УДК 621.039.051:532.517.4

МЕТОД НЕПОЛНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ ДЛЯ ИТЕРАЦИОННОГО РЕШЕНИЯ СИСТЕМ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ И ЕГО АДАПТАЦИЯ ДЛЯ НЕ *M*-МАТРИЦ

В. П. Гинкин, К. Г. Чернов, Ю. Г. Бартенев,
Ю. А. Бондаренко, Р. М. Шагалиев, Е. Б. Щаникова
(ГНЦ РФ-ФЭИ, г. Обнинск; РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Разработаны новые эффективные предобусловливатели DIF и PIF стабилизированного метода бисопряженных градиентов для решения систем двумерных и трехмерных конечно-разностных уравнений эллиптического типа с несимметричными плохо обусловленными *M*-матрицами коэффициентов. Для решения задач с не *M*-матрицами предлагается устойчивый и эффективный метод на основе исключения из предобусловливаемой матрицы положительных недиагональных членов с одновременным увеличением диагональных на сумму всех исключенных членов в данной строке матрицы.

Выполнены исследования скорости сходимости предлагаемых методов как на тестовых задачах Дирихле и Неймана для уравнений диффузионного и диффузионно-конвективного типов, так и на реальных 9- и 27-диагональных положительно определенных не *M*-матрицах.

Ключевые слова: системы линейных уравнений, итерационные методы, метод сопряженных градиентов, метод BICGSTAB, предобусловливатель, метод неполной факторизации, двумерные задачи, трехмерные задачи, 9-диагональные матрицы, 27-диагональные матрицы, несимметричные матрицы, не *M*-матрицы, распараллеливание.

Введение

Метод неполной факторизации является одним из наиболее эффективных ускорителей итерационных методов решения систем линейных уравнений, порождаемых конечно-разностной аппроксимацией краевых задач математической физики. Этот метод был предложен Н. И. Булеевым [1] и получил затем широкое развитие. Как показано в работе [2], где приведена наиболее полная библиография по этому методу, самые сильные результаты с точки зрения увеличения скорости сходимости достигнуты при использовании метода неполной факторизации в качестве предобусловливателя в методе сопряженных градиентов при решении систем линейных уравнений с симметричными матрицами коэффициентов.

В работе [3] Н. И. Булеев предложил другой вариант метода неполной факторизации, обладающий свойством ускорения сходимости при появлении конвективного члена в исходном уравнении. При этом скорость сходимости тем выше, чем больше коэффициент при конвективном члене. В предельном случае, когда один из недиагональных коэффициентов конечно-разностного уравнения обращается в нуль для всех узлов разностной сетки, метод становится безытерационным. В работе [4] была предложена комбинированная схема HFPP, представляющая собой чередование двух схем — схемы h-факторизации [5] и схемы параболических прогонок [4]. Ее использование привело к значительному ускорению сходимости по сравнению с каждой из схем неполной факторизации в отдельности. При этом в отличие от отдельно взятых схем HFPP одинаково быстро сходится при наличии конвективных членов по обоим направлениям.

Другой подход к решению задач с несимметричными матрицами коэффициентов заключается в использовании подпространств Крылова [6]. В этих методах на каждой итерации строится подпространство Крылова и векторы невязки выражаются с помощью матричных многочленов от исходной матрицы, причем эти многочлены выбираются таким образом, чтобы вектор невязки был наименьшим в определенном смысле. Здесь существуют два подхода: один заключается в минимизации нормы невязки, другой — в применении метода Галеркина (использовании ортогональности вектора невязки некоторому подпространству).

В данной работе рассмотрен вариант метода бисопряженных градиентов (стабилизированная версия метода бисопряженных градиентов — BiCGSTAB), предобусловленного по схемам неполной факторизации с диагональной (DIF) и периферийной (PIF) компенсацией итерируемых членов. Схема DIF впервые была предложена Н. И. Булеевым в [1]. В настоящей работе схема DIF записана для 9- и 27-диагональных матриц, аппроксимирующих уравнения эллиптического типа с двумя и тремя пространственными переменными (*двумерные* и *трехмерные* уравнения) на 9- и 27-точечном шаблонах соответственно. Схема PIF впервые была предложена в [7]. Схема PIF записана для 9-диагональных матриц, аппроксимирующих двумерные уравнения эллиптического типа на 9-точечных шаблонах.

Приводятся результаты численных исследований сходимости схем DIF и PIF при использовании каждой из них в качестве предобусловливателя в методе BiCGSTAB для случая несимметричных исходных M-матриц. Предлагается эффективный вариант адаптации предобусловливателей DIF и PIF для не M-матриц. Приводятся также сравнения эффективности предобусловленного метода BiCGSTAB с различными предобусловливателями: схемой с диагональной компенсацией Булеева DIF, схемой PIF, схемой неполной факторизации ILU0 [8] (аналогичной схеме Холецкого для симметричных матриц) и модифицированной схемой неполной факторизации MILU0 [8].

Метод неполной факторизации для двумерных задач

Рассмотрим невырожденную систему линейных уравнений, порождаемую конечно-разностной аппроксимацией двумерного уравнения эллиптического типа, записанную в сеточном представлении:

$$A\varphi = f, \tag{1}$$

где

$$\begin{aligned} A\varphi_{i,k} = a^1_{i,k}\varphi_{i-1,k-1} + a^2_{i,k}\varphi_{i-1,k} + a^3_{i,k}\varphi_{i-1,k+1} + a^4_{i,k}\varphi_{i,k-1} + a^5_{i,k}\varphi_{i,k} +& \\ + a^6_{i,k}\varphi_{i,k+1} + a^7_{i,k}\varphi_{i+1,k-1} + a^8_{i,k}\varphi_{i+1,k} + a^9_{i,k}\varphi_{i+1,k+1} = f_{i,k};& \end{aligned} \tag{2}$$

$$a^l_{i,k} \le 0, \quad l = \overline{1,4}, \overline{6,9}; \quad a^5_{i,k} > 0; \quad \sum_{l=1}^{9} a^l_{i,k} \ge 0; \tag{3}$$

$$i = 1, 2, \ldots, n_1; \qquad k = 1, 2, \ldots, n_2.$$

В последнем условии в (3) предполагается, что строгое неравенство имеет место хотя бы в одной точке (i, k). Тогда матрица A является M-матрицей.

Предполагается, что граничные условия уже учтены в коэффициентах уравнения (2) так, что

$$\begin{aligned} &a^1_{i,k} = a^2_{i,k} = a^3_{i,k} = 0 \quad \text{при } i = 1; \quad a^7_{i,k} = a^8_{i,k} = a^9_{i,k} = 0 \quad \text{при } i = n_1; \\ &a^1_{i,k} = a^4_{i,k} = a^7_{i,k} = 0 \quad \text{при } k = 1; \quad a^3_{i,k} = a^6_{i,k} = a^9_{i,k} = 0 \quad \text{при } k = n_2. \end{aligned} \tag{4}$$

Матрица A соответствует следующему двумерному 9-точечному разностному шаблону:

$$A = \begin{pmatrix} a^3_{i,k} & - & a^6_{i,k} & - & a^9_{i,k} \\ | & & | & & | \\ a^2_{i,k} & - & a^5_{i,k} & - & a^8_{i,k} \\ | & & | & & | \\ a^1_{i,k} & - & a^4_{i,k} & - & a^7_{i,k} \end{pmatrix}.$$

В выражениях (2)—(4) верхний индекс означает номер узла в 9-точечном шаблоне, а нижний двойной индекс означает номер узла сетки.

Условимся в дальнейшем для удобства в нижнем двойном индексе писать только отличающиеся от i или k части. Тогда (2) будет выглядеть так:

$$A\varphi=a^1\varphi_{i-1,k-1}+a^2\varphi_{i-1}+a^3\varphi_{i-1,k+1}+a^4\varphi_{k-1}+a^5\varphi+a^6\varphi_{k+1}+a^7\varphi_{i+1,k-1}+a^8\varphi_{i+1}+a^9\varphi_{i+1,k+1}=f.$$

Метод неполной факторизации заключается в следующем. Прибавим к обеим частям уравнения (1) вектор $B\varphi$, где оператор B выбирается таким, чтобы матрица $A+B$ представлялась в виде произведения двух легко обратимых матриц M и N. Тогда вместо (1) можно записать

$$MN\varphi = f + B\varphi. \tag{5}$$

Введя обозначение $N\varphi = z$, получим систему двух уравнений, которую будем решать методом последовательных приближений:

$$\begin{aligned} &Mz = f + B\varphi^{j-1}; \\ &N\varphi^j = z; \end{aligned} \qquad j = 1, 2, \ldots.$$

Структура матриц M, N и B задается, а элементы этих матриц определяются из тождества

$$MN = A + B. \tag{6}$$

Введя вектор невязки $r^{j-1} = A\varphi^{j-1} - f$, перепишем метод неполной факторизации следующим образом (так происходит избавление от явного включения в алгоритм матрицы B, а значит, и от ее вычисления):

$$\begin{aligned} &Mz = -r^{j-1}; \\ &Nw = z; \\ &\varphi^j = w + \varphi^{j-1}. \end{aligned}$$

Матрицы M и N выберем соответственно нижней и верхней треугольными, определенными на симметричных частях исходного 9-точечного шаблона:

$$Mz = \mu^1 z_{i-1,k-1} + \mu^2 z_{i-1} + \mu^3 z_{i-1,k+1} + \mu^4 z_{k-1} + z = -r^{j-1}; \tag{7}$$

$$Nw = \mu^5 w + \mu^6 w_{k+1} + \mu^7 w_{i+1,k-1} + \mu^8 w_{i+1} + \mu^9 w_{i+1,k+1} = z \tag{8}$$

с неопределенными пока коэффициентами μ^l, $l = 1, \ldots, 9$. Здесь все коэффициенты μ^l, как и коэффициенты $a^l_{i,k}$, имеют нижний двухкомпонентный сеточный индекс, но поскольку он совпадает с (i, k), то согласно принятому выше допущению его писать не будем. Матрицы M и N соответствуют следующим пятиточечным разностным шаблонам:

$$M = \begin{pmatrix} \mu^3_{i,k} & & \\ | & & \\ \mu^2_{i,k} & - & 1 \\ | & & | \\ \mu^1_{i,k} & - & \mu^4_{i,k} \end{pmatrix}, \qquad N = \begin{pmatrix} \mu^6_{i,k} & - & \mu^9_{i,k} \\ | & & | \\ \mu^5_{i,k} & - & \mu^8_{i,k} \\ & & | \\ & & \mu^7_{i,k} \end{pmatrix}.$$

Исключая из (7), (8) вспомогательную функцию z и собирая коэффициенты при одинаковых сеточных индексах функции w, получаем выражение для факторизованного оператора MN:

$$\begin{aligned} MNw = {} & \mu^1\mu^5_{i-1,k-1}w_{i-1,k-1} + \left(\mu^1\mu^6_{i-1,k-1} + \mu^2\mu^5_{i-1}\right) w_{i-1} + \left(\mu^2\mu^6_{i-1} + \mu^3\mu^5_{i-1,k+1}\right) w_{i-1,k+1} + \\ & + \left(\mu^1\mu^8_{i-1,k-1} + \mu^2\mu^7_{i-1} + \mu^4\mu^5_{k-1}\right) w_{k-1} + \left(\mu^1\mu^9_{i-1,k-1} + \mu^2\mu^8_{i-1} + \mu^3\mu^7_{i-1,k+1} + \right. \\ & \left. + \mu^4\mu^6_{k-1} + \mu^5\right) w + \left(\mu^2\mu^9_{i-1} + \mu^3\mu^8_{i-1,k+1} + \mu^6\right) w_{k+1} + \left(\mu^4\mu^8_{k-1} + \mu^7\right) w_{i+1,k-1} + \\ & + \left(\mu^4\mu^9_{k-1} + \mu^8\right) w_{i+1} + \mu^9 w_{i+1,k+1} + Cw, \end{aligned}$$

где через Cw обозначена группа членов, выходящих за рамки исходного 9-точечного шаблона:

$$Cw = \mu^1\mu^7_{i-1,k-1}w_{k-2} + \mu^3\mu^6_{i-1,k+1}w_{i-1,k-2} + \mu^3\mu^9_{i-1,k+1}w_{k+2} + \mu^4\mu^7_{k-1}w_{i+1,k-2}. \tag{9}$$

Отсюда, учитывая (6), можно найти явный вид оператора B:

$$\begin{aligned}Bw = &\left(\mu^1\mu^5_{i-1,k-1} - a^1\right)w_{i-1,k-1} + \left(\mu^1\mu^6_{i-1,k-1} + \mu^2\mu^5_{i-1} - a^2\right)w_{i-1} + \\ &+ \left(\mu^2\mu^6_{i-1} + \mu^3\mu^5_{i-1,k+1} - a^3\right)w_{i-1,k+1} + \left(\mu^1\mu^8_{i-1,k-1} + \mu^2\mu^7_{i-1} + \mu^4\mu^5_{k-1} - a^4\right)w_{k-1} + \\ &+ \left(\mu^1\mu^9_{i-1,k-1} + \mu^2\mu^8_{i-1} + \mu^3\mu^7_{i-1,k+1} + \mu^4\mu^6_{k-1} + \mu^5 - a^5\right)w + \\ &+ \left(\mu^2\mu^9_{i-1} + \mu^3\mu^8_{i-1,k+1} + \mu^6 - a^6\right)w_{k+1} + \left(\mu^4\mu^8_{k-1} + \mu^7 - a^7\right)w_{i+1,k-1} + \\ &+ \left(\mu^4\mu^9_{k-1} + \mu^8 - a^8\right)w_{i+1} + \left(\mu^9 w_{i+1,k+1} - a^9\right) + Cw.\end{aligned} \tag{10}$$

Далее необходимо конкретизировать выбор оператора B. Очевидно, что четыре члена в оператор B обязательно войдут. Это члены, не лежащие на исходном шаблоне, т. е. Cw. Будем называть их *неустранимыми*. Остальные члены в (10) могут быть приравнены нулю. Однако можно допустить, чтобы в оператор B вошли и другие члены из исходного 9-точечного шаблона, и попытаться с помощью привлечения других членов добиться более высокой скорости сходимости итерационного процесса. Будем называть эти добавочные члены *компенсирующими*, так как их роль заключается в компенсации неустранимых членов Cw в итерируемом выражении Bw.

Схема с периферийной компенсацией PIF. Каждый из четырех членов, входящих в Cw (9), будем компенсировать тройкой членов, выбирая их по следующему алгоритму. Первый компенсирующий член выбирается из верхней треугольной части 9-точечного шаблона в ближайшем узле шаблона по отношению к компенсируемому члену с тем же коэффициентом, что и у компенсируемого члена, но с противоположным знаком. Следующие два члена из компенсирующей тройки членов представляют собой разность диагонального члена и члена, симметричного первому компенсирующему члену. Коэффициент перед этой парой членов выбирается таким, чтобы итоговая компенсирующая матрица была симметричной. При этом перед всеми компенсирующими членами в качестве множителя добавляется итерационный параметр $0 \le \theta \le 1$, чтобы в дальнейшем иметь возможность оптимизировать итерационный процесс.

Используя этот алгоритм, находим желаемый вид оператора B:

$$\begin{aligned}Bw = &\,\mu^1\mu^7_{i-1,k-1}\left(w_{k-2} - \theta w_{i+1,k-1}\right) + \theta\mu^1_{i-1,k+1}\mu^7_{i-2}\left(w - w_{i-1,k+1}\right) + \\ &+ \mu^3\mu^6_{i-1,k+1}\left(w_{i-1,k+2} - \theta w_{k+1}\right) + \theta\mu^3_{k-1}\mu^6_{i-1}\left(w - w_{k-1}\right) + \\ &+ \mu^3\mu^9_{i-1,k+1}\left(w_{k+2} - \theta w_{i+1,k+1}\right) + \theta\mu^3_{i-1,k-1}\mu^9_{i-2}\left(w - w_{i-1,k-1}\right) + \\ &+ \mu^4\mu^7_{k-1}\left(w_{i+1,k-2} - \theta w_{i+1,k-1}\right) + \theta\mu^4_{i-1,k+1}\mu^7_{i-1}\left(w - w_{i-1,k+1}\right).\end{aligned} \tag{11}$$

Требуя тождественного совпадения выражений (10) и (11), получаем систему из 9 уравнений для определения коэффициентов μ^l, $l = 1, \ldots, 9$:

$$\begin{aligned}&\mu^1\mu^5_{i-1,k-1} - a^1 = -\theta\mu^3_{i-1,k-1}\mu^9_{i-2};\\ &\mu^1\mu^6_{i-1,k-1} + \mu^2\mu^5_{i-1} - a^2 = 0;\\ &\mu^2\mu^6_{i-1} + \mu^3\mu^5_{i-1,k+1} - a^3 = -\theta\left(\mu^1_{i-1,k+1}\mu^7_{i-2} + \mu^4_{i-1,k+1}\mu^7_{i-1}\right);\\ &\mu^1\mu^8_{i-1,k-1} + \mu^2\mu^7_{i-1} + \mu^4\mu^5_{k-1} - a^4 = -\theta\mu^3_{k-1}\mu^6_{i-1};\\ &\mu^1\mu^9_{i-1,k-1} + \mu^2\mu^8_{i-1} + \mu^3\mu^7_{i-1,k+1} + \mu^4\mu^6_{k-1} + \mu^5 - a^5 =\\ &\qquad = \theta\left(\mu^3_{i-1,k-1}\mu^9_{i-2} + \mu^1_{i-1,k+1}\mu^7_{i-2} + \mu^4_{i-1,k+1}\mu^7_{i-1} + \mu^3_{k-1}\mu^6_{i-1}\right);\\ &\mu^2\mu^9_{i-1} + \mu^3\mu^8_{i-1,k+1} + \mu^6 - a^6 = -\theta\mu^3\mu^6_{i-1,k+1};\\ &\mu^4\mu^8_{k-1} + \mu^7 - a^7 = -\theta\left(\mu^1\mu^7_{i-1,r-1} + \mu^4\mu^7_{k-1}\right);\\ &\mu^4\mu^9_{k-1} + \mu^8 - a^8 = 0;\\ &\mu^9 - a^9 = -\theta\mu^3\mu^9_{i-1,k+1}.\end{aligned}$$

Решив эту систему, найдем рекуррентные формулы для определения μ^l:

$$
\begin{aligned}
&\mu^1 = \frac{1}{\mu^5_{i-1,k-1}}\left(a^1 - \theta\mu^3_{i-1,k-1}\mu^9_{i-2}\right); \qquad \mu^2 = \frac{1}{\mu^5_{i-1}}\left(a^2 - \mu^1\mu^6_{i-1,k-1}\right);\\
&\mu^3 = \frac{1}{\mu^5_{i-1,k+1}}\left[a^3 - \mu^2\mu^6_{i-1} - \theta\left(\mu^1_{i-1,k+1}\mu^7_{i-2} + \mu^4_{i-1,k+1}\mu^7_{i-1}\right)\right];\\
&\mu^4 = \frac{1}{\mu^5_{k-1}}\left(a^4 - \mu^1\mu^8_{i-1,k-1} - \mu^2\mu^7_{i-1} - \theta\mu^3_{k-1}\mu^6_{i-1}\right);\\
&\mu^5 = a^5 - \mu^1\mu^9_{i-1,k-1} - \mu^2\mu^8_{i-1} - \mu^3\mu^7_{i-1,k+1} - \mu^4\mu^6_{k-1} +\\
&\qquad + \theta\left(\mu^3_{i-1,k-1}\mu^9_{i-2} + \mu^1_{i-1,k+1}\mu^7_{i-2} + \mu^4_{i-1,k+1}\mu^7_{i-1} + \mu^3_{k-1}\mu^6_{i-1}\right);\\
&\mu^6 = a^6 - \mu^2\mu^9_{i-1} - \mu^3\mu^8_{i-1,k+1} - \theta\mu^3\mu^6_{i-1,k+1}; \qquad \mu^7 = a^7 - \mu^4\mu^8_{k-1} - \theta\left(\mu^1\mu^7_{i-1,k-1} + \mu^4\mu^7_{k-1}\right);\\
&\mu^8 = a^8 - \mu^4\mu^9_{k-1}; \qquad \mu^9 = a^9 - \theta\mu^3\mu^9_{i-1,k+1}.
\end{aligned}
\tag{12}
$$

Описанный выше алгоритм будем называть схемой неполной факторизации с периферийной компенсацией итерируемых членов и обозначать PIF. Идея описанного способа компенсации в схеме PIF иллюстрируется следующими рассуждениями.

Предобусловливатель будет тем эффективнее, чем ближе матрица K к исходной матрице A. Это означает, что величина Bw должна быть как можно ближе к нулю. Посмотрим, как выполняется это условие для выражения (11).

Пусть для простоты элементы исходной матрицы A постоянны, а ненулевые недиагональные элементы отрицательны и равны друг другу. Легко убедиться, что в этом случае значения элементов матрицы M, вычисляемые по рекуррентным формулам (12), также быстро сходятся к константам, так что выражение для Bw при $\theta = 1$ приближенно будет иметь вид

$$
\begin{aligned}
Bw = {}&\mu^1\mu^3\left(w_{k-2} - w_{i+1,k-1} + w - w_{i-1,k+1} + w_{k+2} - w_{i+1,k+1} + w - w_{i-1,k-1}\right) +\\
&+ \mu^3\mu^4\left(w_{i-1,k+2} - w_{k+1} + w - w_{k-1} + w_{i+1,k-2} - w_{i+1,k-1} + w - w_{i-1,k+1}\right).
\end{aligned}
$$

Разложим выражения в скобках в ряд Тейлора в центральном узле шаблона, полагая шаги по обоим направлениям одинаковыми и равными h. Получим

$$
\begin{aligned}
&w_{k-2} - w_{i+1,k-1} + w - w_{i-1,k+1} + w_{k+2} - w_{i+1,k+1} + w - w_{i-1,k-1} =\\
&\qquad = 0\cdot w + 0\cdot\frac{\partial w}{\partial x} + 0\cdot\frac{\partial w}{\partial y} + 0\cdot\frac{\partial^2 w}{\partial x\partial y} - 2h^2\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + 2h^2\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \ldots;\\
&w_{i-1,k+2} - w_{k+1} + w - w_{k-1} + w_{i+1,k-2} - w_{i+1,k-1} + w - w_{i-1,k+1} =\\
&\qquad = 0\cdot w + 0\cdot\frac{\partial w}{\partial x} + 0\cdot\frac{\partial w}{\partial y} + 0\cdot\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - 2h^2\frac{\partial^2 w}{\partial x\partial y} + 3h^2\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \ldots.
\end{aligned}
$$

Видно, что первые члены этих рядов обращаются в нуль. Остаются только слагаемые со вторыми производными и выше. Это значит, что на гладких функциях выражение Bw действительно будет мало.

При $\theta = 0$ схема PIF переходит в схему неполной факторизации несимметричных и симметричных матриц (ILU0, IC0). Эмпирически было найдено (см. [9]), что при использовании метода PIF в качестве предобусловливателя в методе сопряженных градиентов (метод CGPIF) оптимальное значение параметра θ с хорошей точностью может быть вычислено по формуле

$$
\theta_{opt} \approx 1 - \frac{1}{2n}, \tag{13}
$$

где n — наибольшее из количеств узлов сетки по направлениям. Очевидно, что при $n \to \infty$ θ_{opt} стремится к единице.

Отметим также, что в случае симметричной исходной матрицы A можно использовать вариант метода, для которого достаточно будет вычислять только нижнюю треугольную матрицу коэффициентов, что позволит сократить необходимую память вычислительных машин и машинное время счета примерно вдвое. На основе этого варианта и был создан метод CGPIF.

Схема с диагональной компенсацией DIF. Пусть матрицы M и N имеют вид (7), (8), а желаемый вид оператора B определяется не выражением (11), как в схеме PIF, а так, как было предложено Булеевым в работе [1], т. е.

$$\begin{aligned} Bw = {} & \mu^1\mu^7_{i-1,k-1}\left(w_{k-2}-\theta w\right)+\mu^3\mu^6_{i-1,k+1}\left(w_{i-1,k+2}-\theta w\right)+ \\ & +\mu^3\mu^9_{i-1,k+1}\left(w_{k+2}-\theta w\right)+\mu^4\mu^7_{k-1}\left(w_{i+1,k-2}-\theta w\right), \end{aligned} \tag{14}$$

где $0 \le \theta \le 1$.

Видно, что в этом случае для компенсации итерируемых членов используется только главная диагональ. Такой способ компенсации называется *диагональной компенсацией*.

Приравнивая выражения (10) и (14) для Bw, получаем 9 уравнений для определения μ^l, $l = 1,\ldots,9$, решая которые, находим рекуррентные формулы для вычисления μ^l:

$$\begin{aligned} & \mu^1=\frac{a^1}{\mu^5_{i-1,k-1}}; \qquad \mu^2=\frac{1}{\mu^5_{i-1}}\left(a^2-\mu^1\mu^6_{i-1,k-1}\right); \qquad \mu^3=\frac{1}{\mu^5_{i-1,k+1}}\left(a^3-\mu^2\mu^6_{i-1}\right); \\ & \mu^4=\frac{1}{\mu^5_{k-1}}\left(a^4-\mu^1\mu^8_{i-1,k-1}-\mu^2\mu^7_{i-1}\right); \\ & \mu^5=a^5-\mu^1\mu^9_{i-1,k-1}-\mu^2\mu^8_{i-1}-\mu^3\mu^7_{i-1,k+1}-\mu^4\mu^6_{k-1}- \\ & \qquad -\theta\left(\mu^1\mu^7_{i-1,k-1}+\mu^3\mu^6_{i-1,k+1}+\mu^3\mu^9_{i-1,k+1}+\mu^4\mu^7_{k-1}\right); \\ & \mu^6=a^6-\mu^2\mu^9_{i-1}-\mu^3\mu^8_{i-1,k+1}; \qquad \mu^7=a^7-\mu^4\mu^8_{k-1}; \qquad \mu^8=a^8-\mu^4\mu^9_{k-1}; \qquad \mu^9=a^9. \end{aligned} \tag{15}$$

Схема (7), (8), (15) называется схемой неполной факторизации с диагональной компенсацией итерируемых членов и обозначается DIF. Отметим, что при $\theta = 0$ схема DIF переходит в ILU0, а при $\theta = 1$ — в MILU0.

Метод неполной факторизации для трехмерных задач

Схемы DIF и PIF для трехмерных разностных уравнений эллиптического типа, определенных на 9- и 27-точечных разностных шаблонах, строятся аналогично двумерному случаю. Поэтому, ввиду громоздкости соответствующих формул для 9-точечных и особенно 27-точечных схем, здесь ограничимся рассмотрением 27-точечной схемы DIF без вывода формул.

Пусть матрица A из (1) имеет 27-диагональный вид, соответствующий разностной аппроксимации трехмерного уравнения эллиптического типа на 27-точечном шаблоне:

$$\begin{aligned} A\varphi_{j,i,k} = {} & a^1_{j,i,k}\varphi_{j-1,i-1,k-1}+a^2_{j,i,k}\varphi_{j-1,i-1,k}+a^3_{j,i,k}\varphi_{j-1,i-1,k+1}+a^4_{j,i,k}\varphi_{j-1,i,k-1}+ \\ & +a^5_{j,i,k}\varphi_{j-1,i,k}+a^6_{j,i,k}\varphi_{j-1,i,k+1}+a^7_{j,i,k}\varphi_{j-1,i+1,k-1}+a^8_{j,i,k}\varphi_{j-1,i+1,k}+ \\ & +a^9_{j,i,k}\varphi_{j-1,i+1,k+1}+a^{10}_{j,i,k}\varphi_{j,i-1,k-1}+a^{11}_{j,i,k}\varphi_{j,i-1,k}+a^{12}_{j,i,k}\varphi_{j,i-1,k+1}+ \\ & +a^{13}_{j,i,k}\varphi_{j,i,k-1}+a^{14}_{j,i,k}\varphi_{j,i,k}+a^{15}_{j,i,k}\varphi_{j,i,k+1}+a^{16}_{j,i,k}\varphi_{j,i+1,k-1}+a^{17}_{j,i,k}\varphi_{j,i+1,k}+ \\ & +a^{18}_{j,i,k}\varphi_{j,i+1,k+1}+a^{19}_{j,i,k}\varphi_{j+1,i-1,k-1}+a^{20}_{j,i,k}\varphi_{j+1,i-1,k}+a^{21}_{j,i,k}\varphi_{j+1,i-1,k+1}+ \\ & +a^{22}_{j,i,k}\varphi_{j+1,i,k-1}+a^{23}_{j,i,k}\varphi_{j+1,i,k}+a^{24}_{j,i,k}\varphi_{j+1,i,k+1}+a^{25}_{j,i,k}\varphi_{j+1,i+1,k-1}+ \\ & +a^{26}_{j,i,k}\varphi_{j+1,i+1,k}+a^{27}_{j,i,k}\varphi_{j+1,i+1,k+1}=f_{j,i,k}; \end{aligned} \tag{16}$$

$$a^l_{j,i,k} \le 0, \quad l=\overline{1,13},\overline{15,27}; \quad a^{14}_{j,i,k} > 0; \quad \sum_{l=1}^{27} a^l_{j,i,k} \ge 0; \tag{17}$$

$$j=1,2,\ldots,n_1; \qquad i=1,2,\ldots,n_2; \qquad k=1,2,\ldots,n_3.$$

В последнем условии в (17) предполагается, что строгое неравенство имеет место хотя бы в одной точке (j,i,k). Тогда матрица A является M-матрицей. В выражениях (16), (17), как и прежде, верхний индекс означает номер узла в 27-точечном шаблоне, а нижний тройной индекс означает номер узла сетки.

Предполагается, что граничные условия уже учтены в коэффициентах этого уравнения так, что $a^l_{j,i,k} = 0$ при $(k=1,\ l=1,4,7,10,13,16,19,22,25)$, $(k=n_3,\ l=3,6,9,12,15,18,21,24,27)$, $(j=1,\ l=\overline{1,9})$, $(j=n_1,\ l=\overline{19,27})$, $(i=1,\ l=\overline{1,3},\overline{10,12},\overline{19,21})$, $(i=n_2,\ l=\overline{7,9},\overline{16,18},\overline{25,27})$.

Матрица A соответствует следующему трехмерному 27-точечному разностному шаблону:

$$A = \begin{pmatrix}
 & & & & & & & & & & & & a^{21}_{j,i,k} & - & a^{24}_{j,i,k} & - & a^{27}_{j,i,k} \\
 & & & & & & a^{12}_{j,i,k} & - & a^{15}_{j,i,k} & - & a^{18}_{j,i,k} & & | & & | & & | \\
a^{3}_{j,i,k} & - & a^{6}_{j,i,k} & - & a^{9}_{j,i,k} & & | & & | & & | & & a^{20}_{j,i,k} & - & a^{23}_{j,i,k} & - & a^{26}_{j,i,k} \\
| & & | & & | & & a^{11}_{j,i,k} & - & a^{14}_{j,i,k} & - & a^{17}_{j,i,k} & & | & & | & & | \\
a^{2}_{j,i,k} & - & a^{5}_{j,i,k} & - & a^{8}_{j,i,k} & & | & & | & & | & & a^{19}_{j,i,k} & - & a^{22}_{j,i,k} & - & a^{25}_{j,i,k} \\
| & & | & & | & & a^{10}_{j,i,k} & - & a^{13}_{j,i,k} & - & a^{16}_{j,i,k} & & & & & & \\
a^{1}_{j,i,k} & - & a^{4}_{j,i,k} & - & a^{7}_{j,i,k} & & & & & & & & & & & &
\end{pmatrix},$$

где индексы $1 \div 9$, $10 \div 18$ и $19 \div 27$ находятся в параллельных по Z плоскостях XY. Условимся в дальнейшем для удобства в нижнем тройном индексе писать только отличающиеся от j, i или k части.

Метод неполной факторизации определяется, как и прежде, выражениями (5).

Матрицы M и N выберем нижней и верхней треугольными, определенными на симметричных частях исходного 27-точечного шаблона:

$$\begin{aligned}
Mz &= \mu^1 z_{j-1,i-1,k-1} + \mu^2 z_{j-1,i-1} + \mu^3 z_{j-1,i-1,k+1} + \mu^4 z_{j-1,k-1} + \mu^5 z_{j-1} + \mu^6 z_{j-1,k+1} + \\
&\quad + \mu^7 z_{j-1,i+1,k-1} + \mu^8 z_{j-1,i+1} + \mu^9 z_{j-1,i+1,k+1} + \mu^{10} z_{i-1,k-1} + \mu^{11} z_{i-1} + \mu^{12} z_{i-1,k+1} + \\
&\quad + \mu^{13} z_{k-1} + z = -r^{j-1}; \\
Nw &= \mu^{14} w + \mu^{15} w_{k+1} + \mu^{16} w_{i+1,k-1} + \mu^{17} w_{i+1} + \mu^{18} w_{i+1,k+1} + \mu^{19} w_{j+1,i-1,k-1} + \\
&\quad + \mu^{20} w_{j+1,i-1} + \mu^{21} w_{j+1,i-1,k+1} + \mu^{22} w_{j+1,k-1} + \mu^{23} w_{j+1} + \mu^{24} w_{j+1,k+1} + \\
&\quad + \mu^{25} w_{j+1,i+1,k-1} + \mu^{26} w_{j+1,i+1} + \mu^{27} w_{j+1,i+1,k+1} = z
\end{aligned} \tag{18}$$

с неопределенными пока коэффициентами μ^l, $l = 1,\ldots,27$.

Действуя аналогично двумерному случаю, получаем систему из 27 уравнений для определения коэффициентов μ^l, $l=1,\ldots,27$, решив которую, найдем рекуррентные формулы для их вычисления:

$$\mu^1 = \frac{a^1}{\mu^{14}_{j-1,i-1,k-1}}; \quad \mu^2 = \frac{1}{\mu^{14}_{j-1,i-1}}\left(a^2 - \mu^1\mu^{15}_{j-1,i-1,k-1}\right); \quad \mu^3 = \frac{1}{\mu^{14}_{j-1,i-1,k+1}}\left(a^3 - \mu^2\mu^{15}_{j-1,i-1}\right);$$

$$\mu^4 = \frac{1}{\mu^{14}_{j-1,k-1}}\left(a^4 - \mu^1\mu^{17}_{j-1,i-1,k-1} - \mu^2\mu^{16}_{j-1,i-1}\right);$$

$$\mu^5 = \frac{1}{\mu^{14}_{j-1}}\left(a^5 - \mu^1\mu^{18}_{j-1,i-1,k-1} - \mu^2\mu^{17}_{j-1,i-1} - \mu^3\mu^{16}_{j-1,i-1,k+1} - \mu^4\mu^{15}_{j-1,k-1}\right);$$

$$\mu^6 = \frac{1}{\mu^{14}_{j-1,k+1}}\left(a^6 - \mu^2\mu^{18}_{j-1,i-1} - \mu^3\mu^{17}_{j-1,i-1,k+1} - \mu^5\mu^{15}_{j-1}\right);$$

$$\mu^7 = \frac{1}{\mu^{14}_{j-1,i+1,k-1}}\left(a^7 - \mu^4\mu^{17}_{j-1,k-1} - \mu^5\mu^{16}_{j-1}\right);$$

$$
\begin{aligned}
\mu^8 &= \frac{1}{\mu^{14}_{j-1,i+1}}\left(a^8 - \mu^4\mu^{18}_{j-1,k-1} - \mu^5\mu^{17}_{j-1} - \mu^6\mu^{16}_{j-1,k+1} - \mu^7\mu^{15}_{j-1,i+1,k-1}\right);\\
\mu^9 &= \frac{1}{\mu^{14}_{j-1,i+1,k+1}}\left(a^9 - \mu^5\mu^{18}_{j-1} - \mu^6\mu^{17}_{j-1,k+1} - \mu^8\mu^{15}_{j-1,i+1}\right);\\
\mu^{10} &= \frac{1}{\mu^{14}_{i-1,k-1}}\left(a^{10} - \mu^1\mu^{23}_{j-1,i-1,k-1} - \mu^2\mu^{22}_{j-1,i-1} - \mu^4\mu^{20}_{j-1,k-1} - \mu^5\mu^{19}_{j-1}\right);\\
\mu^{11} &= \frac{1}{\mu^{14}_{i-1}}\left(a^{11} - \mu^1\mu^{24}_{j-1,i-1,k-1} - \mu^2\mu^{23}_{j-1,i-1} - \mu^3\mu^{22}_{j-1,i-1,k+1} - \mu^4\mu^{21}_{j-1,k-1} -\right.\\
&\qquad \left.- \mu^5\mu^{20}_{j-1} - \mu^6\mu^{19}_{j-1,k+1} - \mu^{10}\mu^{15}_{i-1,k-1}\right);\\
\mu^{12} &= \frac{1}{\mu^{14}_{i-1,k+1}}\left(a^{12} - \mu^2\mu^{24}_{j-1,i-1} - \mu^3\mu^{23}_{j-1,i-1,k+1} - \mu^5\mu^{21}_{j-1} - \mu^6\mu^{20}_{j-1,k+1} - \mu^{11}\mu^{15}_{i-1}\right);\\
\mu^{13} &= \frac{1}{\mu^{14}_{k-1}}\left(a^{13} - \mu^1\mu^{26}_{j-1,i-1,k-1} - \mu^2\mu^{25}_{j-1,i-1} - \mu^4\mu^{23}_{j-1,k-1} - \mu^5\mu^{22}_{j-1} -\right.\\
&\qquad \left.- \mu^7\mu^{20}_{j-1,i+1,k-1} - \mu^8\mu^{19}_{j-1,i+1} - \mu^{10}\mu^{17}_{i-1,k-1} - \mu^{11}\mu^{16}_{i-1}\right);\\
\mu^{14} &= a^{14} - \mu^1\mu^{27}_{j-1,i-1,k-1} - \mu^2\mu^{26}_{j-1,i-1} - \mu^3\mu^{25}_{j-1,i-1,k+1} - \mu^4\mu^{24}_{j-1,k-1} - \mu^5\mu^{23}_{j-1} -\\
&\qquad - \mu^6\mu^{22}_{j-1,k+1} - \mu^7\mu^{21}_{j-1,i+1,k-1} - \mu^8\mu^{20}_{j-1,i+1} - \mu^9\mu^{19}_{j-1,i+1,k+1} - \mu^{10}\mu^{18}_{i-1,k-1} -\\
&\qquad - \mu^{11}\mu^{17}_{i-1} - \mu^{12}\mu^{16}_{i-1,k+1} - \mu^{13}\mu^{15}_{k-1} - \theta\left(\mu^3\mu^{15}_{j-1,i-1,k+1} + \mu^1\mu^{16}_{j-1,i-1,k-1} +\right.\\
&\qquad + \mu^3\mu^{18}_{j-1,i-1,k+1} + \mu^6\mu^{15}_{j-1,k+1} + \mu^4\mu^{16}_{j-1,k-1} + \mu^6\mu^{18}_{j-1,k+1} + \mu^9\mu^{15}_{j-1,i+1,k+1} +\\
&\qquad + \mu^7\mu^{16}_{j-1,i+1,k-1} + \mu^7\mu^{17}_{j-1,i+1,k-1} + \mu^8\mu^{16}_{j-1,i+1} + \mu^7\mu^{18}_{j-1,i+1,k-1} + \mu^8\mu^{17}_{j-1,i+1} +\\
&\qquad + \mu^9\mu^{16}_{j-1,i+1,k+1} + \mu^8\mu^{18}_{j-1,i+1} + \mu^9\mu^{17}_{j-1,i+1,k+1} + \mu^9\mu^{18}_{j-1,i+1,k+1} + \mu^1\mu^{19}_{j-1,i-1,k-1} +\\
&\qquad + \mu^1\mu^{20}_{j-1,i-1,k-1} + \mu^2\mu^{19}_{j-1,i-1} + \mu^1\mu^{21}_{j-1,i-1,k-1} + \mu^2\mu^{20}_{j-1,i-1} + \mu^3\mu^{19}_{j-1,i-1,k+1} +\\
&\qquad + \mu^2\mu^{21}_{j-1,i-1} + \mu^3\mu^{20}_{j-1,i-1,k+1} + \mu^3\mu^{21}_{j-1,i-1,k+1} + \mu^1\mu^{22}_{j-1,i-1,k-1} + \mu^4\mu^{19}_{j-1,k-1} +\\
&\qquad + \mu^3\mu^{24}_{j-1,i-1,k+1} + \mu^6\mu^{21}_{j-1,k+1} + \mu^{12}\mu^{15}_{i-1,k+1} + \mu^1\mu^{25}_{j-1,i-1,k-1} + \mu^4\mu^{22}_{j-1,k-1} +\\
&\qquad + \mu^7\mu^{19}_{j-1,i+1,k-1} + \mu^{10}\mu^{16}_{i-1,k-1} + \mu^3\mu^{27}_{j-1,i-1,k+1} + \mu^6\mu^{24}_{j-1,k+1} + \mu^9\mu^{21}_{j-1,i+1,k+1} +\\
&\qquad + \mu^{12}\mu^{18}_{i-1,k+1} + \mu^4\mu^{25}_{j-1,k-1} + \mu^7\mu^{22}_{j-1,i+1,k-1} + \mu^{13}\mu^{16}_{k-1} + \mu^6\mu^{27}_{j-1,k+1} + \mu^9\mu^{24}_{j-1,i+1,k+1} +\\
&\qquad + \mu^7\mu^{25}_{j-1,i+1,k-1} + \mu^7\mu^{26}_{j-1,i+1,k-1} + \mu^8\mu^{25}_{j-1,i+1} + \mu^7\mu^{27}_{j-1,i+1,k-1} + \mu^8\mu^{26}_{j-1,i+1} +\\
&\qquad + \mu^9\mu^{25}_{j-1,i+1,k+1} + \mu^8\mu^{27}_{j-1,i+1} + \mu^9\mu^{26}_{j-1,i+1,k+1} + \mu^9\mu^{27}_{j-1,i+1,k+1} + \mu^{10}\mu^{19}_{i-1,k-1} +\\
&\qquad + \mu^{10}\mu^{20}_{i-1,k-1} + \mu^{11}\mu^{19}_{i-1} + \mu^{10}\mu^{21}_{i-1,k-1} + \mu^{11}\mu^{20}_{i-1} + \mu^{12}\mu^{19}_{i-1,k+1} +\\
&\qquad + \mu^{11}\mu^{21}_{i-1} + \mu^{12}\mu^{20}_{i-1,k+1} + \mu^{12}\mu^{21}_{i-1,k+1} + \mu^{10}\mu^{22}_{i-1,k-1} + \mu^{13}\mu^{19}_{k-1} +\\
&\qquad \left.+ \mu^{12}\mu^{24}_{i-1,k+1} + \mu^{10}\mu^{25}_{i-1,k-1} + \mu^{13}\mu^{22}_{k-1} + \mu^{12}\mu^{27}_{i-1,k+1} + \mu^{13}\mu^{25}_{k-1}\right); \qquad (19)\\
\mu^{15} &= a^{15} - \mu^2\mu^{27}_{j-1,i-1} - \mu^3\mu^{26}_{j-1,i-1,k+1} - \mu^5\mu^{24}_{j-1} - \mu^6\mu^{23}_{j-1,k+1} - \mu^8\mu^{21}_{j-1,i+1} -\\
&\qquad - \mu^9\mu^{20}_{j-1,i+1,k+1} - \mu^{11}\mu^{18}_{i-1} - \mu^{12}\mu^{17}_{i-1,k+1};\\
\mu^{16} &= a^{16} - \mu^4\mu^{26}_{j-1,k-1} - \mu^5\mu^{25}_{j-1} - \mu^7\mu^{23}_{j-1,i+1,k-1} - \mu^8\mu^{22}_{j-1,i+1} - \mu^{13}\mu^{17}_{k-1};\\
\mu^{17} &= a^{17} - \mu^4\mu^{27}_{j-1,k-1} - \mu^5\mu^{26}_{j-1} - \mu^6\mu^{25}_{j-1,k+1} - \mu^7\mu^{24}_{j-1,i+1,k-1} - \mu^8\mu^{23}_{j-1,i+1} -\\
&\qquad - \mu^9\mu^{22}_{j-1,i+1,k+1} - \mu^{13}\mu^{18}_{k-1};\\
\mu^{18} &= a^{18} - \mu^5\mu^{27}_{j-1} - \mu^6\mu^{26}_{j-1,k+1} - \mu^8\mu^{24}_{j-1,i+1} - \mu^9\mu^{23}_{j-1,i+1,k+1};\\
\mu^{19} &= a^{19} - \mu^{10}\mu^{23}_{i-1,k-1} - \mu^{11}\mu^{22}_{i-1} - \mu^{13}\mu^{20}_{k-1};\\
\mu^{20} &= a^{20} - \mu^{10}\mu^{24}_{i-1,k-1} - \mu^{11}\mu^{23}_{i-1} - \mu^{12}\mu^{22}_{i-1,k+1} - \mu^{13}\mu^{21}_{k-1};\\
\mu^{21} &= a^{21} - \mu^{11}\mu^{24}_{i-1} - \mu^{12}\mu^{23}_{i-1,k+1};\\
\mu^{22} &= a^{22} - \mu^{10}\mu^{26}_{i-1,k-1} - \mu^{11}\mu^{25}_{i-1} - \mu^{13}\mu^{23}_{k-1};
\end{aligned}
$$

$$\mu^{23} = a^{23} - \mu^{10}\mu^{27}_{i-1,k-1} - \mu^{11}\mu^{26}_{i-1} - \mu^{12}\mu^{25}_{i-1,k+1} - \mu^{13}\mu^{24}_{k-1};$$
$$\mu^{24} = a^{24} - \mu^{11}\mu^{27}_{i-1} - \mu^{12}\mu^{26}_{i-1,k+1}; \qquad \mu^{25} = a^{25} - \mu^{13}\mu^{26}_{k-1};$$
$$\mu^{26} = a^{26} - \mu^{13}\mu^{27}_{k-1}; \qquad \mu^{27} = a^{27}.$$

Для всех представленных трехмерных схем оптимальное значение параметра θ определяется выражением (13). Стоит также отметить, что при $\theta = 0$ схемы DIF и PIF переходят в ILU0, а при $\theta = 1$ схема DIF переходит в схему MILU0.

DIF и PIF как предобусловливатели для метода бисопряженных градиентов

Рассмотрим эффективный метод решения задач с несимметричными матрицами — метод бисопряженных градиентов BiCG. Одним из наиболее устойчивых и быстро сходящихся вариантов метода бисопряженных градиентов является метод BiCGSTAB [10], который и будем использовать. Формулы метода следующие:

$$r_0 = f - A\varphi_0; \qquad \widetilde{r}_0 = r_0; \qquad \rho_{-1} = \alpha_{-1} = \omega_{-1} = 1; \qquad v_{-1} = p_{-1} = 0;$$

для $i = 0, 1, 2, \ldots$

$$\rho_i = (\widetilde{r}_0, r_i)\,; \quad \beta_{i-1} = \frac{\rho_i}{\rho_{i-1}}\frac{\alpha_{i-1}}{\omega_{i-1}}; \quad p_i = r_i + \beta_{i-1}\left(p_{i-1} - \omega_{i-1}v_{i-1}\right);$$
$$\hat{p} = K^{-1}p_i; \quad v_i = A\hat{p}; \quad \alpha_i = \frac{\rho_i}{(\widetilde{r}_0, v_i)}; \quad s = r_i - \alpha_i v_i; \quad u = K^{-1}s;$$
$$t = Au; \quad \omega_i = \frac{(t,s)}{(t,t)}; \quad \varphi_{i+1} = \varphi_i + \alpha_i\hat{p} + \omega_i u; \quad r_{i+1} = s - \omega_i t,$$

где $K^{-1} = (MN)^{-1}$ — предобусловливающая матрица.

Матрицы M, N будем выбирать из методов DIF и PIF: (7), (8) для двумерного 9-точечного случая и (18), (19) для трехмерного 27-точечного случая (с другими вариантами предобусловливателей можно ознакомиться, например, в [9]).

Оптимальное значение параметра θ при построении предобусловливателей для BiCGSTAB также определяется выражением (13).

Результаты тестирования предобусловливателей DIF и PIF

Для испытания разработанных предобусловливателей DIF и PIF в целях верификации тестировались их реализации в библиотеке ГНЦ РФ-ФЭИ (язык Фортран) и в библиотеке РФЯЦ-ВНИИЭФ PMLP/ParSol (язык C++) [11]. Использовался итерационный метод BiCGSTAB.

Двумерные задачи. Решалась задача Дирихле для уравнения диффузионно-конвективного вида

$$-\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + k_x\frac{\partial\varphi}{\partial x} + k_y\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right) = f, \qquad -1 < x, y < 1.$$

Функция f выбиралась такой, чтобы решение имело вид

$$\varphi = \left(1 + \cos\left(\pi x\right)\right)\left(1 + \cos\left(\pi y\right)\right).$$

Выбирался следующий критерий близости приближенного решения к точному:

$$\varepsilon_j = \sqrt{\frac{(r^j, r^j)}{(f,f)}} < eps = 10^{-6}, \tag{20}$$

где $r^j = A\varphi^j - f$ — невязка j-го приближения; eps — заданная точность решения.

В качестве начального приближения выбиралось

$$\varphi = 0. \tag{21}$$

Варьировались значения k_x, k_y.

На рис. 1, 2 приведено количество итераций ν для двумерной задачи Дирихле при оптимальном значении θ (13) и при $\theta = 0$ для двух случаев варьирования коэффициентов k_x, k_y.

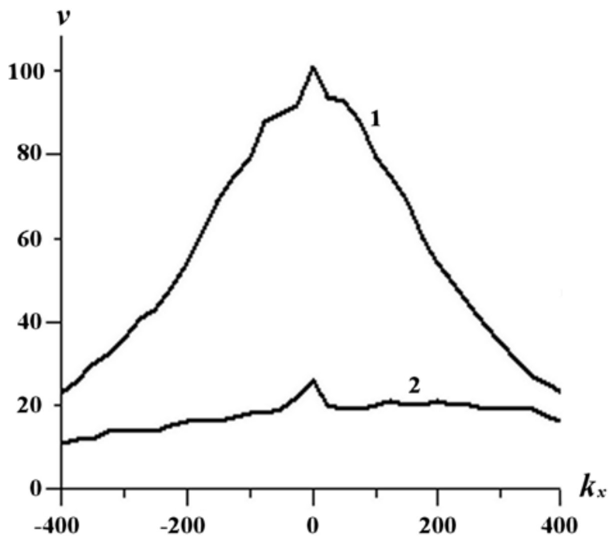

Рис. 1. Число итераций BiCGSTAB с PIF при $-400 < k_x < 400$, $k_y = 0$, $n = 400$ для двух значений θ: $1 - \theta = 0$; $2 - \theta = 1 - 1/(2n)$

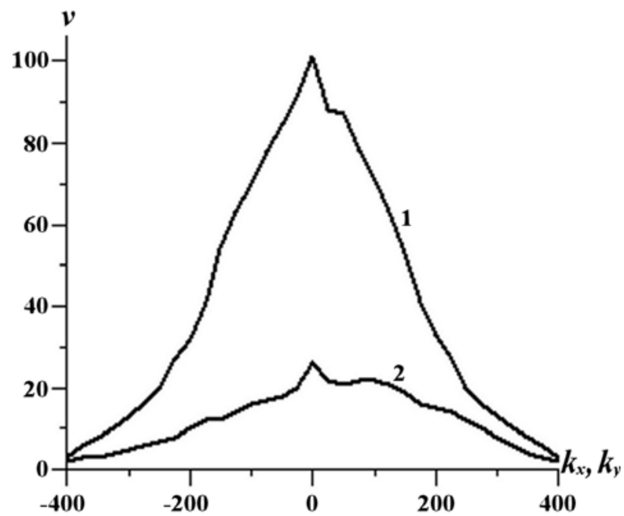

Рис. 2. Число итераций BiCGSTAB с PIF при $-400 < k_x = k_y < 400$, $n = 400$ для двух значений θ: $1 - \theta = 0$; $2 - \theta = 1 - 1/(2n)$

Трехмерные задачи. Решалась задача Дирихле для уравнения диффузионно-конвективного вида

$$-\left[\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} + k\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \frac{\partial\varphi}{\partial y} + \frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)\right] = f, \qquad -1 < x, y, z < 1.$$

Функция f выбиралась такой, чтобы решение имело вид

$$\varphi = (1 + \cos(\pi x))(1 + \cos(\pi y))(1 + \cos(\pi z)). \tag{22}$$

Задавался критерий точности решения (20) и начальное приближение (21). Варьировались значения k и число узлов по одному направлению $n = n_1 = n_2 = n_3$.

На рис. 3 приведено количество итераций для трехмерной задачи Дирихле при предобусловливании по DIF на 27-точечном шаблоне при оптимальном значении θ (13) и при $\theta = 0$ для случая, когда коэффициент k меняется в пределах $-60 < k < 60$ при $n = 61$. На рис. 4 для той же задачи приведена зависимость числа итераций от количества узлов $10 \le n \le 70$ по одному направлению при $k = 0$ для оптимального значения θ (13) и для $\theta = 0$.

Графики на рис. 1—4 иллюстрируют эффективность использования оптимального значения θ (13): число итераций в несколько (2—5) раз меньше, чем при $\theta = 0$.

Рис. 5 демонстрирует сравнение предобусловливателей ILU0 и DIF при решении одной и той же задачи на 27-точечном шаблоне. Сравниваются зависимости числа итераций от количества узлов сетки $5 \le n < 80$ по одному направлению. Решалась тестовая задача (16), (17) на кубе $-1 < x, y, z <$ < 1 с элементами матрицы A, равными $a^l_{j,i,k} = -1$ $\left(l = \overline{1,13}, \overline{15,27}\right)$; $a^{14}_{j,i,k} = 26$. Задавался критерий точности решения (20) и начальное приближение (21). Функция f выбиралась такой, чтобы решение имело вид (22).

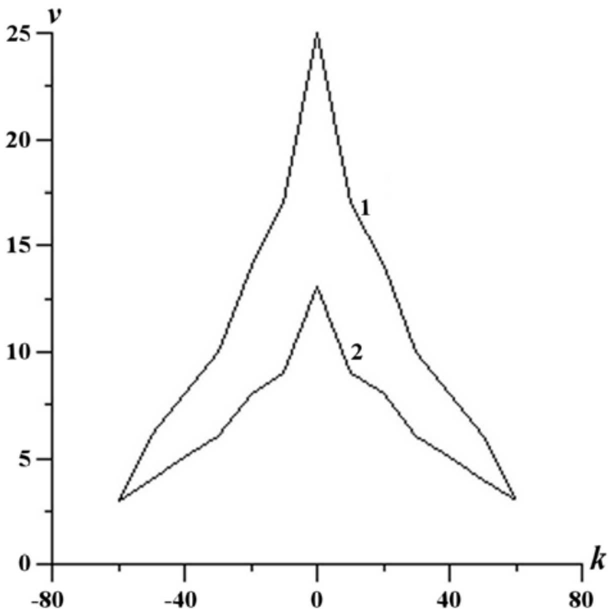

Рис. 3. Зависимости числа итераций от k при $n = 61$ для двух значений θ: 1 — $\theta = 0$; 2 — $\theta = 1 - 1/(2n)$

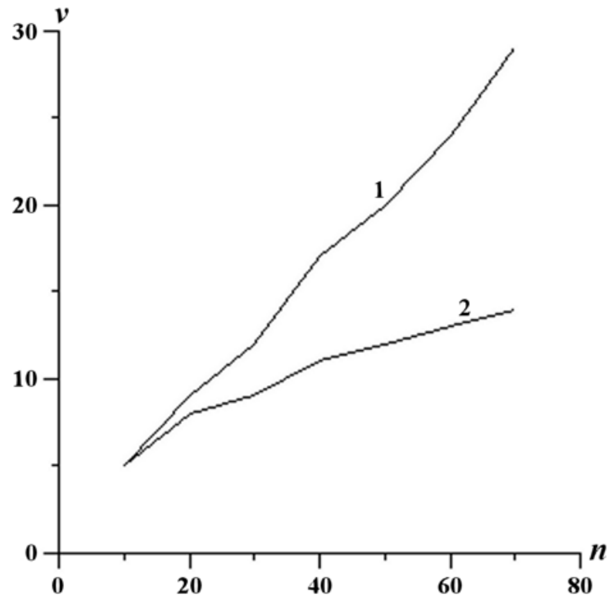

Рис. 4. Зависимости числа итераций от n при $k = 0$ для двух значений θ: 1 — $\theta = 0$; 2 — $\theta = 1 - 1/(2n)$

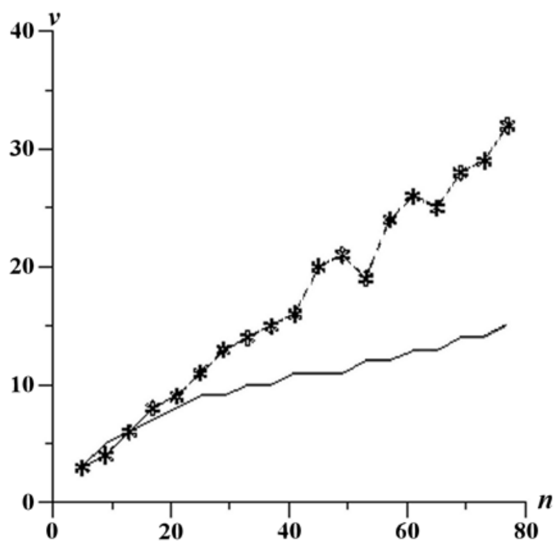

Рис. 5. Зависимость числа итераций от n для метода BiCGSTAB на 27-точечном шаблоне: $*$ — ILU0; - - - — DIF для $\theta = 0$; —— — DIF для $\theta = 1 - 1/(2n)$

Рис. 5 подтверждает, что предобусловливатели ILU0 и DIF с $\theta = 0$ эквивалентны по числу итераций. Предобусловливатель DIF с оптимальным значением θ (13) при $n > 20$ приводит к сокращению числа итераций по сравнению с $\theta = 0$. Это различие при увеличении n возрастает.

Сравнение предобусловливателей DIF и PIF. Выполненные численные исследования на двумерных и трехмерных тестовых задачах с симметричными и несимметричными исходными M-матрицами показали высокую скорость сходимости предобусловленного по DIF и PIF метода BiCGSTAB, причем оказалось, что в области оптимальных значений параметра θ скорости сходимости этих методов практически совпадают. Это наглядно иллюстрируется графиками зависимости количества итераций от θ при предобусловливании по DIF и PIF, приведенными на рис. 6 для двумерной задачи Дирихле при $k = 0$, $n = 101$.

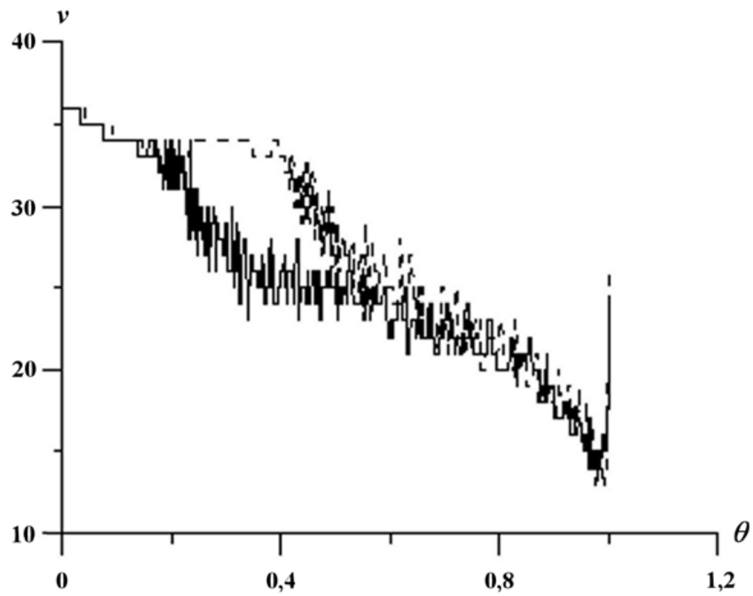

Рис. 6. Число итераций в зависимости от параметра θ: - - - — DIF; —— — PIF

Нарушение *M*-матричности. Было выполнено тестирование предобусловленного по DIF и PIF метода BiCGSTAB на 9-диагональных положительно определенных не M-матрицах, порождаемых конечно-разностной аппроксимацией реальных двумерных задач диффузионного типа в общем случае на криволинейных неортогональных сетках.

Тестирование показало, что предложенные методы как при $\theta = 1$, так и при оптимальном значении θ (13) не всегда ускоряют сходимость по сравнению с методом ILU0. Причиной тому является сильное отличие таких матриц от M-матриц. Поэтому были предприняты попытки найти такой вариант метода, чтобы он был и эффективным, и универсальным для решения задач с не M-матрицами. В частности, был предложен следующий способ решения задач с не M-матрицами:

1. При построении предобусловливателя все положительные недиагональные элементы исходной матрицы зануляются, а диагональный элемент увеличивается на сумму всех исключенных членов соответствующей строки матрицы.
2. Итерационный параметр θ полагается равным единице.

Варианты предобусловливателей, использующих описанный выше механизм исключения положительных недиагональных членов, будем обозначать DIF1 и PIF1.

Было проведено тестирование описанных выше методов. Рассматривалось 7 тестов. В таблице приведены результаты тестирования — число итераций для метода BiCGSTAB с соответствующими предобусловливателями. Напомним, что в предобусловливателях DIF и PIF значение $\theta = 0$ соответствует предобусловливанию по схеме неполной факторизации Холецкого, а значение $\theta = 1$ в методе DIF соответствует предобусловливанию по модифицированной схеме неполной факторизации Холецкого.

Из результатов видно, что только при предобусловливании по DIF1 при $\theta = 1$ метод BiCGSTAB сходится для всех тестовых задач и показывает при этом достаточно высокую скорость сходимости.

Далее представлены результаты тестирования предобусловливателей DIF и DIF1 на трехмерной тестовой задаче диффузионного типа с ненулевыми смешанными производными по пространству, матрица которой не является M-матрицей. Рассматривались два случая начальных приближений. В первом случае начальное приближение задавалось равным нулю $\left(\varphi^0 = 0\right)$, во втором — $\varphi^0 = (-1)^i$, $i = 1, 2, \ldots, n^3$. Правая часть задавалась такой, чтобы точное решение было равно единице. Количество узлов для этого примера было следующим: $N_X = 51$, $N_Y = 21$, $N_Z = 5$.

На рис. 7, 8 приведены зависимости числа итераций BiCGSTAB от параметра θ для предобусловливателей DIF и DIF1. Рис. 7 соответствует начальному приближению $\varphi^0 = 0$, рис. 8 — начальному

Количество итераций для тестовых задач с не *M*-матрицами по методу BiCGSTAB с предобусловливателями ILU0, DIF, PIF, DIF1 и PIF1

Номер теста	Сетка	ILUO из PMLP/ ParSol	DIF/ PIF, $\theta = 0$	DIF1/ PIF1, $\theta = 0$	PIF, $\theta = 1$	PIF1, $\theta = 1$	DIF, $\theta = 1$	DIF1, $\theta = 1$
1	$N_X = 180, \quad N_Y = 3\,146$	97	111	99	–*	401	–	17
2	$N_X = 256, \quad N_Y = 733$	11	12	24	18	15	10	12
3	$N_X = 100, \quad N_Y = 228$	686	531	1 123	663	724	261	258
4	$N_X = 100, \quad N_Y = 228$	10	11	19	12	16	4	5
5	$N_X = 100, \quad N_Y = 228$	–	–	–	–	–	113	138
6	$N_X = 600, \quad N_Y = 988$	11	11	141	4	5	3	3
7	$N_X = 47, \quad N_Y = 144$	198	252	76	–	91	–	69

* Отсутствие сходимости за 5 000 итераций.

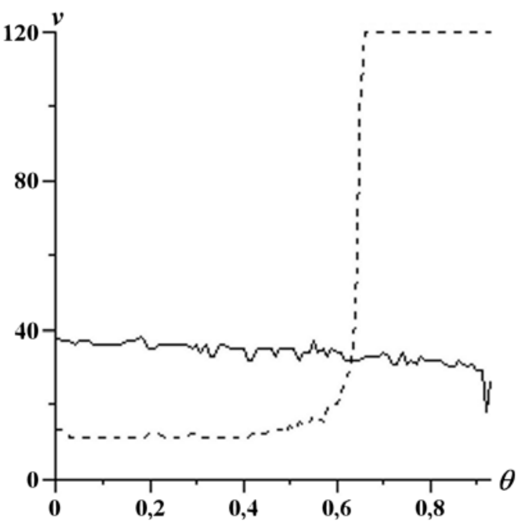

Рис. 7. Зависимость числа итераций от параметра θ для предобусловливателей при $\varphi^0 = 0$: - - - — DIF; —— — DIF1

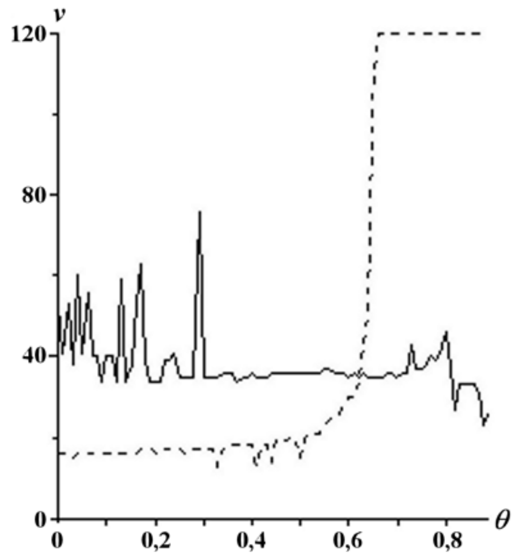

Рис. 8. Зависимость числа итераций от параметра θ для предобусловливателей при $\varphi^0 = (-1)^i$, $i = 1, 2, \ldots, n^3$: - - - — DIF; —— — DIF1

приближению $\varphi^0 = (-1)^i$, $i = 1, 2, \ldots, n^3$. Эти результаты показывают, во-первых, что предобусловливатель DIF1 значительно устойчивей, чем предобусловливатель DIF, в том смысле, что метод BiCGSTAB, предобусловленный по DIF1, сходится во всем диапазоне изменения параметра θ от нуля до единицы, в то время как он же, но предобусловленный по DIF, при значениях $\theta > 0{,}6$ расходится. Во-вторых, видно, что начальное приближение оказывает заметное влияние на количество итераций. Для гладкого начального приближения (см. рис. 7) для обоих предобусловливателей количество итераций меньше, чем для негладкого (см. рис. 8). В данном тестовом примере число итераций при предобусловливании по DIF при $0 \le \theta \le 0{,}5$ примерно в два раза меньше, чем по DIF1.

Распараллеливание

Укажем принципы конвейеризации для создания параллельных решателей (на примере ILU0p9 из PMLP/ParSol для 9-точечного шаблона в случае двумерной задачи):

1. Занумеруем точки двумерной сетки (регулярной) размером $n \times m$ от начала координат снизу вверх, слева направо, так что нумерация точек каждого следующего столбца сетки начинается снизу. При такой нумерации ILU0-разложение строки матрицы для точки (i, j) сетки зависит от коэффициентов разложения матрицы в четырех точках: $(i-1, j-1)$, $(i-1, j)$, $(i-1, j+1)$, $(i, j-1)$ и может быть выполнено, если разложение в этих точках уже проведено.

2. Разрезаем сетку на $m/2$ подобластей по вертикали для конвейеризации на $m/2$ процессорах (на большее число процессоров легко обобщается).
3. Выполняем первый такт конвейера: на первом процессоре вычисляем ILU0 для точек $(1,1)$, $(1,2)$, $(1,3)$, $(1,4)$, $(2,1)$, $(2,2)$, $(2,3)$. Выполняем второй такт: на втором процессоре выполняем разложение в точках $(3,1)$, $(3,2)$, $(4,1)$, а на первом — в точках $(1,5)$, $(2,4)$. Выполняем третий такт: на третьем процессоре — разложение в точках $(5,1)$, $(5,2)$, $(6,1)$, на втором — в точках $(3,3)$, $(4,2)$, на первом — в точках $(1,6)$, $(2,5)$. Так выстраивается волна конвейера, которая обеспечивает разложение (т. е. получение коэффициентов матриц L и U в ILU0) с необходимым запаздыванием в точках сетки с возрастанием номера процессора и одновременную работу всех (или части) процессоров, начиная со второго такта.
4. При предобусловливании в ходе итерационного процесса, например в методе BiCGSTAB, необходимо решить треугольную систему с матрицей L и матрицей U. Конвейеризация решения с матрицей L в точности идентична алгоритму ILU0 в силу возможности идентичного порядка вычислений. Конвейеризация решения с матрицей U выполняется в обратном порядке от верхней крайней правой точки сетки (n,m) с потактовым распространением волны вычислений вниз и влево, обратно волне при решении с матрицей L.

Данный алгоритм при фиксированном числе процессоров обладает тем большим параллелизмом, чем больше вытянутость сетки по вертикали. Иначе (при такой же декомпозиции, так как можно разрезать сетку в другом направлении) требуется усовершенствование описанной схемы алгоритма (оно возможно).

Заключение

Численные исследования показали, что эффективность метода BiCGSTAB, предобусловленного по DIF и по PIF, примерно одинакова. При оптимальном значении итерационного параметра $\theta = \theta_{opt} = 1 - 1/(2n)$, где n — максимальное число узлов по одному из направлений, предобусловливатели DIF и PIF позволяют получить наиболее высокую скорость сходимости как для симметричных, так и для несимметричных исходных матриц. Они могут быть рекомендованы для широкого использования при решении сложных пространственно-временных задач переноса материи в различных областях математической физики.

В то же время остается открытым вопрос о теоретической оценке скорости сходимости метода BiCGSTAB, предобусловленного по DIF и PIF, а также о теоретически оптимальном значении итерационного параметра θ. Эмпирическая формула для оптимального значения θ (13) может быть использована в практических расчетах, однако нуждается в строгом теоретическом обосновании. Пределом оптимального значения θ при стремлении n к бесконечности является единица.

Для решения задач с не M-матрицами предложен устойчивый и эффективный метод на основе исключения из предобусловливаемой матрицы положительных недиагональных членов с одновременным увеличением диагональных на сумму всех исключенных членов в данной строке матрицы. При этом нужно использовать предобусловливатель DIF с параметром $\theta = 1$.

Последовательные предобусловливатели PIF и DIF для двумерных задач на 9-точечном шаблоне и DIF для трехмерных задач на 27-точечном шаблоне включены в библиотеку решателей PMLP/ParSol, разработанную в РФЯЦ-ВНИИЭФ [11, 12]. Используя имеющийся в библиотеке PMLP/ParSol алгоритм распараллеливания предобусловливателя ILU0 для 9-точечного шаблона, можно довольно просто распараллелить PIF и DIF.

Список литературы

1. *Булеев Н. И.* Численный метод решения двумерных уравнений диффузии // Атомная энергия. 1959. Т. 6, № 3. С. 338—340.
2. *Ильин В. П.* Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Наука, 1995. С. 288.

3. *Булеев Н. И.* Новый вариант метода неполной факторизации для решения двумерных разностных уравнений диффузии // Числ. методы мех. спл. среды. 1978. Т. 9, № 1. С. 5—19.
4. *Гинкин В. П.* Метод параболических прогонок для решения двумерных уравнений эллиптического типа: Препринт ФЭИ-1153. Обнинск, 1981.
5. *Гинкин В. П.* Метод h-факторизации для решения двумерных уравнений эллиптического типа // Вычислительные методы линейной алгебры. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1977. С. 123—132.
6. *Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н.* Вычислительные методы линейной алгебры. М.: Физматгиз, 1963.
7. *Ginkin V. P., Kulik A. V., Naumenko O. M.* An efficient preconditioning procedure in the conjugate gradient method for 3D HEX-Z geometry // Proc. of the 4-th Int. Conf. on Supercomputing in Nuclear Computations (SNA 2000). Tokyo, Japan, 2000.
8. *Gustafsson I.* A class of first order factorization methods // BIT. 1978. Vol. 18. P. 142—156.
9. *Гинкин В. П., Гинкина О. М., Ганина С. М. и др.* Эффективный метод решения плохо обусловленных трехмерных уравнений эллиптического типа на примере решения задачи Стефана для моделирования кристаллизации расплавов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 4. С. 45—57.
10. *Van der Vorst H. A.* Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of non-symmetric linear systems // SIAM J. Sci. Statist. Comput. 1992. Vol. 13. P. 631—644.
11. *Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г. и др.* Реализованные методы решения разреженных линейных систем в библиотеке линейной алгебры // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2002. Вып. 2. С. 43—53.
12. *Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г. и др.* Библиотека решателей разреженных линейных систем // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2004. Вып. 7. С. 80—95.

Статья поступила в редакцию 10.03.09.