

УДК 519.63

Экспериментальное исследование некоторых решателей 3D краевых подзадач на регулярных подсетках квазиструктурированных параллелепипедальных сеток

И.А. Климонов¹, В.М. Свешников²

¹Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ), ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090

²Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

E-mails: ilya.klimonov@gmail.com (Климонов И.А.), victor@lapasrv.sccc.ru (Свешников В.М.)

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 4, Vol. 15, 2022.

Климонов И.А., Свешников В.М. Экспериментальное исследование некоторых решателей 3D краевых подзадач на регулярных подсетках квазиструктурированных параллелепипедальных сеток // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2022. — Т. 25, № 4. — С. 429–440.

Проведено экспериментальное исследование эффективности решателей 3D краевых задач на регулярных подсетках квазиструктурированных параллелепипедальных сеток. Рассмотрено пять решателей: три итерационных: метод последовательной верхней релаксации, неявный метод переменных направлений, неявный метод неполной факторизации с ускорением сопряженными градиентами — а также два прямых: PARDISO и NEMHOLTZ — оба из библиотеки Intel MKL. Характерными особенностями проводимых исследований являются следующие: 1) подсетки содержат малое число узлов; 2) эффективность оценивается не только для одиночных расчетов, но и преимущественно для серий расчетов, в каждой из которых проводится большое число повторов решения задачи с различными граничными условиями на одной и той же подсетке. На основе численных экспериментов выявлен наиболее быстрый в данных условиях решатель, которым оказался метод последовательной верхней релаксации.

DOI: 10.15372/SJNM20220408

Ключевые слова: регулярные подсетки квазиструктурированных сеток, решатели краевых задач, прямые методы, итерационные методы, экспериментальные исследования.

Klimonov I.A., Sveshnikov V.M. Experimental study of some solvers of 3D boundary subproblems on the regular subgrids of quasi-structured parallelepipedal meshes // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2022. — Vol. 25, № 4. — P. 429–440.

An experimental study of the efficiency of 3D boundary value problem solvers on the regular subgrids of quasi-structured parallelepipedal grids has been carried out. Five solvers are considered: three iterative: the successive over-relaxation method, the implicit alternating direction method, the implicit incomplete factorization method with acceleration by conjugate gradients, as well as two direct methods: PARDISO and NEMHOLTZ — both from the Intel MKL library. The characteristic features of the conducted research are the following: 1) the subgrids contain a small number of nodes; 2) the efficiency is estimated not only for single calculations, but also mainly for a series of calculations, in each of which a large number of repetitions of solving the problem with different boundary conditions on the same same subgrid. On the basis of numerical experiments, the fastest solver under the given conditions was revealed, which turned out to be the method of successive over-relaxation method.

Keywords: *regular subgrids of quasi-structured grids, boundary value problem solvers, direct methods, iterative methods, experimental research.*

Введение

Квазиструктурированные параллелепипедальные сетки и решение на них краевых задач рассматривались в работах [1, 2]. Такие сетки состоят из равномерных параллелепипедальных подсеток. Решение краевых задач на квазиструктурированных сетках находится методом декомпозиции расчетной области на подобласти без налегания. Метод декомпозиции интенсивно развивается в настоящее время (см., например, монографии [3–5]). Один из вариантов, основанный на прямой (непосредственной) аппроксимации уравнения Пуанкаре–Стеклова, предложен в работе [6]. Его реализация приводит к итерационному процессу по подобластям, на каждом шаге которого решаются задачи Дирихле в подобластях. Решение подзадач в подобластях проводится многократно. Особенно это относится к решению сложных практических задач, которое можно представить в виде цепочки оптимизация–нелинейность–краевая задача. Реализация каждого звена цепочки — это итерационные процессы, которые являются вложенными. На каждом звене проводится решение в подобластях на одной и той же подсетке, но с различными граничными условиями и/или с различными правыми частями. Как будет видно в дальнейшем, число повторов решений на одной и той же подсетке может исчисляться миллионами. Кроме того, необходимо учесть, что подсетки содержат сравнительно небольшое число узлов (мы рассматриваем подсетки $8 \times 8 \times 8$, $16 \times 16 \times 16$, $32 \times 32 \times 32$, $64 \times 64 \times 64$, $128 \times 128 \times 128$). Это вовсе не означает, что итоговая квазиструктурированная сетка содержит малое число узлов. При таких подсетках число узлов итоговой сетки может исчисляться миллиардами (см. далее).

Предлагаемые ниже исследования излагаются на примере решения трехмерных краевых задач для уравнения Пуассона, которое возникает во многих физических приложениях. Одно из них — расчет потенциала электрического поля, создаваемого многоэлектродными электронно-оптическими системами, в задачах сильноточной электроники. К ним относятся многие практически важные приборы, служащие для получения СВЧ-колебаний, электронно-лучевой сварки, ускорения заряженных частиц и для других практически важных целей [7]. Математическое моделирование таких приборов приводит к решению нелинейной самосогласованной задачи по расчету движения пучков заряженных частиц во внешних, т. е. создаваемых электродами прибора, и собственных, т. е. создаваемых самим пучком, электрических и магнитных полях. Одной из подзадач самосогласованной задачи является расчет потенциала электрического поля, который проводится на каждой итерации по нелинейности. В свою очередь, самосогласованная задача решается на каждом шаге по оптимизации конструкции прибора. Для получения адекватной точности необходима сетка, содержащая $10^3 \times 10^3 \times 10^3 = 10^9$ узлов, расчет потенциала на которой занимает часы на персональном компьютере, а решение самосогласованной задачи в сложной расчетной области с мощным пучком заряженных частиц — сутки работы персонального компьютера. Поэтому необходимо тщательное экспериментальное исследование решателей, т. е. программ, реализующих численные алгоритмы, на которые падает значительная вычислительная нагрузка. В первую очередь к ним относятся решатели краевых подзадач в подобластях на регулярных (внутренних структурированных) подсетках, которых подавляющее большинство в квазиструктурированных сетках.

В обширной литературе по решателям краевых задач их эффективность оценивается на одиночных расчетах с большим числом узлов. Действительно, теоретические оценки являются асимптотическими, что сразу отрицает малое конечное число узлов. Экспериментальные оценки с малым числом узлов отсутствуют. Эти обстоятельства стимулировали проведение исследований на сетках с малым числом узлов и с большим числом повторов.

Кроме того, квазиструктурированные сетки предлагается строить из подсеток ограниченного вида, которые можно назвать кирпичиками. Преимущества такого построения, в частности, заключаются в том, что эффективность решателей на подсетках-кирпичиках можно изучить заранее и при решении конкретных задач использовать эти результаты для выбора конкретного эффективного решателя.

Рассмотрено пять решателей. Среди них три итерационных: метод последовательной верхней релаксации (ПВР) [8], неявный метод переменных направлений (МПН) [9], неявный метод неполной факторизации с ускорением сопряженными градиентами EXIFCG [10] — и два прямых: PARDISO и NEMHOLTZ — оба из библиотеки Intel MKL. Проведено экспериментальное исследование эффективности данных решателей и выявлен наиболее эффективный в рассматриваемых условиях, которым оказался ПВР.

1. Постановка задачи и алгоритмы ее решения

Пусть требуется найти функцию \bar{u} , являющуюся решением краевой задачи

$$L\bar{u}(T) = g_1(T), \quad T \in G, \quad (1)$$

$$l\bar{u}(T) = g_2(T), \quad T \in \Gamma, \quad (2)$$

где G — расчетная область, Γ — ее граница ($G \cup \Gamma = \bar{G}$), L — эллиптический дифференциальный оператор, l — оператор граничных условий, $T = (x, y, z)$ — текущая точка. Рассматриваются граничные условия Дирихле и Неймана, причем последние ставятся на плоскостях, параллельных координатным плоскостям.

Построим в \bar{G} параллелепипедальную равномерную макросетку Ω_H , которая разбивает \bar{G} на подобласти $\bar{G}_{H,m}$, $m = 1, \dots, N_H$, где N_H — число подобластей. Если граница области имеет сложную конфигурацию, что характерно для расчета практических устройств, то при этом возникают подобласти следующих типов: 1) внутренние или регулярные, целиком лежащие в области G ; 2) граничные, которые, помимо точек G , содержат куски границы Γ ; 3) внешние, целиком лежащие вне области. Внешние подобласти исключаются из расчетов. Во внутренних и граничных подобластях, которые мы назовем счетными, проводятся расчеты. Для этого в каждой счетной подобласти строится своя равномерная параллелепипедальная подсетка $\bar{\Omega}_{h,r}$, $r = 1, \dots, N_r$, где N_r — число счетных подобластей. Объединение подсеток $\bar{\Omega}_{h,r}$ образует итоговую квазиструктурированную сетку

$$\Omega = \bigcup_{r=1}^{N_r} \bar{\Omega}_{h,r}. \quad (3)$$

Подробно алгоритмы, технологии и структуры данных решения задачи (1), (2) на квазиструктурированных сетках (3) рассматривались в работах [1, 2]. Предметом исследований настоящей статьи будет решение краевых подзадач в регулярных подобластях \bar{G}_h на подсетках $\bar{\Omega}_h$ (индексы m и r мы опускаем). Отметим только, что, согласно работе [6], в регулярных подобластях ставятся граничные условия Дирихле, а в граничных

подобластях — условия Дирихле на границе сопряжения с регулярными подобластями и исходные граничные условия (2) на кусках границы Γ .

Пусть L_h — оператор, аппроксимирующий оператор L в подобласти G_h на подсетке Ω_h .

Если G_h — регулярная подобласть, то в ней решается краевая подзадача

$$L_h u(T) = g_1(T), \quad T \in \Omega_h, \quad (4)$$

$$u(T) = v(T), \quad T \in \gamma_1. \quad (5)$$

Здесь введены обозначения: u — приближенное значение функции \bar{u} , γ_1 — граница рассматриваемой регулярной подобласти, v — известная функция, полученная на очередном шаге внешнего итерационного процесса по решению уравнения Пуанкаре–Стеклова.

Если G_h — граничная подобласть, в ней решается краевая подзадача

$$L_h u(T) = g_1(T), \quad T \in \Omega_h \setminus \Omega'_h, \quad (6)$$

$$l_h u(T) = g_2(T), \quad T \in \delta\Gamma, \quad (7)$$

$$u(T) = v(T), \quad T \in \gamma_2. \quad (8)$$

Здесь введены обозначения: l_h — аппроксимация оператора l , γ_2 — кусок границы между рассматриваемой подобластью и смежными регулярными подобластями, $\delta\Gamma$ — кусок внешней границы, Ω'_h — внешние узлы подсетки Ω_h .

На подсетке Ω_h оператор L_h определим как

$$\begin{aligned} (L_h u)_{i,j,k} = & -a_{i,j,k}^1 u_{i-1,j,k} - a_{i,j,k}^2 u_{i,j-1,k} - a_{i,j,k}^3 u_{i+1,j,k} - a_{i,j,k}^4 u_{i,j+1,k} - \\ & a_{i,j,k}^5 u_{i,j,k-1} - a_{i,j,k}^6 u_{i,j,k+1} - a_{i,j,k}^0 u_{i,j,k}, \\ & i = 1, 2, \dots, I, \quad j = 1, 2, \dots, J, \quad k = 1, 2, \dots, K, \end{aligned} \quad (9)$$

где $a_{i,j,k}^m$, $m = 0, 1, \dots, 6$, — известные величины, I, J, K — число узлов разностной сетки по координатам x, y, z соответственно. Учитывая граничные условия, и на основании (9) получим систему линейных алгебраических уравнений, которую запишем в матричном виде

$$Au = f, \quad (10)$$

где A — квадратная матрица порядка $I \times J \times K$, $u = \{u_{i,j,k}\}$ и $f = \{f_{i,j,k}\}$ — искомый и заданный векторы соответственно. Нашей задачей будет экспериментальное исследование решателей системы (10). При этом учитываются характерные особенности расчета на квазиструктурированных сетках: 1) сравнительно малое число узлов в подсетках; 2) малое число видов подсеток; 3) большое число повторов решений на одной и той же подсетке. Отметим, что, несмотря на малое число узлов в подсетках, результирующая сетка может иметь большое число узлов. Например, если макросетка Ω_H имеет параметры $10 \times 10 \times 10$, то результирующая сетка Ω будет содержать число узлов, показанное в таблице 1.

Таблица 1. Число узлов в квазиструктурированной сетке Ω при различном числе узлов в подсетках Ω_h

Ω_h	$8 \times 8 \times 8$	$16 \times 16 \times 16$	$32 \times 32 \times 32$	$64 \times 64 \times 64$	$128 \times 128 \times 128$
Ω	512 000	4 096 000	32 768 000	262 144 000	2 097 152 000

Рассматривается пять решателей. Первый — итерационный метод последовательной верхней релаксации с оптимальным параметром релаксации (ПВР). Его достоинства следующие: 1) простота в реализации; 2) широкая область применения. Недостатком является сравнительно малая скорость сходимости, что особенно заметно на сетках с большим числом узлов. Второй — неявный метод переменных направлений (МПН) с оптимальным набором итерационных параметров. Его основное достоинство — уникально малое число итераций, имеющее логарифмическую зависимость от шага подсетки. Недостаток — узкая область применения (необходимо знать границы спектра матрицы A). Третий — неявный метод неполной факторизации с ускорением сопряженными градиентами (EXIFCG). Четвертый и пятый — прямые решатели HELMHOLTZ и PARDISO из библиотеки Intel MKL. Ниже приводится описание первых трех методов.

1.1. Метод ПВР

Метод последовательной верхней релаксации реализуется по следующим формулам:

$$\begin{aligned}\hat{u}_{i,j,k}^{n+1} &= \left(f_{i,j,k} + a_{i,j,k}^1 u_{i,-1,j,k}^{n+1} + a_{i,j,k}^2 u_{i,j-1,k}^{n+1} + a_{i,j,k}^5 u_{i,j,k-1}^{n+1} + \right. \\ &\quad \left. a_{i,j,k}^3 u_{i,+1,j,k}^n + a_{i,j,k}^4 u_{i,j+1,k}^n + a_{i,j,k}^6 u_{i,j,k+1}^n \right) / a_{i,j,k}^0, \\ u_{i,j,k}^{n+1} &= \omega \hat{u}_{i,j,k}^{n+1} + (1 - \omega) u_{i,j,k}^n,\end{aligned}$$

где $1 \leq \omega < 2$ — заданный итерационный параметр, $n = 0, 1, \dots$ — номер итерации. Оптимальное значение ω_0 параметра ω выражается через спектральный радиус ρ_Z матрицы перехода в методе Зейделя ($\omega = 1$) как

$$\omega_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho_Z}}.$$

Для вычисления ρ_Z [8] можно использовать итерационный алгоритм

$$\rho_Z^n = \frac{\|u^n - u^{n-1}\|}{\|u^{n-1} - u^{n-2}\|}, \quad n = 2, 3, \dots$$

Но, как показали численные эксперименты, при увеличении числа узлов подсетки данный алгоритм дает ошибку в вычислении ω_0 , что увеличивает число итераций. В связи с этим, учитывая, что изучаются свойства подсеток-кирпичиков, из которых будут собираться квазиструктурированные сетки, оптимальное значение ω_0 уточнялось экспериментально.

1.2. Метод МПН

Рассмотрим неявный итерационный метод переменных направлений для трехмерного случая. При решении системы (10) он формально представляет собой алгебраическую задачу, состоящую в вычислении последовательности векторов

$$\begin{aligned}u^{n+1/2} &= u^n - \tau_n^1 (A_{xy} u^{n+1/2} + A_z u^n - f), \\ u^{n+1} &= u^{n+1/2} - \tau_n^2 (A_{xy} u^{n+1/2} + A_z u^{n+1} - f),\end{aligned}\tag{11}$$

где $n = 0, 1, \dots$ — номер итерации, τ_n^1, τ_n^2 — итерационные параметры, а A_{xy} и A_z — пятидиагональная и трехдиагональная матрицы, определяемые как

$$\begin{aligned}
A_{xy} + A_z &= A, \\
(A_{xy}u)_{i,j,k} &= -a_{i,j,k}^1 u_{i-1,j,k} + a_{i,j,k}^{0,x} u_{i,j,k} - a_{i,j,k}^2 u_{i+1,j,k} - \\
&\quad a_{i,j,k}^3 u_{i,j-1,k} + a_{i,j,k}^{0,y} u_{i,j,k} - a_{i,j,k}^4 u_{i,j+1,k}, \\
(A_z u)_{i,j,k} &= -a_{i,j,k}^5 u_{i,j,k-1} + a_{i,j,k}^{0,z} u_{i,j,k} - a_{i,j,k}^6 u_{i,j,k+1}, \\
a_{i,j,k}^{0,x} + a_{i,j,k}^{0,y} + a_{i,j,k}^{0,z} &= a_{i,j,k}^0.
\end{aligned} \tag{12}$$

Соотношения (11), (12) представляют собой векторную запись 3D модификации метода переменных направлений Писмана–Речфорда [9], в котором каждая n -я итерация выполняется за два полушага.

На первом полушаге решается K двумерных систем порядка $I \times J$:

$$(E + \tau_n^1 A_{xy})u^{n+1/2} = f^{xy}, \tag{13}$$

а на втором — $I \times J$ одномерных систем порядка K :

$$(E + \tau_n^2 A_z)u^{n+1} = f^z. \tag{14}$$

Здесь и далее E — единичная матрица, а правые части

$$f^{xy} = \{f_{i,j,k}^{xy}\}, \quad f^z = \{f_{i,j,k}^z\}$$

вычисляются как

$$\begin{aligned}
f_{i,j,k}^{xy} &= u_{i,j,k}^n + \tau_n^2 (f_{i,j,k} + a_{i,j,k}^5 u_{i,j,k-1}^n + a_{i,j,k}^6 u_{i,j,k+1}^n - a_{i,j,k}^{0,z} u_{i,j,k}^n), \\
f_{i,j,k}^z &= u_{i,j,k}^{n+1/2} + \tau_n^1 (f_{i,j,k} + a_{i,j,k}^1 u_{i-1,j,k}^{n+1/2} + a_{i,j,k}^2 u_{i,j-1,k}^{n+1/2} + a_{i,j,k}^3 u_{i+1,j,k}^{n+1/2} + a_{i,j,k}^4 u_{i,j+1,k}^{n+1/2} - \\
&\quad (a_{i,j,k}^{0,x} + a_{i,j,k}^{0,y}) u_{i,j,k}^{n+1/2}).
\end{aligned}$$

Пусть A_{xy} , A_z — симметричные положительно определенные перестановочные матрицы, т. е.

$$\begin{aligned}
A_{xy}^* &= A_{xy}, & A_z^* &= A_z, \\
\lambda_{xy} E &\leq A_{xy} \leq \Lambda_{xy} E, & \lambda_z E &\leq A_z \leq \Lambda_z E, & \lambda_{xy}, \lambda_z &> 0, \\
A_{xy} A_z &= A_z A_{xy},
\end{aligned}$$

где λ_{xy} , Λ_{xy} , λ_z , Λ_z — границы спектра матриц A_{xy} , A_z . Тогда существует оптимальный набор параметров, при котором число итераций N_{it} , необходимых для достижения заданной точности ε , выражается как

$$N_{it} \approx \frac{1}{\pi^2} \ln \frac{4}{\varepsilon} \ln \frac{4}{\xi}.$$

Здесь

$$\xi = \frac{1-t}{1+t}, \quad t = \sqrt{\frac{(\Lambda_{xy} - \lambda_{xy})(\Lambda_z - \lambda_z)}{(\Lambda_{xy} + \lambda_{xy})(\Lambda_z + \lambda_z)}}.$$

Оптимальные итерационные параметры в методе (11), (12) вычисляются следующим образом:

$$\tau_n^1 = \frac{(q\omega_n + r)}{(1 - p\omega_n)}, \quad \tau_n^2 = \frac{(q\omega_n - r)}{(1 - p\omega_n)},$$

где

$$p = \frac{\chi - t}{\chi + t}, \quad \chi = \frac{(\Lambda_{xy} - \lambda_{xy})\Lambda_z}{(\Lambda_z + \lambda_{xy})\Lambda_{xy}}, \quad r = \frac{\Lambda_{xy} - \Lambda_z(\Lambda_{xy} + \Lambda_z)}{2\Lambda_{xy}\Lambda_z}, \quad q = r + \frac{1 - p}{\Lambda_{xy}},$$

$$\omega_n = \frac{(1 + 2\theta)(1 + \theta^\sigma)}{2\theta^{\sigma/2}(1 + \theta^{1-\sigma} + \theta^{1+\sigma})}, \quad \theta = \frac{1}{16}\xi^2 \left(1 + \frac{1}{2}\xi^2\right), \quad \sigma = \frac{2n - 1}{2N_{\text{it}}},$$

$$n = 1, 2, \dots, N_{\text{it}}.$$

Решение двумерных систем (13) проводится прямым методом циклической редукции Бунемана [8], который асимптотически требует такого же объема вычислений, как и метод быстрого преобразования Фурье, но не требует знания собственных чисел и собственных векторов исходной матрицы. Суть данного метода заключается в следующем: будем предполагать, что в направлении редукции система (10) удовлетворяет всем необходимым требованиям для реализации данного метода, а именно представима в виде

$$-u_{j-1} + Du_j - u_{j+1} = f_j, \quad j = 1, 2, \dots, J,$$

где u_j — векторы порядка J , содержащие значения искомой функции на j -й линии $y = y_j$, $u_0 = u_{J+1} = 0$, D — трехдиагональная матрица порядка I . Предполагается, что $J = 2^{k+1} - 1$, где k — целое число. Редукция состоит из прямого хода и обратного хода. Прямой ход заключается в решении трехдиагональных систем

$$D^v(b_j^{v+1} - b_j^v) = b_{j-2^v}^v + b_{j+2^v}^v + d_j^v, \quad (15)$$

где

$$d_j^{v+1} = d_{j-2^v}^v + d_{j+2^v}^v - 2b_j^{v+1}, \quad j = i2^v, \quad i = 1, 2, \dots, 2^{k-v} - 1,$$

$$b_j^0 = 0, \quad j = 0, 1, \dots, 2^{k+1},$$

$$d_j^0 = f_j, \quad j = 1, 2, \dots, 2^{k+1} - 1.$$

Здесь b_j^v , d_j^v — вспомогательные векторы, $v = 1, 2, \dots, k$ — номер шага прямого хода редукции. Трехдиагональная матрица D^v является произведением трехдиагональных матриц:

$$D^v = \prod_{j=1}^{2^v} \left(D + \cos \frac{(2j-1)\pi}{2^{v+1}} E \right).$$

Обратный ход циклической редукции заключается в проведении вычислений по формулам:

$$D^v \varphi_j^v = u_{j-2^v}^v + u_{j+2^v}^v + d_j^v, \quad (16)$$

$$v = k - 1, \dots, 1, \quad j = 1, 2, \dots, 2^{k+1-v},$$

$$u_0 = u_{2^{k+1}} = 0,$$

где φ_j^v — вспомогательные векторы такие, что искомое решение вычисляется по формуле

$$u_j = b_j^k + \varphi_j^k.$$

Решение систем (14)–(16) проводится методом прогонки.

1.3. Метод EXIFCG

Данный метод изложим согласно работе [10]. Представим матрицу A системы (10) в виде

$$A = D - L - U,$$

где A — симметричная положительно определенная матрица порядка $N = I \times J \times K$, D — диагональная, L — нижняя треугольная, U — верхняя треугольная матрицы. Преобуславливатель B определим как

$$B = (G - L)G^{-1}(G - U),$$

$$G = \frac{1}{\omega}D - \theta S, \quad Se = \left(\frac{1 - \omega}{\omega}D + LG^{-1} \right) e,$$

где ω, θ — релаксационный и компенсационный параметры, e — вектор с компонентами, равными единице, S и G — диагональные матрицы. Тогда система (10) преобразуется к виду

$$\bar{A}\bar{u} = \bar{f}.$$

Здесь

$$\begin{aligned} \bar{A} &= G^{1/2}(G - L)^{-1}A(G - U)^{-1}G^{1/2} \\ &= (E - \bar{L})^{-1} + (E - \bar{U})^{-1} - (E - \bar{L})^{-1}(2E - \bar{D})(E - \bar{U})^{-1}, \\ \bar{L} &= G^{-1/2}LG^{-1/2}, \quad \bar{U} = G^{-1/2}UG^{-1/2}, \quad \bar{D} = G^{-1/2}DG^{-1/2}, \\ \bar{u} &= (E - \bar{U})G^{1/2}u, \\ \bar{f} &= (E - \bar{L})G^{-1/2}f. \end{aligned}$$

Полученная система решается методом сопряженных градиентов по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \bar{r}^0 &= \bar{f} - \bar{A}\bar{u}^0, \quad p^0 = \bar{r}^0, \\ \bar{u}^{n+1} &= \bar{u}^n + \alpha_n p^n, \quad \alpha_n = (\bar{r}^n, \bar{r}^n) / (\bar{A}p^n, p^n), \\ \bar{r}^{n+1} &= \bar{r}^n - \alpha_n \bar{A}p^n, \quad p^{n+1} = \bar{r}^{n+1} - \beta_n p^n, \quad \beta_n = (\bar{r}^{n+1}, \bar{r}^{n+1}) / (\bar{r}^n, \bar{r}^n), \\ n &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Для вычисления произведения матрицы на вектор $\bar{A}p$ применяется эффективный прием, именуемый как модификация Айзенштата, состоящий в следующем:

$$\bar{A}p = q + (E - \bar{L})^{-1}[p - (2E - \bar{D})q], \quad q = (E - \bar{U})^{-1}p.$$

Решение исходной системы восстанавливается по формуле

$$u = G^{-1/2}(E - \bar{U})^{-1}\bar{u}.$$

2. Экспериментальные исследования методов

Цель проводимых численных экспериментов — определить среди рассматриваемых наиболее быстрый решатель в подобластях на подсетках с малым числом узлов и условия его применения. Для этого рассматривалась одна регулярная подобласть, представляющая собой единичный куб, в котором решалась задача

$$\Delta_h u = 0, \quad u|_{\gamma_1} = 1. \quad (17)$$

Здесь γ_1 — граница, Δ_h — матрица системы линейных алгебраических уравнений, аппроксимирующих оператор Лапласа на равномерных кубических сетках Ω_h [8] следующих размерностей: $8 \times 8 \times 8$, $16 \times 16 \times 16$, $32 \times 32 \times 32$, $64 \times 64 \times 64$, $128 \times 128 \times 128$. Предполагается, что именно эти сетки играют роль подсеток-кирпичиков при построении квазиструктурированной сетки. Итерации прекращались при выполнении критерия $\|u^{n+1} - u^n\|_\infty < \varepsilon$, где ε — заданная малая величина, которую мы полагаем равной $\varepsilon = 10^{-4}$, что достаточно, например, для упомянутых задач сильноточной электроники.

Расчеты выполнялись на персональном компьютере Intel(R) Core(TM) i5-8600K CPU @ 3.60GHz. Численные эксперименты проводились в двух режимах: 1) одиночный расчет; 2) расчет серии задач с различными граничными условиями.

2.1. Одиночные расчеты

Под одиночным расчетом понимается решение задачи (17) на сетках Ω_h с фиксированным граничным условием. Для исключения флуктуаций вычислялось среднее время T в секундах за $N_{\text{rep}} \gg 100$ повторов решения одной и той же задачи на одной и той же сетке ($T = T_\Sigma / N_{\text{rep}}$, где T_Σ — суммарное время).

В табл. 2 даны времена вычислений T в секундах и число итераций N_{it} для одиночных расчетов ($e = 10$). Кроме того, для наглядности приводится отношение времен расчета к времени работы ПВР (если это отношение > 1 , то ПВР выигрывает).

Таблица 2. Результаты одиночных расчетов

Решатель	Сетка									
	$8 \times 8 \times 8$		$16 \times 16 \times 16$		$32 \times 32 \times 32$		$64 \times 64 \times 64$		$128 \times 128 \times 128$	
	T	N_{it}	T	N_{it}	T	N_{it}	T	N_{it}	T	N_{it}
ПВР	$1.4e-5$	23	$2.5e-4$	42	$4.5e-3$	80	0.08	156	1.37	303
HEMNOLTZ	$4.6e-5$		$1.5e-4$		$7.5e-4$		$5.0e-3$		$4.5e-2$	
HEMNOLTZ/ПВР	3.3		0.6		0.2		0.1		0.03	
МПН	$5.6e-5$	8	$7.3e-4$	11	$7.8e-3$	12	0.1	14	1.16	15
МПН/ПВР	4		2.9		1.7		1.3		0.8	
EXIFCG	$4.9e-5$	7	$3.9e-4$	10	$6.4e-3$	13	$1.0e-1$	19	1.6	26
EXIFCG/ПВР	3.5		1.6		1.4		1.3		1.2	
PARDISO	$1.0e-3$		$1.5e-2$		0.26		11.8		$2.0e+4$	
PARDISO/ПВР	71.4		60		57.8		147.5		14598	

Из данной таблицы видно, что в одиночных расчетах, во-первых, ПВР оказывается наиболее быстрым методом на сетке $8 \times 8 \times 8$ и вторым по быстродействию после HEMNOLTZ на остальных сетках, незначительно уступая МПН на самой густой сетке $128 \times 128 \times 128$, несмотря на большее по сравнению с МПН число итераций (от 3 до 20 раз), во-вторых, PARDISO медленнее всех остальных методов от десяти до сотен тысяч раз, поэтому данный метод исключается из дальнейших рассмотрений.

Объяснение преимуществу ПВР состоит в том, что данный метод прост и допускает реализацию, которая более эффективно, чем в остальных методах, использует кэш-память, а также в меньшем числе действий на одну итерацию. Наиболее явно это преимущество проявляется при серийных расчетах.

2.2. Серии расчетов

Целью данных расчетов является выяснение сравнительных характеристик изучаемых методов при большом числе повторов решения краевой задачи с различными граничными условиями. Для этого рассматривалась последовательность задач

$$\Delta_h u_k = 0, \quad u_k|_{\gamma_1} = S_k,$$

где S_k — сумма k членов убывающей геометрической прогрессии ($q < 1$):

$$S_k = (1 - q^k), \quad k = 1, 2, \dots, K,$$

причем $S_k \rightarrow 1$. Число K таково, что $1 - S_k < 10^{-4}$.

При решении k -й задачи в итерационных методах в качестве начального приближения берется решение $k - 1$ -й задачи.

Было выполнено 6 серий расчетов с различными параметрами геометрической прогрессии, показанными в табл. 3, где N_s — номер серии.

Таблица 3. Параметры геометрической прогрессии

N_s	1	2	3	4	5	6
q	0.85	0.9	0.95	0.975	0.9875	0.9975
K	57	88	180	364	733	3680

В табл. 4 даны отношения времен расчетов по методам НЕМНОLTZ, EXIFCG и МПН к времени работы ПВР в серийных расчетах (через “-” указан номер серии).

Таблица 4. Результаты серийных расчетов

Решатель	Сетка				
	$8 \times 8 \times 8$	$16 \times 16 \times 16$	$32 \times 32 \times 32$	$64 \times 64 \times 64$	$128 \times 128 \times 128$
НЕМНОLTZ-1/ПВР-1	25	2.9	0.7	0.3	0.2
EXIFCG-1/ПВР-1	3.2	2.5	2.9	2.6	1.4
МПН-1/ПВР-1	3.8	3.5	2.7	2.4	1.5
НЕМНОLTZ-2/ПВР-2	20	2.5	0.8	0.3	0.2
EXIFCG-2/ПВР-2	3.7	3.5	2.9	2.6	1.5
МПН-2/ПВР-2	3.7	3.6	3.1	2.3	1.7
НЕМНОLTZ-3/ПВР-3	16.7	3.1	0.9	0.4	0.2
EXIFCG-3/ПВР-3	3.4	3.4	3.1	2.9	1.7
МПН-3/ПВР-3	4.1	4.3	3.3	2.7	1.9
НЕМНОLTZ-4/ПВР-4	20	3.6	1.2	0.5	0.3
EXIFCG-4/ПВР-4	3.8	4	3.1	3.4	1.8
МПН-4/ПВР-4	4.4	5	3.7	3	2.1
НЕМНОLTZ-5/ПВР-5	20	4.5	1.4	0.6	0.4
EXIFCG-5/ПВР-5	4.5	4.4	3.7	3.8	2.1
МПН-5/ПВР-5	4.9	5.3	4.2	3.3	2.4
НЕМНОLTZ-6/ПВР-6	33.3	7.7	2.7	1.4	0.8
EXIFCG-6/ПВР-6	11.3	7.3	5.4	6.3	3.5
МПН-6/ПВР-6	10	7.9	6.1	4.9	3.7

Из данной таблицы видно, что в серийных расчетах, во-первых, ПВР оказывается самым быстрым методом на сетках $8 \times 8 \times 8$, $16 \times 16 \times 16$ и на сетке $32 \times 32 \times 32$ в сериях 4–6, во-вторых, на последней 6-й серии, т. е. при большом числе повторов, ПВР

выигрывает почти на всех сетках, за исключением последней $128 \times 128 \times 128$, на которой ПВР практически сравнивается с НЕМНОLTZ, в-третьих, ПВР опережает МПН и EXIFCG на всех сетках и во всех сериях.

Последний факт объясняется тем, что ПВР более чувствителен к начальному приближению, чем МПН. Экспериментальное доказательство этому содержится в нижеследующей таблице. В ней показана величина Q для 6-й серии, равная отношению суммарного числа итераций в серийных расчетах N_{it}^s к числу итераций в одиночных расчетах N_{it} ($Q = N_{it}^s/N_{it}$) для методов ПВР, МПН и EXIFCG.

Таблица 5. Отношение Q числа итераций в серийных и одиночных расчетах

Решатель	Сетка				
	$8 \times 8 \times 8$	$16 \times 16 \times 16$	$32 \times 32 \times 32$	$64 \times 64 \times 64$	$128 \times 128 \times 128$
ПВР-6	416	318	268	252	222
МПН-6	512	529	601	658	683
EXIFCG-6	1037	740	619	443	331

Данная таблица показывает чувствительность методов к начальному приближению. Из нее следует, что, во-первых, отношение суммарного числа итераций в серийных расчетах к одиночным расчетам для ПВР меньше, чем для методов МПН и EXIFCG (обозначим их M), во-вторых, величина Q уменьшается с ростом числа узлов сетки для ПВР и возрастает для методов M . Все это говорит о том, что ПВР более чувствителен к начальному приближению, чем методы M , причем с ростом числа узлов сетки эта чувствительность для ПВР увеличивается, а для методов M уменьшается.

Заключение

Проведено экспериментальное исследование решателей 3D краевых задач на подсетках квазиструктурированных параллелепипедальных сеток. Необходимость в таких исследованиях возникла в связи с предложением составлять квазиструктурированную сетку из подсеток-кирпичиков вида $8 \times 8 \times 8$, $16 \times 16 \times 16$, $32 \times 32 \times 32$, $64 \times 64 \times 64$, $128 \times 128 \times 128$ (результатирующая сетка при этом может содержать миллиарды узлов). Характерной чертой данных сеток является малое число узлов в подсетках и большое число повторов решений на каждой подсетке. Рассмотрено пять решателей. Среди них — три итерационных: ПВР — метод последовательной верхней релаксации, МПН — неявный метод переменных направлений, EXIFCG — неявный метод неполной факторизации с ускорением сопряженными градиентами — и два прямых решателя: PARDISO и НЕМНОLTZ (оба из библиотеки Intel MKL). Расчеты проводились в одиночном и серийном режимах; в последнем случае имитируя внешний сходящийся итерационный процесс. Результаты расчетов показали, что при большом числе повторов наиболее эффективным оказался метод ПВР.

Литература

1. **Korneev V.D., Sveshnikov V.M.** Parallel algorithms and domain decomposition techniques for solving three-dimensional boundary value problems on quasi-structured grids // Numerical Analysis and Applications. — 2016. — Vol. 9, № 2. — P. 141–149.

2. **Корнеев В.Д., Свешников В.М.** Параллельные технологии и сеточные структуры данных для решения трехмерных краевых задач в сложных областях на квазиструктурированных сетках // Вычислительные методы и программирование. — 2018. — Т. 19. — С. 496–506.
3. **Василевский Ю.В., Ольшанский М.А.** Краткий курс по многосеточным методам и методам декомпозиции области. — М.: МГУ, 2007.
4. **Quarteroni A., Valli A.** Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. — Oxford: Clarendon Press, 1999.
5. **Dolean V., Jolivet P., Nataf F.** An Introduction to Domain Decomposition Methods: Algorithms, Theory and Parallel Implementation. — Philadelphia, USA: SIAM, 2015.
6. **Свешников В.М.** Построение прямых и итерационных методов декомпозиции // Сиб. журн. индустр. математики. — 2009. — Т. 12, № 3. — С. 99–109.
7. **Коваль Н.Н., Окс Е.М., Протасов Ю.С., Семашко Н.Н.** Эмиссионная электроника / Ю.С. Протасов. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009.
8. **Ильин В.П.** Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. — Новосибирск: Изд-во Института математики, 2000.
9. **Самарский А.А.** Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977.
10. **Pin V.P., Itskovich E.A.** Two explicit incomplete factorization methods // Bull. Novosibirsk Comp. Center. Ser. Numerical Analysis. — Novosibirsk, 2002. — Iss. 11. — P. 51–59.

Поступила в редакцию 02 февраля 2022 г.

После исправления 24 марта 2022 г.

Принята к печати 18 июля 2022 г.

Литература в транслитерации

1. **Korneev V.D., Sveshnikov V.M.** Parallel algorithms and domain decomposition techniques for solving three-dimensional boundary value problems on quasi-structured grids // Numerical Analysis and Applications. — 2016. — Vol. 9, № 2. — P. 141–149.
2. **Korneev V.D., Sveshnikov V.M.** Parallel'nye tekhnologii i setochnye struktury dannyh dlya resheniya trekhmernykh kraevykh zadach v slozhnykh oblastyakh na kvazistrukturirovannykh setkah // Vychislitel'nye metody i programmirovaniye. — 2018. — Т. 19. — S. 496–506.
3. **Vasilevskii Yu.V., Ol'shanskii M.A.** Kratkii kurs po mnogosetochnym metodam i metodam dekompozitsii oblasti. — М.: MGU, 2007.
4. **Quarteroni A., Valli A.** Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. — Oxford: Clarendon Press, 1999.
5. **Dolean V., Jolivet P., Nataf F.** An Introduction to Domain Decomposition Methods: Algorithms, Theory and Parallel Implementation. — Philadelphia, USA: SIAM, 2015.
6. **Sveshnikov V.M.** Postroenie pryamykh i iteratsionnykh metodov dekompozitsii // Sib. zhurn. industr. matematiki. — 2009. — Т. 12, № 3. — S. 99–109.
7. **Koval' N.N., Oks E.M., Protasov Yu.S., Semashko N.N.** Emissionnaya elektronika / Yu.S. Protasov. — М.: Izd-vo MGTU im. N.E. Bauman, 2009.
8. **Pin V.P.** Metody konechnykh raznostei i konechnykh ob'emov dlya ellipticheskikh uravnenii. — Novosibirsk: Izd-vo Instituta matematiki, 2000.
9. **Samarskii A.A.** Teoriya raznostnykh skhem. — М.: Nauka, 1977.
10. **Pin V.P., Itskovich E.A.** Two explicit incomplete factorization methods // Bull. Novosibirsk Comp. Center. Ser. Numerical Analysis. — Novosibirsk, 2002. — Iss. 11. — P. 51–59.