k+1;
        Ai[l+4] = k+param.z_sampl;
        Ap[k+1] = Ap[k]+5;
        l += 5;
    }
}
(void) umfpack_di_symbolic (n, n, Ap, Ai, Ax, &Symbolic, NULL, NULL) ;
(void) umfpack_di_numeric (Ap, Ai, Ax, Symbolic, &Numeric, NULL, NULL) ;
umfpack_di_free_symbolic (&Symbolic) ;
```