



Жуков В.Т., Новикова Н.Д.,
Феодоритова О.Б.

Параллельный
многосеточный метод для
разностных эллиптических
уравнений. Часть I.
Основные элементы
алгоритма

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений. Часть I. Основные элементы алгоритма // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 30. 32 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-30>

ОРДЕНА ЛЕНИНА ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ
МАТЕМАТИКИ
им.М.В.Келдыша
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

В.Т. Жуков, Н.Д. Новикова, О.Б. Феодоритова

Параллельный многосеточный метод для разностных
эллиптических уравнений.

Часть I. Основные элементы алгоритма

Москва, 2012

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект 11-01-12082-ОФИМ) и Программы № 25 фундаментальных исследований РАН

УДК.519.6

В.Т. Жуков, Н.Д. Новикова, О.Б. Феодоритова

Email: zhukov@kiam.ru, nn@kiam.ru, feodor@kiam.ru

Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений.

Часть I. Основные элементы алгоритма

Аннотация

Многосеточный метод широко используется для расчетов процессов диффузии, динамики жидкости и др. Параллельная реализация этого метода может иметь трудности, особенно в условиях быстрого роста производительности суперкомпьютеров и усложнения их архитектур. Для достижения высокой производительности возникает требование масштабируемости компьютерных кодов. Предложенный в работе алгоритм представляет собой эффективную параллельную реализацию многосеточного метода Р.П. Федоренко и предназначен для решения разностных эллиптических трехмерных уравнений. Рассмотрены задачи с краевыми условиями первого, второго и третьего рода, включая вырожденную задачу Неймана. Масштабируемость на большое число процессоров обеспечивается сочетанием вычислительной интенсивности и логической простоты алгоритма. Это достигается использованием явных чебышевских итераций при решении грубосеточных уравнений и для построения сглаживающих процедур. Приведены основные алгоритмические элементы многосеточного метода и результаты расчетов, подтверждающие работоспособность алгоритма и масштабируемость параллельного кода.

Ключевые слова: трехмерные эллиптические уравнения, многосеточный метод, чебышевские итерации, параллельная реализация

Стр. 32, табл.3, рис. 6, библиогр. назв. 15

V.T. Zhukov, N.D. Novikova. O.B. Feodoritova

Parallel multigrid method for elliptic difference equations.

Part I. Main elements of the algorithm

Abstract

Multigrid method is widely used for computations of diffusion, fluid dynamics, etc. The parallel implementation of this method may be difficult, especially under conditions of rapid productivity growth and increasing complexity of supercomputer architectures. In order to achieve high performance the scalability requirement arises for running the computer code on parallel computers. Proposed algorithm represents an efficient parallel implementation of the multigrid method of R.P. Fedorenko and is intended for solving three-dimensional elliptic equations. It is considered the boundary value problems including semi-definite Neumann problem. Scalability to a large number of processors is provided by both computational intensity and the logical simplicity of the algorithm. It is achieved by using the explicit Chebyshev iterations as solver of the coarsest grid equations and to construct smoothing procedures. The calculation results are given; they confirm the efficiency of the algorithm and scalability of the parallel code.

Key words: three-dimensional elliptic equations, multigrid, Chebyshev's iterations, parallel implementation

P. 32, Tabl. 3, Fig. 6, Ref. 15

1 Введение

В задачах расчета процессов диффузии, динамики жидкости, обработки изображений трудоемким элементом является итерационное решение систем линейных уравнений с большим числом неизвестных $N \simeq 10^{10}$. Такие системы возникают, например, при дискретизации трехмерных дифференциальных уравнений. Дополнительные трудности связаны с быстрым развитием архитектур многопроцессорных систем, усложнением их иерархической структуры для достижения эксафлопных скоростей. Уже сейчас машины имеют производительность в 1 петафлопс, а количество процессоров может достигать сотни тысяч. Новая парадигма программирования предъявляет высокие требования на масштабируемость компьютерных программ. Среди итерационных методов претендентом на высокую масштабируемость является многосеточный метод Р.П. Федоренко [1]– [3] при реализации его этапов на принципе алгоритмической простоты, что особенно важно для ультрапараллельных вычислений. Данная работа посвящена изложению основных алгоритмических элементов, положенных в основу параллельной реализации многосеточного метода решения разностных эллиптических уравнений, записанных на трехмерных декартовых стеках. Для эллиптических задач многосеточный метод оптимален – вычислительная трудоемкость метода зависит линейно от числа неизвестных, то есть метод является алгоритмически масштабируемым. Число многосеточных итераций и время счета зависит от конкретной задачи, но также от реализации основных алгоритмических элементов, среди которых основное значение имеет сглаживающая процедура.

На примере сглаживающей процедуры объясним принцип алгоритмической простоты. Основой для построения сглаживателей во многих реализациях многосеточного метода является метод Гаусса-Зейделя. Его эффективность зависит от нумерации неизвестных. При параллельной реализации часто используется переупорядочение неизвестных (двухцветное или блочно-двухцветное). Для симметризации производят еще и перекрашивание неизвестных на разных этапах сглаживания. Поэтому алгоритм Гаусса-Зейделя следует признать неподходящим для достижения масштабируемости на ультрапараллельных компьютерах.

Мы строим параллельный многосеточный алгоритм на основе явных чебышевских итераций, показываем, что такой подход обеспечивает хорошую масштабируемость. Чебышевские итерации уже использовались в [4] для сглаживания в многосеточном методе на блочно-структурных сетках. Сейчас роль чебышевского метода активно пересматривается в свете ультрапараллельных вычислений [13].

Построенный алгоритм работает с краевыми условиями третьего рода, Ди-

рихле и Неймана. Специальное внимание уделено обеспечению разрешимости вырожденной задачи Неймана на каждом сеточном уровне. Изложение ведется на примере конечно-объемной семиточечной дискретизации.

Реализация многосеточного метода на неструктурных сетках для более сложных уравнений [9], [10] показывает, что добиться масштабируемости в общей ситуации будет чрезвычайно трудно.

Вопросы эффективности алгоритма при решении анизотропных задач рассмотрены в [5]. Детальному численному исследованию свойств алгоритма и характеристик масштабируемости на различных суперкомпьютерах – ИПМ К-100, МГУ “Ломоносов” – будет посвящена отдельная работа.

2 Формулировка задачи

Рассмотрим линейное эллиптическое уравнение

$$\operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} u) - a \cdot u = -f \quad (1)$$

в прямоугольном параллелепипеде $\Omega = \{(x^1, x^2, x^3) : l_\alpha^- \leq x^\alpha \leq l_\alpha^+, \alpha = 1, 2, 3\}$. Коэффициенты κ, a и источник f являются заданными функциями $x = (x^1, x^2, x^3)$, искомая функция $u(x)$ удовлетворяет на границе Γ параллелепипеда (на его гранях $x_\alpha = l_\alpha^\pm, \alpha = 1, 2, 3$) краевым условиям Дирихле, Неймана или краевому условию третьего рода. Предполагаем, что $\kappa > 0, a \geq 0$. Запишем краевое условие в общем виде

$$-\kappa \frac{\partial u}{\partial n} = \sigma(u - u_\Gamma) + \gamma, \quad x \in \Gamma; \quad (2)$$

n – вектор внешней нормали к границе Γ , σ, u_Γ, γ – заданные на Γ функции x . Функция σ , помимо содержательного смысла, выполняет роль переключателя краевого условия. Запись (2) включает, в частности, условие Дирихле

$$u = u_\Gamma(x), \quad (3)$$

третье краевое условие вида (2) с $\sigma(x) \geq 0$ и условие Неймана

$$-\kappa \frac{\partial u}{\partial n} = \gamma. \quad (4)$$

Будем предполагать, что входные данные обеспечивают разрешимость краевой задачи. Можно считать, что κ, a, f являются кусочно-гладкими функции в Ω . Если хотя бы одна из функций $a(x), \sigma(x)$ не обращается тождественно в нуль, то задача однозначно разрешима. Если на всей границе области задано условие Неймана (4) и одновременно в (1) функция $a(x) \equiv 0$, то будем называть такую задачу вырожденной задачей Неймана. Нетрудно видеть, что

постоянная функция входит в ядро дифференциального оператора данной краевой задачи. Чтобы решение этой задачи существовало, необходимо потребовать выполнения условия

$$\int_{\Gamma} \gamma(x) ds = \int_{\Omega} f(x) dv. \quad (5)$$

Тогда на подпространстве функций, ортогональных постоянной, вырожденная задача Неймана имеет единственное решение.

Для многосеточного метода точность выполнения сеточного аналога условия (5) на всех сеточных уровнях существенным образом влияет на эффективность алгоритма. На всех сеточных уровнях, кроме первого, условие Неймана является однородным, так как на грубых сетках разностная схема записывается для поправки, а в роли f выступает проекция невязки на грубую сетку. Качество аппроксимации условия (5) зависит от оператора проектирования, конструкции которого уделяется особое внимание.

Стационарное уравнение (1) может быть элементом общей нестационарной модели, и тогда возникает необходимость на каждом шаге по времени решать задачу (1), (2). Это значит, что в нестационарных расчетах задача (1), (2) должно решаться быстро (за секунды для сетки с $1 \div 10$ млрд. узлов).

Заметим также, что к задаче (1), (2) приводит неявная дискретизация по времени нестационарного уравнения. Поэтому при условии эффективной реализации алгоритма для стационарной задачи, построенный код может быть использован и для решения параболических уравнений.

Уравнение (1) перепишем в компактном виде

$$A u = f, \quad (6)$$

а также в виде, удобном для записи разностной дискретизации:

$$-\sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \left(A_\alpha \frac{\partial u}{\partial x^\alpha} \right) + A_0 u = f, \quad (7)$$

где A_0, A_1, A_2, A_3, f – заданные функции x .

Предполагаем, что дифференциальный оператор A краевой задачи является самосопряженным неотрицательно-определенным оператором.

3 Пространственная дискретизация

Сетка, сеточные функции. Точку трехмерного пространства будем обозначать (x^1, x^2, x^3) или (x, y, z) . Введем в параллелепипеде Ω по каждому направлению неравномерную сетку с числом шагов N_x, N_y, N_z :

$$\omega_x = \{x_0 = l_1^-, \dots, x_{N_x} = l_1^+\},$$

$$\omega_y = \{y_0 = l_2^-, \dots, y_{N_y} = l_2^+\},$$

$$\omega_z = \{z_0 = l_3^-, \dots, z_{N_z} = l_3^+\}.$$

Узлы сетки $\Omega_h = \omega_x \times \omega_y \times \omega_z$ обозначим как (x_i, y_j, z_k) или (i, j, k) , $i = 0, \dots, N_x$, $j = 0, \dots, N_y$, $k = 0, \dots, N_z$. В узлах сетки Ω_h определены сеточные функции: итерационное приближение u , правая часть f , коэффициенты A_0, A_1, A_2, A_3 , невязка $r = f - Au$. Для сетки ω_x середину отрезка $[x_i; x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, N_x - 1$ обозначим как $x_{i+1/2}$, аналогичные обозначения $y_{j+1/2}$, $z_{k+1/2}$ используем для сеток ω_y, ω_z . Дополнительно коэффициенты A_1, A_2, A_3 вычисляются на интерфейсах ячеек интегрирования в соответствующих “получелых” точках: $A_1^{i+1/2, j, k}$, $A_2^{i, j+1/2, k}$, $A_3^{i, j, k+1/2}$. Предусмотрены две интерполяционные процедуры расчета A_1, A_2, A_3 в указанных точках – эти коэффициенты вычисляются либо как среднее арифметическое, либо как среднее гармоническое соответствующих узловых значений. Коэффициенты краевого условия σ, β, γ задаются в узлах, лежащих на гранях параллелепипеда. Например, на грани $x = x_0$ функции σ, β, γ заданы в узлах $(0, j, k)$, аналогично определяются граничные функции на остальных гранях.

Схему строим методом баланса, интегрируя исходное уравнение по ячейке $(i, j, k) : [x_{i-1/2}; x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}; y_{j+1/2}] \times [z_{k-1/2}; z_{k+1/2}]$. Условимся здесь и далее, что если значение сеточного индекса выходит за границу области определения, то этот индекс принимает ближайшее значение к предельному, то есть $x_{-1/2} = x_0$, $x_{N_x+1/2} = x_{N_x}$, $x_{-1} = x_0$, $x_{N_x+1} = x_{N_x}$ и т.п. Площади шести граней данной ячейки обозначим как

$$S_{i+1/2, j, k} = \frac{1}{2}(y_{j+1} - y_{j-1}) \cdot \frac{1}{2}(z_{k+1} - z_{k-1}) \equiv S_{jk}^x,$$

$$S_{i, j+1/2, k} = \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1}) \cdot \frac{1}{2}(z_{k+1} - z_{k-1}) \equiv S_{ik}^y,$$

$$S_{i, j, k+1/2} = \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1}) \cdot \frac{1}{2}(y_{j+1} - y_{j-1}) \equiv S_{ij}^z.$$

Объем ячейки (i, j, k) обозначим как

$$V_{i, j, k} = \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1}) \cdot \frac{1}{2}(y_{j+1} - y_{j-1}) \cdot \frac{1}{2}(z_{k+1} - z_{k-1}). \quad (8)$$

Эти формулы пригодны и для узлов (i, j, k) , лежащих на границе области Ω_h , так как значения индексов, вышедших за границу области, определены.

Скалярное произведение в пространстве сеточных функций U_h , заданных на сетке Ω_h определяется стандартным образом:

$$(u, w) = \sum_{i, j, k} u_{i, j, k} w_{i, j, k} V_{i, j, k}, \quad (9)$$

где сумма берется по всем узлам сетки. Сеточная $L_2(\Omega_h)$ -норма вводится равенством $\|u\|^2 = (u, u)$. Выражение (9) является сеточным аналогом скалярного произведения в $L_2(\Omega)$, а его одномерный аналог на сетке, например, ω_x имеет вид

$$(u, v) = u_0 v_0 \frac{h_1}{2} + u_1 v_1 \frac{h_1 + h_2}{2} + \dots + u_{N_x} v_{N_x} \frac{h_{N_x}}{2}, \quad (10)$$

где $h_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, \dots, N_x$.

Стандартный вид схемы. Построим семиточечную схему методом баланса с записью потоков на интерфейсах (гранях) ячеек:

$$\begin{aligned} -Q_{i+1/2,j,k} + Q_{i-1/2,j,k} - Q_{i,j+1/2,k} + Q_{i,j-1/2,k} - Q_{i,j,k+1/2} + Q_{i,j,k-1/2} + \\ + (A_0)_{i,j,k} \cdot V_{i,j,k} = f_{i,j,k} \cdot V_{i,j,k}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $Q_{i\pm 1/2,j,k}$, $Q_{i,j\pm 1/2,k}$, $Q_{i,j,k\pm 1/2}$ – потоки на гранях ячейки (i, j, k) . При записи коэффициентов схемы используем локальную нумерацию узлов шаблона со следующим соответствием:

$$\begin{aligned} 3 \rightarrow (i, j, k), \quad 2 \rightarrow (i-1, j, k), \quad 4 \rightarrow (i+1, j, k), \\ 1 \rightarrow (i, j-1, k), \quad 5 \rightarrow (i, j+1, k), \quad 0 \rightarrow (i, j, k-1), \quad 6 \rightarrow (i, j, k+1). \end{aligned}$$

При такой нумерации схема для любого узла (i, j, k) имеет вид:

$$c_0 u_0 + c_1 u_1 + c_2 u_2 + c_3 u_3 + c_4 u_4 + c_5 u_5 + c_6 u_6 = b_0, \quad (12)$$

где ниже приведен явный вид коэффициентов c_0, c_1, \dots, c_6 и b_0 . С помощью этих коэффициентов формируются матрица и правая часть системы уравнений на каждом сеточном уровне.

Схема во внутренних узлах. Запишем стандартную аппроксимацию потока $q = A_1 u_x$ на внутренней интерфейсной грани $x = x_{i-1/2}$ ячейки:

$$Q_{i-1/2,j,k} \simeq A_1 u_x \Big|_{x=x_{i-1/2}} \cdot S_{i-1/2,j,k} \simeq A_1^{i-1/2,j,k} \cdot \frac{u_{i,j,k} - u_{i-1,j,k}}{x_i - x_{i-1}} \cdot S_{j,k}^x.$$

Записывая аналогично потоки через все грани ячейки, в каждом внутреннем узле (i, j, k) получаем 7-точечную схему вида (12) с коэффициентами

$$\begin{aligned} c_2 = Q_{i-1/2,j,k} &= \frac{A_1^{i-1/2,j,k}}{x_i - x_{i-1}} \cdot S_{jk}^x, & c_4 &= Q_{i+1/2,j,k}, \\ c_1 = Q_{i,j-1/2,k} &= \frac{A_2^{i,j-1/2,k}}{y_j - y_{j-1}} \cdot S_{ik}^y, & c_5 &= Q_{i,j+1/2,k}, \\ c_0 = Q_{i,j,k-1/2} &= \frac{A_3^{i,j,k-1/2}}{z_k - z_{k-1}} \cdot S_{ij}^z, & c_6 &= Q_{i,j,k+1/2}, \end{aligned}$$

$$c_3 = - \sum_{i=0, i \neq 3}^6 c_i + a_0, \quad a_0 = (A_0)_{i,j,k} \cdot V_{i,j,k}, \quad b_0 = f_{i,j,k} \cdot V_{i,j,k}.$$

В случае краевой задачи Дирихле приведенные формулы практически завершают построение разностной схемы; достаточно учесть граничные значения, например, изменив правую часть в приграничных ячейках.

Схема в граничных узлах. Если узел (i, j, k) граничный, то в случае условия Дирихле нужно добавить к системе (12) уравнение $u_{i, j, k} = u_\Gamma$, т.е. соответствующий узлу (i, j, k) диагональный элемент матрицы положить равным 1, а соответствующий элемент правой части f положить равным u_Γ .

Определим тип краевого условия в узлах, лежащих на ребрах параллелепипеда Ω . Примем, что на каждой из его шести граней, задано краевое условие только одного типа: либо условие Дирихле, либо условие третьего рода (2), куда формально включим и условие Неймана. Припишем этим двум условиям номера 1, 2. Пусть ребро является стыком граней с краевыми условиями с номерами K_p, K_q . Тогда для такого ребра тип краевого условия есть $\min(K_p, K_q)$. Для вершины параллелепипеда Ω , являющейся стыком ребер с краевыми условиями K_1, K_2, K_3 тип определяется как $\min(K_1, K_2, K_3)$. Для узла, лежащего на ребре с условием Дирихле, граничное значение определяется усреднением всех приписанных к этому узлу граничных значений.

Приведем коэффициенты схемы (12) для узла $(0, j, k)$, лежащего на грани $x = x_0$, в случае краевого условия (2). Часть коэффициентов выписывается сразу:

$$\begin{aligned} c_2 &= 0, & c_4 &= Q_{1/2,j,k}, & c_1 &= Q_{0,j-1/2,k}, \\ c_5 &= Q_{0,j+1/2,k}, & c_0 &= Q_{0,j,k-1/2}, & c_6 &= Q_{0,j,k+1/2}, \end{aligned} \quad (13)$$

а коэффициенты c_3, a_0, f_0 определяются аппроксимацией потока

$$q_{0,j,k} = A_1^{0,j,k} \cdot u_x |_{x=x_0} \cdot S_{j,k}^x.$$

В силу краевого условия (2) для данной границы получаем

$$-A_1^{0,j,k} \cdot u_x |_{x=x_0} = \sigma(u - u_\Gamma) + \gamma,$$

следовательно,

$$q_{0,j,k} = -(\sigma(u - u_\Gamma) + \gamma)_{0,j,k} \cdot S_{j,k}^x, \quad (14)$$

где все сеточные функции $\sigma, u, u_\Gamma, \gamma$ определены в узле $(0, j, k)$. Поэтому

$$c_3 = - \sum_{i=0, i \neq 3}^6 c_i + a_0, \quad a_0 = (A_0)_{0,j,k} \cdot V_{0,j,k} + \sigma_{0,j,k} \cdot S_{j,k}^x, \quad (15)$$

$$b_0 = f_{0,j,k} \cdot V_{0,j,k} + (\sigma \cdot u_\Gamma - \gamma)_{0,j,k} \cdot S_{j,k}^x.$$

Аналогично вычисляются коэффициенты схемы (12) для всех остальных граней Ω_h в случае постановки на них условий (2).

Свойства дискретизации. Построенную дискретизацию краевой задачи в пространство сеточных функций U_h будем записывать в операторном виде

$$A_h u_h = f_h. \quad (16)$$

Исходный дифференциальный оператор A аппроксимирован оператором A_h , матрица которого связана с коэффициентами c_0, c_1, \dots, c_6 схемы (12) следующим образом: каждая строка матрицы, отвечающая узлу сетки (i, j, k) , содержит семь ненулевых элементов $\tilde{c}_m = c_m/V_{i,j,k}$, $m = 0, 1, \dots, 6$ на соответствующих местах. Правая часть f_h схемы (16) в узле (i, j, k) определяется аналогично: $(f_h)_{i,j,k} = b_0/V_{i,j,k}$. При таком определении оператор A_h является самосопряженным в скалярном произведении (9).

Исследование свойств многосеточного метода существенно опирается на спектральный анализ разностных операторов краевых задач. Такой анализ изложен в [2], [3], [11], откуда по мере необходимости мы будем приводить нужные сведения. Здесь отметим, что собственные значения оператора A_h лежат на отрезке $[\lambda_{min}; \lambda_{max}]$ вещественной оси; $\lambda_{min} \geq 0$, так как оператор A_h является неотрицательно-определенным. Для вырожденной задачи Неймана $\lambda_{min} = 0$ и $Ker A_h$ (ядро оператора) является одномерным подпространством, состоящим из сеточных функций-констант.

Напомним, что норма линейного оператора D , действующего из U_h в U_h , определяется как $\| D \| = \max \| Dz \|$ при $\| z \| = 1$, и для самосопряженного оператора норма равна максимальному из модулей его собственных значений.

Введенную неравномерную декартову сетку будем характеризовать параметром h , определяемым равенством

$$h^2 = \sum_{\alpha=1}^3 h_{\alpha}^2,$$

где h_{α} — среднеквадратичный шаг неравномерной сетки по направлению x^{α} . Точность построенной разностной схемы есть $O(h^2)$ в норме максимума модуля на последовательности сеток, для которой точки разрыва коэффициентов κ, a, f по каждому координатному направлению являются узлами сетки [12].

4 Оценки границ разностного оператора

Аккуратная оценка границ спектра обеспечивает эффективность итерационного решения уравнений на самой грубой сетке и сглаживателей, основанных на чебышевских итерациях. Нам нужны не слишком грубые оценки для λ_{min} (снизу) и λ_{max} (сверху).

Оценка нижней границы. Заметим, что неточность оценки λ_{min} может привести к замедлению сходимости чебышевских итераций, но не приводит к их расходимости, если λ_{max} оценить сверху [11]. При получении оценок пользуемся расщеплением по направлениям x^α , $\alpha = 1, 2, 3$. Сначала приведем оценку нижней границы разностного аналога одномерного оператора $-\partial/\partial x^\alpha(A_\alpha\partial/\partial x^\alpha)$ при краевых условиях вида (2). Опустим индекс α в записи направления x^α и других аналогичных обозначениях. Рассмотрим краевые условия

$$\kappa \frac{\partial u}{\partial n} = \sigma(u - u_\Gamma) + \gamma \quad \text{при} \quad x = l^- \quad \text{и} \quad x = l^+.$$

Обозначим

$$\sigma_0 = \min_{x=l^-} \sigma, \quad \sigma_1 = \min_{x=l^+} \sigma, \quad l = l^+ - l^-.$$

Тогда нижняя граница разностного аналога оператора $-\partial/\partial x(\partial/\partial x)$ при указанных краевых условиях имеет вид [11]

$$\gamma_{min} = \frac{8(\sigma_0 + \sigma_1 + l\sigma_0\sigma_1)^2}{l(2 + l\sigma_0)(2 + l\sigma_1)(2\sigma_0 + 2\sigma_1 + l\sigma_0\sigma_1)}. \quad (17)$$

Эта формула содержит все нужные предельные переходы, превращаясь при $\sigma_0, \sigma_1 \rightarrow +\infty$ (условия Дирихле) в формулу $\gamma_{min} = 8/l^2$. Точная нижняя граница дифференциального оператора для первой краевой задачи равна π^2/l^2 , то есть оценка (17) является не слишком грубой. При $\sigma_0 = \sigma_1 = 0$ из (17) получаем $\gamma_{min} = 0$, а при $\sigma_0 \rightarrow +\infty$ и $\sigma_1 = 0$ имеем $\gamma_{min} = 2/l^2$.

Вычисляем по формуле (17) границы $\lambda_{min}^{(\alpha)}$, $\alpha = 1, 2, 3$ всех трех операторов по направлениям и находим нижнюю границу “суммарного” оператора

$$\bar{\lambda}_{min} = \min_{x \in \Omega_h} A_1(x) \cdot \lambda_{min}^{(1)} + \min_{x \in \Omega_h} A_2(x) \cdot \lambda_{min}^{(2)} + \min_{x \in \Omega_h} A_3(x) \cdot \lambda_{min}^{(3)}.$$

Нижняя граница оператора A_h имеет вид

$$\lambda_{min} = \bar{\lambda}_{min} + \min_{x \in \Omega_h} A_0(x). \quad (18)$$

Если $\lambda_{min} = 0$, то оператор является вырожденным. Так как итерации должны выполняться на подпространстве, ортогональном ядру, то в качестве нижней границы оператора на этом подпространстве вместо $\lambda_{min} = 0$ берем минимальное из трех значений:

$$\lambda_{min} = 8 \cdot \min \left[\min_{x \in \Omega_h} A_1(x) \cdot l_1^{-2}, \quad \min_{x \in \Omega_h} A_2(x) \cdot l_2^{-2}, \quad \min_{x \in \Omega_h} A_3(x) \cdot l_3^{-2} \right]. \quad (19)$$

Оценка верхней границы. При получении этой оценки также воспользуемся расщеплением по направлениям. Определим

$$\lambda_{max}^{(\alpha)} = 4 \cdot \max_{x \in \Omega_h} (A_\alpha(x) \cdot h_\alpha^{-2}(x)), \quad (20)$$

где $h_\alpha(x)$ – переменный шаг по направлению x^α , $\alpha = 1, 2, 3$. Глобальная оценка верхней границы разностного оператора имеет вид:

$$\lambda_{max} = \lambda_{max}^{(1)} + \lambda_{max}^{(2)} + \lambda_{max}^{(3)} + \max_{x \in \Omega_h} A_0(x) . \quad (21)$$

Оценки по направлениям пригодятся для конструирования сглаживателей. Глобальную оценку можно также определить по теореме Гершгорина [15].

5 Многосеточный метод

Общая схема. Вычислительная трудоемкость итерационного метода решения систем линейных уравнений определяется числом арифметических операций, затрачиваемых на уменьшение нормы невязки итерационного приближения в заданное число раз. Если трудоемкость метода зависит линейно от числа неизвестных, то такой метод является оптимальным. Примером служит многосеточный метод Р.П. Федоренко, который для разностных эллиптических задач является оптимальным. Поэтому этот метод является первым претендентом на масштабируемость. Пусть нужно решить систему сеточных уравнений

$$A_h u_h = f_h, \quad (22)$$

где A_h – разреженная $N \times N$ –матрица, u_h, f_h – искомая и заданная сеточные функции соответственно. Изложим метод в двухсеточном представлении, т.е. опишем переход с подробной сетки на другую сетку, называемую грубой. Объекты этих сеток будем отмечать символами h и H соответственно. Тогда итерирующий оператор имеет вид (см. [6])

$$Q = S_p(I - P A_H^{-1} R A_h) S_p, \quad (23)$$

где A_h, A_H – операторы (матрицы) на подробной и грубой сетках соответственно, P и R – операторы интерполяции (продолжения) и сборки (проектирования), S_p – сглаживающий оператор, p – число пре- и пост-сглаживающих шагов. В данной работе оператор A_H строится редискретизацией, то есть на H –сетке записывается аппроксимация исходного уравнения (1) с однородными краевыми условиями, а в качестве правой части берется невязка, полученная проектированием невязки $r_h = f_h - A_h u_h$ на грубую H –сетку с помощью оператора R . Разрешающий оператор многосеточного метода имеет вид $C = (I - Q^m) A_h^{-1}$, где m – число итераций многосеточного метода; с его помощью можно формально записать решение в виде $u_h = C f_h$.

Объясним требования к операторам межсеточных переходов P и R . Напомним [6], что *порядок m_P оператора интерполяции P* равен $k+1$, если интерполяция точна на полиномах степени k ; *порядок m_R оператора R* равен

порядку сопряженного оператора R^* . Для обеспечения достаточных условий сходимости многосеточного метода для дифференциального оператора порядка d требуется выполнение условия

$$m_P + m_R > d. \quad (24)$$

Предположим, что переменные на подробной сетке определяются с помощью линейной интерполяции грубосеточных переменных, а в качестве оператора сборки R взято тождественное отображение (порядок такого оператора $m_R = 0$, так как сопряженный к нему не сохраняет константу). В этом случае оператор P точен на линейных функциях, т.е. его порядок $m_P = 2$, и, следовательно, для уравнения второго порядка (1) неравенство (24) не выполняется. Как правило, использование межсеточных операторов более высокого порядка не приводит к заметному ускорению сходимости метода, поэтому мы ограничимся порядками $m_P = 2$ и $m_R = 2$.

Заметим, что при редискретизации многосеточный метод может быть работоспособным и с тождественным отображением в качестве оператора R . Но для разрешимости на всех сеточных уровнях вырожденной задачи Неймана критически важно использовать в качестве R оператор, сопряженный к оператору интерполяции: $R = P^*$.

В форму (23) многосеточного метода входит сглаживающий оператор S_p . Пусть u, v – точное и приближенное решения задачи (22) на сетке любого уровня, кроме самой грубой. Процедура сглаживания, т.е. переход от приближения v к более "гладкому" приближению \bar{v} , записывается следующим образом: оператор S_p текущую ошибку $\varepsilon_0 = v - u$ за p шагов сглаживания преобразует в ошибку $\varepsilon_1 = \bar{v} - u$, где $\varepsilon_1 = S_p \varepsilon_0$. Дадим сначала содержательное объяснение действия сглаживающего оператора, основываясь на классической теории многосеточного метода, см. [1] – [3], [6], [14]. Рассмотрим собственные числа и собственные векторы (сеточные функции) оператора A_h :

$$(\lambda_n, \varphi_n) : A_h \varphi_n = \lambda_n \varphi_n, \quad n = 1, \dots, N, \quad \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N.$$

Множество собственных значений самосопряженного оператора A_h лежит на отрезке $[\lambda_{min}; \lambda_{max}]$ вещественной оси. Мы считаем, что $\lambda_{min} > 0$, так как случай вырожденной задачи Неймана сводится к исследованию свойств операторов на подпространстве, ортогональном ядру. В данной работе в качестве $S_p = S_p(A)$ будем рассматривать многочлен или дробно-рациональную функцию над полем вещественных чисел; тогда оператор S_p является самосопряженным и его спектр, то есть собственные числа – это значения функции $S_p(\lambda)$ на спектре оператора A_h . Используя разложение начальной ошибки

$\varepsilon_0 = v - u$ в ряд Фурье по собственным функциям оператора A_h , получим:

$$\varepsilon_0 = \sum_{n=1}^N c_n \varphi_n, \quad \varepsilon_1 = \sum_{n=1}^N c_n \varrho_n \varphi_n, \quad \text{где } \varrho_n = Sp(\lambda_n).$$

Для нас важны не отдельные собственные значения (они нам неизвестны), а поведение функции затухания $\varrho(\lambda) = Sp(\lambda)$ на спектре оператора A_h , то есть на отрезке $[\lambda_{min}; \lambda_{max}]$. Графики функции затухания для различных сглаживателей показаны в разделе 6.

Выберем границу λ_{min}^* , разделяющую спектр на две части: $[\lambda_{min}; \lambda_{min}^*)$ – низкочастотная часть, $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ – высокочастотная часть спектра оператора. В соответствии с этим разбиением собственные функции разделяются на две группы – на низкочастотные (гладкие моды) и высокочастотные компоненты (негладкие моды), и соответственно, все подпространство сеточных функций представляется ортогональной суммой двух подпространств. Идеализируя, предположим, что для двухсеточного представления (23) грубосеточная коррекция является точной и после интерполяции в ошибке нет гладких мод. Тогда эффективным сглаживателем будет операторный многочлен $F_p(A_h)$, где $F_p(\lambda)$ – многочлен Чебышева, наименее уклоняющийся от нуля на $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ и нормированный условием $F_p(0) = 1$. Максимальное значение $|F_p(\lambda)|$ на $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ зависит от p и определяет скорость сходимости многосеточного метода. На гладкой части спектра $|F_p(\lambda)| < 1$, то есть сглаживатель является сходящимся итерационным методом.

На практике ситуация может отличаться от идеальной. Поэтому мы строим и исследуем два явно-итерационных сглаживателя. Первый – вариант стандартных чебышевских итераций с заданием границы λ_{min}^* . Обозначим его как $Cheb(p) = Cheb(p, \lambda_{min}^*, \lambda_{max})$.

Второй сглаживатель – схема ЛИ-М [7] – представляет собой специальный вариант чебышевского итерационного метода. Обозначим этот сглаживатель как $LIM(p) = LIM(p, \lambda_{min}^*, \lambda_{max})$. Для него компоненты ошибки уменьшаются на $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ практически прямо пропорционально значению λ , гладкие компоненты тоже убывают, но медленно.

Граница λ_{min}^* определяется по некоторым эмпирическим правилам, причем значения λ_{min}^* , λ_{max} – свои для каждого сеточного уровня, но отношение границ может быть одинаковым. Подход к уточнению λ_{min}^* в процессе многосеточных итераций рассмотрен в работе [5].

Процедура $Cheb(p)$ также используется для решения уравнений на самой грубой сетке при задании в качестве нижней границы величины λ_{min} , полученной в разделе 4, то есть используется стандартный чебышевский итерационный метод [11] с переупорядочиванием оптимальных итерационных

параметров для обеспечения вычислительной устойчивости. Число p чебышевских итераций в этом случае назначается из условия уменьшения нормы невязки итерационного приближения в заданное число раз.

При применении сглаживателя $Cheb(p)$ или $LIM(p)$ число шагов p и набор чебышевских параметров мы выбираем так, чтобы обеспечить погашение высокочастотных компонент в несколько раз, например, в два-три раза. В изотропной задаче число $p = 2 \div 3$ получается действительно небольшим, но для анизотропных задач (для которых мы можем дать количественную оценку степени анизотропии или уточнять границу λ_{min}^* в процессе многосеточных итераций), число сглаживающих шагов может быть достаточно заметным, $p \simeq 100$. Но с алгоритмической точки зрения для трехмерных анизотропных задач такой подход к сглаживанию является самым простым из известных нам. Для двумерных задач можно воспользоваться продольно-поперечной прогонкой, но для трехмерных задач уже нужна групповая релаксация по плоскостям Oxy , Oxz , Oyz . Исследование эффективности чебышевского и ЛИ-М сглаживателей в анизотропных задачах приведено в [5].

Предположим, для простоты изложения, что исходная сетка

$$\omega_x = \{x_0, x_1, x_2, \dots, x_{N_x}\}, \quad \omega_y = \{y_0, y_1, y_2, \dots, y_{N_y}\}, \quad \omega_z = \{z_0, z_1, z_2, \dots, z_{N_z}\},$$

такова, что $N_x = 2^{nx}$, $N_y = 2^{ny}$, $N_z = 2^{nz}$. Наряду с подробной h -сеткой $\omega_h = \omega_x \times \omega_y \times \omega_z$ рассмотрим более грубую H -сетку, которая получается из h -сетки прореживанием узлов по каждому направлению, например, при прореживании через один узел получаем :

$$\omega_x^H = \{x_0, x_2, x_4, \dots, x_{N_x}\}, \quad \omega_y^H = \{y_0, y_2, y_4, \dots, y_{N_y}\}, \quad \omega_z^H = \{z_0, z_2, z_4, \dots, z_{N_z}\},$$

и тогда $\omega_H = \omega_x^H \times \omega_y^H \times \omega_z^H$.

Оператор интерполяции (продолжения) P . Введем оператор интерполяции P , который сеточную функцию $U_H(x, y, z)$ отображает в сеточную функцию $u_h(x, y, z)$. Под аргументом (x, y, z) , мы подразумеваем либо узел грубой либо узел подробной сетки, и это понятно из контекста. При записи формул интерполяции и сборки воспользуемся тем, что трехмерная сетка представляет прямое декартово произведение трех одномерных сеток. Назовем x_h -линией набор узлов $(x_0, y, z), \dots, (x_k, y, z), \dots, (x_{N_x}, y, z)$ сетки ω_h , аналогично вводятся другие координатные линии. Оператор P реализован следующим образом.

1. Узел $(x, y, z) \in \omega_H$. Тождественный перенос: $u_h(x, y, z) = U_H(x, y, z)$.
2. Узел $(x, y, z) \in \omega_h$, но не является узлом сетки ω_H . Обработка таких узлов состоит из нескольких этапов.

Сначала обрабатываем x_h -линии, которые являются x_H -линиями. Такие линии лежат в плоскостях $z = z_q \in \omega_z^H$. Пусть (x_1^H, y, z) , (x_2^H, y, z) – два

соседних узла грубой сетки, лежащие на данной линии. Между ними лежит m узлов подробной h -сетки ($m \geq 1$):

$$(x_1^h, y, z), \dots, (x_m^h, y, z), \quad x_1^H < x_1^h < \dots < x_m^h < x_2^H.$$

Тогда

$$u(x_k^h, y, z) = (1 - d) \cdot U_H(x_1^H, y, z) + d \cdot U_H(x_2^H, y, z), \quad (25)$$

где $d = (x_k^h - x_1^H)/(x_2^H - x_1^H)$, $k = 1, \dots, m$.

Затем обрабатываем y_h -линии, лежащие в плоскостях $z = z_q \in \omega_z^H$. Пусть (x, y_1^H, z) , (x, y_2^H, z) – два узла h -сетки, лежащие на x_h -линиях $y = y_1^H$ и $y = y_2^H$; значения сеточной функции в таких узлах уже сосчитаны на предыдущем этапе. Между ними лежат узлы

$$(x, y_1^h, z), \dots, (x, y_m^h, z), \quad y_1^H < y_1^h < \dots < y_m^h < y_2^H$$

h -сетки, и в этих узлах значения функции находятся по формулам линейной интерполяции, аналогичным (25).

И наконец, обрабатываем z_h -линии. К этому этапу уже построено отображение $U_H(x, y, z) \rightarrow u_h(x, y, z)$ для всех плоскостей $z = z_q \in \omega_z^H$ грубой сетки. Теперь интерполируем по узлам грубой сетки вдоль всех z_h -линий.

Вышеуказанный алгоритм представляет собой трилинейную интерполяцию сеточных значений, определенных в вершинах грубой ячейки в узлы подробной сетки, попавшие в эту ячейку. Заметим, что оператор P не меняет на подробной сетке значения сеточной функции в узлах границы с условием Дирихле. В таких узлах интерполянт поправки равен нулю.

Оператор интерполяции можно построить с использованием коэффициентов уравнения (так называемая операторно-зависимая формулировка). Мы будем пользоваться стандартным оператором интерполяции, так как именно такой оператор P и сопряженный ему оператор проектирования $R = P^*$ обеспечивают выполнение условия разрешимости вырожденной дискретной задачи Неймана на всех сеточных уровнях многосеточного метода.

Оператор сборки (проектирования) R . Оператор проектирования R отображает функцию $u_h(x, y, z)$ на h -сетке в функцию $U_H(x, y, z)$ и необходим для определения невязки на грубой сетке. Оператор R не задается в граничных узлах h -сетки, если в них задано условие Дирихле.

Объясним важный аспект, связанный с вырожденной задачей Неймана (1), (4). В силу дискретизации (11) аналогом условия (5) разрешимости краевой задачи является разностное соотношение на подробной сетке:

$$\begin{aligned} & \sum_{j,k} (\gamma_{N_x, j, k} - \gamma_{0, j, k}) S_{jk}^x + \sum_{i,k} (\gamma_{i, N_y, k} - \gamma_{i, 0, k}) S_{ik}^y + \sum_{i,j} (\gamma_{i, j, N_z} - \gamma_{i, j, 0}) S_{ij}^z = \\ & = \sum_{i,j,k} f_{ijk} \cdot V_{ijk}. \end{aligned} \quad (26)$$

Действительно, при суммировании уравнения (11) в результате произойдет сокращение потоков на внутренних интерфейсах ячеек, и в левой части равенства останутся только суммы потоков на шести гранях области Ω .

Запишем для вырожденной задачи Неймана на произвольном u_h невязку r системы разностных уравнений с компонентами: $r_{ijk} = (A_h \cdot u_h - f_h)_{ijk}$. Тогда условие разрешимости (26) можно записать в виде

$$\sum_{i,j,k} r_{ijk} V_{ijk} = 0. \quad (27)$$

То есть, невязка ортогональна единичной сеточной функции в скалярном произведении (9): $(r, c)_h = 0$. Это значит, что при сборке невязки на грубую сетку свойство ортогональности (27) невязки нужно сохранить для обеспечения корректности сеточной задачи на грубой сетке. Для параллельной эффективности лучше обойтись без дополнительной процедуры проектирования невязки на подпространство $Im A_h$, так как такое проектирование содержит глобальную операцию – расчет скалярного произведения. Автоматическое обеспечение ортогональности (27) невязки выполняется при использовании оператора R , сопряженного в скалярном произведении (9) к оператору интерполяции: $R = P^*$.

Действительно, если на подробной сетке невязка r ортогональна единичной сеточной функции $c = (1, \dots, 1)_h$, то в силу цепочки равенств

$$(R \cdot r, C)_H = (r, R^* \cdot C)_h = (r, P \cdot C)_h = (r, c)_h$$

выполнено $(R \cdot r, C)_H = 0$ для сеточной функции $C(1, \dots, 1)_H$. Последнее равенство в цепочке справедливо, так оператор интерполяции P точен на линейных функциях, а значит и на константах.

Как построить такой R , что $R = P^*$, будет объяснено ниже при детальном разборе случаев равномерной и неравномерной сеток.

Равномерная сетка, 3D случай. Прежде чем вводить общую конструкцию оператора R , рассмотрим частные случаи, в которых сопряженность операторов обеспечивается достаточно просто. Сначала рассмотрим равномерную по каждому направлению сетку, и пусть для простоты $H = 2h$. Запишем сначала оператор R во внутреннем узле в шаблонной форме [6]. Для одномерного случая

$$R = \frac{1}{4} \cdot [1 \quad 2 \quad 1].$$

Применение R к сеточной функции $u_h(x)$ означает, что в узле x грубой сетки

$$U_H(x) = \frac{1}{4} \cdot [u_h(x - h^x) + 2u_h(x) + u_h(x + h^x)].$$

С помощью обобщения этого правила нетрудно записать шаблонные формы для $2D$ и $3D$ случаев, см. [6]. Так для $2D$ получаем

$$R = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Применение этого оператора к h -сеточной функции в плоскости (x, y) в узле грубой сетки (x, y, z) означает, что

$$U_H(x, y, z) = \frac{1}{16} [u(x - h^x, y + h^y) + 2u(x, y + h^y) + u(x + h^x, y + h^y) + \\ 2u(x - h^x, y) + 4u(x, y) + 2u(x + h^x, y) + \\ u(x - h^x, y - h^y) + 2u(x, y - h^y) + u(x + h^x, y - h^y)].$$

Для $3D$ случая оператор R имеет в шаблонной записи следующий вид

$$R = \frac{1}{64} \left[\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 4 & 8 & 4 \\ 2 & 4 & 2 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \right].$$

Такая запись означает, что значения функции $U_H = Ru_h$ на грубой сетке в узле (x, y, z) вычисляется по правилу:

$$U_H(x, y, z) = \frac{1}{64} \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} u_h(x, y, z - h^z) + \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 4 & 8 & 4 \\ 2 & 4 & 2 \end{bmatrix} u_h(x, y, z) + \right. \\ \left. \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} u_h(x, y, z + h^z) \right\},$$

где использована двумерная шаблонная запись, уже объясненная выше.

Равномерная сетка, 1D случай. Приведем матричный вид операторов интерполяции P и проектирования R на равномерной сетке:

$$R = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}, \quad P = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & 2 & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & 1 & 1 \\ 0 & \cdot & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Простой проверкой, пользуясь определением (10), убеждаемся, что операторы P и R сопряжены $P = R^*$ в сеточном скалярном произведении.

Неравномерная сетка, 1D случай. Рассмотрим сетку с шагами $h_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, \dots, n$ и грубую H -сетку, полученную из h -сетки прореживанием через узел, то есть соотношение $H = 2h$ имеет условный смысл. Оператор P строим обычным образом: если узел с номером i на h -сетке является узлом с номером k грубой сетки, то $u_i = U_k$; если же узел i лежит между узлами $(k-1)$ и k грубой сетки, то $u_i = (U_{k-1}h_i + U_k h_{i-1}) / (h_{i-1} + h_i)$. Для оператора P запишем на h -сетке для $u \in \omega_x^h$, $W \in \omega_x^H$ скалярное произведение $(u, PW)_h$ по формуле (10):

$$(u, PW)_h = u_0 W_0 \frac{h_1}{2} + u_1 \frac{W_0 h_2 + W_1 h_1}{2} + u_2 W_1 \frac{h_2 + h_3}{2} \dots + u_n W_m \frac{h_n}{2}.$$

Преобразуем правую часть равенства к виду

$$\frac{u_0 h_1 + u_1 h_2}{2} W_0 + \frac{(u_1 h_1 + u_2 h_2) + (u_2 h_3 + u_3 h_4)}{2} W_1 + \dots + \frac{u_{n-1} h_{n-1} + u_n h_n}{2} W_m.$$

Для оператора R запишем на H -сетке для функций $u \in \omega_x^h$, $W \in \omega_x^H$ скалярное произведение $(Ru, W)_H$ по формуле (10):

$$(Ru, W)_H = U_0 W_0 \frac{H_1}{2} + U_1 W_1 \frac{H_1 + H_2}{2} + \dots + U_m W_m \frac{H_m}{2}.$$

Для того, чтобы при сборке невязки на грубую сетку любого уровня сохранить свойство ортогональности (27) (что необходимо для корректности сеточной задачи), потребуем выполнения равенства введенных скалярных произведений: $(Ru, W)_H = (u, PW)_h$. Отсюда следует, что

$$U_0 = \frac{u_0 h_1 + u_1 h_2}{H_1} = \frac{u_0 h_1 + u_1 h_2}{h_1 + h_2},$$

$$U_1 = \frac{(u_1 h_1 + u_2 h_2) + (u_2 h_3 + u_3 h_4)}{H_1 + H_2} = \frac{(u_1 h_1 + u_2 h_2) + (u_2 h_3 + u_3 h_4)}{h_1 + h_2 + h_3 + h_4},$$

и т. д. Эти формулы есть определение оператора R на неравномерной сетке.

Неравномерная сетка, 3D случай, прореживание через узел. Для реализации в трехмерном случае воспользуемся таблицей, построенной на основе одномерных формул. Таблица содержит вклады в узел грубой сетки значений невязки в узлах подробной сетки для одной ячейке грубой сетки

$$\begin{aligned} q(0, 0, 0) &= h_k^z \cdot h_j^y \cdot h_i^x \leftarrow r(i, j, k), \\ q(0, 0, 1) &= h_{k+1}^z \cdot h_j^y \cdot h_i^x \leftarrow r(i, j, k + 1), \\ q(0, 1, 0) &= h_k^z \cdot h_{j+1}^y \cdot h_i^x \leftarrow r(i, j + 1, k), \\ q(0, 1, 1) &= h_{k+1}^z \cdot h_{j+1}^y \cdot h_i^x \leftarrow r(i, j + 1, k + 1), \\ q(1, 0, 0) &= h_k^z \cdot h_j^y \cdot h_{i+1}^x \leftarrow r(i + 1, j, k), \\ q(1, 0, 1) &= h_{k+1}^z \cdot h_j^y \cdot h_{i+1}^x \leftarrow r(i + 1, j, k + 1), \\ q(1, 1, 0) &= h_k^z \cdot h_{j+1}^y \cdot h_{i+1}^x \leftarrow r(i + 1, j + 1, k), \\ q(1, 1, 1) &= h_{k+1}^z \cdot h_{j+1}^y \cdot h_{i+1}^x \leftarrow r(i + 1, j + 1, k + 1), \end{aligned}$$

здесь $h_i^x = x_{i+1} - x_i$ есть i -ый шаг h -сетки по направлению x , и т.д. При прореживании с шагом 1 неравномерной по каждому направлению сетки для расчета проекции невязки в грубый узел $(i, j, k)_H$, отвечающий узлу (i, j, k) подробной сетки, нужно сначала вычислить вклады всех ячеек грубой сетки, имеющих в качестве вершины узел (i, j, k) (таких ячеек может быть одна, две, четыре или восемь). Например, для ячейки $\{x_i \leq x \leq x_{i+2}, y_j \leq y \leq y_{j+2}, z_k \leq z \leq z_{k+2}\}$ вклад в невязку $r_H(i, j, k)$ в узле грубой сетки $(i, j, k)_H$ находится по формуле

$$r_H(i, j, k) = \sum_{l,m,n=0,1} q(l, m, n) \cdot r(i + l, j + m, k + n). \quad (28)$$

После нахождения вкладов всех входящих в узел $(i, j, k)_H$ ячеек грубой сетки, эти вклады суммируются и делятся на сумму объемов обработанных ячеек грубой сетки. Эта сумма может включать 8, 4, 2 или 1 ячейку в зависимости от положения узла $(i, j, k)_H$.

Неравномерная сетка, общий 1D случай. Рассмотрим неравномерную сетку и грубую H -сетку, полученную из h -сетки произвольным прореживанием. Конструкция оператора интерполяции P детально описана в начале данного разделе (см. формулу (25)). Как обычно, если узел с номером i на h -сетке является узлом с номером k грубой сетки, то $u_i = U_k$. Рассмотрим узел с номером i и координатой x_i , лежащий между узлами $(k-1)$ и k грубой сетки. Обозначим L – расстояние между этими узлами грубой сетки. Пусть на отрезке, соединяющем указанные два узла, лежит $m+1 > 1$ узлов подробной h -сетки, включая концы: $x_0 < x_1 < \dots < x_m$. Введем для удобства локальную систему координат, в которой $x_0 = 0, x_m = L$. Обозначим W_0, W_1 – значения функции W в узлах x_0 и x_m . Выше при построении оператора R продемонстрирована техника, из анализа которой понятно, что все рассуждения можно проводить для одного сеточного интервала грубой сетки. Этот вывод есть следствие аддитивности формулы для скалярного произведения. Запишем формулу одномерной интерполяции в виде

$$w(x_i) = \frac{1}{L}((L - x_i) \cdot W_0 + x_i \cdot W_1), \quad (29)$$

где $i = 0, \dots, m$; на концах интервала $w(x_0) = W_0, w(x_m) = W_1$. Для оператора интерполяции запишем на этом сеточном интервале для $u \in \omega_x^h, W \in \omega_x^H$ скалярное произведение

$$(u, PW)_h = \frac{1}{2}u_0W_0x_1 + \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{m-1} u_i (W_0(L - x_i) + W_1x_i) + \frac{1}{2}u_mW_1(x_m - x_{m-1})$$

или с учетом принятого соглашения о том, что $x_{-1} = x_0$, $x_{m+1} = x_m$,

$$(u, PW)_h = \frac{1}{2L} \sum_{i=0}^m u_i (W_0(L - x_i) + W_1 x_i)(x_{i+1} - x_{i-1}).$$

Преобразуем это выражение, приводя подобные члены относительно W_0, W_1 :

$$(u, PW)_h = \frac{W_0}{2L} \sum_{i=0}^m u_i (L - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1}) + \frac{W_1}{2L} \sum_{i=0}^m u_i x_i (x_{i+1} - x_{i-1}).$$

Так как

$$(Ru, W)_H = U_0 W_0 \frac{L}{2} + U_1 W_1 \frac{L}{2},$$

то

$$U_0 = \frac{1}{L^2} \sum_{i=0}^m u_i (L - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1}), \quad U_1 = \frac{1}{L^2} \sum_{i=0}^m u_i x_i (x_{i+1} - x_{i-1}).$$

Неравномерная сетка, общий 3D случай. Построение оператора проектирования в общем случае сводится к использованию приведенных формул. Расчет взвешенной суммы вида (28) можно интерпретировать как квадратурную формулу расчета интеграла по ячейке грубой сетке с помощью правила левых прямоугольников, примененного для трехмерного случая.

Решение грубосеточных уравнений. Для решения уравнений на самой грубой сетке

$$A_H \cdot y = g_H, \quad (30)$$

то есть системы уравнений с матрицей A_H и невязкой g_H в качестве правой части, используем стандартный чебышевский итерационный метод [11]:

$$y^j = y^{j-1} - \omega_j (A_H \cdot y^{j-1} - g_H), \quad j = 1, \dots, p, \quad (31)$$

где y^0 – заданное начальное приближение (в данном случае нулевое, так как уравнение (30) записывается для поправки), ω_j – заданные итерационные параметры. Пусть известны границы $\lambda_{min}, \lambda_{max}$ спектра оператора A_H . Задача о выборе оптимальных параметров приводит к построению многочлена Чебышева I рода $F_p(\lambda)$ степени p , наименее уклоняющегося от нуля на отрезке $[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$ и нормированного условием $F_p(0) = 1$. Многочлен F_p легко выражается через многочлен Чебышева $T_p(x)$ на стандартном отрезке $[-1, 1]$, в который отображается отрезок $[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$ при замене

$$x = \frac{2}{\lambda_{max} - \lambda_{min}} \cdot \left(\frac{\lambda_{max} + \lambda_{min}}{2} - \lambda \right).$$

Многочлен $T_p(x)$ можно записать в виде

$$T_p(x) = \cos(p \arccos x), \quad |x| \leq 1; \quad T_p(x) = \cosh(p \operatorname{Acoth} x), \quad |x| > 1.$$

Из условия нормировки получаем

$$F_p(\lambda) = T_p(x)/T_p(\varrho_0), \quad \text{где} \quad \varrho_0 = \frac{1 + \eta}{1 - \eta}, \quad \eta = \frac{\lambda_{min}}{\lambda_{max}}. \quad (32)$$

Оптимальные параметры β_j определяются нулями полинома Чебышева T_p

$$\beta_j \in K_p = \left\{ \cos \frac{2i - 1}{2p} \pi, \quad i = 1, 2, \dots, p \right\}, \quad (33)$$

упорядоченными для устойчивости [11], по формуле:

$$\omega_j^{-1} = \frac{\lambda_{max} + \lambda_{min}}{2} + \frac{\lambda_{max} - \lambda_{min}}{2} \cdot \beta_j, \quad j = 1, \dots, p. \quad (34)$$

Верхняя граница λ_{max} определена в (21). В качестве нижней границы λ_{min} возьмем либо величину (18), либо, в случае вырожденной задачи, величину (19); эти оценки не зависят от сетки.

Критерием выбора числа итераций p является достижение заданной точности: $\|r_p\| < \varepsilon \|r_0\|$, где r_0, r_p – начальная и конечная невязки. Оценка числа итераций $p = p(\varepsilon, \eta)$ имеет вид (см. [3], [11]):

$$p(\varepsilon, \eta) \approx \ln \left(\varepsilon^{-1} + \sqrt{\varepsilon^{-2} - 1} \right) / \ln \rho, \quad \text{где} \quad \rho = \frac{1 + \sqrt{\eta}}{1 - \sqrt{\eta}}; \quad (35)$$

здесь η – число обусловленности, определенное в (32).

Сглаживающие итерации. Рассмотрим систему уравнений (22), записанную на одном из сеточных уровней, за исключением самой грубой сетки. Процедура сглаживания, т.е. переход от текущего итерационного приближения v к более "гладкому" \bar{v} , записывается с помощью оператора сглаживания S_p , который текущую ошибку $\varepsilon_0 = v - u$ за p шагов сглаживания преобразует в ошибку $\varepsilon_1 = \bar{v} - u$: $\varepsilon_1 = S_p \varepsilon_0$. Эффективность сглаживания зависит от выбора границы λ_{min}^* , разделяющую спектр на две части: $[\lambda_{min}; \lambda_{min}^*)$ – низкочастотная часть, $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ – высокочастотная часть спектра оператора.

Введем количественную характеристику, нужную нам для выбора λ_{min}^* . Обозначим

$$\gamma_{min} = 0.5 \cdot \min(\lambda_{max}^{(1)}, \lambda_{max}^{(2)}, \lambda_{max}^{(3)}),$$

где $\lambda_{max}^{(\alpha)}$, $\alpha = 1, 2, 3$ – оценки (20) верхних границ разностных операторов по направлениям Ox , Oy , Oz . В качестве основной характеристики в данной работе возьмем отношение

$$\eta_1 = \frac{\gamma_{min}}{\lambda_{max}}, \quad \text{где} \quad \lambda_{max} = \lambda_{max}^{(1)} + \lambda_{max}^{(2)} + \lambda_{max}^{(3)}. \quad (36)$$

Для случая $\lambda_{max}^{(1)} = \lambda_{max}^{(2)} = \lambda_{max}^{(3)}$ полученное пороговое значение $\eta_1 = 1/6$ есть обобщение правила, согласно которому в одномерном случае к негладкой части спектра относятся частоты $\lambda > 0.5\lambda_{max}$.

Возможна ситуация, когда максимальные параметры практически одинаковы: $\lambda_{max}^{(1)} \approx \lambda_{max}^{(2)} \approx \lambda_{max}^{(3)}$, но расчет с $\eta_1 = 1/6$ не приводит к эффективному погашению негладких мод. Такой пример дает задача на сетке, которая сгущается от центра ко всем граням области Ω по всем направлениям одинаково. Существуют и другие примеры, когда сеточная анизотропия и/или анизотропия в коэффициентах делает выбор λ_{min}^* трудным. Настройка сглаживателей в случае анизотропных задач и примеры решения таких задач даны в [5]. Здесь исследуем сглаживатели в стандартных ситуациях.

Чебышевские сглаживающие итерации. На высокочастотном участке спектра $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ с

$$\lambda_{min}^* = \eta \cdot \lambda_{max}, \quad \text{где } \eta = \min\left(\frac{1}{6}, \eta_1\right), \quad (37)$$

а η_1 определено в (36), возьмем чебышевские итерации вида (31)–(34) и определим число $p = p(\varepsilon, \eta)$ по формулам (35), но с числом обусловленности η из (37). Тогда на $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ компоненты погрешности уменьшаются в заданное число $\varepsilon^{-1} > 1$ раз.

Оператор сглаживания $Cheb(p) = Cheb(p, \lambda_{min}^*, \lambda_{max})$ является многочленом Чебышева, наименее уклоняющемся от нуля на отрезке $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$. Его спектр, или, другими словами, функция затухания есть

$$\rho_{Cheb}(\lambda) = F_p(\lambda). \quad (38)$$

Для построения многочлена F_p нужно задать значения λ_{min}^* , λ_{max} , ε . Обычно достаточно задать $\varepsilon = 0.5$, и тогда для изотропного случая с $\eta \approx 1/6$ получаем $p = 2$. При $\varepsilon = 0.7$ получаем $p = 1$; такое сглаживание обеспечивает оптимальность, но за большее число многосеточных итераций.

Переход от негладкого приближения v на текущей подробной сетке к более гладкому приближению v_{new} запишем в следующем виде.

1. Задаем начальное приближение: $y^0 = v_h$, где функция v_h равна тождественно нулю на этапах пред-сглаживания для всех сеток, кроме начальной. В остальных случаях v_h – текущее итерационное приближение.

2. Вычисляем границу λ_{max} спектра оператора A_h по формуле (21).

3. Вычисляем границу λ_{min}^* и число η с помощью формул (36) – (37).

4. Вычисляем степень p многочлена Чебышева по формуле (35), его нули (33) и итерационные параметры (34).

5. Проводим цикл чебышевских итераций:

$$y^j = y^{j-1} + \omega_j(A_h \cdot y^{j-1} - f_h), \quad j = 1, \dots, p. \quad (39)$$

6. Результат p -й итерации есть новое приближение к решению: $v_{new} = y^{(p)}$.

ЛИ-М сглаживающие итерации. Для сглаживания можно использовать схему локальных итераций [7], которая в простых примерах является более затратной по сравнению с чебышевским сглаживателем, но в сложных ситуациях ЛИ-М сглаживатель может обеспечивать более высокую скорость сходимости многосеточных итераций при меньших затратах. Хорошим примером являются анизотропные задачи и изотропные задачи при грубой оценке нижней границы высокочастотной части спектра, см. раздел 6.

Для перехода от негладкого приближения v на текущей сетке к более гладкому приближению v_{new} первые три этапа предыдущего алгоритма повторяются. Остальные этапы видоизменяются.

4. Выбираем степень многочлена p Чебышева. Для этого зададим вспомогательный параметр:

$$\tau = \frac{1}{\lambda_\infty} (\lceil 16p^2/\pi^2 \rceil - 1); \quad (40)$$

здесь $\lceil x \rceil$ обозначает наименьшее целое, большее или равное x .

5. Вычисляем нули многочлена Чебышева по формуле (33), упорядочивая их для устойчивости, причем так, что $\beta_1 = z_1 = \cos(0.5\pi/p)$.

6. Вычисляем итерационные параметры $\{a_m, m = 1, \dots, p\}$:

$$a_m = \lambda_\infty(z_1 - \beta_m)/(1 + z_1).$$

7. По построенному набору строим другой набор из $2p - 1$ параметров

$$\{b_1, \dots, b_{2p-1}\} \equiv \{a_1, \dots, a_p, a_2, \dots, a_p\}.$$

8. В цикле по $m = 1, \dots, 2p - 1$ вычисляем

$$\begin{pmatrix} m \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + \tau b_m} \{v + \tau b_m \cdot \begin{pmatrix} m-1 \\ y \end{pmatrix} - \tau(A_h \cdot \begin{pmatrix} m-1 \\ y \end{pmatrix} - f_h)\}.$$

9. Результат $2p-1$ -й итерации примем новым приближением: $v_{new} = \begin{pmatrix} 2p-1 \\ y \end{pmatrix}$.

Сглаживатель ЛИ-М, обозначаемый как $LIM(p) = LIM(p, \lambda_{min}^*, \lambda_{max})$, есть дробно-рациональная функция

$$S_\nu = (I - F_p^2)(I + \tau A_h)^{-1}, \quad (41)$$

где $\nu = 2p - 1$. Здесь $F_p(\lambda)$ есть полином Чебышева 1 рода, наименее уклоняющийся от нуля на отрезке $[\lambda_0; \lambda_{max}]$, где

$$\lambda_0 = \lambda_{max} \frac{z_1 - 1}{z_1 + 1} \in [-\frac{1}{\tau}, 0],$$

с условием нормировки $F_p(-\frac{1}{\tau}) = 1$. На отрезке $[0, \lambda_{max}]$ имеем:

$$|F_p(\lambda)| \leq 1, \quad F_p(0) = 0, \quad |S_\nu(\lambda)| \leq 1. \quad (42)$$

В отличие от стандартного чебышевского метода при заданном p величина λ_{min} не является параметром метода (41) – (42). Такой многочлен F_p построен в [8], а конструкция вида (41) детально исследована в [7].

Полином F_p легко выражается через стандартный полином Чебышева:

$$F_p(\lambda) = \frac{H_p(\lambda)}{H_p(-\frac{1}{\tau})}, \quad \text{где} \quad H_p(\lambda) = \prod_{m=1}^{m=p} (a_m - \lambda) = T_p(z_1 - \frac{z_1 + 1}{\lambda_{max}} + \lambda);$$

здесь $T_p(z) = \cos(p \arccos z)$ – чебышевский полином степени p на стандартном отрезке $[-1; 1]$, в которой отображается отрезок $[\lambda_0; \lambda_{max}]$ при замене $z = z_1 - (z_1 + 1)\lambda/\lambda_{max}$. Спектр сглаживающего оператора (41) есть

$$\rho_{Lim}(\lambda) = \frac{1 - F_p^2(\lambda)}{1 + \tau\lambda}. \quad (43)$$

В силу (42) получаем следующую оценку для функции затухания $\rho_{Lim}(\lambda)$:

$$0 \leq \rho_{Lim}(\lambda) \leq \frac{1}{1 + \tau\lambda}. \quad (44)$$

Возьмем степень многочлена Чебышева p так, чтобы компоненты погрешности, отвечающие участку спектра $[\lambda_{min}^*, \lambda_{max}]$, уменьшились в заданное число $\varepsilon^{-1} > 1$ раз. Используя (40), получаем

$$p = \frac{\pi}{4} \sqrt{(\varepsilon^{-1} - 1) \cdot \eta + 1}. \quad (45)$$

Подставляя в (44) выражение (40), находим, что на правом конце спектра затухание моды определяется множителем $\rho_{Lim}(\lambda_{max}) \leq \pi^2/(16p^2)$, то есть сглаживание лучше чебышевского; на левом конце высокочастотной части спектра достигается заданная скорость убывания ε^{-1} .

6 Примеры расчетов

Модельная задача 1: уравнение Пуассона

$$u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} = f(x, y, z), \quad (x, y, z) \in [0, 1]^3, \quad (46)$$

с краевыми условиями Дирихле (3), Неймана (4), для которых входные данные, как и правая часть f , определяются по заданному решению

$$u(x, y, z) = (\cos k_1 x + \cos k_2 x) \cdot (\cos m_1 y + \cos m_2 y) \cdot (\cos n_1 z + \cos n_2 z), \quad (47)$$

где $k_1 = m_1 = n_1 = 2$, $k_2 = 4$, $m_2 = 8$, $n_2 = 16$.

В табл. 1 – 3 приводится число многосеточных итераций m для рассматриваемых сглаживателей (число шагов сглаживания одинаковое на каждом сеточном уровне), время счета, оценка скорости сходимости

$$\rho = \sqrt[m]{r_m/r_0}, \quad (48)$$

где r_0 , r_m – сеточные нормы начальной и конечной невязок соответственно; достижение сходимости контролируется по условию $r_m < tol \cdot r_0$ с заданной точностью $tol = 10^{-7}$. Точность решения грубосеточных уравнений варьировалась в диапазоне $ctol = 10^{-3} - 10^{-5}$. Затраты на решение грубосеточных уравнений обычно составляют от долей процента до нескольких процентов общих затрат; в приводимых расчетах $ctol = 10^{-5}$. В табл. 1 – 3 приведено время счета на одном процессоре К-100 ИПМ им.М.В. Келдыша РАН.

Объем вычислений для показанных результатов оценивается как $V \simeq const \cdot N \cdot S$, N – число узлов сетки, S – суммарное число сглаживающих шагов в m итерациях многосеточного метода. При постоянном числе шагов сглаживания суммарное число сглаживающих шагов $S = 2p \cdot m$; один шаг примерно эквивалентен расчету невязки. При расчете показателя S для сглаживателя ЛИ-М учтено, что для заданного p в процедуре $LIM(p)$ число сглаживающих шагов $\nu = 2p - 1$.

В табл. 1 приведены характеристики для задачи Дирихле и вырожденной задачи Неймана с чебышевским сглаживателем $Cheb(p)$ при $p = 2$. Полученная средняя скорость сходимости $\rho \approx 0.15$ и $\rho \approx 0.17$ выше, чем теоретическая скорость $\rho \approx 0.20$ метода в двухсеточном представлении с двумя шагами точечной релаксацией [6]. Видим, что число итераций m не зависит от размера сетки N , а время счета растет пропорционально N , увеличиваясь примерно в 8 раз при удвоении числа шагов по каждому из трех направлений. На рис. 1 показано типичное поведение нормы невязки в ходе многосеточных итераций для сетки $N = 512^3$ для задачи Дирихле и вырожденной задачи Неймана.

В случае чебышевского сглаживателя $Cheb(p)$ при $p = 1$, то есть при использовании метода простой итерации с выбором параметра, оптимального для высокочастотной части спектра, в таких же расчетах получаем скорость сходимости $\rho = 0.5$, число многосеточных итераций 24 – 25, время счета удваивается. В этой ситуации полученные результаты ожидаемы. Качество сглаживателя, измеряемое как скорость убывания негладких компонент, составляет 0.7 и 0.35 для $p = 1$ и $p = 2$ соответственно.

Решение с заданной точностью указанной задачи стандартным чебышевским методом на сетке с числом узлов $N = 512^3$ получается за 150 минут и требует 5271 итераций, т.е многосеточный метод в данном случае дает 50-кратное ускорение.

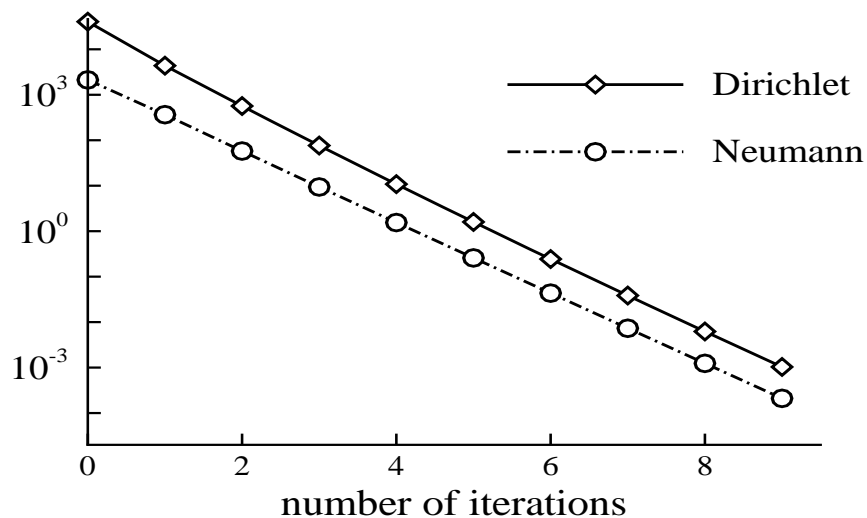


Рис. 1: Скорость сходимости многосеточных итераций

Отметим, что существенной разницы в сходимости многосеточных итераций при варьировании начального приближения (47) или комбинировании краевых условий на гранях области в расчетах не наблюдалось.

Табл. 1. Характеристики сходимости для задачи 1 :
5 уровней, $tol = 10^{-7}$, $ctol = 10^{-5}$, чебышевский сглаживатель, $p = 2$

Сетка, число узлов	Задача Дирихле			Задача Неймана		
	m , число итераций	ρ	время счета, сек.	m , число итераций	ρ	время счета, сек.
64^3	9	0.145	0.32	9	0.136	0.30
128^3	9	0.156	2.50	9	0.160	2.50
256^3	9	0.152	21.0	10	0.167	24.0
512^3	9	0.143	174.0	9	0.166	175.0

В табл. 2 приведены результаты расчета задачи Неймана со сглаживателями $Cheb(p)$ при $p = 3$ и ЛИ-М, построенным на основе многочлена Чебышева степени $p = 2$ с числом шагов сглаживания $\nu = 2p - 1 = 3$. Тогда затраты на сглаживание для двух этих процедур одинаковы. Граница негладкой части спектра λ_{min}^* для данной модельной задачи угадана верно: $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/6$. В этом случае чебышевский сглаживатель обеспечивает более высокую скорость сходимости, чем ЛИ-М.

Табл. 2. Характеристики сходимости для задачи 1

Сетка, число узлов	Чеб. сглаживатель, $p = 3$			Сглаживатель ЛИ-М, $\nu = 3$		
	m , число итераций	ρ	время счета, сек.	m , число итераций	ρ	время счета, сек.
64^3	7	0.095	0.27	8	0.125	0.37
128^3	8	0.118	2.64	9	0.149	3.45
256^3	8	0.124	23.0	9	0.156	28.0
512^3	8	0.126	188.0	9	0.155	234.0

Рассмотрим ситуацию, которая является типичной для практических задач – бывает трудно указать границу λ_{min}^* негладкой части спектра. Мы такую границу указываем эмпирически, и возможен значительный разброс в оценках. Возьмем три значения λ_{min}^* : $\lambda_{max}/20$, $\lambda_{max}/6$, $\lambda_{max}/1.5$. Выберем, как и выше, сглаживатели *Cheb(3)* и *LIM(3)*. В табл. 3 приведены результаты решения задачи Неймана на сетка с $N = 512^3$ для указанных значений λ_{min}^* . Видим, что при фиксированном числе сглаживающих шагов неточность в λ_{min}^* влияет на сходимость многосеточного метода для чебышевского сглаживателя. Сглаживатель ЛИ-М в данной ситуации не зависит от λ_{min}^* . Такое свойство ЛИ-М представляется перспективным для решения анизотропных задач.

Табл. 3. Характеристики сходимости для задачи 1

Граница λ_{min}^*	Чеб. сглаживатель, $p = 3$			Сглаживатель ЛИ-М, $\nu = 3$		
	m , число итераций	ρ	время счета, сек.	m , число итераций	ρ	время счета, сек.
$\lambda_{max}/6$	8	0.126	188	9	0.155	234
$\lambda_{max}/20$	9	0.157	212	9	0.155	234
$\lambda_{max}/1.5$	12	0.243	280	9	0.155	234

Для указанных трех случаев графики спектров сглаживающих операторов как непрерывные функции параметра λ изображены на рис. 2–4. По оси абсцисс отложен спектральный отрезок $[0, \lambda_{max} \cdot h^2]$. Нормированная таким образом верхняя граница равна 12; сохраним за ней ниже прежнее обозначение.

ние λ_{max} . По оси ординат отложены значения функции затухания $\rho_{Cheb}(\lambda)$ и $\rho_{Lim}(\lambda)$ соответствующих мод (см. (38) и (43)).

Прокомментируем графики более подробно. На рис. 2 показаны спектры операторов, когда граница негладкой части угадана верно: $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/6 = 2$. Оба сглаживателя эффективны и гасят высокочастотные компоненты практически одинаково. Это подтверждается расчетами, см. табл. 3. На рис. 3 показаны спектры операторов, когда граница занижена: $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/20 = 0.6$. Чебышевский сглаживатель гасит компоненты равномерно по выбранному участку спектра в 2 раза. График спектра сглаживателя ЛИ-М по построению лежит в верхней полуплоскости; отметим, что на отрезке $[0.6; 1]$ график лежит выше значения 0.5, но на истинной высокочастотной части он лежит ниже уровня 0.3, а на отрезке $[3; 12]$ лежит ниже уровня 0.2. Расчет в случае чебышевского сглаживателя дает: $m = 9$, $\rho = 0.157$, то есть эффективность многосеточного метода ухудшилась по сравнению со случаем, когда граница высокочастотной части угадана верно. На рис. 3 приведены спектры операторов сглаживания, когда граница высокочастотной части завышена: $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/1.5 = 8$. Расчет в случае чебышевского сглаживателя дает: $m = 12$, $\rho = 0.243$, то есть скорость сходимости многосеточного метода ухудшилась.

Отсюда следует важный вывод: эффективность ЛИ-М не зависит явно от нижней границы негладкой части спектра. Зависимость от отношения $\lambda_{min}^*/\lambda_{max}$ есть, но только на этапе определения степени многочлена p . Как только этот параметр определен, строится многочлен Чебышева без участия λ_{min}^* , а затем определяется сам оператор сглаживания (41), который оказывается достаточно эффективным и мало чувствительным к ошибке в определении границы высокочастотной части спектра.

Описанию параллельной программы и детальному исследованию характеристик масштабируемости на различных суперкомпьютерах будет посвящена отдельная работа, поэтому здесь приведем первые результаты расчетов.

Для оценки масштабируемости для задачи Дирихле на 64-х процессорах К-100 в топологии “трехмерная решетка процессоров” проведены 5 расчетов на сетках 128^3 , 256^3 , 512^3 , 1024^3 , 2048^3 . На рис. 5 по осям отложены размеры сеток и время счета в относительных единицах: за единицу масштаба по оси абсцисс принята сетка с числом узлов 128^3 ; за единицу по оси ординат принято время расчета на этой сетке. Последняя сетка в $(2048/128)^3 = 4096$ больше первой сетки. Время счета на этой сетке с почти 10 млрд. узлов составляет 5 мин., т.е. $\approx 3.5 \cdot 10^{-8}$ сек. на узел. Аналогичные результаты, графически малоразличимые, получены на кластере МГУ “Ломоносов” (из-за ограничений оперативной памяти на этом кластере расчет на сетке 2048^3 не получился).

Видно, что время счета растет с размером сетки практически линейно, и на сетке 2048^3 увеличивается примерно на 20 % по сравнению с линейным ростом. Используются 4 сеточных уровня, точность решения уравнений на грубой сетке $tol = 10^{-5}$. На каждом сеточном уровне применен сглаживатель $Cheb(2)$. Точность решения уравнений $tol = 10^{-6}$ для всех пяти расчетов достигается за семь многосеточных итераций независимо от размера сетки; апостериорная оценка скорости сходимости (48) практически одинакова и для всех расчетов равна $\rho = 0.1360, 0.1353, 0.1350, 0.1348, 0.1347$ соответственно. Это значит, что присущая многосеточному методу алгоритмическая масштабируемость наследуется компьютерным кодом.

В расчетах с фиксированной сеткой 1024^3 на 64, 512 и 4096 процессорах суперкомпьютера МГУ “Ломоносов” время счета составляет 30 сек., 3.2 сек. и 0.5 сек., то есть расчет ускоряется почти прямо пропорционально числу процессоров, см. рис. 6. Время счета на 4096 процессорах составляет $\approx 10^{-9}$ сек. на узел. И, конечно, в этом случае результаты всех трех расчетов идентичны, что трудно обеспечить, если использовать сглаживатели типа Гаусса-Зейделя.

7 Заключение

Многосеточный метод Р.П. Федоренко применен для решения эллиптического уравнения диффузии с краевыми условиями общего вида на многопроцессорных суперкомпьютерах. Показано, что сеточная разрешимость вырожденной задачи Неймана обеспечивается при записи оператора проектирования как сопряженного к оператору интерполяции; это исключает применения на каждом сеточном уровне дополнительной процедуры, содержащей глобальную операцию – расчет скалярного произведения.

Вместо сглаживателей типа Гаусса-Зейделя, малоэффективных для трехмерных анизотропных задач, а также трудных для реализации на ультрапараллельных компьютерах, предложены сглаживатели, основанные на многочленах Чебышева. В расчетах показана эффективность многосеточного метода с построенными сглаживателями, допускающими высокую степень параллелизма и обеспечивающими естественную масштабируемость многосеточного метода.

В следующей работе [5] изложенный подход распространен на задачи анизотропной диффузии.

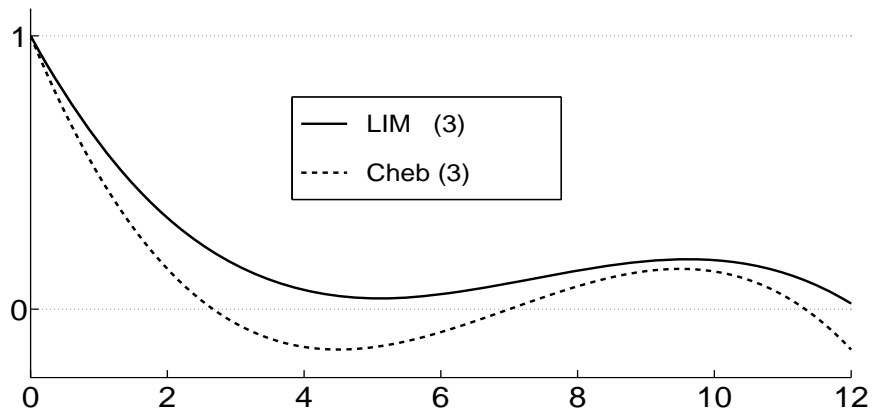


Рис. 2: Чебышевский и ЛИ-М сглаживатели; $\lambda_{\min}^* = \lambda_{\max}/6$

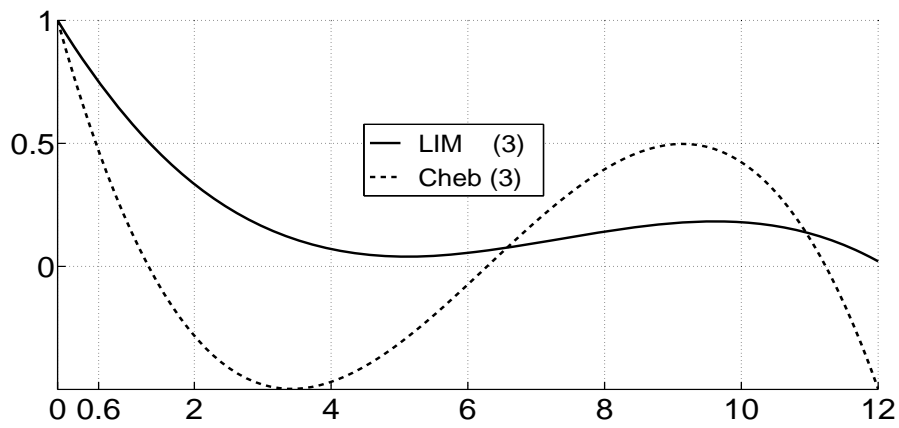


Рис. 3: Чебышевский и ЛИ-М сглаживатели; $\lambda_{\min}^* = \lambda_{\max}/20$

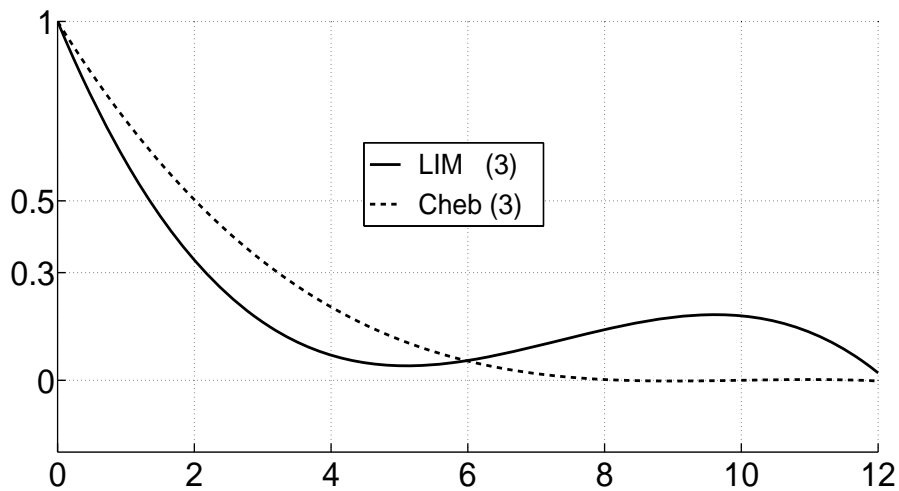


Рис. 4: Чебышевский и ЛИ-М сглаживатели; $\lambda_{\min}^* = \lambda_{\max}/1.5$

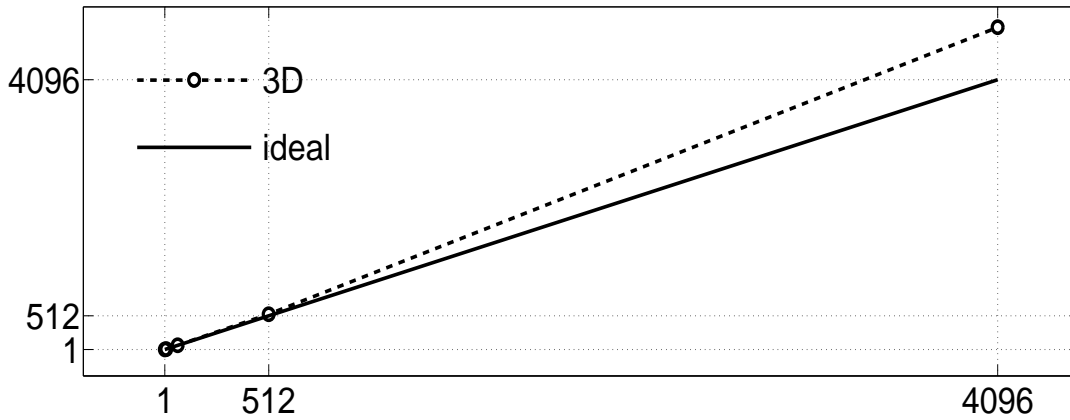


Рис. 5: Практическая масштабируемость задачи для 64 процессоров; по осям отложены размеры сеток и время расчета в относительных единицах: за единицу масштаба по оси абсцисс принята первая сетка с числом узлов 128^3 ; единица по оси ординат – время расчета на первой сетке.

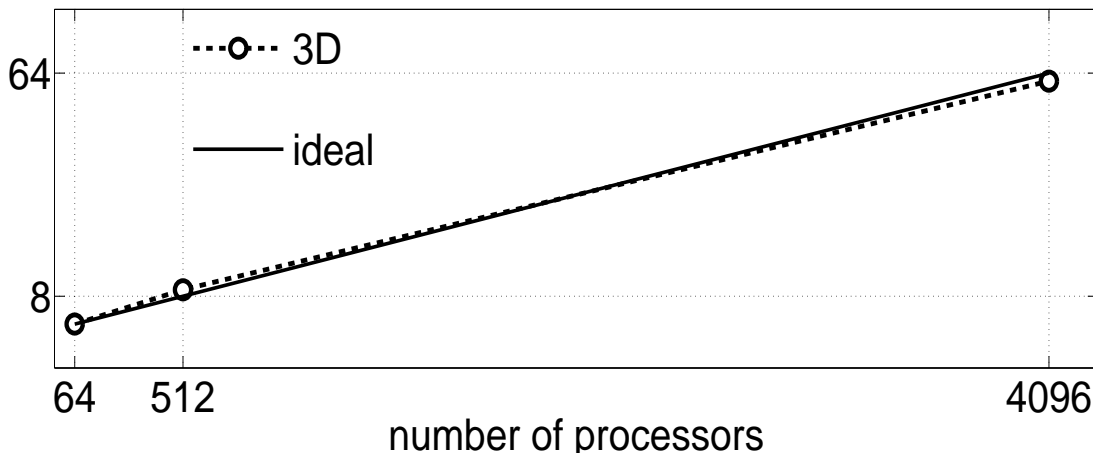


Рис. 6: Масштабируемость задачи для фиксированной сетке 1024^3 в топологии $3D$ -решетка процессоров; по оси абсцисс отложено число процессоров: 64, 512, 4096; по оси ординат – ускорение расчета по отношению к расчету на 64 процессорах.

Список литературы

- [1] Федоренко Р. П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1961, т.1, №5, с. 922–927.
- [2] Федоренко Р.П. Итерационные методы решения разностных эллиптических уравнений // Успехи математических наук, 1973, т. XXVIII, вып. 2(170), с.129-195.

- [3] *Федоренко Р.П.* Введение в вычислительную физику. - М.: МФТИ, 1994, 528 с.
- [4] *Жуков В.Т., Феодоритова О.Б.* Многосеточный метод решения эллиптических уравнений с использованием чебышевских итераций. - М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 1996, препринт № 16, 20 с.
- [5] *Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б.* Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений. Часть II. Анизотропные задачи. - М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2012, препринт, 32 с. В печати.
- [6] *Trottenberg U., Oosterlee C.W., Schuller A.* Multigrid. 2001. ACADEMIC PRESS.
- [7] *Жуков В. Т.* О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // Матем. моделирование, 2010, т.22, №10, с. 127-158.
- [8] *Локуцевский В.О., Локуцевский О.В.* О численном решении краевых задач для уравнений параболического типа // Докл. АН СССР, 1986, т. 291, №3, с. 540 - 544.
- [9] *Жуков В. Т., Феодоритова О. Б., Янг Д. П.* Итерационные алгоритмы для схем конечных элементов высокого порядка // Матем. моделирование, 2004, т.16, №7, с.117–128.
- [10] *Жуков В.Т., Феодоритова О.Б.* Многосеточный метод для конечно-элементных дискретизаций уравнений аэродинамики // Матем. моделирование, 2011, т. 23, №1, с. 115-131.
- [11] *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. -М.: Наука, 1978, 592 с.
- [12] *Самарский А.А., Тихонов А.Н.* Об однородных разностных схемах // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1961. Т. 1. №1, с. 5–63.
- [13] *Allison H. Baker, Robert D. Falgout, Tzanio V. Kolev, and Ulrike Meier Yang.* Multigrid Smoothers for Ultraparallel Computing. // SIAM J. Sci. Comput., 2011, V.33, №5. pp. 2864-2887.
- [14] *Василевский Ю.В., Ольшанский М.А.* Краткий курс по многосеточным методам и методам декомпозиции области. -М.: МАКС ПРЕСС, 2007, 100 с.
- [15] *Гантмахер Ф.Р.* Терия матриц. - М.: Наука, 1966, 576 с.