

УДК 519.63

НЕКОТОРЫЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ И ПАРАБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ НА ЛОКАЛЬНО ИЗМЕЛЬЧАЮЩИХСЯ СЕТКАХ

О. Ю. Милукова, В. Ф. Тишкин
(ИММ РАН)

Построена неявная разностная схема для решения уравнения теплопроводности на локально измельчающихся сетках в прямоугольной области расчета. Для решения системы уравнений, получающейся в результате аппроксимации краевых задач для эллиптического и параболического уравнений, используются методы сопряженных градиентов с предобуславливанием, являющимся вариантом неполного разложения Холецкого или модифицированного неполного разложения Холецкого. Предлагаются параллельные варианты рассматриваемых методов для решения задачи на параллельной вычислительной технике MIMD-архитектуры. С помощью расчетов модельных задач на умеренном числе процессоров исследуется скорость сходимости и эффективность предложенных методов.

Введение

В последнее время все большее значение для повышения точности численного решения, эффективности численных алгоритмов, позволяющих на порядки сокращать компьютерные затраты времени и используемой памяти, приобретают методы адаптивных сеток. Эти подходы становятся особенно необходимы в расчетах газовой динамики с относительно небольшими размерами таких элементов потока, как тонкие пограничные слои при больших числах Рейнольдса, контактные разрывы, скачки уплотнения. Размеры этих газодинамических структур могут в десятки, сотни и даже тысячи раз отличаться от характерных размеров задачи. Для расчета таких течений используют динамически адаптивные сетки, которые, как правило, локально сгущаются в местах расположения газодинамических особенностей. В случае использования локально измельчающихся сеток [1] осуществляется "встраивание" дополнительных ячеек в те зоны расчетной области, где наблюдается превышение перепадов плотности по отношению к заданному уровню. Ячейки начального уровня сетки (в настоящей работе прямоугольные) называют ячейками первого уровня. Дополнительные ячейки каждого следующего уровня создаются путем разбиения исходной ячейки, в которой требуется повысить точность, на четыре более мелкие ячейки.

При численном решении системы уравнений газовой динамики обычно используются явные разностные схемы. Параллельная реализация расчетов с использованием явной разностной схемы рассмотрена в работах [2, 3]. Для увеличения временного шага, а следовательно, сокращения времени счета всей задачи целесообразно использовать неявные разностные схемы прежде всего для определения температуры из уравнения энергии, что приводит к необходимости решения систем линейных уравнений с сильно разреженной симметричной положительно определенной матрицей. К решению систем уравнений такого вида приходится прибегать также при численном решении краевых задач для эллиптических уравнений второго порядка.

Для решения систем уравнений с симметричной положительно определенной матрицей часто используется метод сопряженных градиентов с предобуславливанием неполного разложения Холецкого (метод ICCG(0)) [4, 5], а также его модифицированного варианта (метод MICCG(0)) [6], метод

приближенной факторизации сопряженных градиентов (MAFCG) [7], метод неполного разложения Холецкого с релаксацией (RICCG) [8] и его различные модификации.

Распараллеливание алгоритма предобусловленного метода сопряженных градиентов, основанное на декомпозиции области, сталкивается с рядом трудностей, связанных прежде всего с рекурсивным характером вычислений при обращении матрицы предобусловливания [9–11]. В работах [10–12] предложены эффективные параллельные варианты методов ICCG(0), MICCG(0), DRICCG (динамической версии [13] метода RICCG) для решения краевых задач для эллиптических уравнений на равномерной ортогональной сетке, основанные на использовании стратегии упорядочения узлов сетки [14, 5].

В настоящей работе рассматривается численное решение двумерных краевых задач для эллиптического уравнения второго порядка

$$\sum_{\alpha=1,2} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \kappa \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} - du = -\psi(x_1, x_2) \quad (1)$$

и двумерных краевых задач для уравнения теплопроводности

$$c\nu \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div} \kappa \operatorname{grad} T \quad (2)$$

с использованием неявной разностной схемы. В уравнениях (1), (2) $\kappa(x_1, x_2) \geq c_1 > 0$; $d(x_1, x_2) \geq 0$; $c\nu > 0$. Для численного решения этих задач в прямоугольной области расчета, не сильно вытянутой в одном пространственном направлении, построены разностные схемы на локально измельчающихся сетках на основе прямоугольных элементов, удовлетворяющие требованию самосопряженности получившегося оператора. Для решения полученной системы уравнений с симметричной положительно определенной матрицей используются итерационные методы VICCG, VMICCG [5, 15] (варианты методов ICCG(0), MICCG(0)). Предложена модификация определения матрицы предобусловливания метода VICCG для случая численного решения уравнения теплопроводности с резко меняющимся коэффициентом теплопроводности.

В работе предложены параллельные варианты методов VICCG, VMICCG для решения дискретных эллиптических и параболических уравнений на параллельной вычислительной системе с распределенной памятью, теоретически обоснована их сходимость. Параллельные варианты методов базируются на стратегии переупорядочения узлов сетки [14, 5], используются упорядочения узлов сетки типа *Domain Decomposition ordering*, т. е. упорядочения, связанные с разбиением области расчета. В параллельном варианте метода VMICCG используются параметры, полученные для случая решения эллиптических уравнений на ортогональных равномерных сетках [10, 11].

С помощью расчетов модельных задач на умеренном числе процессоров параллельной вычислительной системы МВС 1000М исследуется скорость сходимости и эффективность предложенных методов. Производится сравнение предложенных методов с методом сопряженных градиентов с диагональным предобусловливанием [16].

Заметим, что метод VICCG с предложенным в статье способом модификации определения матрицы предобусловливания был использован для численного исследования неустойчивости в плазме на контактной границе.

Неявная разностная схема для решения уравнения теплопроводности на локально измельчающихся сетках

Для численного решения задач (2) в области расчета построены разностные схемы на локально измельчающихся сетках на основе прямоугольных элементов, удовлетворяющие требованию самосопряженности получившегося оператора. Узлы разностной сетки располагаются в центрах ячеек. Построение разностной схемы проводится методом опорных операторов [17], при этом опорным оператором является оператор grad , а определяемым — оператор div . Шаблон разностного оператора — различный в разных узлах разностной сетки и зависит от уровня соседних узлов сетки в иерархической последовательности сеток (в рассматриваемом случае на основе прямоугольных ячеек). Накладываются следующие ограничения:

- 1) каждая ячейка не может иметь соседей на два уровня выше или ниже;
- 2) каждая ячейка не может быть окружена со всех сторон ячейками уровня на единицу выше.

Таким образом, шаблон разностного оператора содержит от 5 до 8 точек во внутренних узлах сетки.

В регулярных узлах сетки, ячейки которых окружены соседями того же уровня, разностные уравнения, аппроксимирующие уравнение (2), имеют вид (рис. 1, а)

$$(h_x h_y)_i \text{св}i \frac{T_i^n - T_i^{n-1}}{\tau} = \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i \frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(3)}}{2} (T_{i-1}^n - T_i^n) + \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i \frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(4)}}{2} (T_{i+1}^n - T_i^n) + \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i \frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(2)}}{2} (T_{\text{ind}(2)}^n - T_i^n) + \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i \left(\frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(5)}}{2}\right) (T_{\text{ind}(5)}^n - T_i^n),$$

где λ_j — значение коэффициента теплопроводности $\kappa(x_1, x_2)$ в точке с индексом j ; $\text{ind}(l)$ — индекс точки с номером l ($l = 2, 3, 4, \dots$) на рисунке, причем точки шаблона нумеруются снизу вверх и слева направо, $\text{ind}(1) = i$; h_x, h_y — длина и высота ячейки; τ — шаг по времени.

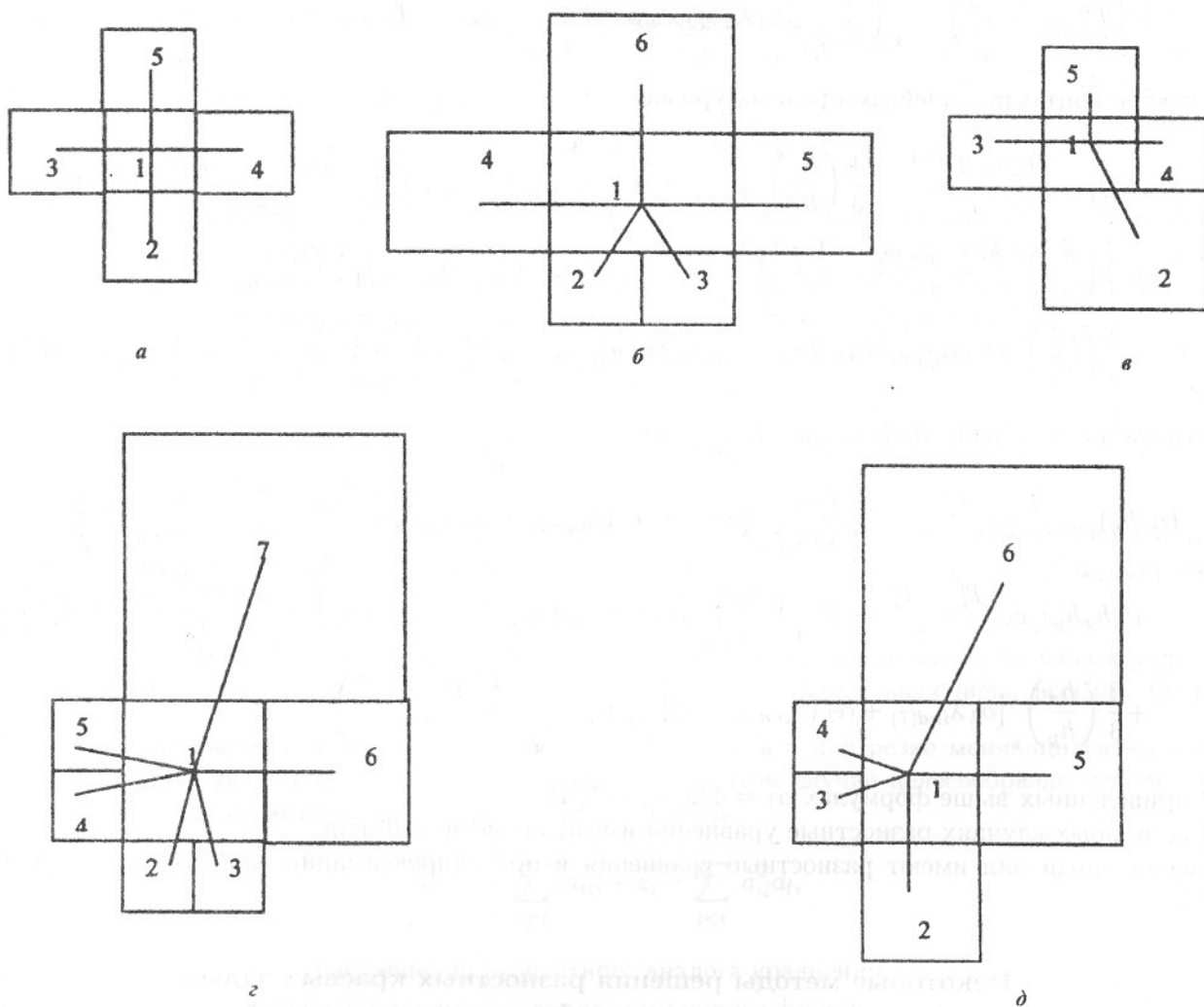


Рис. 1. Примеры шаблонов разностного оператора при различных расположениях ячеек разных уровней

В случае контакта ячейки рассматриваемого узла с двумя ячейками высшего уровня, как, например, на рис. 1, б, имеем

$$\begin{aligned} (h_x h_y)_i \text{CV}_i \frac{T_i^n - T_i^{n-1}}{\tau} &= \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i \frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(4)}}{2} (T_{i-1}^n - T_i^n) + \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i \frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(5)}}{2} (T_{i+1}^n - T_i^n) + \\ &+ \frac{4}{3} \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i [\alpha_1 \lambda_i + \alpha_2 (\lambda_{\text{ind}(2)} + \lambda_{\text{ind}(3)})] \left(\frac{T_{\text{ind}(2)}^n + T_{\text{ind}(3)}^n}{2} - T_i^n\right) + \\ &+ \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i \left(\frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(6)}}{2}\right) (T_{\text{ind}(6)}^n - T_i^n). \end{aligned}$$

В случае контакта с одной ячейкой нижнего уровня (см., например, рис. 1, в) разностное уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} (h_x h_y)_i \text{CV}_i \frac{T_i^n - T_i^{n-1}}{\tau} &= \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i \frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(3)}}{2} (T_{\text{ind}(3)}^n - T_i^n) + \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i \left(\frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(5)}}{2}\right) (T_{\text{ind}(5)}^n - T_i^n) + \\ &+ \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i \left\{ \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i \frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(4)}}{2} - \frac{1}{3} \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i [\alpha_1 \lambda_{\text{ind}(2)} + \alpha_1 (\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(4)})] \right\} \times \\ &\times (T_{\text{ind}(4)}^n - T_i^n) + \frac{2}{3} \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i [\alpha_1 \lambda_{\text{ind}(2)} + \alpha_2 (\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(4)})] (T_{\text{ind}(2)}^n - T_i^n). \end{aligned}$$

В случае контакта с ячейками разных уровней (см., например, рис. 1, г) имеем

$$\begin{aligned} (h_x h_y)_i \text{CV}_i \frac{T_i^n - T_i^{n-1}}{\tau} &= \frac{4}{3} \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i [\alpha_1 \lambda_i + \alpha_2 (\lambda_{\text{ind}(3)} + \lambda_{\text{ind}(4)})] \left(\frac{T_{\text{ind}(3)}^n + T_{\text{ind}(4)}^n}{2} - T_i^n\right) + \\ &+ \left\{ \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i \frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(5)}}{2} - \frac{1}{3} \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i [\alpha_1 \lambda_{\text{ind}(6)} + \alpha_2 (\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(5)})] \right\} (T_{\text{ind}(5)}^n - T_i^n) + \\ &+ \frac{2}{3} \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i [\alpha_1 \lambda_{\text{ind}(6)} + \alpha_2 (\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(5)})] (T_{\text{ind}(6)}^n - T_i^n) + \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i \frac{\lambda_i + \lambda_{\text{ind}(2)}}{2} (T_{\text{ind}(2)}^n - T_i^n). \end{aligned}$$

В ситуации, изображенной на рис. 1, д, имеем

$$\begin{aligned} (h_x h_y)_i \text{CV}_i \frac{T_i^n - T_i^{n-1}}{\tau} &= \frac{4}{3} \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i [\alpha_1 \lambda_i + \alpha_2 (\lambda_{\text{ind}(2)} + \lambda_{\text{ind}(3)})] \left(\frac{T_{\text{ind}(2)}^n + T_{\text{ind}(3)}^n}{2} - T_i^n\right) + \\ &+ (h_x h_y)_i \text{CV}_i \frac{T_i^n - T_i^{n-1}}{\tau} = \frac{4}{3} \left(\frac{h_y}{h_x}\right)_i [\alpha_1 \lambda_i + \alpha_2 (\lambda_{\text{ind}(5)} + \lambda_{\text{ind}(4)})] \left(\frac{T_{\text{ind}(5)}^n + T_{\text{ind}(4)}^n}{2} - T_i^n\right) + \\ &+ \frac{2}{3} \left(\frac{h_x}{h_y}\right)_i [\alpha_1 \lambda_{\text{ind}(7)} + \alpha_2 (\lambda_{\text{ind}(6)} + \lambda_i)] \left(T_{\text{ind}(7)}^n - \frac{T_{\text{ind}(6)}^n + T_i^n}{2}\right). \end{aligned}$$

В приведенных выше формулах $\alpha_1 = 4/9$, $\alpha_2 = 5/18$.

В остальных случаях разностные уравнения имеют аналогичный вид.

Аналогичный вид имеют разностные уравнения и при аппроксимации эллиптического уравнения (1).

Некоторые методы решения разностных краевых задач для эллиптических и параболических уравнений

Разностную задачу, аппроксимирующую уравнение (1) или (2) с граничными условиями, можно записать в виде

$$Ay = f, \quad (3)$$

где матрица A — симметричная положительно определенная.

Для решения уравнения (3) на однопроцессорной ЭВМ можно использовать метод неполного разложения Холецкого сопряженных градиентов ICCG(0) [4, 5], алгоритм которого имеет следующий вид [5]:

$$r^0 = Ay^0 - f;$$

далее, для $k = 0, 1, \dots$ решить уравнение $Bw^k = r^k$,

$$\begin{aligned} \beta_k &= \frac{(w^k, r^k)}{(w^{k-1}, r^{k-1})} \quad \text{при } k \neq 0, \quad \beta_0 = 0; \\ p^k &= w^k + \beta_k p^{k-1}; \\ \alpha_k &= \frac{(w^k, r^k)}{(p^{k-1}, Ap^{k-1})}; \\ y^{k+1} &= y^k - \alpha_k p^k; \quad r^{k+1} = r^k - \alpha_k Ap^k, \end{aligned} \quad (4)$$

где матрица-предобусловливатель $B = (L + D^{-1})D(L^T + D^{-1})$, L — строго нижнетреугольная матрица; y^k — приближенное решение уравнения (3) на k -й итерации.

Однако будем решать систему уравнений (3), используя другой предобусловливатель [15, 5 (дополнение)]:

$$B = (A^- + D^{-1})D((A^-)^T + D^{-1}), \quad (5)$$

где A^- — строго нижнетреугольная часть матрицы A . Элементы диагональной матрицы D выбираются из условия совпадения диагональных элементов матриц A и B (так же, как в методе ICCG(0)). Заметим, что в случае одноуровневой сетки $L = A^-$. Использование предобусловливателя (5) удобнее для распараллеливания алгоритма (4). Кроме того, можно использовать прием Айзенштата [5] с целью "удешевить" каждую итерацию (в настоящей работе прием Айзенштата не применялся).

Элементы d_i матрицы D вычисляются по формулам

$$d_i^{-1} = a_{ii} - \sum_{l < i} a_{il}^2 d_l, \quad (6)$$

где a_{il} — элементы матрицы A . Если $D > 0$, то $B = B^T > 0$ и итерационный процесс при условии $A = A^T > 0$ сходится [5]. Можно доказать, что если все $a_{il} \leq 0$ при $l \neq i$ и $a_{ii} \geq -\sum_{l \neq i} a_{il}$ для всех i , то $D > 0$.

Условие $a_{il} \leq 0$ при $l \neq i$ выполнено для достаточно медленно меняющихся от узла к узлу разностной сетки коэффициентов λ_i , условие $a_{ii} \geq -\sum_{l \neq i} a_{il}$ для всех i выполнено всегда. Однако, как показывают расчеты, итерационный процесс (4) сходится и для резко меняющихся λ_i , только скорость сходимости становится существенно меньше. В этом случае целесообразно использовать вместо d_i значения \bar{d}_i , которые вычисляются по формулам

$$\bar{d}_i^{-1} = \sum_{l \neq i} |a_{il}| + q_i - \sum_{l < i} a_{il}^2 d_l, \quad (7)$$

где $q_i = (h_x h_y)_i c_{Vi} / \tau$ в случае решения разностного аналога уравнения (2) и $q_i = (h_x h_y)_i \bar{d}_i$ в случае аппроксимации уравнения (1), причем \bar{d}_i — аппроксимация коэффициента $d(x_1, x_2)$ в уравнении (1). Можно доказать, что если в качестве элементов диагональной матрицы D использовать \bar{d}_i , то $D > 0$. Как показывают расчеты модельной задачи, такой подход резко ускоряет сходимость итерационного процесса при наличии положительных внедиагональных элементов матрицы A .

Заметим, что в случае равномерных ортогональных сеток метод ICCG(0) требует для сходимости значительно больше итераций при большом числе узлов сетки, чем метод MICCG(0) и метод MAFCG. Будем использовать вариант метода MICCG(0) — метод VMICCG [15, 5 (дополнение)], в котором матрица предобусловливания имеет вид (5), а элементы диагональной матрицы D определяются из критерия равенства строчных сумм:

$$Ae + \Lambda D_A e = Be,$$

где $e = (1, 1, \dots, 1)^T$; D_A — диагональная часть матрицы A ; Λ — диагональная матрица с неотрицательными элементами σ_i малого порядка. Диагональные элементы матрицы D вычисляются по формуле

$$d_i^{-1} = a_{ii} (1 + \sigma_i) - \sum_{l < i} a_{il} \sum_{j > l} a_{lj} d_l. \quad (8)$$

В настоящей работе в методе VMICCG будем использовать $\sigma_i \equiv 0$. Заметим, что в случае одноуровневой сетки метод VMICCG совпадает с методом MAFCG или MICCG(0) без возмущения. Можно доказать, что если все $a_{il} \leq 0$ при $l \neq i$ и $a_{ii} \geq -\sum_{l \neq i} a_{il}$ для всех i , то $D > 0$ и метод VMICCG

сходится (в случае решения задачи Неймана для уравнения (1) предположим, что $\tilde{d}_i > 0$ хотя бы для одного i). Заметим, что можно построить разностную схему такую, что условие *все $a_{il} \leq 0$ при $l \neq i$* выполнено для всех i .

Существенное влияние на скорость сходимости методов ICCG(0), MICCG(0) оказывает способ упорядочения узлов сетки [14]. Будем придерживаться следующего способа упорядочения узлов локально измельчающейся сетки. Все ячейки самого низшего уровня нумеруются слева направо и снизу вверх. Если какая-либо ячейка подвергается измельчению, то вновь образующиеся 4 ячейки нумеруются слева направо и снизу вверх, а номера ячеек, следующих после этой измельченной ячейки, увеличиваются на 3.

При таком способе упорядочения узлов сетки ширина ленты матрицы близка к минимальной, что уменьшает число обусловленности матрицы и хорошо сказывается на сходимости рассматриваемых методов.

Параллельные варианты методов VICCG, VMICCG

Для построения параллельных вариантов методов VICCG, VMICCG будем использовать подход, называемый декомпозицией области, или геометрическим параллелизмом [5]. Разобьем прямоугольную область расчета в двух пространственных направлениях на $p = p_1 \times p_2$ подобластей, как показано на рис. 2 для случая $p_1 = p_2 = 3$. Пусть при разбиении в вертикальном направлении горизонтальные линии границ удовлетворяют условию $x_2 = \text{const}$ и проходят по сторонам ячеек одного и того же уровня (если это возможно). Следует стремиться, чтобы число узлов сетки во всех горизонтальных слоях было примерно одинаковым. Разбиение в горизонтальном направлении будем производить независимо в каждом горизонтальном слое. Предполагаемое количество узлов в каждой подобласти горизонтального слоя N_{k_2}/p_1 , где N_{k_2} — количество узлов в горизонтальном слое с номером k_2 . Пусть x^0 — левая вертикальная граница области расчета. Для $m = 1, 2, \dots, p_1 - 1$ находим x^m такое, чтобы количество узлов в подобласти горизонтального слоя, в которых $x^{m-1} < x_1 < x^m$, как можно меньше отличалось от N_{k_2}/p_1 . Как показали расчеты модельной задачи, при таком способе разбиения для достаточно больших N , где N — число узлов сетки во всей области расчета, и умеренных p число узлов в подобластях отличалось на 5–8%.

Для преодоления основной трудности распараллеливания алгоритмов методов VICCG, VMICCG, связанной с рекурсивным характером вычислений при обращении матрицы предобусловливания, переупорядочим узлы сетки и реконструируем матрицу предобусловливания. В качестве разделителей в каждой подобласти будем рассматривать верхнюю горизонтальную и правую вертикальную границы с соседними подобластями (см. рис. 2). Установим следующий порядок узлов сетки. Пусть сначала идут узлы сетки, не принадлежащие множествам узлов разделителей, причем в том порядке, в котором они были до переупорядочения. Затем следуют узлы разделителей, причем в порядке

возрастания номеров подобластей, а на множестве узлов разделителей в каждой подобласти сначала идут узлы ломаной 6, содержащей точку 4 и не содержащей точку 8 (рис. 3), затем — полуинтервала 7, содержащего точку 5 и не содержащего точку 10, и, наконец, — узлы ломаной 9, содержащей обе точки 8 и 10. Заметим, что подобласти нумеруются слева направо и снизу вверх. Стрелками на рис. 3 указан порядок следования узлов на каждом фрагменте разделителя. При таком порядке следования узлов сетки процессоры могут выполнять вычисления в своих подобластях одновременно.

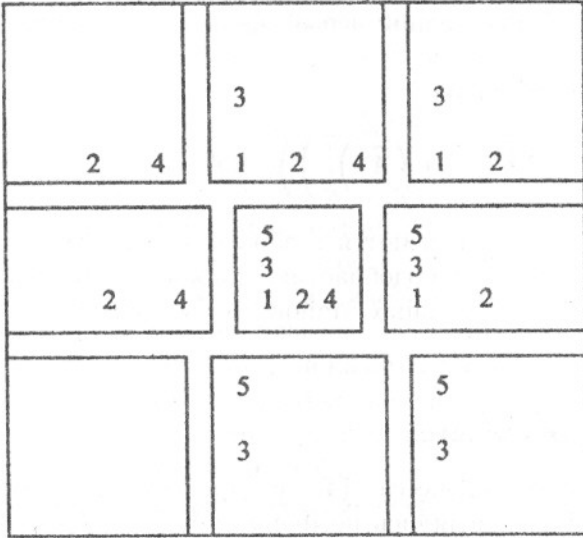


Рис. 2. Схематическое изображение разбиения области расчета на 9 подобластей

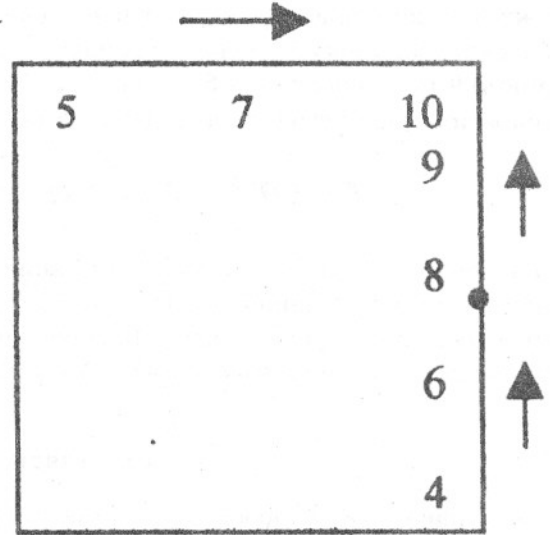


Рис. 3. Порядок следования узлов сетки на разделителях

Вместо системы уравнений (3) будем решать систему уравнений

$$\hat{A}\hat{y} = \hat{f},$$

где $\hat{A} = PAP^{-1}$, $\hat{f} = Pf$, $\hat{y} = Py$, P — матрица перестановок [5].

Матрица предобусловливания в параллельных вариантах методов VICCG, VMICCG будет иметь вид

$$\hat{B} = (D^{-1} + \hat{A}^-) D (D^{-1} + (\hat{A}^-)^T),$$

где \hat{A}^- — строго нижнетреугольная часть матрицы \hat{A} . В параллельном варианте метода VICCG элементы диагональной матрицы D определяются из условия совпадения диагональных элементов матриц \hat{A} и \hat{B} и вычисляются по формулам (6), где a_{il} — элементы матрицы \hat{A} . В параллельном варианте метода VMICCG элементы диагональной матрицы D определяются из критерия равенства строчных сумм и вычисляются по формулам (8), где a_{il} — элементы матрицы \hat{A} .

Как показано в работе [11], параллельный вариант метода MAFCG (или MICCG(0) с $\sigma_i \equiv 0$) имеет хорошую скорость сходимости, число итераций в нем в случае решения эллиптических уравнений пропорционально $\sqrt[3]{N}$ при любой фиксированной решетке процессоров и растет медленно с ростом числа процессоров. Воспользуемся результатами работы [10], положим $\sigma_i = 0,75\pi h$ на линиях 2, 3, в точках 4, 5; $\sigma_i = \pi h$ в точках 1 (см. рис. 2); $\sigma_i = 0$ в остальных случаях. Здесь $h = \sqrt{\frac{L_1 L_2}{N}}$, L_1 , L_2 — длины сторон прямоугольной области расчета.

Рассуждая аналогично [11], можно доказать, что при выполнении условий *все* $a_{il} \leq 0$ при $l \neq i$ и $a_{ii} \geq -\sum_{l \neq i} a_{il}$ для *всех* i параллельные варианты методов VICCG, VMICCG сходятся (в случае решения задачи Неймана для уравнения (1) предположим, что $\tilde{d}_i > 0$ в первой подобласти).

Рассмотрим теперь, как происходит параллельная реализация предложенных параллельных методов на примере параллельного варианта VICCG. Расчет начинается одновременно на всех процессорах с вычисления d_i . Сначала вычисляются d_i во всех узлах подобласти, кроме узлов разделителя, причем в том порядке, который был при первоначальном упорядочении. Затем происходит пересылка значений d_i в точке 1 и на линии 3 на соседний левый процессор (см. рис. 2). Далее происходит расчет в узлах сетки, расположенных на линии 6 (включая точку 4), указанной на рис. 3. Затем значения d_i в узлах на всей нижней границе подобласти пересылаются на соответствующие процессоры в нижнем ряду процессоров, где эти значения нужны. Далее происходит расчет d_i на полуинтервале 7 (включая точку 5), пересылка значения d_i в точке 5 на соседний левый процессор и расчет d_i на линии 9 (включая точки 8 и 10).

Аналогично происходит параллельная реализация обоих этапов

$$\bar{w}^k = \left(D^{-1} + \hat{A}^- \right)^{-1} \left(\hat{A}^- \hat{y} - \hat{f} \right), \quad w^k = \left(D \left(D^{-1} + \left(\hat{A}^- \right)^T \right) \right)^{-1} \bar{w}^k$$

обращения матрицы \hat{B} на каждой итерации. Значения w^k вычисляются в обратном порядке. Все значения w^k в приграничных точках, находящихся в соседних подобластях, должны быть пересланы с соседних процессоров. Параллельная реализация остальных этапов схемы сопряженных градиентов аналогична рассмотренной в работе [18].

Результаты численных расчетов

Для сравнения скорости сходимости итерационного процесса (4) с предобусловливателем (5), в котором элементы диагональной матрицы D вычислялись по формулам (6) и по формулам (7), решалась следующая задача (*модельная задача 1*). Решалось уравнение (2) с нулевыми граничными условиями Неймана. В единичной квадратной области расчета задавалась начальная температура $T^0 = 32[x_1(1-x_1)x_2(1-x_2)]^2$, предполагалось, что $c_V \equiv 1$. Для аппроксимации уравнения (2) использовалась трехуровневая сетка, причем ячейки третьего уровня располагались в области $\Omega_3 = \{1/3 + 1/9 \leq x_l \leq 2/3 - 1/9, l = 1, 2\}$, ячейки второго уровня — в области $\Omega_2 = \{1/3 \leq x_l \leq 2/3, l = 1, 2\} \setminus \Omega_3$, а ячейки первого уровня — в области $\Omega_1 = \{0 \leq x_l \leq 1, l = 1, 2\} \setminus \Omega_2 \setminus \Omega_3$. Использовались максимальные значения $h_x = h_y = 1/81$, $\tau = 1/81$. Коэффициент теплопроводности вычислялся по формулам: $\kappa(x_1, x_2) = 1$ при $(x_1, x_2) \in \Omega_1 \cup \Omega_3$ и $\kappa(x_1, x_2) = \kappa_{\max}$ при $(x_1, x_2) \in \Omega_2$; κ_{\max} приведены в табл. 1.

Разностное уравнение теплопроводности решалось на одном временном слое, итерации прекращались при выполнении условия $(Ay^k - f, y^k - y) < \varepsilon^2 (Ay^0 - f, y^0 - y)$, где $\varepsilon = 10^{-8}$, $y^0 \equiv 0$. В табл. 1

Таблица 1

Количество итераций метода сопряженных градиентов с различными предобусловливателями

κ_{\max}	n_1	n_2	n_3	m_1	m_3
1	80	80	200	0	0
3	90	90	204	0	0
5	93	93	206	0	0
6	94	94	206	144	0
10	96	95	213	144	0
20	108	101	220	144	0
30	121	102	224	144	0
40	138	104	227	144	0
50	159	105	230	144	0
60	192	106	232	144	0
70	247	106	234	144	0
80	775	106	236	144	4
100	2 400	107	238	144	10

приведены n_1 — значения числа итераций при использовании предобусловливателя (5), (6); n_2 — значения числа итераций при использовании предобусловливателя (5), (7); n_3 — значения числа итераций при использовании предобусловливателя $B = D_A$; m_1 — число положительных внедиагональных элементов матрицы A ; m_2 — число отрицательных d_i .

Как видно из табл. 1, количество итераций минимально при использовании предобусловливателя (5), (7). При использовании предобусловливателя (5), (6) итерационный процесс сходится также в случае, когда в матрице A имеются положительные внедиагональные элементы, и даже в случае, когда имеются отрицательные d_i . Однако число итераций быстро растет с ростом κ_{\max} , особенно при наличии отрицательных d_i . При использовании предобусловливателя (5), (7) число итераций возрастает незначительно с ростом κ_{\max} , не более чем в 1,34 раза. При использовании предобусловливателя $B = D_A$ число итераций возрастает с ростом κ_{\max} не более чем в 1,19 раза, однако оно при любом $\kappa_{\max} > 1$ примерно в 2,2 раза больше, а при $\kappa_{\max} = 1$ в 2,5 раза больше, чем число итераций, полученное в расчетах с предобусловливателем (5), (7). Заметим, что, как видно из табл. 2, в которой представлены результаты расчетов для модельной задачи 2, описанной ниже, при больших N и $\kappa_{\max} = 1$ этот коэффициент возрастает до 2,7.

Для исследования скорости сходимости и эффективности параллельных вариантов методов VICCG, VMICCG рассматривалась модельная задача 2, в которой уравнение (3) получено в результате аппроксимации уравнения (2) с нулевыми граничными условиями Неймана, причем $\kappa(x_1, x_2) \equiv 1$, $c_V \equiv 1$. В единичной квадратной области расчета по пространственным переменным вводилась трехуровневая сетка, такая же, как в задаче 1, но шаги по времени и пространству удовлетворяли условиям $\tau = \max h_x$, причем $h_x = h_y$ для любой ячейки и принимали различные значения. T^0 задавалось по той же формуле, что в задаче 1, уравнение (2) решалось на одном временном слое.

Рассматривалась также модельная задача 3, в которой уравнение (3) получено в результате аппроксимации уравнения (1), где $\kappa(x_1, x_2) \equiv 1$, $d \equiv 1$, в той же области расчета на той же разностной сетке. Задавались нулевые граничные условия Неймана. Правая часть f в задаче 3 задавалась так, что функция $y = 32[x_1(1-x_1)x_2(1-x_2)]^2$ была точным решением уравнения (3). Итерации прекращались при выполнении условия $(Ay^k - f, y^k - y) < \varepsilon^2 (Ay^0 - f, y^0 - y)$, где $\varepsilon = 10^{-8}$, $y^0 \equiv 0$. Программы написаны на языке Dec Visual Fortran, использовалась библиотека организации обменов MPI.

В табл. 2 представлены значения числа итераций метода VMICCG и его параллельного варианта при решении задачи 2 для различных значений N , $p = p_1 \times p_2$, причем $p_1 = p_2$. Как видно из табл. 2, для сходимости метода VMICCG и его параллельного варианта для решения параболического уравнения требуется не более чем $O(N^\alpha)$ итераций, где $0,34 \leq \alpha \leq 0,39$. Увеличение числа итераций с ростом числа процессоров в параллельном варианте VICCG было не более чем на 6%. Эффективность параллельного варианта VICCG $e = t_p/t_1/p$ (t_p — время счета на p процессорах) на параллельной вычислительной системе МВС 1000М при $N = 182\,520$ составила 88% на 9 процессорах, 87% на 16 процессорах, 71% на 25 процессорах.

В последнем столбце табл. 2 приведены значения числа итераций при решении модельной задачи 2 методом сопряженных градиентов с предобусловливанием Якоби, или диагональным предобусловливанием, когда матрица предобусловливания $B = D_A$. Распараллеливание алгоритма обращения матрицы $B = D_A$ не представляет труда, оно аналогично параллельной реализации неподобусловленного метода сопряженных градиентов. Из табл. 2 видно, что число итераций в параллельном варианте VICCG не менее чем в 2,6 раза меньше, чем в методе с предобусловливанием Якоби. Число арифметических действий на каждой итерации в параллельном варианте VICCG не более чем в 1,6 раза больше, чем в методе с $B = D_A$. Следовательно, вычислительные затраты в параллельном варианте VICCG не менее чем в 1,65 раза меньше, чем в методе с $B = D_A$, этот коэффициент почти не зависит от числа процессоров. Заметим, что использование приема Айзенштата дополнительно сокращает количество арифметической работы на каждой итерации. Количество пересылок на каждой итерации, не считая пересылок, связанных с вычислением скалярных произведений, в параллельном варианте метода VICCG примерно в 1,5 раза больше, чем в методе с $B = D_A$. При достаточно большом числе узлов сетки дополнительные потери времени на обмен не должны привести к сильному ухудшению эффективности метода [19].

Таблица 2

Количество итераций в параллельном варианте VICCG для различных значений N , p при решении задачи 2

N	p					$B = D_A$
	1	4	9	16	25	
5568	66	67	68	71	—	—
22272	105	106	109	109	110	289
48000	146	147	150	151	151	395
182520	243	—	251	249	251	671

Таблица 3

Количество итераций в параллельном варианте VMICCG для различных значений N , p при решении задачи 2

N	p			
	1	9	16	25
5568	30	50	52	58
22272	38	66	66	71
89088	47	83	84	92
182520	51	87	92	103
		1,72	1,77	1,96

В табл. 3 приведены значения числа итераций при различных значениях N и p , полученные в результате решения задачи 2 методом VMICCG на одном процессоре и его параллельным вариантом на 9, 16, 25 процессорах ($\varepsilon = 10^{-8}$). В последней строке таблицы приведен средний по N коэффициент возрастания числа итераций с ростом числа процессоров. Как видно из табл. 3, в параллельном варианте VMICCG приблизительно сохраняется характер асимптотической зависимости числа итераций от числа узлов сетки $O(N^\beta)$, где $0,15 \leq \beta \leq 0,21$, рост числа итераций с ростом числа процессоров остается приемлемым до 25 процессоров.

В табл. 4 представлены значения числа итераций для метода VICCG и его параллельного варианта, полученные при решении модельной задачи 3, для различных значений N и p . Как видно из табл. 4, для сходимости метода VICCG и его параллельного варианта требуется примерно \sqrt{N} итераций. Увеличение числа итераций с ростом числа процессоров в параллельном варианте VICCG было не более чем на 27% (до 25 процессоров). Эффективность параллельного варианта VICCG при решении задачи 3 на параллельной вычислительной системе МВС 1000М при $N = 182\,520$ составила 76% на 9 процессорах, 78% на 16 процессорах, 67% на 25 процессорах.

В табл. 5 приведены значения числа итераций при различных значениях N и p , полученные в результате решения задачи 3 методом VMICCG на одном процессоре и его параллельным вариантом на 9, 16, 25 процессорах. В последней строке таблицы приведен средний по N коэффициент возрастания числа итераций с ростом числа процессоров. Как видно из табл. 5, в параллельном варианте VMICCG приблизительно сохраняется характер асимптотической зависимости числа итераций от числа узлов сетки $\sqrt[3]{N}$, рост числа итераций с ростом числа процессоров остается вполне приемлемым по крайней мере до 25 процессоров. Эффективность параллельного варианта VMICCG при проведении расчетов задачи 3 на параллельной вычислительной системе МВС 1000М при $N = 182\,520$ составила 55% на 9 процессорах, 54% на 16 процессорах, 44% на 25 процессорах.

Из сравнения табл. 2 и 3, 4 и 5 следует, что в параллельном варианте VMICCG даже на 25 процессорах число итераций существенно меньше, чем в параллельном варианте VICCG, особенно при больших N .

Таблица 4

Количество итераций в параллельном варианте VICCG для различных значений N , p при решении задачи 3

N	p				
	1	4	9	16	25
5568	99	101	123	124	126
22272	194	193	236	238	241
69600	341	342	402	408	411
182520	539	—	638	646	645

Таблица 5

Количество итераций в параллельном варианте VMICCG для различных значений N , p при решении задачи 3

N	p				
	1	9	16	25	
5568	48	76	79	87	
22272	71	109	110	120	
89108	104	155	156	166	
182520	127	189	190	197	
		1,52	1,55	1,66	

Заключение

В работе предложена неявная разностная схема для решения уравнения теплопроводности на локально измельчающихся сетках в прямоугольной области расчета. Предложены параллельные варианты методов VICCG, VMICCG для решения эллиптических и параболических уравнений на локально измельчающихся сетках на основе прямоугольных элементов на параллельной вычислительной технике с распределенной памятью. С помощью расчетов модельных задач на вычислительной системе МВС 1000М показано, что для умеренного числа процессоров число итераций в предложенных параллельных вариантах методов возрастает не более чем в 2 раза, продемонстрирована хорошая эффективность ряда методов.

Список литературы

1. Гильманов А. Н. Методы адаптивных сеток в задачах газовой динамики. М.: Физматлит, 2000.
2. Елизарова Т. Г., Четверушкин Б. Н. Применение многопроцессорных транспьютерных систем для решения задач математической физики // Математическое моделирование. 1992. Т. 4, № 11. С. 75–100.
3. Tishkin V. F., Zmitrenko N. V., Ladonkina M. Yu., Garina S. M. A study of a gravity-gradient mixing properties by the means of a direct numerical modeling // Parallel Computational Fluid Dynamics. Moscow, Russia. May 13–15, 2003 / Ed. B. Chetverushkin, A. Ecer, J. Periaux and N. Satofuka. Amsterdam, 2004. P. 197–204.
4. Meijerink J. A., van der Vorst H. A. An iterative solution method for linear systems, of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix // Math. Comp. 1977. Vol. 31, No 137. P. 148–162.
5. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М.: Мир, 1991.

6. *Gustafsson I.* A class of first order factorization methods // BIT. 1978. Vol. 18. P. 142–156.
7. *Кучеров А. Б., Макаров М. М.* Метод приближенной факторизации для решения разностных смешанных краевых задач // Разностные методы математической физики. М.: МГУ, 1984. С. 54–65.
8. *Axelsson O., Lindskog G.* On the eigenvalue distribution of class of preconditioning methods // Numer. Math. 1986. Vol. 48. P. 479–498.
9. *Doi S.* On parallelism and convergence of incomplete LU factorization // Appl. Numer. Math. 1991. Vol. 7(5). P. 417–436.
10. *Милюкова О. Ю.* Parallel approximate factorization method for solving discrete elliptic equations // Parallel Computing. 2001. Vol. 27. P. 1365–1379.
11. *Милюкова О. Ю.* Параллельные варианты некоторых итерационных методов с факторизованной матрицей предобуславливания // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2001. Т. 41, № 11. С. 1619–1636.
12. *Notay Y.* An efficient parallel discrete PDE solver // Parallel Computing. 1995. Vol. 21. P. 1725–1748.
13. *Notay Y.* DRIC: a dynamic version of the RIC method // J. Num. Lin. Alg. with Appl. 1994. Vol. 1. P. 511–533.
14. *Duff I. S., Meurant G. A.* The effect of ordering on preconditioned conjugate gradients // BIT. 1989. Vol. 29. P. 635–657.
15. *Kershaw D. S.* The incomplete Cholesky-conjugate gradient method for the iterative solution of systems of linear equations // J. Comp. Phys. 1978. Vol. 26. P. 43–65.
16. *Самарский А. А., Николаев Е. С.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
17. *Самарский А. А., Колдоба А. В., Повещенко Ю. А., Тишкин В. Ф., Фаворский А. П.* Разностные схемы на нерегулярных сетках. Минск, 1996.
18. *Милюкова О. Ю.* Параллельный вариант обобщенного попеременно-треугольного метода для решения эллиптических уравнений // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1998. Т. 38, № 12. С. 2002–2012.
19. *Милюкова О. Ю., Четверушкин Б. Н.* Параллельный вариант попеременно-треугольного метода // Там же. Т. 38, № 2. С. 219–229.

Статья поступила в редакцию 21.01.05.