



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

Параллельный  
многосеточный метод для  
разностных эллиптических  
уравнений. Анизотропная  
диффузия

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений. Анизотропная диффузия // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 76. 36 с.  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-76>

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. Анизотропная диффузия

Москва – 2012

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. Анизотропная диффузия.

Приведено развитие параллельного многосеточного алгоритма [1] решения разностных эллиптических трехмерных уравнений, показавшего хорошую масштабируемость в расчетах изотропных задач на многопроцессорных суперкомпьютерах. В новой работе рассмотрены вопросы повышения эффективности алгоритма для решения анизотропных задач, типичных в приложениях при моделировании процессов диффузии, теплопроводности, динамики жидкости. Развиваемый алгоритм представляет собой параллельную реализацию классического многосеточного метода Р.П.Федоренко для краевых задач первого, второго и третьего рода, включая вырожденную задачу Неймана. Построенный алгоритм использует явные чебышевские итерации на этапах сглаживания и при решении грубосеточных уравнений. Разработана процедура адаптации сглаживателей к анизотропии, и на примерах показано, что адаптация обеспечивает эффективность многосеточного метода и масштабируемость параллельного кода.

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

Стр. 36, табл. 6, рис. 6, библиогр. назв. 14

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

Parallel multigrid method for elliptic difference equations. Anisotropic diffusion

We present the development of the parallel multigrid algorithm [1] for solving three-dimensional elliptic difference equations. This algorithm exhibits scalability in the calculation of isotropic problems on multiprocessor supercomputers. Here we improve efficiency of the algorithm for solving anisotropic problems which are typical in applications for modeling the processes of diffusion, heat conduction, fluid dynamics, etc. The developed algorithm is a parallel implementation of the classical multigrid of R.P.Fedorenko for boundary-value problems of the first, second and third kinds, including semi-definite Neumann problem. The algorithm is based on the explicit Chebyshev iterations for solving the coarsest grid equations and to construct smoothing procedures. We develop the adaptive smoothers for anisotropy problems, and show that the multigrid provides efficiency and scalability in parallel implementation.

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

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 11-01-12082-офи-м, 11-01-12045-офи-м) и Программы № 25 фундаментальных исследований РАН

## Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Формулировка задачи</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Пространственная дискретизация</b>	<b>7</b>
<b>4</b>	<b>Многосеточный метод</b>	<b>9</b>
4.1	Основные элементы . . . . .	9
4.2	Анизотропия . . . . .	12
4.3	Сглаживающие итерации . . . . .	14
4.4	Решение грубосеточных уравнений . . . . .	19
4.5	Уточнение нижних границ . . . . .	19
<b>5</b>	<b>Примеры расчетов</b>	<b>20</b>
<b>6</b>	<b>Заключение</b>	<b>31</b>
	<b>Список литературы</b>	<b>36</b>

## 1 Введение

В [1] приведен параллельный многосеточный алгоритм для решения разностных эллиптических уравнений и детально изложены основные алгоритмические элементы – операторы межсеточных переходов и две сглаживающие процедуры, основанные на многочленах Чебышева. Там же даны примеры, показывающие хорошую масштабируемость параллельного кода при его выполнении на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью на основе коммуникаций MPI. Новая работа посвящена вопросам повышения эффективности алгоритма при решении анизотропных задач. Анизотропия может проистекать из-за разномасштабности коэффициентов уравнения, а также сеточной неравномерности, например, когда размеры ячеек сетки по различным направлениям различаются в сотни раз. Такие задачи возникают при исследовании процессов диффузии, теплопроводности, динамики жидкости. Математические модели таких процессов представляют эллиптические или параболические уравнения. При их сеточной или конечно-элементной аппроксимации возникают системы линейных уравнений большой размерности. Матрицы таких систем обычно плохо обусловлены. Дополнительные трудности может создавать сложный характер распределения их собственных значений как результат анизотропии. Кластеризация спек-

тра влияет на скорость сходимости многих итерационных методов, в том числе и многосеточного метода. Методы подпространств Крылова, включая предобусловленные методы сопряженных градиентов, при решении таких задач тоже имеют трудности: из-за накопления вычислительных погрешностей последовательно вычисляемые базисные векторы могут терять ортогональность, а процедура переортогонализации является критичной, особенно при использовании параллельных компьютеров. Анизотропия усиливает трудности итерационного решения систем линейных уравнений с большим числом неизвестных (в диапазоне  $N \simeq 10^{10}$ ).

Дополнительные сложности при разработке алгоритмов и программ возникают в связи с быстрым развитием архитектур суперкомпьютеров с целью достижения экзафлопных скоростей. Рост производительности компьютеров сопровождается ростом числа процессоров, количество которых может достигать сотни тысяч. Поэтому для достижения высокой эффективности к компьютерным кодам предъявляется требование масштабируемости. Различают два типа масштабируемости параллельного компьютерного кода.

Масштабируемость в сильном смысле характеризует эффективность распараллеливания при фиксированном размере задачи  $N$  и определяется ускорением расчета на  $p$  процессорах. В идеале ускорение расчета должно расти линейно с ростом числа процессоров.

Масштабируемость в слабом смысле характеризует эффективность кода при одновременном пропорциональном изменении величин  $N$  и  $p$  с сохранением отношения  $N/p$  постоянным. В идеале при таком изменении  $N$  и  $p$  время счета не должно изменяться.

При этом предполагается разумность определения диапазонов изменения величин  $N$  и  $p$ : число  $N/p$  узлов сетки в каждом процессоре не должно быть слишком малым или слишком большим.

В [1] приведено практическое подтверждение тому, что среди итерационных методов решения разностных эллиптических уравнений требованиям масштабируемости удовлетворяет классический многосеточный метод Р.П. Федоренко [2] – [4] при реализации всех его этапов на принципе максимальной алгоритмической простоты. Этот принцип объяснен в [1], где также изложены основные алгоритмические элементы, положенные в основу параллельной реализации многосеточного метода решения разностных эллиптических уравнений, записанных на трехмерных декартовых сетках. Алгоритм основан на семиточечной дискретизации в прямоугольном параллелепипеде. Такая дискретизация обеспечивает получение мажорантных оценок эффективности при использовании ультрапараллельных компьютеров. Обобщение на 27-точечные дискретизации представляется достаточно очевидным.

Известно, для разностных эллиптических задач многосеточный метод оптимален – число многосеточных итераций, необходимое для получения решения с заданной точностью, не зависит от числа  $N$  неизвестных в задаче, то есть вычислительная сложность метода зависит линейно от числа неизвестных. Другими словами, многосеточный метод является алгоритмически масштабируемым. Обычно число многосеточных итераций и время счета зависит от конкретной задачи, например, от характера и степени анизотропии, а также от реализации основных алгоритмических элементов – операторов межсеточных переходов, и в большей степени – от сглаживающей процедуры.

Построенный в [1] параллельный многосеточный алгоритм использует явные чебышевские итерации на этапах сглаживания и при решении грубосеточных уравнений, и, как показано на примерах, такой подход обеспечивает хорошую масштабируемость для параллельных компьютеров.

Эффективность явного чебышевского метода недостаточна для решения сложных задач, но сейчас роль таких итерационных методов пересматривается в свете параллельных вычислений, см. [13] и цитированную там литературу. Авторы настоящей работы еще в 1996 году [5] предложили использовать специальный вариант чебышевских итераций при решении эллиптических уравнений на блочно-структурных сетках; в этом случае помимо сглаживания дополнительная роль чебышевских итераций состояла в обеспечении замены прямой дискретизации уравнений в узлах стыковки сеточных блоков аддитивным способом дискретизации, удобным для применения многосеточного метода.

Алгоритм [1] работает при краевых условиях общего вида, включающих условия Дирихле, Неймана и третье краевое условие. Специальное внимание при разработке алгоритма уделено вырожденной задаче Неймана, требующей для разрешимости на каждом сеточном уровне взаимной сопряженности операторов интерполирования и проектирования.

К числу недостатков чебышевских итераций обычно относят необходимость задания границ спектра операторов на всех уровнях сетки. Верхняя граница получается достаточно легко – по теореме Гершгорина (как максимум суммы модулей шаблонных коэффициентов разностной схемы). Нижние границы всего спектра и границы высокочастотной части, нужные соответственно для решения грубосеточных уравнений и сглаживания, мы определяем, используя информацию о коэффициентах уравнения и основной сетке. Нами разработана процедура адаптации сглаживателей, позволяющая уточнять в процессе многосеточных итераций нижнюю границу высокочастотной части спектра и изменять параметры сглаживающей процедуры в соответствии с новой границей.

Заметим, что для реализации в условиях ультрапараллельных вычислений выбран классический многосеточный метод на декартовых сетках; опыт реализации многосеточного метода на неструктурных сетках при решения более сложных уравнений Эйлера и Навье-Стокса [9], [10] показывает, что добиться такого высокого уровня масштабируемости будет чрезвычайно трудно.

## 2 Формулировка задачи

Рассмотрим линейное эллиптическое уравнение

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

в прямоугольном параллелепипеде  $\Omega = \{(x^1, x^2, x^3) : l_\alpha^- \leq x^\alpha \leq l_\alpha^+, \alpha = 1, 2, 3\}$ . Ограничимся случаем, когда тензор диффузии  $\kappa$  является диагональной  $3 \times 3$ -матрицей с положительными диагональными элементами. Эти элементы, коэффициент  $a$  и правая часть  $f$  являются заданными функциями  $x = (x^1, x^2, x^3)$ ; предполагается, что  $a \geq 0$ . Искомая функция  $u(x)$  удовлетворяет на границе  $\Gamma$  параллелепипеда (на его гранях  $x_\alpha = l_\alpha^\pm$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ ) краевым условиям Дирихле, Неймана или краевому условию третьего рода. Запишем краевое условие в общем виде

$$-(\kappa \operatorname{grad} u) \cdot \mathbf{n} = \sigma(u - u_\Gamma) + \gamma, \quad x \in \Gamma, \quad (2)$$

$\mathbf{n}$  – вектор внешней нормали к границе  $\Gamma$ ,  $\sigma \geq 0$ ,  $u_\Gamma$ ,  $\gamma$  – заданные на  $\Gamma$  функции  $x$ . Запись (2) включает условие Дирихле, третье краевое условие и условие Неймана (при  $\sigma(x) \equiv 0$ ).

Считаем, что входные данные обеспечивают разрешимость краевой задачи. В случае вырожденной задачи Неймана (то есть при  $a(x) \equiv 0$ ,  $\sigma(x) \equiv 0$ ) для существования решения необходимо потребовать выполнения условия

$$\int_{\Gamma} \gamma(x) ds = \int_{\Omega} f(x) dv. \quad (3)$$

Тогда на подпространстве функций, ортогональных постоянной функции, вырожденная задача Неймана имеет единственное решение. Как показано в [1], для точного выполнения сеточного аналога условия (3) на всех сеточных уровнях (что важно для эффективной вычислительной реализации) нужно взять оператора проектирования, сопряженный оператору интерполяции.

Уравнение (1) перепишем в компактном виде

$$A u = f, \quad (4)$$

а также в виде, удобном для дискретизации и для моделирования анизотропии по направлениям:

$$-\sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \left( A_\alpha \frac{\partial u}{\partial x^\alpha} \right) + A_0 u = f, \quad (5)$$

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

### 3 Пространственная дискретизация

Точку трехмерного пространства для удобства обозначим как  $(x^1, x^2, x^3)$ , так и  $(x, y, z)$ . Введем в параллелепипеде  $\Omega = \{(x^1, x^2, x^3) : l_\alpha^- \leq x^\alpha \leq l_\alpha^+, \alpha = 1, 2, 3\}$  по каждому направлению неравномерную сетку  $\Omega_h$  с числом шагов  $N_x, N_y, N_z$ . Узлы сетки  $\Omega_h$  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  $\Omega_h$  определены сеточные функции: итерационное приближение  $u$  к искомому решению, правая часть  $f$ , коэффициенты  $A_0, A_1, A_2, A_3$ , невязка  $r = f - Au$ . Коэффициенты  $A_1, A_2, A_3$  уравнения (5) вычисляются в “полуцелых” точках (на интерфейсах ячеек интегрирования)  $\{i + \frac{1}{2}, j, k\}, \{i, j + \frac{1}{2}, k\}, \{i, j, k + \frac{1}{2}\}$  с обозначениями  $A_1^{i+1/2, j, k}, A_2^{i, j+1/2, k}, A_3^{i, j, k+1/2}$  соответственно. Предусмотрены две интерполяционные процедуры расчета  $A_l, l = 1, 2, 3$  в “полуцелых” точках – эти коэффициенты вычисляются либо как среднее арифметическое, либо как среднее гармоническое соответствующих узловых значений  $A_l^{i, j, k}$ . Коэффициенты краевого условия  $\sigma, \beta, \gamma$  задаются в узлах, лежащих на гранях параллелепипеда, например, на грани  $x = 0$  функции  $\sigma, \beta, \gamma$  определены в узлах  $(0, j, k)$ , аналогично определяются граничные сеточные функции на остальных гранях параллелепипеда. Дискретную схему строим методом баланса, интегрируя исходное уравнение по ячейке  $(i, j, k)$

$$\begin{aligned} x_{i-1/2} &\leq x \leq x_{i+1/2}, \\ y_{j-1/2} &\leq y \leq y_{j+1/2}, \\ z_{k-1/2} &\leq z \leq z_{k+1/2}, \end{aligned}$$

ассоциированной с узлом  $(i, j, k)$ . Площади шести граней ячейки  $(i, j, k)$  обозначим как  $S_{i+1/2, j, k}, S_{i, j+1/2, k}, S_{i, j, k+1/2}$ , а ее объем как  $V_{i, j, k}$ .

Скалярное произведение в пространстве сеточных функций  $U_h$ , заданных на сетке  $\Omega_h$  (и обращающихся в нуль на  $\Gamma_h$  в случае задачи Дирихле), определяется стандартным образом:

$$(u, w) = \sum_{i, j, k} u_{i, j, k} w_{i, j, k} V_{i, j, k}, \quad (6)$$



где сумма берется по всем узлам сетки. Выражение (6) является сеточным аналогом скалярного произведения в  $L_2(\Omega)$ . Введем сеточную  $L_2(\Omega)$ -норму равенством

$$\| u \|^2 = (u, u).$$

Для каждой ячейки  $(i, j, k)$  сетки записываем закон сохранения

$$\begin{aligned} & -q_{i+1/2,j,k} + q_{i-1/2,j,k} - q_{i,j+1/2,k} + q_{i,j-1/2,k} - \\ & -q_{i,j,k+1/2} + q_{i,j,k-1/2} + A_0^{i,j,k} \cdot V_{i,j,k} = f_{i,j,k} V_{i,j,k} \end{aligned} \quad (7)$$

с аппроксимацией потоков  $q_{i\pm 1/2,j,k}$ ,  $q_{i,j\pm 1/2,k}$ ,  $q_{i,j,k\pm 1/2}$  на гранях ячейки с помощью обычной двухточечной формулы (или с учетом краевого условия (2) в случае граничного узла), см. [1]. Построенную семиточечную разностную схему запишем в операторном виде

$$A_h u_h = f_h. \quad (8)$$

Введенную неравномерную декартову сетку будем характеризовать параметром  $h$ , определяемым равенством

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

где  $h_\alpha$  – среднеквадратичный шаг неравномерной сетки по направлению  $x^\alpha$ . Точность построенной разностной схемы есть  $O(h^2)$  в норме максимума модуля на последовательности сеток, для которой точки разрыва коэффициентов  $A_0, A_1, A_2, A_3, f$  по каждому координатному направлению являются узлами сетки [12].

Разностный оператор  $A_h$  является самосопряженным в скалярном произведении (6). Будем считать известными следующие характеристики оператора  $A_h$ . Его спектр лежит на отрезке  $[\lambda_{min}; \lambda_{max}]$  вещественной оси;  $\lambda_{min} \geq 0$ . Для вырожденной задачи Неймана  $Ker A_h$  (ядро оператора) является одномерным подпространством, состоящим из сеточных функций–констант; в этом случае  $\lambda_{min} = 0$  и известна оценка  $\lambda_{min}^d > 0$  нижней границы оператора на ортогональном ядру подпространстве [1]. Для дискретной аппроксимации уравнения в форме (5) введем верхние границы  $\lambda_{max}^\alpha$  спектров разностных аналогов одномерных операторов

$$-\frac{\partial}{\partial x^\alpha} A_\alpha(x) \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \quad (9)$$

по направлениям  $x^\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$  при краевых условиях вида (2).

Формулы расчета  $\lambda_{min}$ ,  $\lambda_{max}$ ,  $\lambda_{min}^d$ ,  $\lambda_{max}^\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$  даны в [1]. Дополнительно считаем известными постоянные  $0 < \zeta_1 \leq \zeta_2$  энергетической эквивалентности оператора  $A_h$  и дискретного оператора  $D = -\Delta_h + a \cdot I_h$ :

$$\zeta_1(Du_h, u_h) \leq (A_h u_h, u_h) \leq \zeta_2(Du_h, u_h), \quad (10)$$

где  $\Delta_h$  – разностный оператор Лапласа при одинаковых с  $A_h$  краевых условиях,  $I_h$  – тождественный оператор. Аккуратные оценки границ спектра оператора обеспечивают эффективность процедур сглаживания и решения грубосеточных уравнений, основанных на чебышевских итерациях. Полученные оценки могут быть слишком грубыми, поэтому некоторые из них будут уточнены в процессе многосеточных итераций. Отметим, что верхняя граница  $\lambda_{max}$  спектра оператора  $A_h$  вычисляется как оценка сверху максимального собственного значения дискретного оператора, получаемая по теореме Гершгорина о кругах, и является не слишком грубой.

## 4 Многосеточный метод

### 4.1 Основные элементы

Вычислительная сложность (иначе трудоемкость) итерационного метода решения систем линейных уравнений определяется числом арифметических операций, затрачиваемых на получение приближенного решения с заданной точностью. Как обычно, мы понимаем под этим уменьшение нормы невязки итерационного приближения в заданное число раз. Если трудоемкость метода зависит линейно от числа неизвестных, то такой метод является оптимальным. Примером служит классический многосеточный метод Р.П. Федоренко [2], который для разностных эллиптических задач является оптимальным. В [1] дано детальное описание многосеточного алгоритма и приведены примеры расчетов, подтверждающие его параллельную эффективность для уравнений изотропной диффузии. В данной работе основной акцент делается на исследование работоспособности метода и его усовершенствование для анизотропного случая. Напомним кратко элементы многосеточного метода, представленного в [1].

Рассмотрим систему сеточных уравнений

$$A_h u_h = f_h, \quad (11)$$

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. Размерность сеточной задачи при переходе на грубую сетку уменьшается в несколько раз (в простейшем варианте в трехмерном случае – в 8 раз). Объекты этих сеток будем отмечать символами  $h$  и  $H$  соответственно. Тогда итерированный оператор имеет вид

$$Q = S_p(I - PA_H^{-1}RA_h)S_p, \quad (12)$$

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; это число может быть переменным, зависящим от номера сеточного уровня и даже направления движения по сеткам. Мы строим грубосеточный оператор  $A_H$  редискретизацией, то есть на  $H$ -сетке записывается заново аппроксимация исходного уравнения (1) относительно грубосеточной коррекции решения. В этом случае краевые условия являются однородными, 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 можно представить в виде  $C = (I - Q^m)A_h^{-1}$ , где  $m$  – число итераций многосеточного метода; с его помощью результат работы многосеточного алгоритма (который, конечно, не содержит явного обращения операторов) можно формально записать в виде  $u_h = C \cdot f_h$ .

Оператор интерполяции  $P$  определяет переменные на подробной сетке с помощью трилинейной интерполяции грубосеточных переменных. В качестве оператора сборки  $R$  берем оператор, сопряженный в скалярном произведении (6) к оператору интерполяции:  $R = P^*$ . Для вырожденной задачи Неймана соблюдение последнего условия автоматически обеспечивает разрешимость сеточных краевых задач на всех сеточных уровнях, если разностный аналог условия разрешимости (3) выполнен на основной сетке.

Сглаживающий оператор  $S_p$  из определения многосеточного метода (12) задает переход от итерационного приближения  $v$  к более "гладкому" приближению  $\bar{v}$ . Если  $u$  – точное решение задачи (11) на сетке любого уровня, кроме самой грубой, то оператор  $S_p$  текущую ошибку  $e_0 = v - u$  за  $p$  шагов сглаживания преобразует в ошибку  $e_1 = \bar{v} - u$ , где  $e_1 = S_p e_0$ . Детальные формулы для двух операторов сглаживания приведены в [1].

В анизотропных задачах роль сглаживающих итераций чрезвычайно высока. Для объяснения этого факта рассмотрим собственные числа и собственные векторы (сеточные функции) оператора  $A_h$ :

$$(\lambda_k, \varphi_k) : A_h \varphi_k = \lambda_k \varphi_k, \quad k = 1, \dots, N, \quad \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N.$$

Собственные значения лежат на отрезке  $[\lambda_{min}; \lambda_{max}]$  вещественной оси; в данном случае считаем, что  $\lambda_{min} > 0$ , так как случай вырожденной задачи

Неймана сводится к исследованию свойств операторов на подпространстве с  $\lambda_{min} = \lambda_{min}^d > 0$ . Мы исследуем эффективность двух сглаживателей. По построению первый сглаживатель  $S_p = S_p(A)$  – операторный многочлен Чебышева, второй – дробно-рациональная функция над полем вещественных чисел; тогда оператор  $S_p$  является самосопряженным и его собственные числа – это значения функции  $S_p(\lambda)$  на спектре оператора  $A_h$ . Разложим начальную ошибку  $e_0 = v - u$  в ряд Фурье по собственным функциям оператора  $A_h$ . Тогда ошибки  $e_0, e_1$  можно представить в виде рядов

$$e_0 = \sum_{k=1}^N c_k \varphi_k, \quad e_1 = \sum_{k=1}^N c_k \varrho_k \varphi_k \quad (13)$$

по собственным функциям оператора  $A_h$ ; в выражении для  $e_1$  величины  $\varrho_k = S_p(\lambda_k)$  являются собственными значениями оператора сглаживания  $S_p$ . Для нас важны не отдельные собственные значения (они нам неизвестны), а поведение функции  $\varrho(\lambda) = S_p(\lambda)$  на отрезке  $[0; \lambda_{max}]$ , содержащим отрезок  $[\lambda_{min}; \lambda_{max}]$ . Непрерывную функцию

$$\varrho(\lambda) = S_p(\lambda), \quad \lambda \in [0; \lambda_{max}]$$

параметра  $\lambda$  назовем функцией затухания.

Для сглаживания мы используем конструкции, связанные с многочленом Чебышева 1 рода  $T_p(x)$  степени  $p$ , который можно записать в виде

$$T_p(x) = \cos(p \arccos x), \quad |x| \leq 1; \quad T_p(x) = \cosh(p \operatorname{Aco}sh x), \quad |x| > 1. \quad (14)$$

Свойства чебышевских многочленов подробно изложены в [14]. Многочлен  $T_p(x)$  наименее уклоняется от нуля на отрезке  $[-1; 1]$  (имеет наименьшую норму в пространстве  $C[-1; 1]$ ) среди всех алгебраических многочленов степени  $p$  со старшим коэффициентом, равным  $2^{p-1}$ . Если нам нужно построить многочлен, наименее уклоняющийся от нуля на произвольном отрезке  $[a; b]$ , то следует сделать замену переменных  $x = 0.5 \cdot (a+b) - (a-b) \cdot t$ , переводящую отрезок  $[-1; 1]$  в отрезок  $[a; b]$ .

Выберем границу  $\lambda_{min}^*$ , разделяющую спектр на две части: низкочастотный спектр  $[\lambda_{min}; \lambda_{min}^*)$  и высокочастотный спектр  $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}^*]$ . Границы  $\lambda_{min}^*, \lambda_{max}^*$  – свои для каждого сеточного уровня, но отношение границ может быть одинаковым для всех уровней. В соответствии с этим разбиением собственные функции разделяются на две группы – на низкочастотные и высокочастотные компоненты или, в другой терминологии, гладкие и негладкие функции. Соответственно, все подпространство сеточных функций представляется ортогональной суммой двух подпространств.

Предположим, что для двухсеточного представления (12) грубосеточная коррекция является точной и после интерполяции в ошибке нет низкочастотных компонент. Тогда эффективный сглаживатель есть операторный многочлен  $F_p(A_h)$ , где  $F_p(\lambda)$  – многочлен Чебышева, наименее уклоняющийся от нуля на отрезке  $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$  и нормированный условием  $F_p(0) = 1$ . Максимальное значение  $|F_p(\lambda)|$  на отрезке  $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$  зависит от  $p$  и определяет скорость сходимости многосеточного метода. На низкочастотной части спектра выполнено важное для многосеточного метода условие  $|F_p(\lambda)| < 1$ , означающее, что амплитуды низкочастотных мод тоже уменьшаются. Другими словами, такой чебышевский сглаживатель, мы его обозначаем как  $Cheb(p) = Cheb(p, \lambda_{min}^*, \lambda_{max})$ , является оптимальным на  $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$  среди всех явно-итерационных скалярных методов. Более того, этот сглаживатель является сходящимся итерационным методом со скоростью сходимости, определяемой значением многочлена Чебышева на левой границе спектра.

Как показано в [1], когда ситуация отличается от идеальной, сглаживатель  $Cheb(p)$  чувствителен к ошибке в определении  $\lambda_{min}^*$ . Например, недооценка  $\lambda_{min}^*$  приводит к росту числа сглаживающих итераций без улучшения сглаживания. Поэтому мы исследуем другую сглаживающую явно-итерационную процедуру, которая не является оптимальной, но имеет свои привлекательные стороны. Этот второй сглаживатель называется ЛИ-М и обозначается как  $LIM(p) = LIM(p, \lambda_{min}^*, \lambda_{max})$ . Он представляет собой специальный вариант явных чебышевских итераций и является дробно-рациональной функцией исходного оператора в отличие от стандартного полиномиального чебышевского сглаживателя. Для построения сглаживателя ЛИ-М нужна оценка  $\lambda_{min}^*$ , но только для определения числа сглаживающих итераций. Недооценка  $\lambda_{min}^*$  приводит к улучшению сглаживания и увеличению скорости сходимости многосеточного метода (наряду с ростом числа сглаживающих итераций). Основная причина изучения и использования двух сглаживателей – нет достаточно полного исследования их эффективности при решении анизотропных задач. Некоторые свойства двух используемых сглаживателей изучены в [1], и также изучаются здесь в расчетах. В данной работе предпринята попытка конструирования и исследования алгоритмов адаптации сглаживателей для анизотропных задач, когда нет хорошей оценки границы  $\lambda_{min}^*$  раздела спектра.

## 4.2 Анизотропия

Для трехмерных задач наличие анизотропии представляет значительные препятствия для достижения эффективности многосеточного метода. Рассмотрим четыре модельных случая, которые не исчерпывают все анизотропные

эффекты, но позволяют понять типичные трудности. Опишем эти трудности на примере уравнения (5) при каких-либо краевых условиях в кубе  $\Omega = [0, 1]^3$ , предполагая постоянство коэффициентов  $A_1, A_2, A_3$ ,  $A_0 \equiv 0$  и запись дискретных уравнений на кубической равномерной сетке с шагом  $h$  по каждому направлению. Для такой задачи анизотропию можно описать в терминах коэффициентов  $A_1, A_2, A_3$  исходного дифференциального уравнения:

1.  $A_1 \approx A_2 \approx A_3$
2.  $A_1 \gg A_2 \approx A_3$
3.  $A_1 \approx A_2 \gg A_3$
4.  $A_1 \gg A_2 \gg A_3$ .

Случай 1 дает пример изотропной задачи, и эффективность многосеточного метода обеспечивается фактически при любом самом простом сглаживателе, например при точечной релаксации Гаусса-Зейделя. Но мы в такой ситуации используем схему *Cheb*( $p$ ) с малым числом итераций (обычно с  $p = 2$ ); в изотропной задаче даже одной итерации достаточно для достижения асимптотической оптимальности.

Случай 2 представляет пример одномерной анизотропии. К такому случаю мы приходим, например, при решении уравнения Пуассона в прямоугольном параллелепипеде, размер которого по оси  $Ox$  много меньше двух других размеров. Тогда при преобразовании области к кубу  $[0, 1]^3$  получаем случай 2. В этом случае рекомендуют обычно использовать в качестве сглаживателя прогонку вдоль оси  $Ox$ , то есть групповую релаксацию с объединением в группу неизвестных, отвечающих сеточной  $x$ -линии.

В двумерном случае даже при наличии сильной анизотропии общего вида использование продольно-поперечной прогонки обеспечивает хорошее сглаживание. Однако, обобщение такого сглаживания на трехмерный случай, то есть использование прогонки попеременно в трех направлениях, не решает проблемы со сглаживанием для случаев анизотропии 3 и 4. В этих двух частных случаях можно ограничиться групповой релаксацией, объединяя в группы неизвестные, отвечающие сеточным плоскостям  $Oxy$ . В общем случае придется объединять неизвестные в три группы поочередно – в плоскостях  $Oxy$ ,  $Oxz$  и  $Oyz$ . Указанная групповая релаксация сводится к многократному решению двумерных задач, и эти задачи нужно решать достаточно хорошо, чтобы обеспечить влияние друг на друга всех неизвестных в группе. Для решения таких задач обычно рекомендуют двумерный многосеточный метод с продольно-поперечной прогонкой в качестве сглаживателя. Такой путь, кроме больших вычислительных и трудовых затрат, ведет к существенным труд-

ностям при параллельной реализации многосеточного метода. Именно поэтому мы для сглаживания используем высокопараллельную схему  $Cheb(p)$  или  $Lim(p)$  с автоматической настройкой на анизотропию, что, конечно, достигается за счет увеличения числа сглаживающих итераций.

### 4.3 Сглаживающие итерации

Рассмотрим систему сеточных уравнений (11), записанную на одном из сеточных уровней, за исключением последнего уровня с самой грубой сеткой. Сначала введем некоторые количественные характеристики анизотропии. Границе, разделяющей спектр на две части, отвечают собственные функции с номерами  $(N_x/2, 1, 1)$ ,  $(1, N_y/2, 1)$ ,  $(1, 1, N_z/2)$ . Соответствующие собственные значения имеют вид

$$\lambda_1^* = 0.5 \cdot \lambda_{max}^{(1)} + \lambda_{min}^{(2)} + \lambda_{min}^{(3)},$$

$$\lambda_2^* = 0.5 \cdot \lambda_{max}^{(2)} + \lambda_{min}^{(1)} + \lambda_{min}^{(3)},$$

$$\lambda_3^* = 0.5 \cdot \lambda_{max}^{(3)} + \lambda_{min}^{(1)} + \lambda_{min}^{(2)},$$

где  $\lambda_{min}^{(\alpha)}$ ,  $\lambda_{max}^{(\alpha)}$  – оценки границ разностных аналогов операторов (9) по направлениям  $x^\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ . В качестве первой характеристики анизотропии возьмем отношение

$$\eta_1 = \frac{\gamma_{min}}{\lambda_{max}}, \quad \text{где } \lambda_{max} = \lambda_{max}^{(1)} + \lambda_{max}^{(2)} + \lambda_{max}^{(3)}, \quad \gamma_{min} = \min(\lambda_1^*, \lambda_2^*, \lambda_3^*). \quad (15)$$

Полученное пороговое значение  $\eta_1$  есть обобщение правила, согласно которому в одномерном простейшем случае к высокочастотной части спектра относятся частоты  $\lambda > 0.5\lambda_{max}$ . В изотропном трехмерном случае имеем  $\eta_1 \approx 1/6$ .

Мы вводим обозначение  $\gamma_{min}$ , а не  $\lambda_{min}^*$ , так как это значение не является окончательным и может быть изменено, или уточнено в расчетах. Дело в том, что вышеуказанные случаи анизотропии 1 – 4 достаточно хорошо разрешаются при таком выборе границы раздела спектра, и это будет показано на примерах. Но возможна скрытая анизотропия, 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 высокочастотных мод. Пример такой анизотропии дает задача на сетке, которая сгущается от центра ко всем граням области  $\Omega$ . В отличие от вышеизложенного, где оценка  $\eta_1$  имеет содержательное, а в изотропном случае и теоретическое обоснование, в этой ситуации можно воспользоваться аналогом известного

“принципа замороженных коэффициентов” и в качестве характеристики сеточной анизотропии взять

$$\eta_2 = \frac{1}{6} \cdot \min_{x \in \Omega_h} \frac{\eta_{min}(x)}{\eta_{max}(x)}, \quad (16)$$

где

$$\eta_{max}(x) = \max \left( \frac{A_1(x)}{h_1(x)^2}, \frac{A_2(x)}{h_2(x)^2}, \frac{A_3(x)}{h_3(x)^2} \right), \quad (17)$$

$$\eta_{min}(x) = \min \left( \frac{A_1(x)}{h_1(x)^2}, \frac{A_2(x)}{h_2(x)^2}, \frac{A_3(x)}{h_3(x)^2} \right),$$

$h_\alpha(x)$  – переменный шаг сетки по направлению  $x^\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ . Тогда границу раздела спектра можно грубо определить как  $\gamma_{min} = \min(\eta_1, \eta_2) \cdot \lambda_{max}$ . Для равномерной сетки при постоянных коэффициентах эта оценка при  $\eta_1 = 1/6$  переходит в естественную границу  $\gamma_{min} = \lambda_{max}/6$ .

В ряде случаев полезна еще одна оценка  $\lambda_{min}^*$ , основанная на использовании постоянных  $\zeta_1, \zeta_2$  энергетической эквивалентности из (10):

$$\lambda_{min}^* = \frac{1}{6} \cdot \zeta_1 \cdot \lambda_{max}^0 = \frac{1}{6} \cdot \frac{\zeta_1}{\zeta_2} \cdot \lambda_{max}, \quad \text{тогда} \quad \eta_3 = \frac{1}{6} \cdot \frac{\zeta_1}{\zeta_2};$$

значения  $\zeta_1, \zeta_2$  могут быть вычислены по найденным границам спектра  $\lambda_{min}, \lambda_{max}$  и  $\lambda_{min}^0, \lambda_{max}^0$  операторов  $A_h$  и  $D$ ; последние находятся в процессе оценки границ спектра оператора  $A_h$ . Все оценки  $\eta_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  находятся до начала расчета. Для удобства мы будем пользоваться следующей итоговой формулой определения относительной границы раздела спектра:

$$\eta = \min \left( \frac{1}{6}, \eta_1, \eta_2, \eta_3 \right). \quad (18)$$

**Чебышевские сглаживающие итерации.** Формализация вышеприведенных рассуждений приводит к следующему эмпирическому правилу: число  $p$  чебышевских итераций возьмем так, чтобы компоненты начальной погрешности (13), отвечающие высокочастотному участку спектра с относительной границей раздела (18), уменьшились в заданное число  $\varepsilon^{-1} > 1$  раз. Эта задача имеет хорошо известное решение (см. [11], [1]):

$$p(\varepsilon) = \left\lceil \ln \left( \varepsilon^{-1} + \sqrt{\varepsilon^{-2} - 1} \right) / \ln \rho \right\rceil, \quad \text{где} \quad \rho = \frac{1 + \sqrt{\eta}}{1 - \sqrt{\eta}}. \quad (19)$$

Здесь используем обозначение  $\lceil x \rceil$  для наименьшего целого, большего или равного  $x$ :

$$\lceil x \rceil = \min \{ n \in Z \mid n \geq x \}.$$



Будем называть параметр сглаживателя  $\varepsilon$  фактором сглаживания. Для расчета итерационных параметров определяем верхнюю границу  $\lambda_{max}$  на данной сетке с помощью теоремы Гершгорина о кругах. Нижнюю границу высокочастотной части находим с использованием параметра  $\eta$  из (18):

$$\lambda_{min}^* = \eta \cdot \lambda_{max}. \quad (20)$$

Оператор сглаживания, который мы обозначаем при описании результатов как  $Cheb(p) = Cheb(p, \lambda_{min}^*, \lambda_{max})$ , является операторным многочленом

$$S_p = \prod_{j=1}^{j=p} (I - \omega_j \cdot A_h). \quad (21)$$

На отрезке  $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$  функция  $S_p(\lambda)$  является многочленом, наименее уклоняющемся от нуля среди многочленов степени  $p$ , равных единице при  $\lambda = 0$ . Здесь  $\omega_j$  – параметры (обычно называемые чебышевскими итерационными параметрами), которые вычисляются с помощью корней стандартного многочлена Чебышева (14)

$$\beta_j \in K_p = \left\{ \cos \frac{2i-1}{2p} \pi, \quad i = 1, 2, \dots, p \right\}, \quad (22)$$

(со специальным упорядочиванием для устойчивости [11]) по формуле:

$$\omega_j^{-1} = \frac{\lambda_{max} + \lambda_{min}^*}{2} + \frac{\lambda_{max} - \lambda_{min}^*}{2} \cdot \beta_j, \quad j = 1, \dots, p. \quad (23)$$

Алгоритмическая реализация проста: новое итерационное приближение  $y^j$  находится явным образом

$$y^j = y^{j-1} - \omega_j (A_h \cdot y^{j-1} - f_h), \quad j = 1, \dots, p, \quad (24)$$

где  $y^0$  – заданное начальное приближение. Спектр сглаживающего оператора (21) есть

$$\rho_{Cheb}(\lambda) = F_p(\lambda), \quad (25)$$

где многочлен Чебышева  $F_p$  полностью определен параметрами  $\lambda_{min}^*$ ,  $\lambda_{max}$ ,  $\varepsilon$ . Для сглаживания обычно достаточно требовать, чтобы норма невязки  $r_p = A_h \cdot y^p - f_h$  уменьшалась по сравнению с нормой начальной невязки в несколько, например, в два раза. Тогда в соответствии с формулами (19) для изотропного случая с  $\eta \approx 1/6$  при факторе сглаживания  $\varepsilon = 0.5$  получаем два сглаживающих шага,  $p = 2$ . При  $\varepsilon = 0.7$  получаем  $p = 1$ ; такое сглаживание обеспечивает асимптотическую оптимальность, но за большее число многосеточных итераций. Для анизотропных случаев, например, с  $\eta \approx 10^{-2}$  и  $\eta \approx 10^{-4}$  получаем  $p = 7$  и  $p = 66$ .

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

1. Задаем начальное приближение:  $y^0 = v_h$ . На начальной сетке и всех этапах пост-сглаживания  $v_h$  – текущее итерационное приближение; в остальных случаях  $v_h \equiv 0$ .
2. Вычисляем верхнюю границу  $\lambda_{max}$  спектра оператора  $A_h$ .
3. Вычисляем границу раздела спектра  $\lambda_{min}^*$  по формуле (20).
4. Находим для заданного фактора сглаживания  $\varepsilon$  степень  $p$  многочлена Чебышева  $F_p$  и итерационные параметры (23) (обычно  $\varepsilon = 0.5$ ).
5. Проводим цикл чебышевских итераций (24).
6. Результат  $p$ -й итерации есть новое приближение к решению:  $v_{new} = y^p$ .

**ЛИ-М сглаживающие итерации.** Для сглаживания вместо чебышевского сглаживателя (21) можно применять схему локальных итераций [7], которая в простых примерах является более затратной по сравнению с чебышевским сглаживателем, но в сложных ситуациях сглаживатель ЛИ-М обеспечивает более высокую скорость сходимости многосеточных итераций при меньших затратах. Хорошим примером являются анизотропные задачи и даже изотропные задачи при грубой оценке нижней границы высокочастотной части спектра. Оператор сглаживания ЛИ-М, обозначаемый как  $LIM(p) = LIM(p, \lambda_{min}^*, \lambda_{max})$ , в отличие от чебышевских итераций не полином, а дробно-рациональная функция

$$S_\nu = (I - G_p^2)(I + \tau A_h)^{-1}, \quad (26)$$

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

$$\lambda_0 = \lambda_{max} \frac{z_1 - 1}{z_1 + 1} \in \left[-\frac{1}{\tau}; 0\right], \quad \tau = \frac{1}{\lambda_{max}} \left( \left\lceil \frac{16p^2}{\pi^2} \right\rceil - 1 \right) \text{ и } z_1 = \cos \frac{\pi}{2p},$$

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

$$|G_p(\lambda)| \leq 1, \quad |S_\nu(\lambda)| \leq 1, \quad |G_p(\lambda)| \leq 1, \quad (27)$$

причем  $G_p(0) = 0$ .

*Замечание.* В отличие от стандартного чебышевского метода при заданной степени  $p$  многочлена величина  $\lambda_{min}^*$  не является параметром метода (26) – (27). Эта величина при заданном факторе сглаживания  $\varepsilon$  определяет только степень  $p$  и число шагов сглаживания  $\nu = 2p - 1$ . Конструкция вида (26) детально исследована в [7].

Полином  $G_p$  выражается через стандартный полином Чебышева  $T_p$  (14):

$$G_p(\lambda) = \frac{H_p(\lambda)}{H_p(-\frac{1}{\tau})}, \quad H_p(\lambda) = \prod_{m=p}^{m=1} (a_m - \lambda) \equiv T_p\left(z_1 - \frac{z_1 + 1}{\lambda_{max}} + \lambda\right),$$

здесь  $T_p(z)$  – чебышевский полином степени  $p$  на стандартном отрезке  $[-1; 1]$ , в которой отображается отрезок  $[\lambda_0; \lambda_{max}]$  при замене  $z = z_1 - (z_1 + 1)\lambda/\lambda_{max}$ ; нули  $\{a_m, m = 1, \dots, p\}$  многочлена  $H_p$  являются итерационными параметрами метода и выражаются через корни (22) многочлена Чебышева  $T_p(z)$ :

$$a_m = \frac{\lambda_{max}}{1 + z_1}(z_1 - \beta_m), \quad m = 1, \dots, p. \quad (28)$$

Спектр сглаживающего оператора (26) определяется по формуле

$$\rho_{Lim}(\lambda) = \frac{1 - G_p^2(\lambda)}{1 + \tau\lambda}. \quad (29)$$

Считаем для удобства, что функция  $\rho_{Lim}(\lambda)$  определена на всем отрезке  $[0; \lambda_{max}]$ , содержащим спектр оператора  $A_h$ . В силу (27)

$$0 \leq \rho_{Lim}(\lambda) \leq \frac{1}{1 + \tau\lambda}. \quad (30)$$

Напомним, что формула (29) означает, что в представлении погрешности (13) в виде ряда по собственным функциям оператора  $A_h$  амплитуда гармоники с частотой  $\lambda$  после сглаживания уменьшится за  $\nu = 2p - 1$  итераций в  $1/\rho_{Lim}(\lambda)$  раз. Возьмем степень многочлена Чебышева  $p$  так, чтобы компоненты погрешности, отвечающие высокочастотному участку спектра  $[\eta \cdot \lambda_{max}, \lambda_{max}]$ , уменьшились в заданное число  $\varepsilon^{-1} > 1$  раз. Используя (30), получаем

$$p = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{(\varepsilon^{-1} - 1)/\eta + 1} \right\rceil. \quad (31)$$

Подставляя в (30) выражение из (29) для  $\tau$ , получаем, что на правом конце спектра затухание самой высокочастотной моды определяется множителем

$$\rho_{Lim}(\lambda_{max}) \leq \frac{\pi^2}{16p^2}, \quad (32)$$

то есть затухание происходит быстрее, чем при чебышевском сглаживании; на левом конце высокочастотной части спектра достигается заданная скорость убывания  $\varepsilon^{-1}$ .

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

4. Вычисляем степень  $p$  многочлена Чебышева  $G_p$ , его нули (упорядочивая их для устойчивости, причем так, что первый корень есть  $\beta_1 = z_1 = \cos(0.5\pi/p)$ ); находим итерационные параметры  $\{a_m, m = 1, \dots, p\}$  по формуле (28). По построенному набору строим другой набор из  $2p - 1$  параметров

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

5. Проводим цикл итераций по  $m = 1, \dots, 2p - 1$  :

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

6. Результат примем как гладкое приближение к решению:  $v_{new} = y^{2p-1}$ .  
Примеры применения приведенных алгоритмов даны в разделе 5.

#### 4.4 Решение грубосеточных уравнений

Для решения уравнений на самой грубой сетке

$$A_H \cdot y = g_H, \quad (33)$$

то есть системы уравнений с матрицей  $A_H$  и невязкой  $g_H$  в качестве правой части, используем чебышевский итерационный метод (24) с начальным приближением  $y^0 \equiv 0$ , так как уравнение (33) записывается для поправки. Границы  $0 < \lambda_{min}$  и  $\lambda_{max}$  спектра оператора  $A_H$  приближенно оценены в [1]. Условие  $0 < \lambda_{min}$  выполнено и для вырожденной задачи Неймана, так как в этом случае  $\lambda_{min}$  – минимальное собственное значение на подпространстве, ортогональном ядру. Число итераций  $p$  выбирается из условия достижения заданной точности  $\| r_p \| < tol \cdot \| r_0 \|$ , где  $r_0, r_p$  – начальная и конечная невязки. Оценка числа итераций  $p = p(\varepsilon)$  имеет вид (19) (см. также [4], [11]):

$$p(\varepsilon) \approx \ln \left( \varepsilon^{-1} + \sqrt{\varepsilon^{-2} - 1} \right) / \ln \rho_1, \quad \text{где } \rho_1 = \frac{1 + \sqrt{\xi}}{1 - \sqrt{\xi}}, \quad \xi = \frac{\lambda_{min}}{\lambda_{max}}. \quad (34)$$

#### 4.5 Уточнение нижних границ

Заметим, что в ходе многосеточных итераций можно проводить апостериорное уточнение нижней границы  $\lambda_{min}$  оператора  $A_H$  на самой грубой сетке, или, что более важно, можно уточнить границу раздела спектра  $\lambda_{min}^*$ , нужную для построения сглаживателя.

Пусть на этапе решения грубосеточных уравнений или на этапе сглаживания после  $p$  итераций для начальной и конечной невязок получено соотношение  $\delta = \| r_p \| / \| r_0 \|$ . Если  $\delta < 1$ , то для чебышевского итерационного метода, обращая формулы (34), находим

$$\lambda_{min}^* = \left( \frac{\varrho_1 - 1}{\varrho_1 + 1} \right)^2 \cdot \lambda_{max}, \quad \text{где } \varrho_1 = (\delta^{-1} + \sqrt{\delta^{-2} - 1})^{1/p}. \quad (35)$$

Аналогичное уточнение получается и для  $\lambda_{min}^*$  в случае чебышевского сглаживателя. Для сглаживателя ЛИ-М, используя (30) с  $\tau$  из (29), находим

$$\lambda_{min}^* = \frac{\pi^2}{16p^2} \cdot (\delta^{-1} - 1) \cdot \lambda_{max}. \quad (36)$$

Если  $\delta > 1$ , то полагаем  $\lambda_{min}^* = 0.1 \cdot \lambda_{max}$ .

Надежность такого уточнения оценок для построения сглаживателей не слишком велика, так как уточнения основываются на предположении, что в погрешности в основном преобладает негладкая компонента. После серии расчетов, в которых проверялись различные варианты уточнения оценок  $\lambda_{min}^*$ , мы становились на этой процедуре адаптации границы раздела  $\lambda_{min}^*$  в ходе многосеточных итераций. Процедура адаптации подробно приведена в следующем разделе вместе с результатами расчетов.

## 5 Примеры расчетов

Приведем примеры, показывающие работоспособность многосеточного метода для трехмерного уравнения диффузии при наличии анизотропии.

**Модельная задача 1: уравнение с постоянными коэффициентами**

$$A_1 u_{xx} + A_2 u_{yy} + A_3 u_{zz} = f(x, y, z), \quad (x, y, z) \in [0; 1]^3 \quad (37)$$

и краевыми условиями Дирихле или Неймана, для которых входные данные, как и правая часть  $f$ , определяются по одному из заданных решений:

$$u(x, y, z) = (\cos k_1 x + \cos k_2 x) \cdot (\cos m_1 y + \cos m_2 y) \cdot (\cos n_1 z + \cos n_2 z), \quad (38)$$

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

$$u(x, y, z) = x^2 + y^2, \quad (39)$$

или  $u(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ .

Сразу отметим, что при тестировании метода на задачах с точными решениями разного вида и при различных начальных приближениях заметной разницы в сходимости многосеточных итераций в расчетах не наблюдается, поэтому в представленных ниже расчетах для задания входных данных использована функция (39), если не оговорено противное.

В табл. 1 приводятся значения коэффициентов  $A_1, A_2, A_3$  и характеристика трудоемкости задач Дирихле и Неймана; можно взять в качестве такой характеристики число обусловленности, но мы для наглядности указываем число чебышевских итераций, затрачиваемых на решение с заданной точностью уравнений на подробной сетке. Отметим, что обусловленность задачи Дирихле практически одинакова для всех четырех вариантов, и стандартный чебышевский решатель успешно справляется с задачей Дирихле за относительно небольшое число итераций. Тем не менее для многосеточного метода эта задача в случаях 2 – 4 является трудной, так увеличение анизотропии в коэффициентах сдвигает границу раздела спектра  $\lambda_{min}^*$  влево, в сторону  $\lambda_{min}$ .

Вычислительные затраты для задачи Неймана и смешанной краевой задачи, когда на грани  $z = z_0$  задано условие Дирихле, а на остальных – условие Неймана, примерно одинаковы (в случае 4 обусловленность этих задач  $\simeq 3 \cdot 10^8$ ), но число итераций растет с ростом анизотропии, достигая 76 тысяч.

Табл. 1. Число чебышевских итераций, затрачиваемых на решение задачи на основной сетке из  $N = 128^3$  узлов с точностью  $tol = 10^{-7}$

Случай	$A_1$	$A_2$	$A_3$	Задача Дирихле	Задача Неймана
1	1	1	1	761	1318
2	100	1	1	761	7684
3	100	100	1	761	10780
4	10000	100	1	761	76463

В табл. 2 – 3 приводятся для указанных значений коэффициентов  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$  число многосеточных итераций  $m$ , суммарное число шагов пред- и пост-сглаживания  $\sum p$  (*Cheb*) или  $\sum p$  (*Lim*) (в отсутствие адаптации, о которой речь пойдет ниже, число шагов сглаживания на каждом сеточном уровне одно и то же). Скорость сходимости характеризуем двумя величинами

$$\rho = r_m/r_{m-1}, \quad \rho^* = \sqrt[m]{r_m/r_0}, \quad (40)$$

где  $r_m$ ,  $r_{m-1}$ ,  $r_0$  – сеточные нормы невязок на последней и предпоследней многосеточных итерациях соответственно,  $r_0$  – норма начальной невязки. Как правило, отношение норм невязок на двух последовательных итерациях стабилизируется в процессе итераций, что говорит о выходе на асимптотический режим. Поэтому  $\rho$  является основной характеристикой. Но иногда, при быстрой сходимости (малом числе итераций  $m$ ), или при наличии механизма изменения параметров сглаживания (адаптации), когда выход на асимптотический режим происходит после достижения заявленной точности, удобно приводить характеристику  $\rho^*$  (40) как среднюю скорость сходимости. В таблицах соответствующие числа отмечены звездочками. Достижение сходимости контролируется по условию  $r_m < tol \cdot r_0$  с заданной точностью ( $tol = 10^{-7}$  или другой указанной). Такого уменьшения невязки часто бывает достаточно для достижения относительной точности приближенных решений в пределах  $10^{-5} - 10^{-6}$ . 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, поэтому этот параметр не играет заметной роли; в приводимых расчетах  $ctol = 10^{-5}$ . Число сеточных уровней может варьироваться, но обычно 5 уровней достаточно для достижения эффективности и параллельной масштабируемости на сетках с числом узлов  $N \simeq 128^3 - 2048^3$ .

Табл. 2. Характеристики сходимости для задачи 1 с решением (39).  
Сетка  $128^3$  узлов, 5 уровней,  $tol = 10^{-7}$ , чебышевский сглаживатель

Случай	$A_1$	$A_2$	$A_3$	Задача Дирихле			Задача Неймана		
				$m$	$\sum p(Cheb)$	$\rho$	$m$	$\sum p(Cheb)$	$\rho$
1	1	1	1	9	36	0.16	8	32	0.15
2	100	1	1	10	200	0.20	10	200	0.20
3	100	100	1	11	286	0.24	10	280	0.21
4	10000	100	1	10	1020	0.22	11	2068	0.24
				<b>адаптация</b>			<b>адаптация</b>		
4 Варианты	10000	100	1			$\rho^*$			$\rho^*$
Вар.1				7	462	0.19*	10	1018	0.18*
Вар.2				14	692	0.29*	11	474	0.24*

Табл. 3. Характеристики сходимости для задачи 1 с решением (39).  
Сетка  $128^3$  узлов, 5 уровней,  $tol = 10^{-7}$ , сглаживатель ЛИ-М

Случай	$A_1$	$A_2$	$A_3$	Задача Дирихле			Задача Неймана		
				$m$	$\sum p$	$\rho$ или $\rho^*$	$m$	$\sum p$	$\rho$ или $\rho^*$
1	1	1	1	9	54	0.14	7	42	0.14
2	100	1	1	6	252	0.15	5	210	0.03*
3	100	100	1	6	348	0.13	5	290	0.03*
4	10000	100	1	3	714	0.003*	3	1338	0.003*
				<b>адаптация</b>			<b>адаптация</b>		
4 Варианты	10000	100	1			$\rho^*$			$\rho^*$
Вар.1				7	1038	0.25*	6	1472	0.06*
Вар.2				14	1260	0.25*	11	1198	0.20*

Объем вычислений для приводимых результатов можно оценить как  $V \simeq const \cdot N \cdot \sum p$ ,  $N$  – число узлов сетки,  $\sum p$  – суммарное число сглаживающих шагов на основной сетке в  $m$  итерациях многосеточного метода. Один шаг сглаживания примерно эквивалентен расчету невязки на подробной сетке. Именно сглаживание составляет основной объем вычислительных затрат ( $\simeq 90\%$ ), поэтому в таблицах приведен параметр  $\sum p$  в качестве характеристики трудоемкости. При расчете суммарного показателя  $\sum p$  для сглаживателя ЛИ-М учтено, что заданного  $p$  в процедуре  $LIM(p)$  число сглаживающих шагов  $\nu = 2p - 1$ . Во всех расчетах для определения числа шагов сглаживания  $p$  задан фактор сглаживания  $\varepsilon = 0.5$ . Убывание нормы невязки в сглаживающих итерациях (без адаптации) можно не контролировать. С точки зрения параллельного кода это некоторое достоинство, так как исключает глобальные операции расчета норм невязок. Реальные значения отношения норм невязок на последней  $p$ -ой и начальной сглаживающих итерациях на сеточных уровнях могут меняться (обычно от 0.1 до почти 1). Информацию о достигнутой реальной точности можно использовать для адаптации сглаживателей (см. раздел 4.3 и примеры расчетов ниже).

В расчетах могут возникать ситуации, когда при слабом сглаживателе делается большое число многосеточных итераций, и тогда заметно возрастают относительные затраты на решение грубосеточных уравнений и реализацию межсеточных переходов. Поэтому для диагностирования таких ситуаций в таблицах приводится число выполненных многосеточных итераций (параметр  $m$ ). Как видно из представленных в таблицах 2 и 3 результатов, число многосеточных итераций при использовании вычислительно-интенсивных сглаживателей получается небольшим. Это значит, что с точки зрения эффективности, и в особенности параллельной эффективности, построенные чебышевские сглаживатели являются очень удачными.

В качестве примера смешанной краевой задачи рассмотрим существенно анизотропный случай 4 с  $A_1 = 10000$ ,  $A_2 = 100$ ,  $A_3 = 1$  и зададим на пяти гранях условие Неймана, а на грани  $z = 0$  – условие Дирихле. В этом случае результаты практически совпадают с характеристиками сходимости задачи Неймана (см. соответствующие строки в таблицах 2 и 3 для обоих сглаживателей – чебышевского и ЛИ-М),

Как уже говорилось, при решении с заданной точностью указанной задачи стандартным чебышевским методом на сетке  $128^3$  требуется 76 тысяч итераций (см. табл. 1); многосеточный метод в этой и других рассмотренных задачах дает многократное ускорение (15 – 50 раз).

Обсудим таблицы более детально. Рассмотрим сначала изотропный случай:  $A_1 = A_2 = A_3 = 1$ . В этом случае чебышевский и ЛИ-М сглаживатели



обеспечивают (см. первую строку табл. 2 и 3) скорость сходимости  $\rho \approx 0.16$ . Отметим, что достигнутая скорость близка к асимптотической: при увеличении точности до  $10^{-13}$  получаем  $\rho \approx 0.18$ . Это лучше, чем теоретическая скорость [6]  $\rho = 0.198$ , приведенная в первой строке табл. 4, полученная для многосеточного метода с двумя шагами точечной релаксации. Напомним, фактор сглаживания задан как  $\varepsilon = 0.5$ , но в данном изотропном случае операция определения целого  $p$  из условия (19) в действительности его переопределяет:  $\varepsilon_{fact} = 0.35$ . Это, в частности, видно на рис. 1, где показан график многочлена Чебышева при  $p = 2$ . На этом рисунке и аналогичных рис. 2 – 4 по оси абсцисс отложен спектральный отрезок  $[0, \lambda_{max} \cdot h^2]$ . Нормированная верхняя граница спектра равна 12; ниже мы сохраним за этой величиной прежнее обозначение  $\lambda_{max}$ . По оси ординат отложены значения функции затухания  $\rho_{Cheb}(\lambda)$  и  $\rho_{Lim}(\lambda)$  (см. формулы (25) и (29)). При идеализации предполагается, что для двухсеточного представления (12) грубосеточная коррекция является точной и после интерполяции в приближенном решении не появляются низкочастотные компоненты. Тогда фактор сглаживания  $\varepsilon_{fact} = 0.35$  определяет скорость сходимости многосеточного метода, то есть в идеале имеем  $\rho = \varepsilon_{fact}^2 \approx 0.12$  вместо фактической скорости  $\rho \approx 0.16 \div 0.18$ . В данном изотропном случае сглаживатель ЛИ-М в полтора раза дороже чебышевского сглаживателя, так как для достижения указанной скорости для ЛИ-М требуется задать  $p = 2$ , что соответствует трем чебышевским итерациям, см. рис. 2. Из этого рисунка видно, что при трех шагах сглаживания для ЛИ-М фактор сглаживания  $\varepsilon_{fact} = 0.35$ , а для чебышевского – в два раза лучше.

При наличии слабой анизотропии (см. строки 2, 3 в табл. 2 и 3) сглаживатель ЛИ-М уступает чебышевскому сглаживателю, но при сильной анизотропии (см. строку 4 в табл. 2 и 3), сглаживатель ЛИ-М показывает лучший результат. Кроме того, для параллельной реализации важно сокращение числа многосеточных итераций, приводящее к сокращению числа глобальных операций расчета норм невязки, поэтому ЛИ-М является сглаживателем, перспективным для ультрапараллельных вычислений.

Убывание невязки в процессе многосеточных итераций на первых итерациях обычно происходит быстрее (и зависит от задачи), чем при выходе на асимптотический режим, поэтому при одной и той же асимптотической скорости сходимости число сделанных итераций может быть различно.

**Сглаживатели с адаптацией.** Адаптация основана простых соображениях, позволяющих уточнять на каждом сеточном уровне границу спектра  $\lambda_{min}^*$  и число итераций сглаживания  $p$  ходе многосеточных итераций. Мы находим на каждой многосеточной итерации новое уточненное значение относи-

тельной границы  $\eta = \lambda_{min}^*/\lambda_{max}$ . Пусть до начала расчета задано начальное приближение  $\eta_{init}$ . Мы задаемся желаемой скоростью сходимости многосеточных итераций  $\rho^0$ ; в приводимых расчетах  $\rho^0 = \varepsilon^2 = 0.25$ , где  $\varepsilon = 0.5$  – заданный фактор сглаживания.

Процедуру адаптации можно ввести с помощью анализа отношения  $\rho$  норм невязок на двух последовательных многосеточных итерациях. Величина  $\rho$  является объективным критерием качества сглаживания, и ее анализ может снизить затраты на адаптацию. Но в данной работе мы не будем оптимизировать саму процедуру адаптации, и будем применять адаптацию на каждой итерации многосеточного метода, независимо от значения  $\rho$ .

Определим алгоритм адаптации на основе достигнутых значений факторов сглаживания  $\delta = \|r_p\| / \|r_0\|$  – отношения норм начальной и конечной невязок после  $p$  шагов сглаживания на этапах пре- и пост-сглаживания на каждом сеточном уровне, включая основную сетку. По значениям  $\delta_{pre}$  и  $\delta_{post}$  находим для каждого сеточного уровня единое значение

$$\delta = \sqrt{\delta_{pre} \cdot \delta_{post}}. \quad (41)$$

Используя это значение  $\delta$ , по формулам (35) или (36) в зависимости от вида сглаживателя, находим уточненную границу раздела спектра, новое число шагов сглаживания  $p$  (чебышевских итераций) и новый набор чебышевских параметров. Полученные параметры сглаживателей используются на каждом сеточном уровне на этапах пред- и пост-сглаживания. Это не означает, что уже на следующей многосеточной итерации будут достигнуты желаемые значения  $\rho \approx \varepsilon^2$  и заданный фактор сглаживания; адаптация есть итерационная процедура, служащая для постепенного уточнения параметров сглаживания. Расчеты подтверждают, что обычно после нескольких первых многосеточных итераций происходит выход на режим  $\delta \approx \varepsilon$  и  $\rho \leq \varepsilon^2$ . Как вариант, вместо величины (41) можно взять  $\delta = \max(\delta_{pre}, \delta_{post})$ .

В расчетах модельных задач рассмотрены два варианта выбора начального значения  $\eta_{init}$  относительной границы раздела спектра:

- вариант 1:  $\eta_{init}$  берется из оценки (18).
- вариант 2:  $\eta_{init} = 1/6$  – значение, типичное для изотропного случая.

Для некоторых расчетов в варианте 1 начальное значение  $\eta_{init}$  из-за грубости определения обеспечивает сверхбыструю сходимость многосеточных итераций без адаптации, например, за одну итерацию. В таком случае для проверки работоспособности адаптации мы выбираем новое начальное значение  $\eta_{init}$  (с указанием при описании расчета) вместо значения из оценки (15).

Для модельной задачи 1 в случае сильной анизотропии  $A_1 = 10000$ ,  $A_2 = 100$ ,  $A_3 = 1$  в последних строчках табл. 2 приведены результаты расчетов для указанных вариантов (отмечены как Вар.1 и Вар.2 соответственно). В случае задачи Дирихле для варианта 1 начальное значение  $\eta_{init} \approx 0.17 \cdot 10^{-3}$  определяет на первой многосеточной итерации определяет  $p = 51$ ; на последней многосеточной итерации адаптация дает значения  $\eta_{fin} = 0.21 \cdot 10^{-3}$  и  $p = 46$ .

Для варианта 2 начальное значение  $\eta_{init} = 1/6$  определяет на первой многосеточной итерации значение  $p = 2$ ; на последней многосеточной итерации адаптация дает значения  $\eta_{fin} = 0.21 \cdot 10^{-3}$  и  $p = 46$ . Полученные в двух вариантах конечные значения  $\eta_{fin}$  и  $p$  совпадают, так как они основаны в данной задаче на достаточно точных оценках спектра оператора (ввиду расщепления по направлениям).

Аналогичные результаты получаем и в случае задачи Неймана. Для варианта 1 начальное значение  $\eta_{init} \approx 0.49 \cdot 10^{-4}$  определяет на первой многосеточной итерации число шагов сглаживания  $p = 94$ ; на последней  $\eta_{fin} \approx 0.64 \cdot 10^{-4}$  и  $p = 83$ . Для варианта 2 при начальном значении  $\eta_{init} = 1/6$  относительной границы раздела спектра на первой и последней многосеточных итерациях получаем соответственно  $p = 2$  и  $p = 69$  ( $\eta_{fin} \approx 0.93 \cdot 10^{-4}$ ). То есть, при старте с разных начальных приближений адаптация приводит к достаточно близким значениям параметров сглаживателя.

Адаптация построена на простых соображениях: в идеальном двухсеточном методе скорость сходимости есть  $\varepsilon^2$ ; в изотропном случае ( $A_1 = A_2 = A_3 = 1$ ) расчеты с адаптацией и без нее практически совпадают. В этом случае при включении адаптации величина  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/6$  незначительно изменяется (получается  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/5$ ), а число шагов сглаживания остается неизменным,  $p = 2$ . Переход от изначально заданного значения  $\lambda_{min}^*$  к близкому, но другому значению соответствует достигнутой скорости сходимости многосеточного метода  $\rho = 0.16$  (см. первую строку табл. 2). Это значение лучше, чем идеализированное  $\rho = \varepsilon^2 = 0.25$ , так как сглаживатели в ходе многосеточных итераций уменьшают не только высокочастотную ошибку.

В анизотропном случае, как показано в последних двух строках табл. 2, адаптация уменьшает число шагов чебышевского сглаживателя, расчет ускоряется в полтора-два раза. Сглаживатель ЛИ-М для данных задач (см. табл. 3) сверхэффективен, сходимость обеспечивается за несколько многосеточных итераций, адаптация не требуется. Ее применение приводит к увеличению числа многосеточных итераций, так как адаптация работает в сторону увеличения фактора сглаживания.

Приведем результаты теоретического исследования с помощью анализа Фурье сходимости многосеточного метода в двухсеточном представлении,

взяты из [6]. В табл. 4 показана эффективность некоторых сглаживателей: приведена скорость сходимости двухсеточных итераций  $\rho$ , то есть норма итерирующего оператора (12). Предполагается, что на подробной сетке выполняются два шага сглаживания, оператор на грубой сетке обращается точно, оператор  $P$  – трилинейная интерполяция, оператор проектирования ему сопряжен,  $R = P^*$ . В качестве сглаживателей рассмотрены методы точечной и групповой релаксации, то есть точечный и блочный методы Гаусса-Зейделя.

Табл. 4. Теоретические характеристики сходимости для задачи 1.  
два сглаживающих шага на подробной сетке

Случай	$A_1$	$A_2$	$A_3$	Тип релаксации	$\rho$
1	1	1	1	точечная	0.198
2	100	1	1	точечная	0.961
3	100	100	1	х-линейная	0.074
				точечная	0.980
4	10000	100	1	попеременная	
				х-/у-линейная	0.938
				(х,у)-групповая	0.052
				точечная	1.0
				х-линейная	0.961
				(х,у)-групповая	0.052

В этих методах использована специальная нумерация неизвестных: черно-белое  $3D$  упорядочивание для точечной релаксации, черно-белое  $2D$  упорядочивание линий для линейной релаксации, черно-белое  $1D$  упорядочивание плоскостей для  $(x, y)$ -групповой релаксации. Предполагается, что расчет неизвестных в группах делается точно; для линейной релаксации это легко делается прогонкой, для реализации  $(x, y)$ -релаксации для каждой плоскости точно решается система  $2D$  разностных уравнений. Из табл. 4 следует, что для анизотропных случаев 3 и 4 только использование групповой  $(x, y)$ -релаксации обеспечивает хорошую скорость сходимости. Использование попеременной линейной релаксации, то есть продольно-поперечной прогонки, не приводит к хорошей сходимости. Это значит, что для общего  $3D$  случая не годится прогонка, попеременная по трем направлениям, а нужно реализовать релаксацию по плоскостям  $(x, y)$ ,  $(y, z)$  и  $(x, z)$  попеременно. Конечно, для каждой плоскости не нужно точно решать систему  $2D$  разностных уравнений. Рекомендуют, например, использовать одну итерацию  $2D$  много-

сеточного метода. С учетом пожелания симметризации релаксации (чтобы итерирующий оператор был симметричным) такой подход следует признать не очень удобным для параллельной реализации.

Анализируя представленные в таблицах результаты, можем заключить, что предложенные нами оба сглаживателя – чебышевский и ЛИ-М – обеспечивают эффективность многосеточного метода. В случае 4 хороший результат дает использование для сглаживания ЛИ-М: этот сглаживатель в данном случае не требует адаптации и оказывается эффективней чебышевских итераций особенно с точки зрения сокращения числа многосеточных итераций.

Дадим содержательное объяснение этому факту. В анизотропной задаче трудно указать границу раздела спектра. Мы такую границу указываем эмпирически (см. раздел 4.3). Чебышевские итерации гасят высокочастотные компоненты невязки в заданное число раз, например, в 2 раза, равномерно на высокочастотном участке спектра, а сглаживатель ЛИ-М гасит компоненты невязки в соответствии с формулой (29) для спектра сглаживающего оператора (26), то есть в данном случае в 2 раза на левом конце высокочастотного участка и не менее чем в  $\pi^2/(16p^2) \approx 0.6/p^2$  раз на его правом конце, см. (32). Подчеркнем, что здесь приведена оценка сверху: как следует из графиков спектра сглаживателей (см. рис. 2 – 4) фактическая скорость еще выше.

Для подтверждения рассмотрим изотропную задачу 1 с решением (38); результаты расчетов представлены в первой строке табл. 3; сетка  $128^3$ , 5 уровней,  $tol = 10^{-7}$ , задача Дирихле. Чебышевский сглаживатель в этом расчете показывает лучшую эффективность, чем ЛИ-М; здесь нижняя граница высокочастотной части спектра выбрана как  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/6$ . Изменим задачу следующим образом. Выберем  $p = 3$  для чебышевского сглаживателя и  $p = 2$  для ЛИ-М; тогда вычислительные затраты одинаковы, так как для ЛИ-М они пропорциональны числу  $\nu = 2p - 1$ . Графики спектров сглаживающих операторов как непрерывные функции спектрального параметра  $\lambda$  изображены на рис. 2 – 4 с обозначениями *Cheb*(3) и *LIM*(3).

На рис. 2 показаны спектры сглаживающих операторов, когда граница высокочастотной части угадана верно:  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/6 = 2$ . Оба сглаживателя эффективны и гасят высокочастотные компоненты почти одинаково. Это подтверждается расчетами: число многосеточных итераций  $m$  и скорость сходимости составляют для чебышевского и ЛИ-М сглаживателей соответственно  $m = 7$ ,  $\rho = 0.119$ , и  $m = 8$ ,  $\rho = 0.156$  при одинаковом времени счета.

На рис. 3 показаны спектры сглаживающих операторов, когда граница высокочастотной части 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 лежит в верхней полуплоскости,

так как в силу (30) спектр этого сглаживателя неотрицательный. Отметим также, что на отрезке  $[0.6; 1]$  график лежит выше заданного порога 0.5, но на истинной высокочастотной части он лежит ниже уровня 0.3, то есть обеспечивает убывание высокочастотных компонент в три раза вместо двух раз. На отрезке  $[3; 12]$  график лежит ниже уровня 0.2. Расчет в случае чебышевского сглаживателя дает:  $m = 10$ ,  $\rho = 0.247$ , то есть эффективность многосеточного метода ухудшилась по сравнению со случаем, когда граница высокочастотной части угадана верно. Результаты расчета со сглаживателем ЛИ-М не изменились.

На рис. 4 приведены спектры операторов сглаживания, когда граница высокочастотной части завышена:  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/1.5 = 8$ . Расчет в случае чебышевского сглаживателя с  $p = 3$ :  $m = 12$ ,  $\rho = 0.254$ , то есть эффективность многосеточного метода уменьшилась. Расчет со сглаживателем ЛИ-М при  $p = 2$  дает практически прежние результаты  $m = 9$ ,  $\rho = 0.157$ .

Отсюда следует важный вывод: эффективность ЛИ-М не зависит явно от нижней границы высокочастотной 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 степени  $p$  без участия  $\lambda_{min}^*$ , а затем определяется сам оператор сглаживания (26) в виде достаточно простого явно-итерационного алгоритма (см. раздел 4.3), который оказывается достаточно эффективным и мало чувствительным к ошибке в определении нижней границы высокочастотной части спектра. В дополнение к сказанному на рис. 5 приведен график спектра оператора сглаживания ЛИ-М, когда граница высокочастотной части выбрана как  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/40$ , а  $\varepsilon = 0.5$ . Такие данные определяют для сглаживателя ЛИ-М значение  $p = 4$ , что эквивалентно 7 шагов сглаживания. График чебышевского полиномиального сглаживателя для  $p = 7$  нанесен на рис. 5 пунктиром. Расчет в случае чебышевского сглаживателя с  $p = 3$ :  $m = 12$ ,  $\rho = 0.254$ , то есть эффективность многосеточного метода уменьшилась. Расчет со сглаживателем ЛИ-М при  $p = 2$  дает практически прежние результаты  $m = 9$ ,  $\rho = 0.157$ .

Приведем результаты параллельных расчетов для задачи 1 в случае самой сильной анизотропии  $A_1 = 10000$ ,  $A_2 = 100$ ,  $A_3 = 1$ ; в табл. 5 приведено время решения задачи Неймана на разном числе процессоров с чебышевским сглаживателем с адаптацией и без адаптации. Расчет без адаптации выполнен в соответствии с вариантом 1 задания границы раздела спектра: для данной задачи эта граница известна весьма точно. Всего выполнено 11 многосеточных итераций; чебышевский сглаживатель на каждом сеточном уровне на каждом из этапов пред- и пост-сглаживания требовал 94 шага. Полное число сглаживающих шагов на подробной сетке составило  $94 \times 2 \times 11 = 2068$ .

Табл. 5. Время счета (сек.); сетка  $512^3$  узлов, 5 уровней,  $tol = 10^{-7}$ , чебышевский сглаживатель с адаптацией и без

Число процессоров	Чеб. сглаживатель без адаптации Вариант 1	Чеб. сглаживатель с адаптацией Вариант 2
1	4704	1047
8	866	189
64	112	26

Расчет с адаптацией выполнен в соответствии с вариантом 2: начальная граница раздела спектра на две части – низкочастотную и высокочастотную – взята как для изотропной задачи. Всего выполнено 10 многосеточных итераций. Полное число сглаживающих шагов на подробной сетке составило 352 и изменялось от 2 до 86; разброс числа шагов на по сеточным уровням составлял от 1 до 50%

**Практическая масштабируемость.** Для сеток с числом узлов  $128^3$ ,  $256^3$ ,  $512^3$ ,  $1024^3$  и  $2048^3$  в табл. 6 приведены результаты решения задачи Неймана с сильной анизотропией  $A_1 = 10000$ ,  $A_2 = 100$ ,  $A_3 = 1$  на 64 процессорах суперкомпьютера ИПМ К-100. В таблице приведены результаты расчета с чебышевским сглаживателем без адаптации (вариант1 – при задании фиксированной границы раздела спектра в соответствии с ее априорной оценкой) и с адаптацией (вариант 2 – при задании начальной границы раздела спектра как для изотропной задачи).

Табл. 6. Время счета (сек.) на 64 процессорах; сетка  $128^3 - 2048^3$  узлов, 5 уровней,  $tol = 10^{-7}$ , чебышевский сглаживатель с адаптацией и без

Число узлов	Чеб. сглаживатель без адаптации Вариант 1	Чеб. сглаживатель с адаптацией Вариант 2
$128^3$	2.3	1
$256^3$	23	8
$512^3$	191	42
$1024^3$	1500	356
$2048^3$	14190	3517

Из таблицы следует, что адаптация сокращает время расчета в несколько раз. Эти результаты графически представлены на рис. 6; для сравнения там же приведены результаты решения изотропной задачи. На этом рисунке 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 масштаба по оси ординат – время расчета на первой сетке. Последняя сетка содержит почти 10 млрд. узлов и в 4096 больше первой сетки. Для сравнения на этом же рисунке приведены результаты для изотропного случая (пунктир). Время счета на последней сетке составляет 236 мин., 58 мин., 9 мин. соответственно для расчета анизотропной задачи с адаптацией, без адаптации и изотропной задачи, т.е. примерно  $10^{-6}$  сек.,  $4 \cdot 10^{-6}$  сек.,  $6 \cdot 10^{-8}$  сек. на один узел.

В табл. 5 и 6 указано время расчета, а не оценка числа затрат по совокупному числу сглаживающих итераций, как приведено в таблицах 1 – 3. Время расчета является не очень точным показателем, так как оно зависит от объема памяти, доступной параллельному процессу. Например, для сетки с  $512^3$  узлами время счета составляет 81, 192, 228, 258 секунд соответственно при задании 2, 4, 8, 10 ядер, составляющих один узел суперкомпьютера К-100.

Представленные результаты показывают, что точность решения разностных уравнений достигается за небольшое число многосеточных итераций независимо от размера сетки. Это значит, что присущая многосеточному методу алгоритмическая масштабируемость наследуется компьютерным кодом. Параллельная масштабируемость достигается и при использовании большого числа процессоров. Например, при расчете изотропной задачи на суперкомпьютере МГУ “Ломоносов” с сеткой из  $1024^3$  узлов на 64, 512 и 4096 процессорах время счета составляет 30 сек., 3.2 сек. и 0.5 сек, то есть расчет ускоряется почти прямо пропорционально числу процессоров. И, конечно, результаты расчетов на разном числе процессоров идентичны, что трудно обеспечить, если использовать сглаживатели типа Гаусса-Зейделя.

## 6 Заключение

Показано, что многосеточный метод Р.П. Федоренко может быть использован для решения эллиптических уравнений с краевыми условиями общего вида при наличии сильной анизотропии на параллельных многопроцессорных системах с распределенной памятью. Вместо классических сглаживателей типа Гаусса-Зейделя, малоэффективных для данного класса задач и неудобных для реализации на ультрапараллельных компьютерах, предло-



жены вычислительно-интенсивные высокопараллельные сглаживатели, основанные на многочленах Чебышева. Первый сглаживатель – вариант стандартного чебышевского итерационного метода с заданием границы, разделяющей низкочастотную и высокочастотную части спектра оператора. Он также используется для решения уравнений на самой грубой сетке при соответствующем задании входных параметров (требуемой точности и границ спектра грубосеточного оператора). Второй сглаживатель представляет собой специальный вариант явных чебышевских итераций, но в отличие от первого сглаживателя является не многочленом, а дробно-рациональной функцией исходного оператора.

В серии расчетов для анизотропных задач показана эффективность многосеточного метода при использовании построенных сглаживателей. Предложены эмпирические количественные критерии анизотропии и алгоритмы адаптации сглаживателей к анизотропии в процессе выполнения многосеточных итераций. Построенные сглаживатели являются логически простыми, допускают любую степень параллелизма и обеспечивают естественную масштабируемость многосеточного метода. Результаты расчетов подтверждают справедливость этих выводов.

Практическое подтверждение эффективности рассмотренного подхода получено и в расчетных экспериментах на существенно неравномерных сетках, а также при решении задач с разрывными коэффициентами. Детальное представление вышеуказанных результатов будет дано в последующих работах.

Предложенный подход может быть обобщен на произвольные сеточные аппроксимации эллиптических уравнений, в том числе на неструктурных сетках, а чебышевские сглаживающие процедуры могут быть использованы в реализациях алгебраического многосеточного метода.

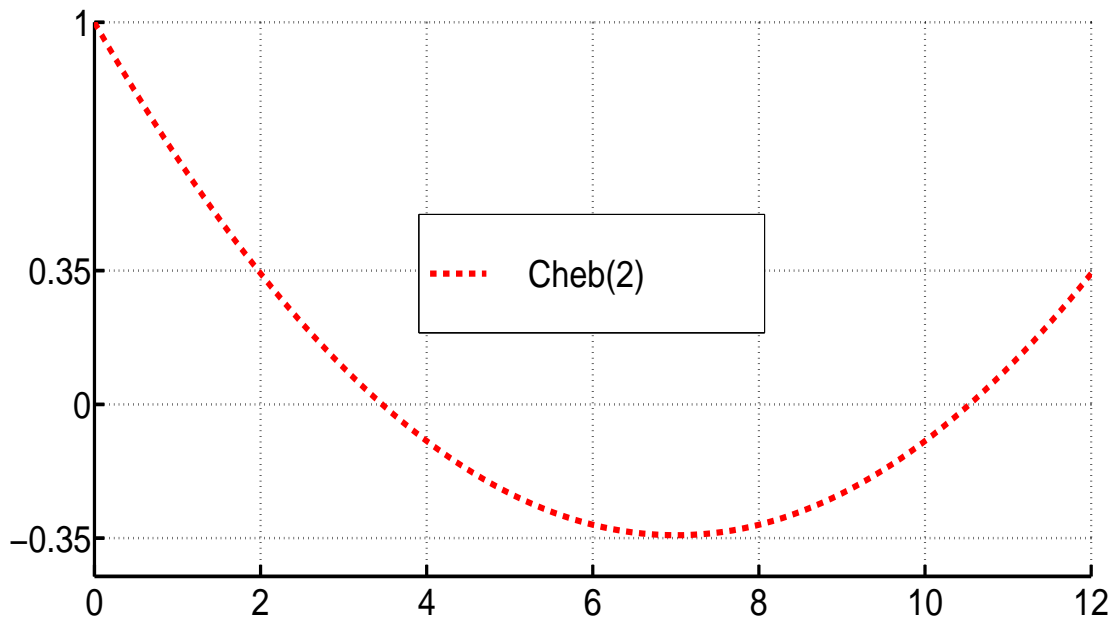


Рис. 1: Чебышевский сглаживатель при  $p = 2$ ;  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/6$

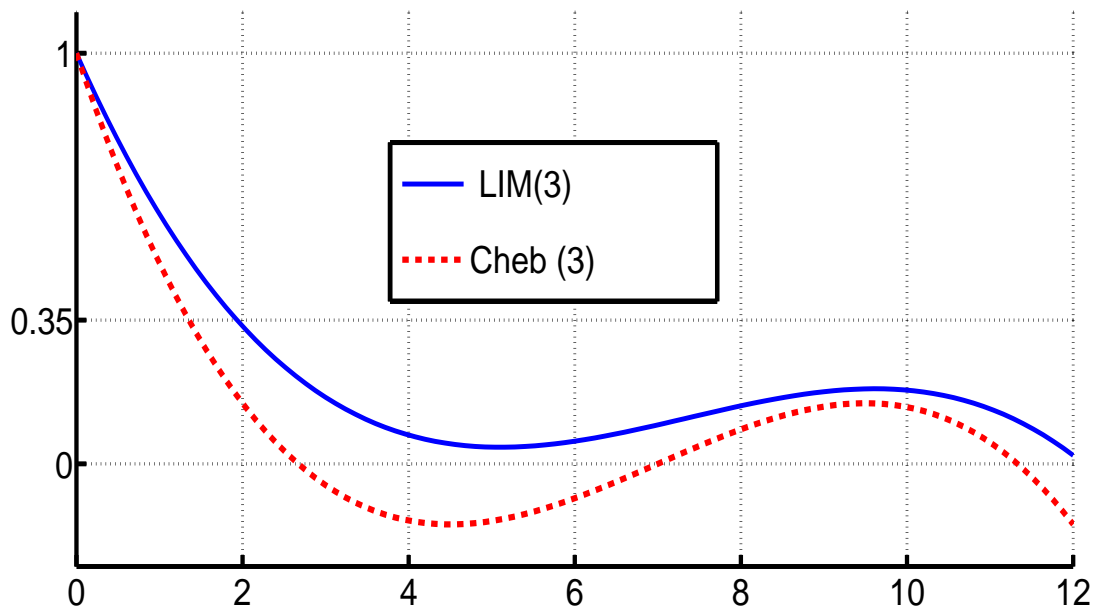


Рис. 2: Чебышевский и ЛИ-М сглаживатели;  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/6$

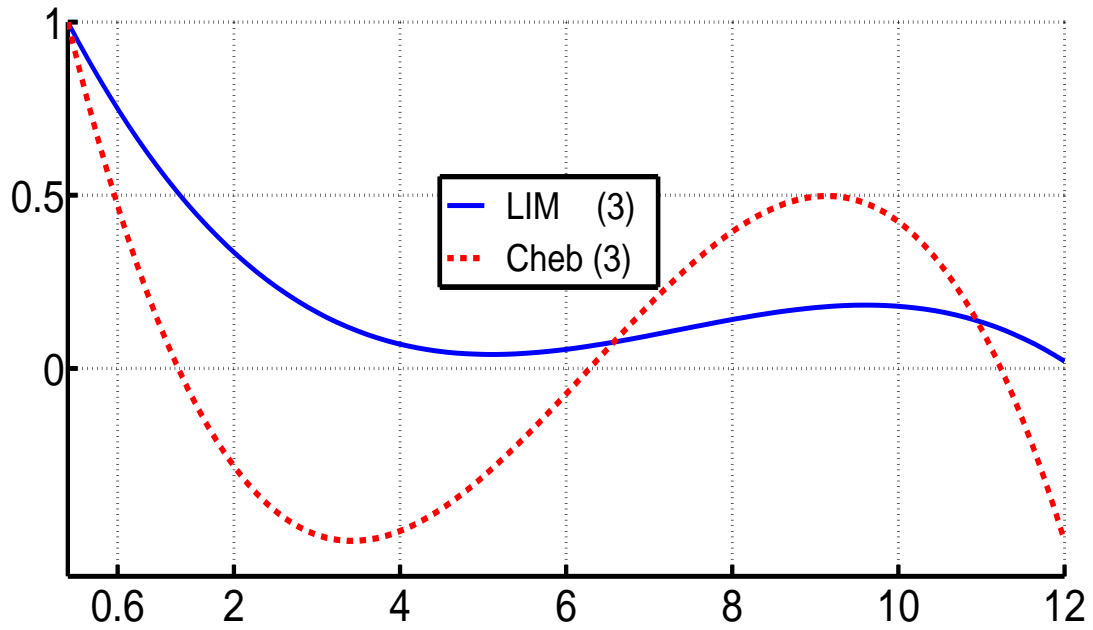


Рис. 3: Чебышевский и ЛИ-М сглаживатели;  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/20$

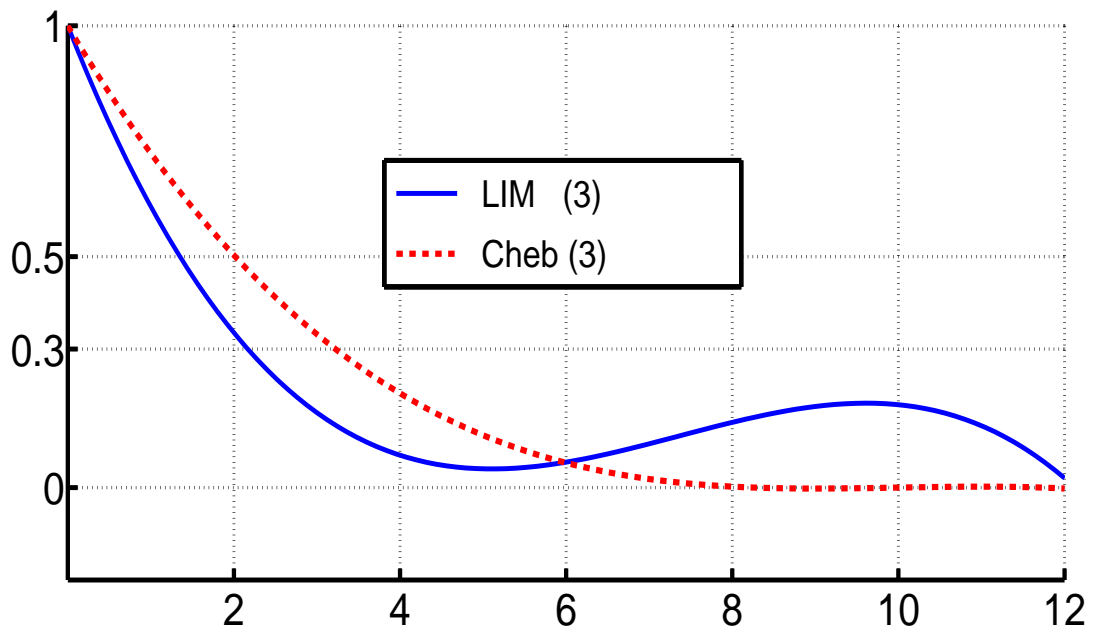


Рис. 4: Чебышевский и ЛИ-М сглаживатели;  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/1.5$

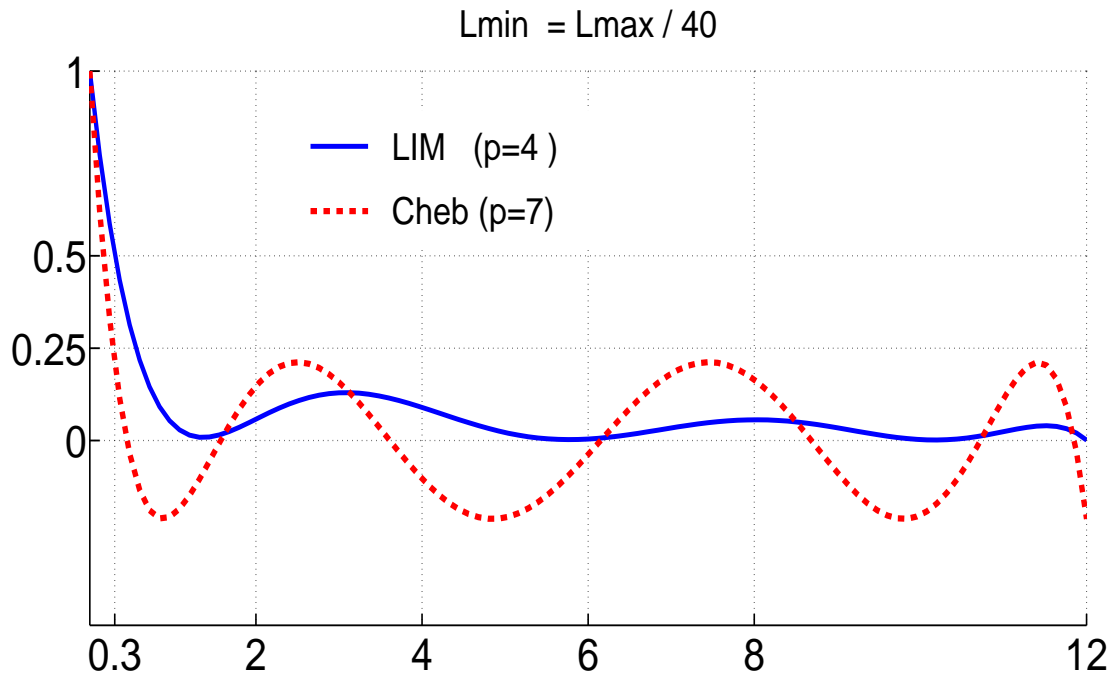


Рис. 5: Эквивалентные по вычислительным затратам сглаживатели: чебышевский ( $p = 7$ ) и ЛИ-М ( $p = 4$ ) сглаживатели;  $\lambda_{min}^* = \lambda_{max}/40$

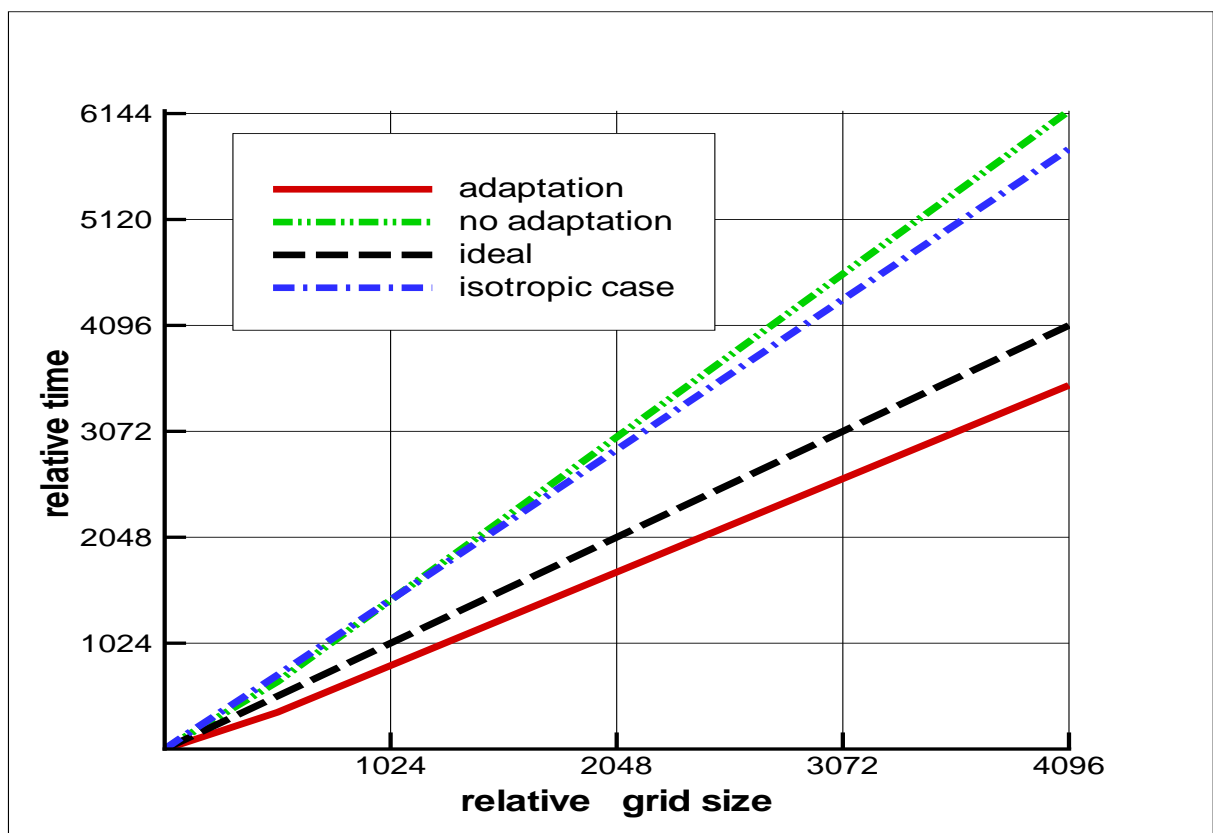


Рис. 6: Практическая масштабируемость в случае анизотропии  $A_1 = 10000$ ,  $A_2 = 100$ ,  $A_3 = 1$  для 64 процессоров

## Список литературы

- [1] *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 РАН. 2012. № 30. 32 с.  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-30>
- [2] *Федоренко Р.П.* Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1:5 (1961), с. 922–927.
- [3] *Федоренко Р.П.* Введение в вычислительную физику. - М.: МФТИ, 1994, 528 с.
- [4] *Федоренко Р.П.* Итерационные методы решения разностных эллиптических уравнений // Успехи математических наук, 1973, т. XXVIII, вып. 2(170), с.129-195.
- [5] *Жуков В.Т., Феодоритова О.Б.* Многосеточный метод решения эллиптических уравнений с использованием чебышевских итераций // Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша РАН. 1996. № 16, 20 с.  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=1996-16>
- [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, т.22, №10, 2010, 127-158.
- [8] *Локуцкий В.О., Локуцкий 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, т.16, №7, 2004, 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
- [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] *Натансон И. П.* Конструктивная теория функций. - М.-Л.: ГИТТЛ, 1949, 688 с.