



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 28 за 2014 г.



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

О многосеточном и явно-
итерационном методах
решения параболических
уравнений

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. О многосеточном и явно-итерационном методах решения параболических уравнений // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2014. № 28. 36 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-28>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Российской академии наук

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

**О многосеточном и явно-итерационном
методах решения параболических
уравнений**

Москва — 2014

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

О многосеточном и явно-итерационном методах для параболических уравнений

Параллельные алгоритмы решения трехмерных параболических уравнений необходимы для масштабируемого моделирования процессов диффузии и теплопроводности на многопроцессорных компьютерах. В работе изучены две параллельные схемы численного интегрирования. Первая – это неявная схема, разрешаемая многосеточным методом. Вторая схема основана на явных итерациях с чебышевскими параметрами. Приведено сравнение схем, в том числе на задачах с разрывными коэффициентами. Показано, что обе схемы обеспечивают высокую параллельную эффективность, хорошо масштабируются и позволяют преодолеть трудности, связанные с достижением экзафлопсных скоростей.

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

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

On multigrid and explicit-iterative methods for parabolic equations

Parallel solvers for three-dimensional parabolic equations needed for scalable simulation of diffusion and heat conduction on supercomputers with a large number of processors. Two parallel schemes of numerical integration are studied in this paper. The first one is the implicit scheme, resolved by the multigrid. The second one is based on explicit Chebyshev iterations. The results of numerical experiments are given for model problems including case of discontinuous coefficients. Computations show these techniques provide high parallel efficiency and allow to overcome scalability challenges in preparation for exascale.

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

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 13-01-12079-офи-м, и Программы № 25 фундаментальных исследований Президиума РАН

1. Введение

Рассмотрим проблему численного интегрирования по времени трехмерных параболических уравнений с разрывными коэффициентами. Практическая необходимость в эффективном решении таких задач вызвана их широким распространением в математических моделях диффузии и теплопроводности в неоднородных областях с существенно различающимися свойствами. Повышение интереса к указанной проблеме связано с парадигмой программирования в условиях ультрапараллельных вычислений: требуются коды для суперкомпьютеров с большим числом процессоров. Такие коды должны обеспечивать масштабируемое моделирование на расчетных сетках с миллиардом (и более) узлов с достижением в перспективе экзафлопсной производительности.

Для параболических уравнений можно применять схемы расщепления по пространственным переменным. Но они хуже распараллеливаются и в ряде случаев (области неправильной формы, неструктурированные сетки и т.п.) могут оказаться малопригодными. Универсальной является явная схема, но она используется крайне редко из-за известного ограничения на шаг по времени. При записи неявных разностных схем возникает необходимость решения систем линейных алгебраических уравнений, что для многомерных краевых задач является серьезной проблемой. Обычно для решения такой системы на каждом шаге по времени используется какой-либо итерационный процесс. При таком подходе трудной задачей является выбор численного значения критерия останова. Для большинства задач относительное уменьшение нормы невязки до значений $\varepsilon = 10^{-4} \div 10^{-5}$ позволяет получить разумную точность интегрирования; увеличение значения ε может привести к большой ошибке, уменьшение ε приводит к росту объема вычислений.

Отметим, что трудной является проблема выбора шага интегрирования по времени, обеспечивающего заданную точность интегрирования. Для ее решения разработаны специальные методы с автоматическим выбором шага, но

здесь эта проблема обсуждаться не будет. Используя один из методов пространственной дискретизации, например, стандартную 7-точечную конечно-объемную 3D дискретизацию, можно исходную задачу свести к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Мы рассмотрим две схемы численного интегрирования такой системы. Первая схема – неявная двухслойная по времени схема, разрешаемая относительно неизвестной функции на верхнем слое с помощью многосеточного алгоритма. Ее обозначение ниже – схема ММ (схема на основе многосеточного метода). Детальное изложение многосеточного алгоритма, являющегося разновидностью метода Р.П. Федоренко [1], дано в [2 – 5]. Вторая схема – ЛИ-М – специально разработана для решения параболических уравнений [6]. Отметим, что алгоритм ММ использует чебышевские итерации при решении уравнений на самой грубой сетке, а также на этапах сглаживания. По указанию в качестве сглаживателя может использоваться и схема ЛИ-М в модификации, обеспечивающей сглаживание невязки в заданном интервале частот. Мы изучим работоспособность схем ММ и ЛИ-М при решении параболических уравнений с наличием в коэффициентах диффузии и коэффициентах поглощения разрывов с большими скачками.

Сложность решения параболических уравнений принято характеризовать «параболическим» числом Куранта $cou = O(\tau \cdot h^{-2})$, где τ – шаг по времени, h – характерный шаг сетки по пространству. Для 3D задач вычислительные затраты схемы ММ на одном шаге по времени составляют $O(h^{-3})$ и при фиксированной сетке от числа cou не зависят. Но константа в оценке $O(h^{-3})$ зависит от задачи и заданной точности разрешения неявной схемы. В 3D случае объем вычислений схемы ЛИ-М есть $O(\sqrt{\tau \cdot h^{-2}} \cdot h^{-3})$ и константа в этой оценке зависит только от задачи. Можно сказать, что асимптотически при $h \rightarrow 0$ затраты схемы ЛИ-М в $O(\sqrt{cou})$ раз больше, чем схемы ММ.

Преимущества схемы ММ – это работоспособность в любом диапазоне чисел Куранта и асимптотическая оптимальность. Результаты расчетов показывают, что эти преимущества ярко проявляются при больших значениях числа Куранта. При относительно небольших значениях $coi \approx 10^2 - 10^4$ становится конкурентоспособной схема ЛИ-М (как по объему вычислительных затрат, так и по точности, см. разделы 4, 5). Отличительной чертой схемы ЛИ-М, повышающей ее конкурентоспособность, является отсутствие настроечных параметров. В схеме ММ они есть: это точность итерационного решения неявной схемы, тип и параметры сглаживателя, число сеточных уровней, точность решения системы уравнений на самой грубой сетке. Впрочем, настройка параметров легко делается в процессе первых прикидочных расчетов, а два последних параметра можно задавать по простым правилам, см. раздел 5.

Расчеты показывают, что схемы ММ и ЛИ-М масштабируются на большое число процессоров и позволяют преодолеть трудности достижения в перспективе экзафлопсных скоростей. В данной работе мы изучаем свойства этих схем для случая конечно-объемной 7–точечной трехмерной дискретизации; обобщение на 27–точечные дискретизации представляется очевидным.

2. Постановка задачи

Рассмотрим начально-краевую задачу для параболического уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \operatorname{div} (\kappa \operatorname{grad} u) - a_0 \cdot u + f, & r \in G, \\ -(\kappa \operatorname{grad} u) \cdot n &= \alpha u + \gamma, & r \in \Gamma. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $r = (t, x, y, z) \in G = [t_0; T] \times \Omega$, $[t_0; T]$ – заданный интервал времени, Ω – трехмерная область с границей Γ , n – вектор внешней нормали к границе области. Функции $\kappa(r)$, $a_0(r)$, $f(r)$, $\alpha(r)$, $\gamma(r)$ являются заданными, а функция $u(r)$ – искомой. В общем случае κ – тензор диффузии; мы здесь ограничимся случаем, когда κ – скалярная функция или диагональная 3×3 –матрица с положительными диагональными элементами. Задача (1) решается с краевыми

условиями общего вида и начальными данными при $t = t_0$. Считаем, что входные данные обеспечивают разрешимость начально-краевой задачи.

Проблемы построения сетки и аппроксимации по пространству задачи (1) здесь не обсуждаются, поэтому считаем область Ω для простоты d -мерным прямым параллелепипедом. Возьмем в $[t_0, T] \times \Omega$ сетку $\Omega_{h,\tau} = \Omega_h \times \Omega_\tau$, где $\Omega_\tau = \{t_j, 0 \leq j \leq J, t_J = T\}$ – сетка по времени с переменным шагом $\tau > 0$: $\tau_j = t_{j+1} - t_j$, $\Omega_h = \{x_n \in \Omega, 0 \leq n \leq N\}$ – декартова сетка в параллелепипеде, зависящая от параметра h (шага сетки), характеризующего средний размер ячеек.

Запишем дифференциально-разностную аппроксимацию задачи (1) в операторной форме (полагая, что краевые условия учтены в определении оператора L_h):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + L_h \cdot u = f. \quad (2)$$

Считаем, что оператор L_h является самосопряженным и неотрицательно-определенным. Переход со слоя t_j на верхний слой $t_{j+1} = t_j + \tau$ может быть реализован разными способами. Рассмотрим явную схему

$$\frac{u_{j+1} - u_j}{\tau} + L_h \cdot u_j = f_j, \quad (3)$$

требующую жесткого ограничения на шаг по времени, и чисто неявную схему

$$\frac{u_{j+1} - u_j}{\tau} + L_h \cdot u_{j+1} = f_j. \quad (4)$$

Эта неявная схема может быть записана в виде системы линейных уравнений

$$(I + \tau \cdot L_h) u_{j+1} = u_j + \tau f_j; \quad (5)$$

здесь I – тождественный сеточный оператор. Запишем эту систему в виде

$$A_h u_h = g_h, \quad (6)$$

где $A_h = I + \tau \cdot L_h$ – разреженная $N \times N$ - матрица, u_h, g_h – искомая и заданная сеточные функции. Считаем, что оценки границ спектра $\lambda_{\min} \geq 0$ и λ_{\max} оператора A_h известны; в ряде случаев они могут быть вычислены, см. [2].

Систему (6) можно решить многосеточным алгоритмом или другим итерационным методом. Как уже говорилось выше, вопрос о согласовании точности итерационного решения такой системы с требуемой точностью интегрирования по времени является открытым и решается эмпирическим путем.

Помимо итерационных приближений к неявной схеме, эффективными являются явные многошаговые схемы решения эволюционных уравнений, использующие многочлены Чебышева. Такие схемы сравнительно экономны по объему вычислений и удобны для реализации на параллельных компьютерах; к схемам такого типа относится схема ЛИ-М. Ее особенностью является учет известного характерного свойства разностной аппроксимации эллиптических уравнений, сформулированного в работе [7] Л.А. Люстерником: «Если “первые” гладкие собственные элементы аппроксимируют собственные функции дифференциального оператора, то “последние” собственные элементы носят “паразитический” характер и зависят в основном от свойств сетки и сеточной аппроксимации». Отсюда следует известный принцип: нужен правильный расчет эволюции во времени первых, низкочастотных компонент разностного решения, а для высокочастотных компонент достаточно обеспечить их ограниченность для устойчивости.

В схеме ЛИ-М этот принцип выполнен. Расчет по схеме ЛИ-М решения на верхнем слое по времени состоит в выполнении определенного числа явных итераций с параметрами, являющимися корнями многочленов Чебышева 1 рода. Применение чебышевских параметров для решения эволюционных уравнений вошло в практику в 1980-е годы [8 – 11], но часть основных идей сформировалась в 1950-е годы (см. [12]). Главная идея схемы ЛИ-М отличается от обычного чебышевского ускорения итераций: выбор числа итераций и итерационных параметров диктуется условиями аппроксимации и устойчивости, а не оптимизацией сходимости итераций к решению неявной схемы.

3. Схема на основе многосеточного метода (схема ММ)

3.1. Основные элементы алгоритма

Неявная схема, записанная в виде системы линейных уравнений (6), может быть решена многосеточным алгоритмом [1 – 5]. Изложим этот метод в двухсеточном представлении, т.е. опишем переход с подробной сетки на другую сетку, называемую грубой. Объекты этих сеток будем отмечать символами h и H соответственно. В двухсеточном представлении итерирующий оператор многосеточного метода имеет вид

$$Q = S_p \cdot (I - P \cdot A_H^{-1} \cdot R \cdot A_h) \cdot S_p. \quad (7)$$

Здесь A_h, A_H – операторы на подробной и грубой сетках; P и R – операторы межсеточных переходов – с грубой сетки на подробную (интерполяции P) и с подробной на грубую сетку (проектирования R); S_p – оператор сглаживания с числом p пред- и постсглаживающих шагов. В рассматриваемом алгоритме оператор A_H строится редискретизацией, то есть на грубой сетке записывается аппроксимация исходного уравнения (5) (с однородными краевыми условиями), а в качестве правой части на грубой сетке берется невязка результата действия оператора проектирования R на невязку $r_h = g_h - A_h u_h$.

Стандартный оператор интерполяции P определяет переменные на подробной сетке с помощью трилинейной интерполяции грубосеточных переменных. Для решения задач с разрывными коэффициентами диффузии нами построен специальный оператор интерполяции P в так называемой операторно-зависимой форме. Этот оператор основан на приближенном учете непрерывности диффузионного потока на поверхности разрыва коэффициента диффузии. В качестве оператора сборки R всегда строится оператор, сопряженный к оператору интерполяции $R = P^*$.

Разрешающий оператор многосеточного метода после выполнения m итераций имеет вид $C = (I - Q^m) \cdot A_h^{-1}$; с помощью этого оператора можно

формально записать полученное приближенное решение как $u_h = C \cdot f_h$. Видим, что при $Q^m \rightarrow 0$ разрешающий оператор многосеточного метода приближает обратный к $A_h: C \rightarrow A_h^{-1}$.

Будем предполагать, что на каждом сеточном уровне, включая самый грубый, известны оценки границ спектра $\lambda_{min} \geq 0$ и λ_{max} . Верхняя граница легко и достаточно хорошо оценивается с помощью теоремы Гершгорина о кругах, а в качестве нижней границы λ_{min} на каждом сеточном уровне можно взять оценку, полученную на основной сетке, см. [2].

3.2. Обращение грубосеточного оператора

Для решения на самой грубой сетке системы $A_H \cdot y = g_H$ с невязкой g_H в правой части используем стандартный чебышевский итерационный метод [13]

$$y^k = y^{k-1} - \omega_k (A_H \cdot y^{k-1} - g_H), \quad k = 1, \dots, p \quad (8)$$

с итерационными параметрами ω_k ; здесь y^0 – начальное приближение. Число итераций p выбирается из условия достижения точности ε : $\|r_p\| < \varepsilon \|r_0\|$, где r_0, r_p – начальная и конечная невязки, $r_0 = g_H$, $r_p = g_H - A_H \cdot y^p$. Оценка для $p = p(\varepsilon, \eta)$ имеет вид [13]:

$$p(\varepsilon, \eta) \approx \ln(\varepsilon^{-1} + \sqrt{\varepsilon^{-2} - 1}) / \ln \rho, \quad \rho = \frac{1 + \sqrt{\eta}}{1 - \sqrt{\eta}}, \quad \eta = \frac{\lambda_{min}}{\lambda_{max}}, \quad (9)$$

здесь $\lambda_{min}, \lambda_{max}$ – нижняя и верхняя границы оператора A_H .

3.3. Сглаживатели

Сглаживающий оператор S_p в (7) задает переход от текущего приближения к новому «гладкому» приближению на сетке каждого уровня, кроме самого грубого. Мы используем два типа сглаживателя, являющихся операторными функциями от сеточного оператора A_h : первый сглаживатель – многочлен Чебышева, второй – дробно-рациональная функция. Каждый из двух

сглаживателей $S_p = S_p(A_h)$ является самосопряженным оператором. Качество сглаживания невязки характеризуется поведением функции «затухания» $\rho(\lambda) = S_p(\lambda)$ на отрезке спектра, отвечающем высокочастотным модам. Конструкции сглаживателей (см. [2] – [5]) связаны с многочленом Чебышева степени p , наименее уклоняющимся от нуля на заданном отрезке, см., например, [13]. Эффективность каждого сглаживателя зависит от выбора некоторой условной границы λ_{min}^* , разделяющей спектр на низкочастотную $[\lambda_{min}; \lambda_{min}^*)$ и высокочастотную $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ части. Границы λ_{min}^* , λ_{max} свои для каждого сеточного уровня.

Представим идеальную ситуацию: 1) для двухсеточного представления (7) грубосеточная коррекция является точной; 2) после интерполяции в невязке нет гладких мод. Тогда эффективным сглаживателем будет операторный многочлен $F_p(A_h)$, где $F_p(\lambda)$ – оптимальный многочлен Чебышева для отрезка $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ с нормировкой $F_p(0) = 1$. На всем спектре $|F_p(\lambda)| < 1$, а максимум модуля этого многочлена на высокочастотном отрезке $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ спектра зависит от степени p и в значительной мере определяет скорость сходимости многосеточного метода. Отметим, что, как показывают расчеты, чебышевский сглаживатель $F_p(A_h)$ достаточно чувствителен к ошибке в определении границы раздела λ_{min}^* , см. [2 – 5]. Для сглаживателя ЛИ-М (описанного ниже) ситуация иная: например, недооценка λ_{min}^* приводит к значительному улучшению сглаживания и увеличению скорости сходимости многосеточного метода. Мы изучаем возможности использования обоих сглаживателей, так как пока нет весомых оснований для предпочтения одного из них.

Число шагов сглаживания и набор чебышевских параметров мы выбираем так, чтобы погасить высокочастотную компоненту невязки в $\varepsilon_{smooth}^{-1}$ раз, что контролируется по норме полной невязки итерационного приближения. В изо-

тропных задачах при задании фактора сглаживания $\varepsilon_{smooth} = 0.5$ число шагов p получается небольшим, 2–3. Для анизотропных задач (для которых можно указать неплохую оценку λ_{min}^*) число шагов может быть большим, например, $p \approx 100$, и это отвечает существованию дела.

Чебышевский сглаживатель определяется итерациями вида (8) с многочленом Чебышева, наименее уклоняющимся от нуля на отрезке $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$. Найдем степень многочлена $p = p(\varepsilon, \eta)$ по формулам (9) с заданным фактором сглаживания $\varepsilon = \varepsilon_{smooth}$. Функция затухания, отвечающая построенному оператору, есть

$$\rho_{Cheb}(\lambda) = F_p(\lambda). \quad (10)$$

Оператор сглаживания ЛИ-М при заданном p требует $\nu = 2p - 1$ шагов и является дробно-рациональной функцией [6]:

$$S_\nu = (I - G_p^2) \cdot (I + \tau A_h)^{-1}. \quad (11)$$

Здесь G_p – оптимальный многочлен Чебышева для отрезка $[\lambda_0; \lambda_{max}]$, где левый конец λ_0 отрезка определяется двумя параметрами p, λ_{max} по достаточно простым формулам [2]:

$$\lambda_0 = \lambda_{max} \frac{z_1 - 1}{z_1 + 1} \in [-1/\tau; 0], \quad \tau = \frac{16p^2/\pi^2 - 1}{\lambda_{max}}, \quad z_1 = \cos(0.5\pi/p). \quad (12)$$

В (12) параметр τ выражается через основные параметры p, λ_{max} и в конструкции сглаживателя ЛИ-М играет вспомогательную роль. Изначально схема ЛИ-М изобретена как схема интегрирования параболических уравнений, в которой независимыми параметрами являются шаг по времени τ и верхняя граница λ_{max} оператора пространственной дискретизации. Конструкция ЛИ-М как схемы интегрирования параболических уравнений детально изложена в [6].

Нетрудно видеть, что спектр сглаживающего оператора (11) удовлетворяет неравенству

$$\rho_{ЛИМ}(\lambda) = \frac{1 - G_p^2(\lambda)}{1 + \tau\lambda} \leq \frac{1}{1 + \tau\lambda}. \quad (13)$$

Используя (11) – (13), получаем, что для погашения невязки на отрезке $[\lambda_{min}^*; \lambda_{max}]$ в заданное число $\varepsilon_{smooth}^{-1}$ раз нужно задать степень многочлена p следующей формулой:

$$p = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{(\varepsilon_{smooth}^{-1} - 1)/\eta + 1} \right\rceil, \quad (14)$$

где $\eta = \lambda_{min}^*/\lambda_{min}$ – относительная граница раздела спектра. Алгоритмическая реализация оператора сглаживания ЛИ-М (11) очень проста и требует $\nu = 2p - 1$ явных шагов.

3.4. Оценка границы раздела спектра

В ряде случаев можно указать оценку границы λ_{min}^* . Рассмотрим сначала классический случай, когда A_h – разностный оператор Лапласа на декартовой сетке. Тогда условной границе, разделяющей все собственные функции на две части: гладкие и негладкие – отвечают собственные функции с номерами $(0.5 \cdot N_1, 1, 1)$, $(1, 0.5 \cdot N_2, 1)$, $(1, 1, 0.5 \cdot N_3)$; здесь N_α – число шагов сетки по каждому координатному направлению $\alpha = 1, 2, 3$. Соответствующие этим функциям собственные значения имеют вид

$$\lambda_1^* = 0.5 \cdot \lambda_{max}^{(1)} + \lambda_{min}^{(2)} + \lambda_{min}^{(3)}, \quad \lambda_2^* = 0.5 \cdot \lambda_{max}^{(2)} + \lambda_{min}^{(1)} + \lambda_{min}^{(3)}, \quad \lambda_3^* = 0.5 \cdot \lambda_{max}^{(3)} + \lambda_{min}^{(1)} + \lambda_{min}^{(2)},$$

где $\lambda_{min}^{(\alpha)}$, $\lambda_{max}^{(\alpha)}$ – границы разностных аналогов одномерных операторов по координатным направлениям, $\alpha = 1, 2, 3$. В качестве относительной характеристики, отражающей возможную анизотропию спектра по направлениям, мы возьмем величину η , определенную формулами:

$$\eta = \min(1/6, \eta_1), \quad \eta_1 = \gamma_{min}/\lambda_{max}, \quad \gamma_{min} = \min(\lambda_1^*, \lambda_2^*, \lambda_3^*). \quad (15)$$

Сильная анизотропия спектра по направлениям возникает, например, когда область Ω – параллелепипед, размеры которого по направлениям различаются в десятки и сотни раз.

Алгоритмическая реализация расчета η сделана в предположении, что в уравнении (1) возможно пространственный оператор расщепить на три одномерных оператора по направлениям. Если это сделать нельзя, то можно взять в качестве начальной оценки $\eta = 1/6$ и уточнять эту границу в процессе многосеточных итераций, т.е. использовать адаптацию сглаживателей согласно рекомендациям [2, 4].

Оценку границы раздела спектра λ_{min}^* определим как

$$\lambda_{min}^* = \eta \cdot \lambda_{max}. \quad (16)$$

Получаем обобщение на трехмерный случай правила, согласно которому в одномерном простейшем случае к высокочастотной части спектра относятся частоты $\lambda > 0.5\lambda_{max}$. В изотропном трехмерном случае имеем $\eta \approx 1/6$.

Для трехмерных задач анизотропия часто является препятствием для достижения эффективности многосеточного метода. В [3, 5] рассмотрены примеры, которые не исчерпывают все анизотропные эффекты, но позволяют понять типичные трудности. Показано, что важный для приложений случай анизотропии спектра по направлениям хорошо разрешается при выборе границы раздела в соответствии с формулами (15) – (16). Но возможна более общая анизотропия, когда расчет с указанной границей не приводит к погашению высокочастотных мод. Пример такой анизотропии дает задача на сетке, сгущающейся от центра ко всем граням области Ω . В этой ситуации мы рекомендуем в качестве характеристики сеточной анизотропии взять параметр

$$\eta_2 = \frac{1}{6} \cdot \min_{x \in \Omega_h} (\eta_{min}(x) / \eta_{max}(x)), \quad (17)$$

где сеточные функции $\eta_{min}(x)$, $\eta_{max}(x)$ определяются на основе локального анализа коэффициентов уравнения и шагов сетки [2]. Тогда границу раздела

можно определить как $\lambda_{min}^* = \min(\eta_1, \eta_2) \cdot \lambda_{max}$. Для равномерной сетки при постоянных коэффициентах эта оценка при $\eta_1 = 1/6$ переходит в естественную границу $\lambda_{min}^* = \lambda_{max} / 6$.

В общем случае можно получить оценку границы раздела спектра с помощью исследования оператора $D = -\Delta_h$, где Δ_h – разностный оператор Лапласа при одинаковых с L_h краевых условиях. Считаем, что для операторов A_h и D известны постоянные $0 < \zeta_1 \leq \zeta_2$ их энергетической эквивалентности

$$\zeta_1(Du_h, u_h) \leq (A_h u_h, u_h) \leq \zeta_2(Du_h, u_h) .$$

На практике (см. [3, 5]) значения ζ_1, ζ_2 вычисляются в процессе оценки границ оператора A_h и D . Обозначим верхнюю границу оператора D как λ_{max}^0 . Тогда с учетом соотношения $\lambda_{max} = \zeta_2 \cdot \lambda_{max}^0$ имеем еще один способ задания относительной границы η_3 раздела спектра:

$$\lambda_{min}^* = \frac{1}{6} \cdot \zeta_1 \cdot \lambda_{max}^0 \equiv \eta_3 \cdot \lambda_{max}, \quad \eta_3 = \frac{1}{6} \cdot \frac{\zeta_1}{\zeta_2}. \quad (18)$$

Суммируя вышесказанное, получаем следующий алгоритм оценки границы раздела спектра. До начала многосеточных итераций находятся все $\eta_j, j=1,2,3$, определенные формулами (15), (17), (18). Итоговая формула относительной границы η раздела спектра для определения $\lambda_{min}^* = \eta \cdot \lambda_{max}$ имеет вид:

$$\eta = \min\left(\frac{1}{6}, \eta_1, \eta_2, \eta_3\right). \quad (19)$$

Способ (19) задания начальной границы раздела назовем «спектральной настройкой»; а задание $\eta=1/6$, не требующее анализа спектра оператора, назовем «стандартной настройкой». В следующем разделе приведен алгоритм адаптации границы раздела спектра в ходе многосеточных итераций. Адаптация может начинаться при задании в качестве начальной границы любого из двух указанных значений.

3.5. Адаптация сглаживателей

Пусть в ходе многосеточных итераций на любом этапе сглаживания после p шагов сглаживания для начальной и конечной невязок получено соотношение $\delta = \|r_p\| / \|r_0\|$. Если $\delta < 1$, то для чебышевского сглаживателя, обращая формулы (9), находим

$$\lambda_{min}^* = \left(\frac{\rho_1 - 1}{\rho_1 + 1} \right)^2 \cdot \lambda_{max}, \quad \rho_1 = \left(\delta^{-1} + \sqrt{\delta^{-2} - 1} \right)^{1/p}. \quad (20)$$

Для сглаживателя ЛИ-М, используя (13) – (14), находим

$$\lambda_{min}^* = \frac{\pi^2}{16p^2} \cdot (\delta^{-1} - 1) \cdot \lambda_{max}. \quad (21)$$

Если $\delta > 1$, то есть невязка возрастает, то мы рекомендуем расширить отрезок сглаживания, взяв $\lambda_{min}^* = 0.1 \cdot \lambda_{max}$, и продолжать многосеточные итерации с этим новым значением. Детали реализации адаптивного алгоритма даны в [3]. Аналогично уточняется граница λ_{min} оператора A_H на самой грубой сетке.

4. Схема локальных итераций ЛИ-М

Запишем эту схему для лаконичности объяснения в случае однородного уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} + L_h u = 0. \quad (22)$$

Применяться схема ЛИ-М будет для задачи общего вида (1). В этой схеме переход с нижнего слоя по времени t_j на верхний слой $t_{j+1} = t_j + \tau$ делается с помощью $\nu = 2p - 1$ явных шагов. В операторном виде этот переход можно записать как

$$u_{j+1} = W \cdot u_j, \quad (23)$$

где

$$W = (I - F_p^2) \cdot (I + \tau L_h)^{-1} \quad (24)$$

– оператор послойного перехода, определяемый операторным многочленом Чебышева $F_p(L_h)$ специальной конструкции [6] алгебраической степени

$$p = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{\tau \lambda_{max} + 1} \right\rceil. \quad (25)$$

Вместо операторной записи (23) схему ЛИ-М удобно объяснить в терминах функции множителей роста

$$\rho_{\text{ЛИ-М}}(\lambda) = \frac{1 - F_p^2(\lambda)}{1 + \tau \lambda}, \quad (26)$$

являющихся собственными числами оператора перехода W ; здесь $\lambda \in [0; \lambda_{max}]$ – отрезок вещественной оси, содержащий спектр оператора L_h . Аналогичную функцию сглаживателя ЛИ-М в разделе 3.3 мы называли функцией затухания. Многочлены G_p и F_p , определяющие эти функции, обладают свойством оптимальности (наименьшего уклонения от 0) на различных отрезках.

На начальном участке спектра функция $\rho_{\text{ЛИ-М}}(\lambda)$ (26) аппроксимирует множители роста точного оператора перехода $\exp(-\tau L_h)$ (см. рис. 1). Заметим, что оператор перехода неявной схемы (4) имеет вид $(I + \tau L_h)^{-1}$, а вопрос о том, какая из двух аппроксимаций точного оператора $\exp(-\tau L_h)$ является лучшей, остается открытым и зависит от конкретной задачи.

Схема ЛИ-М требует задания оценки максимального собственного значения λ_{max} дискретного оператора L_h ; вычисление этой оценки не представляет труда и производится на основе теоремы Гершгорина. Схема ЛИ-М алгоритмически проста, не требует задания дополнительных настроечных параметров, может быть использована при произвольной сеточной дискретизации. Эта схема принадлежит к классу явно-итерационных методов со скалярными параметрами и реализует переход с нижнего слоя по времени t на верхний слой $t + \tau$ за конечное число $\nu = 2p - 1$ явных итераций. Для работы алгоритма нужно задать величины τ и λ_{max} ; с их помощью определяется многочлен F_p , нужный для

явно-итерационного конструирования дробно-рациональной аппроксимации (24) точного оператора перехода $\exp(-\tau L_h)$.

По сравнению со схемой ЛИ-М, другая рассматриваемая здесь схема ММ обладает таким существенным достоинством как оптимальность при разрешении неявной схемы. Это означает, что при фиксированном шаге τ и заданной точности решения системы уравнений (6) число многосеточных итераций при $h \rightarrow 0$ не зависит от h . Схема ЛИ-М в этом смысле не является оптимальной: число $\nu = 2p - 1$ явных итераций определяется согласно (25) как $O(1/h)$.

С другой стороны, у схемы ЛИ-М есть два принципиальных свойства, отличающие ее от неявной схемы, которая разрешается на верхнем слое каким-либо итерационным методом, в частности, схемой ММ.

Во-первых, схема ЛИ-М автоматически и точно обеспечивает локальную консервативность с сохранением в качестве ячеек консервативности конечных объемов, связанных с узлами исходной расчетной сетки и используемых для записи разностных законов сохранения, то есть исходной разностной схемы. Это обеспечивается специальной конструкцией оператора F_p , в соответствии с которой его можно записать в виде

$$F_p = -\tau L_h \cdot Z_{p-1}. \quad (27)$$

Во-вторых, при малых значениях шага по времени $\tau < \tau_{exp}$, удовлетворяющих условию устойчивости явной схемы $\tau_{exp} \cdot \lambda_{max} < 2$, схема ЛИ-М автоматически переходит в явную схему, обеспечивающую на одном шаге минимум вычислительных затрат. Поэтому схему ЛИ-М целесообразно использовать, когда по разным причинам шаг интегрирования по времени τ может быть переменным, как большим, так и малым.

Погрешность аппроксимации схемы ЛИ-М на j -ом слое по времени есть операторная комбинация погрешностей аппроксимаций ε_0^j , ε_1^j на решении соответственно явной и чисто неявной схем:

$$\varepsilon^j = Z_{p-1}^2 \cdot \varepsilon_0^j + A_h^{-1} \cdot (I - Z_{p-1}^2) \cdot \varepsilon_1^j, \quad (28)$$

где оператор Z_{p-1} входит в конструкцию многочлена F_p , см. (27). При выборе степени p чебышевского многочлена по формуле (25) («стандартное» значение) норма оператора Z_{p-1}^2 ограничена величиной $\pi^2/16$. При удвоении p схема ЛИ-М практически совпадает с неявной схемой, что обнаруживается как в расчетах, так и при рисовании с помощью пакета МАТЛАБ серии графиков множителей роста этих схем с варьированием параболического числа Куранта.

Для иллюстрации на рис. 1 показаны множители роста амплитуд собственных мод, отвечающих начальной части спектра, т.е. гладким модам. По оси абсцисс отложен начальный участок $[0; 0.25]$ нормированного спектрального отрезка $[0; \lambda_{max} \cdot h^2] = [0; 12]$. Точные множители роста лежат на графике функции $\exp(-\tau \cdot \lambda)$ (пунктир). Множители роста явной схемы $\rho = 1 - \tau \cdot \lambda$ – это касательная к графику функции $\exp(-\tau \cdot \lambda)$ в начале координат (синяя линия); при $\lambda = \lambda_{max}$ (выходящем за пределы рисунка) этот множитель по модулю равен 150. Множители роста схемы ЛИ-М для «стандартного» значения $p = 10$ показаны красной линией; для удвоенного числа p они показаны кружками, практически попадающими на график множителей роста неявной схемы (черная линия). При стандартном значении p многочлен F_p достигает экстремальных значений, равных ± 1 . В этих точках множители роста $\rho_{\text{ЛИ-М}}(\lambda)$ обращаются в 0; это значение может быть ближе к точному значению $\exp(-\tau \cdot \lambda)$, чем значение $(1 + \tau \lambda)^{-1}$ множителя роста неявной схемы. Для удвоенного числа p многочлен F_p достигает экстремальных значений, равных $\pm \pi/24$, а значит, максимальное отличие $\rho_{\text{ЛИ-М}}(\lambda)$ от множителя роста неявной схемы меньше, чем $(\pi/24)^2 \approx 1.7 \cdot 10^{-2}$, поэтому их графики неразличимы.

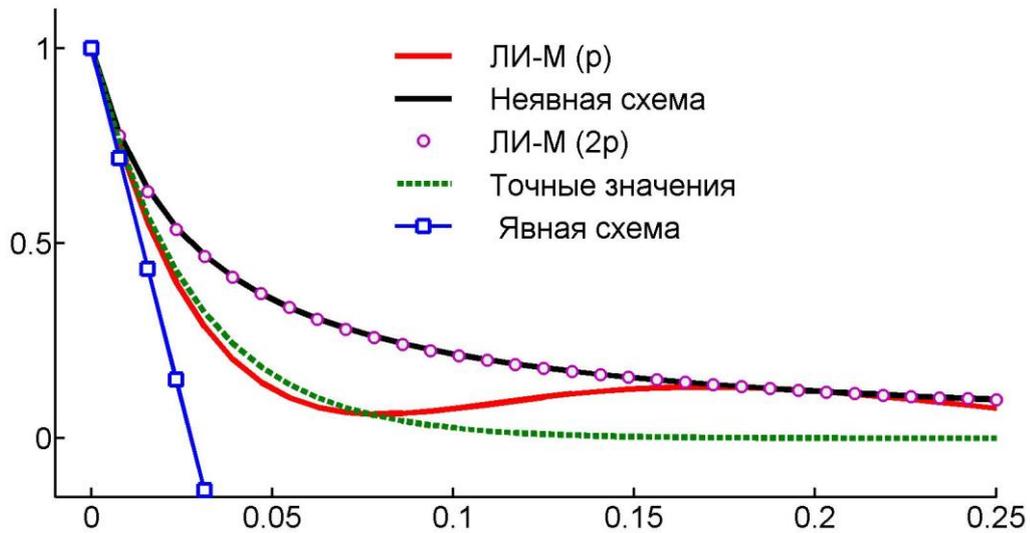


Рис. 1. Множители роста амплитуд собственных мод

5. Численные эксперименты

Рассмотрим некоторые модельные задачи. Они будут решаться на последовательности сеток с числом узлов N по каждому направлению в диапазоне $N=16, 32, \dots, 512$. Число Куранта мы определяем как $coi = 0.5 \cdot \tau \cdot \lambda_{max}$; для модельных задач в единичном кубе оно равно $6\tau N^2$.

Напомним, что исследуются две схемы – ММ и ЛИ-М. Эффективность и точность схемы ММ зависит в определенной степени от задания некоторых настроечных параметров. К таким параметрам относятся: максимальное число сеточных уровней l , относительная точность многосеточных итераций ε_{MG} , относительная точность решения на самой грубой сетке ε_C , начальная граница раздела спектра (спектральная или стандартная настройка), режим адаптации, тип сглаживателя (чебышевский или ЛИ-М), фактор сглаживания ε_{smooth} , характеризующий желаемое убывание нормы невязки на этапе сглаживания, тип оператора интерполяции (трилинейная или проблемно-зависимая интерполяция). Если не сказано противное, то в качестве стандартных опций обычно используются: $l=5$, если $N < 1024$, или $l=6$, если $N > 1024$, $\varepsilon_{MG} = 10^{-5}$, $\varepsilon_C = 10^{-5}$, $\varepsilon_C = 10^{-5}$, $\varepsilon_{smooth} = 0.5$, чебышевский сглаживатель без адаптации со

спектральной настройкой, трилинейная интерполяция. Выбранные значения ε_C , ε_{smooth} можно по умолчанию использовать для широкого круга задач. При расчете на каждом шаге по времени опции не меняются. При использовании режима с адаптацией представляется разумным использовать уточненное значение границы раздела спектра на следующем шаге по времени.

Задача 1. Возьмем задачу (1) в единичном кубе с краевыми условиями Дирихле, постоянными коэффициентами $\kappa=1$, $a_0=0$ и точным решением

$$u(t, x, y, z) = \exp(-\pi^2 t) \cdot \sin \pi x. \quad (29)$$

Задача решается на последовательности сгущающихся сеток с числом узлов $N=16, 32, 64, 128$ по каждому направлению. Зададим $t_0=0$, $\tau=0.05$ и сделаем один шаг по времени. В многосеточном методе взято 4 сеточных уровня; относительная точность задана как $\varepsilon_{MG}=10^{-5}$; такой точности достаточно, чтобы ошибка стабилизировалась за 4 – 5 многосеточных итераций; при увеличении точности приближенные решения графически неразличимы. Расчеты этой задачи проведены на одном процессоре К-100, замеры проводились достаточно грубо, с учетом времени формирования задачи и обработки результатов.

В табл. 1 показаны результаты расчета одного шага по времени на последовательности сеток. Приведены значения чисел Куранта $coi=0.5 \cdot \tau \cdot \lambda_{max}$, абсолютные среднеквадратичные погрешности (обозначены как Δ) схем ММ и ЛИ-М, время счета (в секундах) и число итераций схемы ЛИ-М.

В этой задаче многосеточный метод эффективен даже в простейшей реализации. Работоспособным является чебышевский сглаживатель с $p=2$ (в табл. 1 он обозначен как *Cheb*); при его использовании заданная точность достигается не более, чем за 5 многосеточных итераций, суммарное число шагов сглаживания на самой подробной сетке составляет 20. Затраты на решение системы уравнений на самой грубой сетке составляют менее 1%. Применение сглаживателя ЛИ-М (в табл. 1 он обозначен как *Lim*) с $p=2$ увеличивает затраты на сглаживание в полтора раза, общее время счета увеличивается незначительно.

Как показано ниже в задачах 3 и 4, применение в схеме ММ сглаживателя ЛИ-М является необходимым для работоспособности и эффективности схемы для трудных случаев анизотропных и/или разрывных коэффициентов.

В задаче 1 усиление сглаживателя не является необходимым. При применении схемы ММ число многосеточных итераций не растет при измельчении сетки (в силу оптимальности многосеточного метода), поэтому время счета при переходе к более подробной сетке увеличивается, как и ожидалось, примерно в 8 раз. Для параболической схемы ЛИ-М согласно теории число итераций растет как $\sqrt{\tau \cdot \lambda_{max}}$, т.е. в данном случае наблюдается линейный рост относительно числа узлов сетки N по одному направлению (так как $\lambda_{max} = O(N^2)$) и, следовательно, время счета при переходе к более подробной сетке увеличивается примерно в 16 раз. Отметим, что в однопроцессорном варианте схема ММ на сетке 256^3 узлов (около 16 миллионов) требует 20 сек. на расчет одного временного шага, т.е. 10^{-6} сек. на один узел сетки. Как видно на рис. 2, точность схемы ЛИ-М оказывается выше, чем точность неявной двухслойной схемы.

Таблица 1

Задача 1. Сравнение схем ММ и ЛИ-М

Сетка	Число Куранта	Схема ММ			Схема ЛИ-М		
		Δ	Время счета		Δ	Время счета	Число итераций
			<i>Cheb</i>	<i>Lim</i>			
32^3	308	0.041	0.04	0.04	0.011	0.03	39
64^3	1232	0.042	0.35	0.40	0.013	0.45	77
128^3	4928	0.042	2.75	2.81	0.013	6.0	155
256^3	19712	0.042	19.5	23.0	0.013	90	311

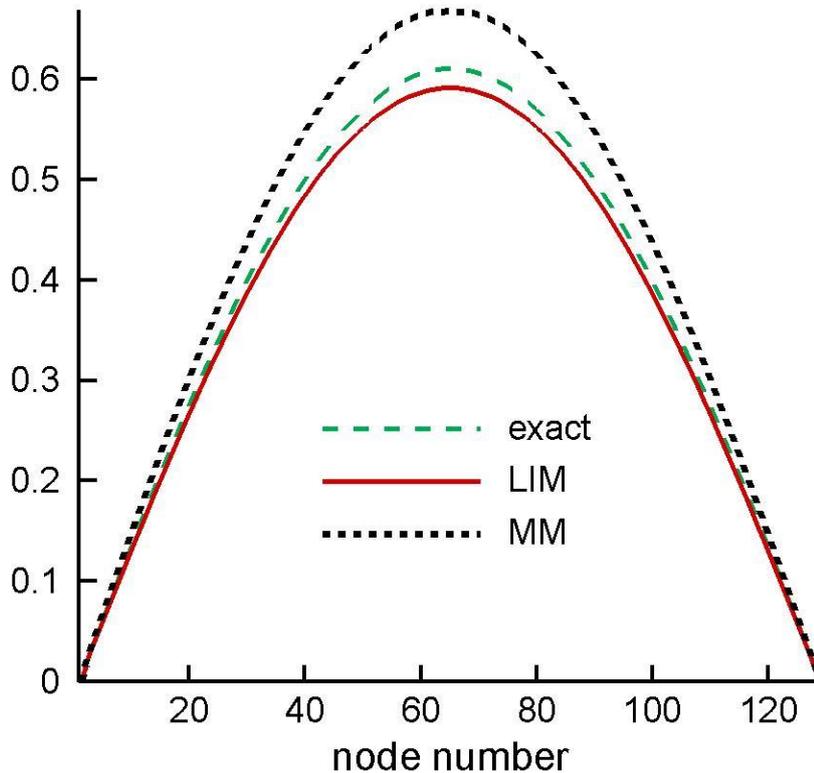


Рис. 2. Задача 1. Профили точного и приближенных решений; сетка 128^3

Как видно на рис. 2, точность схемы ЛИ-М оказывается выше, чем точность чисто неявной двухслойной схемы. Асимптотический анализ (в предположении малости шага τ) показывает, что за один шаг по времени погрешности неявной и явной схем соответственно составляют:

$$\begin{aligned}\delta_{\text{неявн}} &= \exp(-\pi^2\tau) - (1+\pi^2\tau)^{-1} \approx -0.06, \\ \delta_{\text{явн}} &= \exp(-\pi^2\tau) - (1-\pi^2\tau) \approx 0.1.\end{aligned}$$

Выбранный шаг τ нельзя считать малым, так как на сетке с числом узлов 128^3 этому шагу соответствует большое число Куранта ~ 5000 . Причину высокой точности схемы ЛИ-М можно объяснить, анализируя рис. 1. На этом рисунке видно, что множители роста схемы ЛИ-М на начальной части отрезка спектра практически совпадают с точными множителями роста, а на оставшейся части приближают точные множители не хуже множителей роста неявной схемы.

Задача 2. В условиях задачи 1 задана разрывная начальная функция

$$u_0(t_0, x, y, z) = \text{sign } x, \quad -1 \leq x, y, z \leq 1, \quad t_0 = 0.$$

Точное решение имеет вид $u(t, x, y, z) = \text{erf}(0.5 \cdot x / \sqrt{t})$. Условия расчета такие же, как и в задаче 1, шаг по времени $\tau = 0.05$. Расчеты проведены на одном узле суперкомпьютера К-100. Профили точного и приближенных решений показаны на рис. 3 (для половины расчетного интервала по направлению Ox в силу симметрии). Видно, что в среднем схема ЛИ-М обеспечивает лучшую точность, чем схема ММ. Обсудим на этом примере некоторые свойства схем.

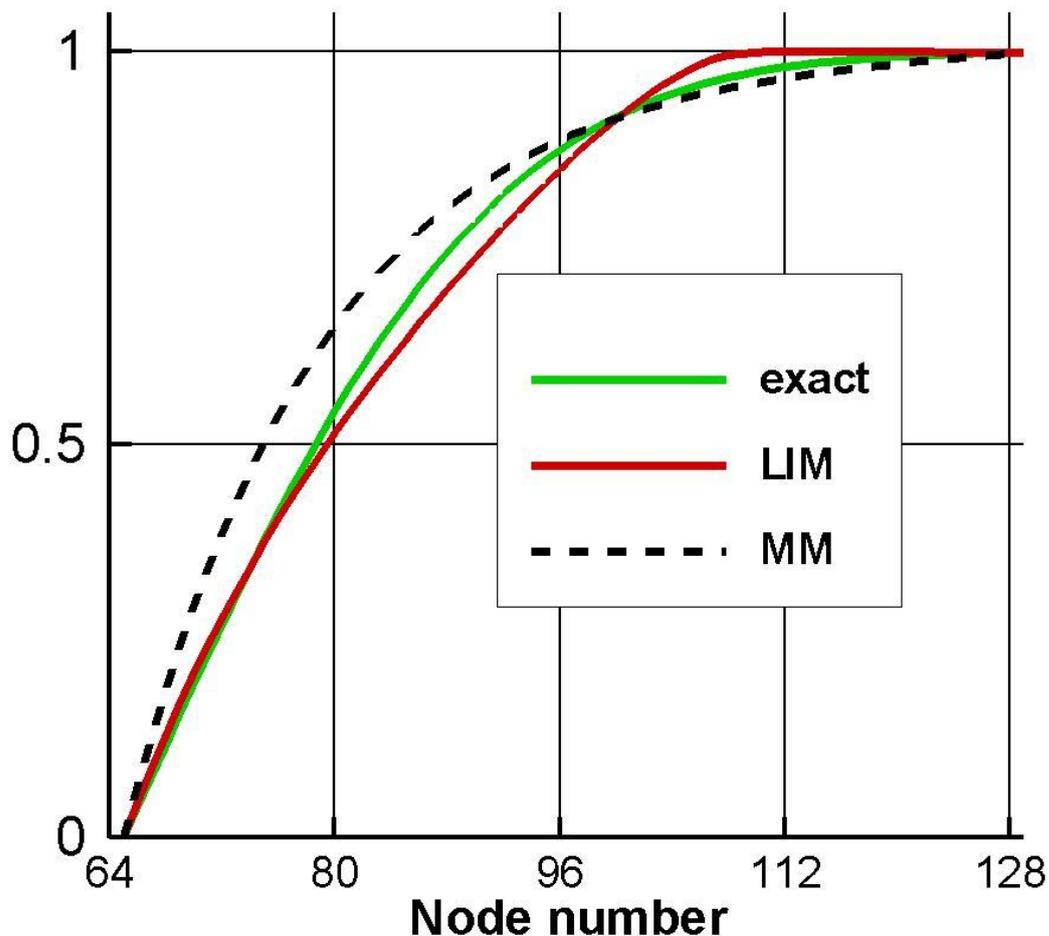


Рис. 3. Задача 2. Профили точного и приближенных решений; сетка 128^3

Небольшой излом профиля приближенного решения схемы ЛИ-М вблизи узла с номером 112 объясняется тем, что эта схема имеет конечную область влияния, и решение в любом узле сетки на верхнем временном слое зависит только от тех значений решения на нижнем слое, которые определены в узлах шаблона схемы. Ширина шаблона (измеряемая в шагах пространственной сетки) равна числу $2\nu+1$, где $\nu=2p-1$ – число явных итераций. В асимптотическом представлении ширина шаблона схемы ЛИ-М есть $O(N \cdot \sqrt{\tau})$. Областью влияния схемы ММ, как правило, является весь нижний слой.

В табл. 2 приведены количественные характеристики схем: абсолютные среднеквадратичные погрешности схем ММ и ЛИ-М (обозначены как Δ), время расчета (в секундах) и число итераций схемы ЛИ-М. Видим, что на подробной сетке с 512^3 узлами схема ММ в три раза быстрее схемы ЛИ-М. Причем дополнительных резервов для ускорения схемы ЛИ-М нет.

Таблица 2

Задача 2. Сравнение схем ММ и ЛИ-М

Сетка	Число Куранта	Схема ММ		Схема ЛИ-М		
		Δ	Время счета	Δ	Время счета	Число итераций
16^3	19	0.055	0.008	0.021	0.008	9
32^3	77	0.058	0.08	0.021	0.044	19
64^3	308	0.059	0.53	0.023	0.44	39
128^3	1232	0.060	4.22	0.024	4.67	77
256^3	4928	0.060	33.8	0.024	57.6	143
512^3	19712	0.060	273	0.024	812	287

Схема ММ может быть ускорена за счет более грубого решения системы линейных уравнений на верхнем слое, например, можно взять $\varepsilon_{MG} = 10^{-4}$ вместо $\varepsilon_{MG} = 10^{-5}$; можно варьировать и другие параметры, такие как границу раздела спектра, фактор сглаживания ε_{smooth} . При достаточно разумном выборе управляющих параметров схемы ММ гарантированы асимптотическая оптимальность и масштабируемость.

Если нужна более высокая точность интегрирования по времени (достигаемая, например, при меньшем шаге $\tau/16$), то на фиксированной сетке время счета схемы ЛИ-М уменьшится в 4 раза, время счета схемы ММ не изменится.

Масштабируемость (параллельная эффективность) проверена в расчете на сетке с числом узлов 512^3 на 1, 8 и 64 процессорах К-100. Время расчета уменьшается пропорционально числу процессоров, см. табл. 3, где приведены характеристики схем. При заданном временном шаге τ абсолютное время расчета лучше у схемы ММ.

Таблица 3

Задача 2. Сравнение схем ММ и ЛИ-М; сетка 512^3

Число процессоров	Время счета, с	
	Схема ММ	Схема ЛИ-М
1	273	812
8	59.3	221
64	9.3	27.1
512	1.3	3.5

Задача 3. Возьмем задачу (1) в области $-0.5 \leq x, y, z \leq 0.5$ с краевыми условиями Неймана, начальной функцией $u_0(t_0, x, y, z) = 1$ и постоянными коэффициентами $c = 1$, $\kappa = 1$. Введем коэффициент поглощения $a_0(x, y, z)$ как разрывную функцию цилиндрического радиуса $r = \sqrt{x^2 + y^2}$:

$$a_0(x, y, z) = \begin{cases} 0, & r > 0.25 \\ 10^6, & 0.125 \leq r \leq 0.25 \\ 1, & r < 0.125 \end{cases}.$$

Такое задание можно интерпретировать как наличие в области зон с различными поглощающими свойствами.

Расчеты на фиксированной сетке. Решим сначала эту задачу на фиксированной по пространству сетке с числом узлов по каждому направлению $N = 64$. Заметим, что сетка, вообще говоря, не согласована с поверхностью разрыва коэффициента a_0 . Интервал интегрирования по времени $0 \leq t \leq 0.01$.

При сравнении схем отметим особенности применения в данной задаче схемы ММ, то есть неявной схемы, разрешаемой многосеточным методом. В расчете на фиксированной сетке на поглощающее кольцо $0.125 \leq r \leq 0.25$ по радиусу приходится всего 8 ячеек сетки, поэтому мы ограничимся двумя сеточными уровнями. Максимальное собственное значение сеточного оператора $D = -\Delta_h$, спектрально эквивалентного оператору A_h неявной схемы, оценивается величиной $\lambda_{max}^0 = 5 \cdot 10^4$, а наличие сильного поглощения определяет границу оператора A_h как $\lambda_{max} = 1.05 \cdot 10^6$. По указанной информации выбор начальной относительной границы раздела спектра η можно задать по формуле «спектральная настройка»:

$$\eta = \frac{1}{6} \cdot \frac{\lambda_{max}^0}{\lambda_{max}}.$$

Относительная граница η определяет нижнюю границу высокочастотной части спектра как $\lambda_{min}^* = \eta \cdot \lambda_{max}$.

Расчеты организованы таким образом, что каждый шаг по времени реализуется процедурой (ЛИ-М или ММ), вызываемой в головной программе. Это значит, что время расчета на заданном интервале $0 \leq t \leq 0.01$ состоит из инициализации расчетных модулей и проведения основных вычислений. За «эталонное» решение возьмем приближенное решение, полученное по явной схеме с шагом $\tau = 2 \cdot 10^{-7}$; такой расчет (50 тыс. шагов) выполняется за 7.5 часов. С максимально допустимым шагом для явной схемы $\tau = 5 \cdot 10^{-7}$ расчет (20 тыс. шагов) выполняется за 3 часа. Расчет с шагом $\tau = 2 \cdot 10^{-6}$ требует на каждом шаге вызова процедуры ЛИ-М с $p = 2$; полное время расчета составляет 1 час. Результаты всех этих трех расчетов (по явной схеме с шагами $\tau = 2 \cdot 10^{-7}$, $\tau = 5 \cdot 10^{-7}$ и по схеме ЛИ-М с шагом $\tau = 2 \cdot 10^{-6}$) графически совпадают.

Приведем результаты расчета с большим шагом $\tau = 2 \cdot 10^{-3}$, которому соответствует значение числа Куранта $coi \approx 10^3$. На рис. 4, 5 на конечный момент времени приведены профили «эталонного» и приближенных решений, полученных по схеме ЛИ-М со стандартным заданием p согласно (14) (в данном случае $p = 36$), схеме ЛИ-М с удвоением p и схеме ММ – неявной схеме, разрешаемой многосеточным методом; эти профили обозначены как Explicit, LIM(p), LIM(2p), MG соответственно.

Схема ММ применяется со сглаживателем ЛИ-М без адаптации с опцией «спектральная настройка», что обеспечивает в данном случае хорошее приближение к точной границе раздела спектра. Остальные параметры: 2 сеточных уровня, фактор сглаживания $\varepsilon_{smooth} = 0.5$, относительная точность многосеточных итераций $\varepsilon_{MG} = 10^{-5}$, относительная точность решения на самой грубой сетке $\varepsilon_C = 10^{-5}$. Затраты времени схем ЛИ-М(p), ЛИ-М($2p$) и ММ составляют 18, 23 и 50 сек. соответственно. На рисунках 4 и 5 видно, что ближе всего к

«эталонному» решению находится график схемы ЛИ-М со стандартным заданием параметра p .

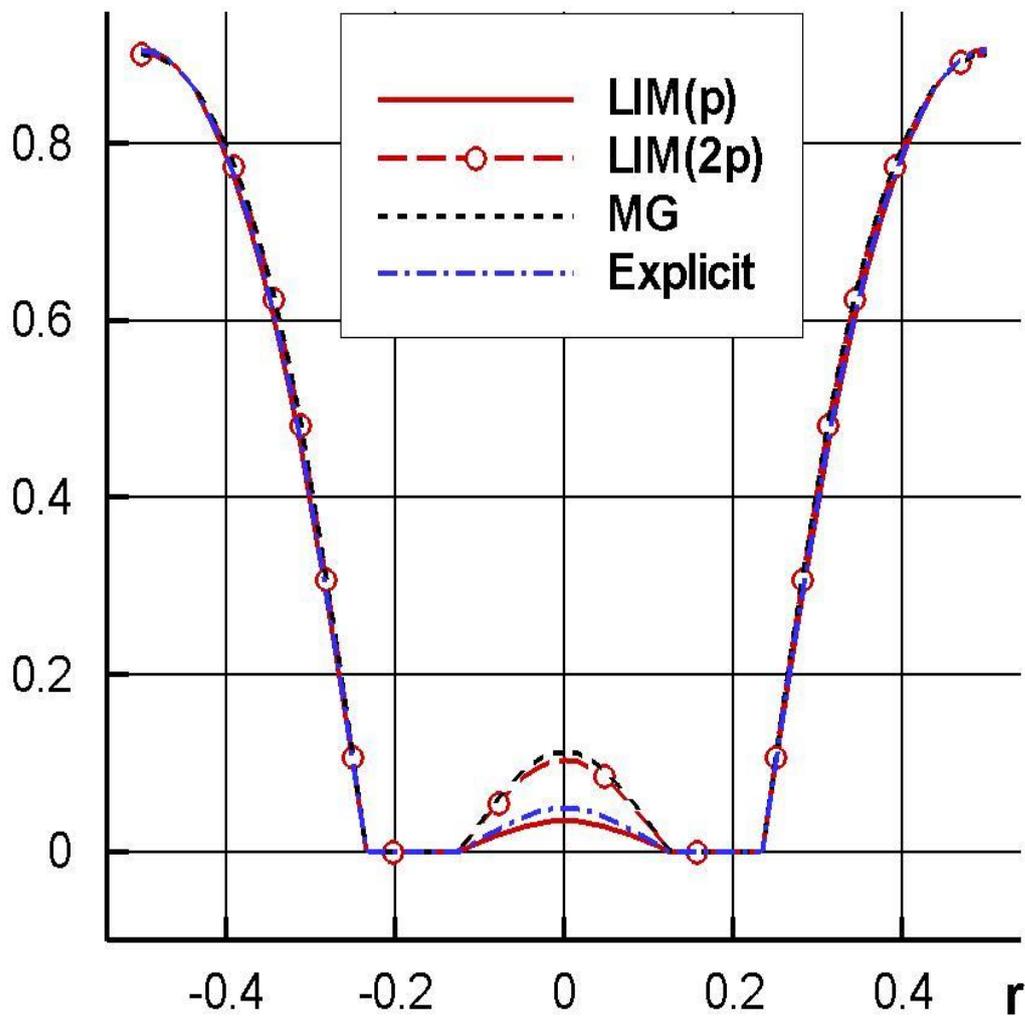


Рис. 4. Задача 3. Профили приближенных решений в центральном сечении

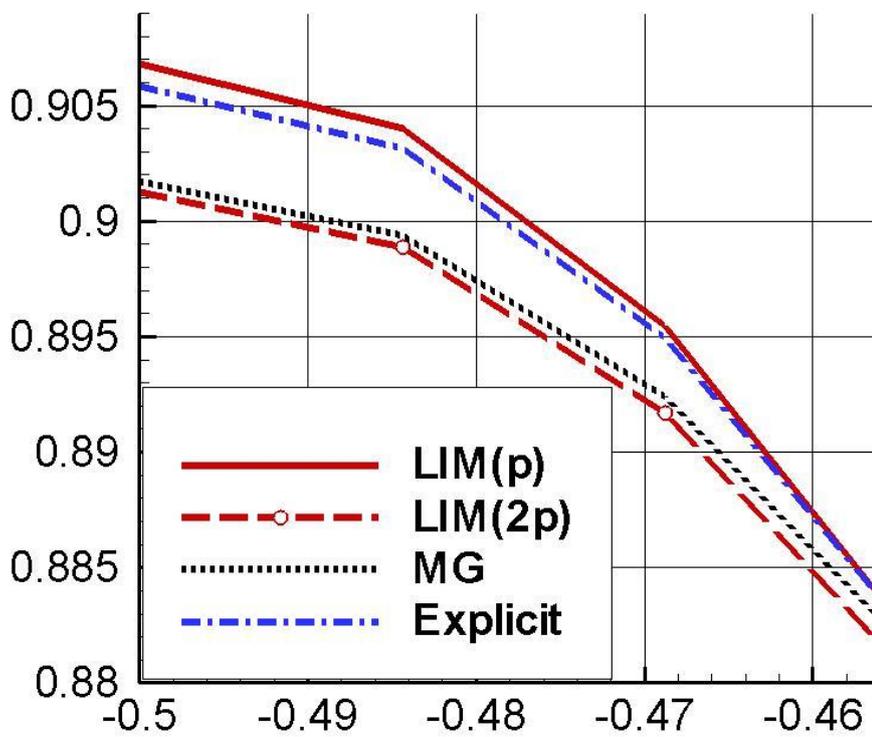
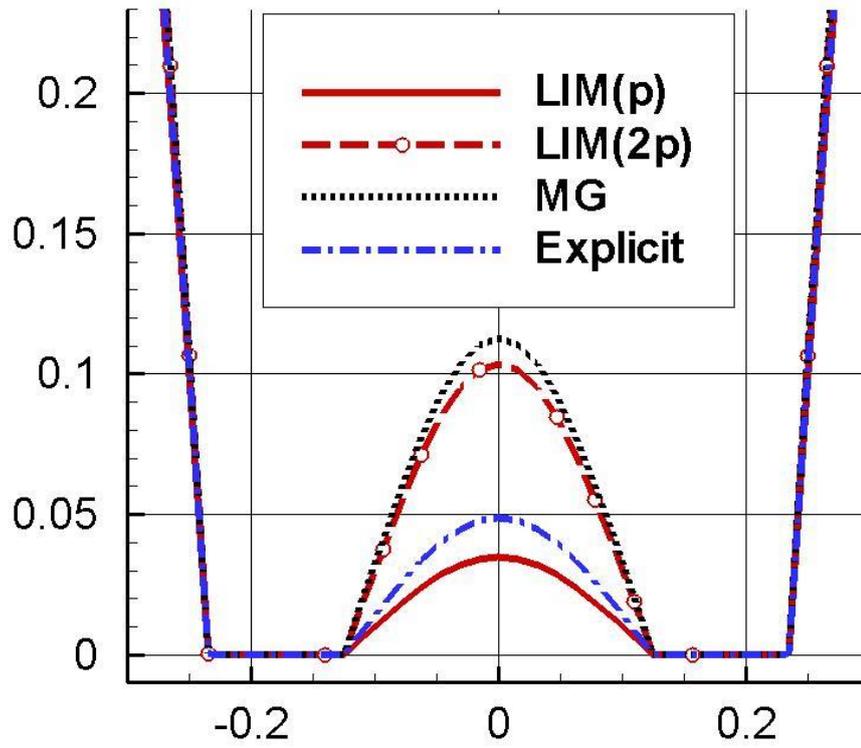


Рис. 5. Задача 3. Фрагменты профилей приближенных решений

На всем интервале расчета затраты схемы ЛИ-М эквивалентны $5 \times (2 \times 36 - 1) = 355$ шагам явной схемы. Расчет по обычной явной схеме требует около 20 тыс. шагов. Расчет по схеме ММ требует 6 многосеточных итераций, причем на сглаживание на основной сетке затрачивается $5 \times 6 \times 2 \times (2 \times 8 - 1) = 900$ шагов. При ослаблении параметров многосеточного метода, например, задании меньшей точности $\varepsilon_{MG} = 10^{-3}$, на сглаживание на основной сетке требуется 480 шагов вместо 900, а графики решений практически совпадают. Если задать $\varepsilon_{MG} = 10^{-1}$, то делается одна многосеточная итерация, а на сглаживание на основной сетке требуется $5 \times 1 \times 2 \times (2 \times 8 - 1) = 150$ шагов. В последнем случае точность расчета по сравнению с двумя предыдущими расчетами по схеме ММ немного ухудшается (примерно на 1%), но расчет занимает на 25% меньше времени, чем расчет по схеме ЛИ-М.

Обсудим эффективность сглаживателей в схеме ММ. Сглаживатель ЛИ-М хорошо работает во всех режимах; сглаживание с адаптацией приводит к небольшому ускорению счета на 5% и 10% соответственно с опциями «стандартная настройка» и «спектральная настройка» при задании начальной границы раздела спектра. Чебышевский сглаживатель при заданных параметрах работоспособен только в режиме с адаптацией, но он приводит к двукратному замедлению счета по сравнению со сглаживателем ЛИ-М, так как при его применении растет число многосеточных итераций и число шагов сглаживания на каждой итерации; причины обсуждены в [2–4].

Результаты расчетов этой задачи показывают, что вопрос о выборе параметров многосеточного метода в схеме ММ решается экспериментально. Для схемы ЛИ-М такого вопроса нет, так как в этой схеме отсутствуют настроечные параметры. Общим для двух схем вопросом является оценка точности интегрирования по времени. Может оказаться, что шаг τ определяется полной задачей, в которую параболическое уравнение входит как составная часть. Тогда для оценки точности следует проводить дополнительный расчет с шагом $\tau/2$, и ес-

ли требуемая точность не достигнута, то продолжаем измельчать шаг τ . С уменьшением шага τ конкурентоспособность схемы ЛИ-М повышается.

Задача 4. Ищется стационарное решение задачи (1) в области $-0.5 \leq x, y, z \leq 0.5$ с краевыми условиями Дирихле, начальной функцией $u_0(t_0, x, y, z) = 1$, постоянными коэффициентами $c = 1$, $a_0 = 0$. Коэффициент диффузии $\kappa(x, y, z)$ является разрывной функцией цилиндрического радиуса $r = \sqrt{x^2 + y^2}$:

$$\kappa(x, y, z) = \begin{cases} \delta, & r > r_0, \\ \delta^{-1}, & r \leq r_0, \end{cases}$$

здесь $r_0 = 0.25$, а δ – варьируемый параметр, определяющий коэффициент диффузии и величину скачка на его разрыве. Точное стационарное решение взято в виде

$$u(t, x, y, z) = \exp\left(\kappa(r)^{-1} \cdot r^2 \cdot (r^2 - r_0^2)\right)$$

при соответствующей этому решению правой части $f(r)$. Задача решается счетом на установление на последовательности сеток с числом узлов $N = 64, 128, 256$ по каждому направлению. Заметим, что сетка не согласована с поверхностью разрыва коэффициента диффузии. Так как ищется стационарное решение, то в случае схемы ММ можно ограничиться одним большим шагом по времени, например, взять $\tau = 10^6$.

Для скачков коэффициента диффузии $\delta^2 = 100$ и $\delta^2 = 2500$ результаты расчета по схеме ММ приведены в табл. 4. Параметры расчета: максимальное число сеточных уровней – 4, сглаживатель ЛИ-М без адаптации со спектральной настройкой. Разрыв в коэффициенте диффузии потребовал применения операторно-зависимой процедуры интерполирования.

Задача 4. Схема ММ

Сетка	Скачок коэффициента диффузии $\delta^2 = 100$			Скачок коэффициента диффузии $\delta^2 = 2500$		
	Число итераций	Число шагов сглаживания	Время счета	Число итераций	Число шагов сглаживания	Время счета
64^3	5	370	2	5	1910	9
128^3	5	370	16	6	2292	85
256^3	6	444	150	6	2292	690

Данные из табл. 4 говорят об эффективности схемы ММ – при фиксированном коэффициенте диффузии время счета растет почти пропорционально числу узлов сетки. Увеличение числа многосеточных итераций на сетке с 256^3 узлами связано с зависимостью правой части от сетки; кроме того, критерий окончания итераций $\varepsilon_{MG} = 10^{-5}$ близок к достижению уже через 5 итераций, а за 6 итераций норма невязки уменьшается в большее число раз. Время счета пропорционально δ , т.е. квадратному корню из величины скачка коэффициента диффузии на разрыве.

Использование схемы ЛИ-М в этой задаче противоречит смыслу схемы правильно описывать эволюцию решения во времени; формальное применение схемы ЛИ-М на сетке с 128^3 узлами требует более 10^6 шагов. Для значения $\delta = 50$, то есть при скачке коэффициента диффузии на разрыве $\delta^2 = 2500$, сетка с числом узлов 64^3 не дает правильного воспроизведения решения, а сетка с числом узлов 128^3 уже является удовлетворительной, как видно из рис. 6.

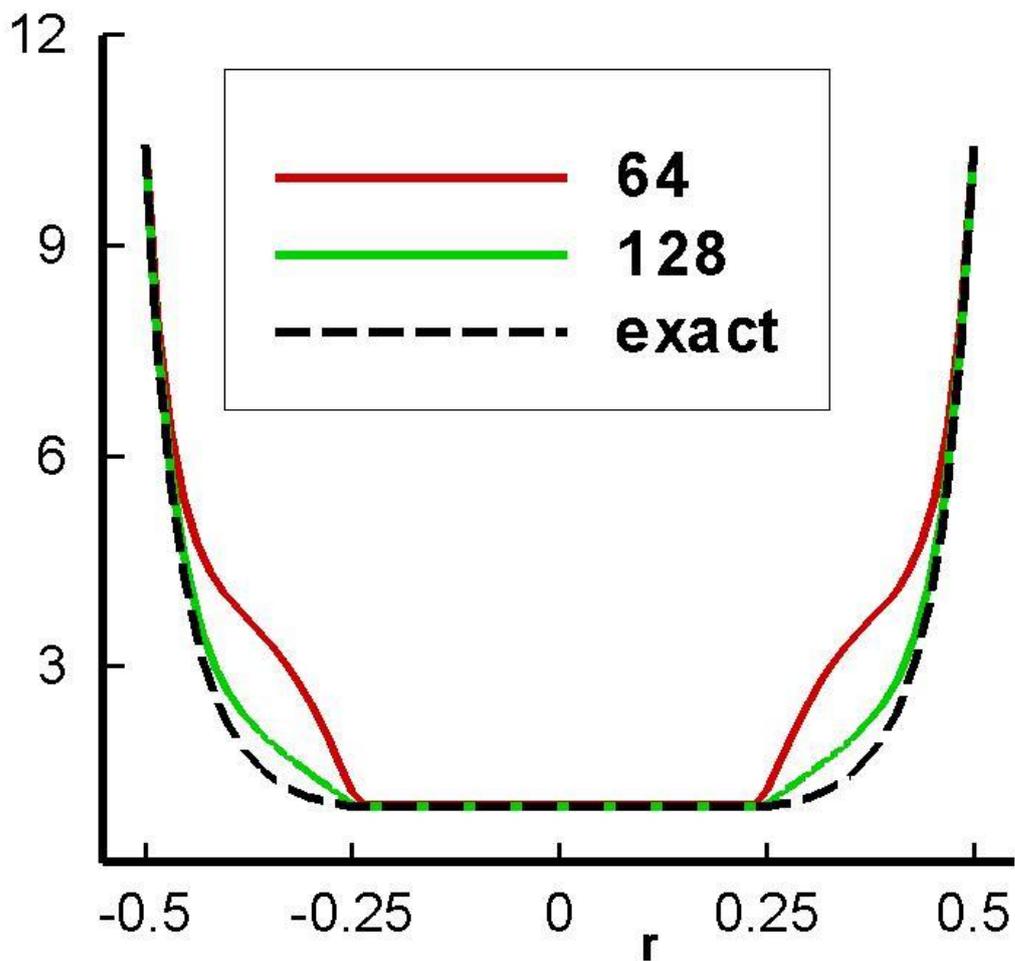


Рис. 6. Профили точного и приближенных решений в центральном сечении

Заметим, что в задаче 4 сопряжение решения на поверхности разрыва является гладким. В дополнение к приведенным здесь результатам по схемам ММ и ЛИ-М решены более общие задачи с разрывными коэффициентами и для таких задач показана эффективность этих схем при варьировании коэффициентов уравнений и параболического числа Куранта. Изложению полученных результатов будет посвящена отдельная работа, где будут освещены вопросы построения операторно-зависимой процедуры интерполирования.

6. Заключение

Изучены две схемы интегрирования по времени трехмерных параболических уравнений. Первая схема ММ основана на записи неявной двухслойной по времени схемы, которая разрешается с помощью параллельного многосеточного метода. Вторая схема ЛИ-М основана на явных итерациях с чебышевскими параметрами и специально разработана для решения параболических уравнений. Анализ и результаты численных экспериментов на задачах-тестах, в том числе задачах с разрывными коэффициентами, показывают, что построенные схемы обладают высокой эффективностью, как по точности, так и по объему вычислительных затрат. При больших значениях параболического числа Куранта следует использовать асимптотически оптимальную схему ММ, а при относительно небольших значениях конкурентоспособной становится схема ЛИ-М. Отличительной чертой схемы ЛИ-М, повышающей ее конкурентоспособность, является отсутствие настроечных параметров. Расчеты показывают, что схемы ММ и ЛИ-М обеспечивают высокую параллельную эффективность, хорошо масштабируются и позволяют преодолеть трудности, связанные с достижением в перспективе экзафлопсных скоростей.

Авторы выражают признательность В.В. Чуданову и В.А. Первичко за привлечение их внимания к рассмотренной выше проблеме и участие в обсуждении результатов.

Список литературы

1. Федоренко Р.П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1961. Т. 1, № 5. С. 922–927.
2. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений. Часть I. Основные элементы алгоритма // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 30. 32 с.
URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-30>

3. 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>

4. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений // Матем. моделирование. 2014. Т.26, № 1. С. 55–68.

5. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Многосеточный метод для анизотропных уравнений диффузии на основе адаптации чебышевских сглаживателей // Матем. моделирование. 2014. В печати.

6. Жуков В.Т. О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // Матем. моделирование. 2010. Т.22, № 10. С. 127–158.

7. Люстерник Л.А. О разностных аппроксимациях оператора Лапласа // Успехи матем. наук. 1954. Т. IX, вып. 2(60). С. 3 – 66.

8. Локуциевский В.О., Локуциевский О.В. О численном решении краевых задач для уравнений параболического типа // ДАН СССР. 1986. Т. 291, № 3. С.540 – 544.

9. Жуков В.Т. Численные эксперименты по решению уравнения теплопроводности методом локальных итераций. – М.: ИПМ им. М. В. Келдыша. 1984. Препринт № 97. 22 с.

10. Жуков В.Т. Разностные схемы локальных итераций для параболических уравнений. –М.: ИПМ им. М. В. Келдыша. 1986. Препринт № 73. 31с.

11. Лебедев В.И. Как решать явными методами жесткие системы дифференциальных уравнений // В кн.: Вычислительные процессы и системы. Вып. 8. Под. ред. Г. И. Марчука. –М.: Наука. 1991.

12. Саульев В.К. Интегрирование уравнений параболического типа методом сеток / Ред. Люстерник Л. А. –М.: Физматгиз. 1960. 324 с.

13. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука. 1978. 592 с.

Содержание

1. Введение	3
2. Постановка задачи	5
3. Схема на основе многосеточного метода (схема ММ)	8
3.1. Основные элементы алгоритма	8
3.2. Обращение грубосеточного оператора.....	9
3.3. Сглаживатели	9
3.4. Оценка границы раздела спектра.....	12
3.5. Адаптация сглаживателей.....	15
4. Схема локальных итераций ЛИ-М.....	15
5. Численные эксперименты	19
6. Заключение	33
Список литературы.....	34