

УДК 532.529

АЛГЕБРАИЧЕСКИЙ МНОГОСЕТОЧНЫЙ МЕТОД В ЗАДАЧАХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ

К. Н. Волков¹, Ю. Н. Дерюгин², В. Н. Емельянов³,
А. С. Козелков⁴, И. В. Тетерина⁵

Рассматриваются особенности реализации и применения алгебраических многосеточных методов для решения систем разностных уравнений, порожденных дискретизацией дифференциальных уравнений в частных производных. Обсуждаются подходы к построению C/F-разбиения (метод стандартного огрубления, RS-метод), методы интерполяции (прямая интерполяция, непрямо́я интерполяция, стандартная интерполяция, интерполяция amg1r5) и сглаживания (итерационные схемы). Для расчета произведения Галеркина применяются различные форматы хранения разреженных матриц. Приводятся результаты численного решения ряда модельных уравнений математической физики. Сравняется эффективность разработанного подхода при использовании различных компонентов вычислительной процедуры.

Ключевые слова: многосеточные методы, интерполяция, сглаживание, вычислительная физика.

1. Введение. Решение систем разностных уравнений, полученных в результате дискретизации дифференциальных уравнений в частных производных, представляет собой один из наиболее важных и доминирующих моментов вычислительной процедуры с точки зрения затрат машинных ресурсов. При дискретизации уравнений на неструктурированных сетках матрица коэффициентов является несимметричной и не имеет диагонального преобладания. В этом случае классические итерационные методы либо перестают работать, либо приводят к медленной сходимости [1–3].

В современных численных методах используются многоуровневые многосеточные методы с явным (геометрический подход) и с неявным (алгебраический подход) построением последовательности сеток. На основе нескольких уровней дискретизации многосеточные методы разрешают конфликты между высокочастотными (дискретизация на подробной сетке) и низкочастотными (дискретизация на грубой сетке) компонентами решения, позволяя достигать высокой эффективности [1–3].

Геометрические многосеточные методы (Geometric Multigrid, GMG) представляются подходящими для решения нелинейных задач, поскольку нелинейности исходной системы уравнений передаются вниз по иерархии сеток (от подробной сетки к грубой) [4]. Алгебраические многосеточные методы (Algebraic Multigrid, AMG) применяются в тех областях, где применение геометрических методов является непрактичным или сталкивается с серьезными трудностями (например, при решении системы разностных уравнений, порожденной дискретизацией уравнений с разрывными коэффициентами). Они требуют значительного времени для инициализации, в связи с чем не применяются для решения систем разностных уравнений малого и среднего размера, а также при использовании дискретизации низкого порядка [5].

¹ Балтийский государственный технический университет “Военмех” им. Д. Ф. Устинова, факультет энергетического машиностроения, 1-я Красноармейская ул., д. 1, 190005, Санкт-Петербург; вед. науч. сотр., e-mail: dsci@mail.ru

² Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, просп. Мира, д. 37, 607188, г. Саров; рук. отдела, e-mail: askozelkov@mail.ru

³ Балтийский государственный технический университет “Военмех” им. Д. Ф. Устинова, факультет энергетического машиностроения, 1-я Красноармейская ул., д. 1, 190005, Санкт-Петербург; профессор, e-mail: vlademelyanov@gmail.com;

⁴ Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, просп. Мира, д. 37, 607188, г. Саров; рук. отдела, e-mail: askozelkov@mail.ru

⁵ Балтийский государственный технический университет “Военмех” им. Д. Ф. Устинова, факультет энергетического машиностроения, 1-я Красноармейская ул., д. 1, 190005, Санкт-Петербург; доцент, e-mail: yaiv@mail.ru

Реализация алгебраического многосеточного метода состоит из шага формирования сеток (матриц) на различных уровнях и шага решения. В процессе создания последовательности грубых сеточных уровней используется информация, которая содержится в матрице коэффициентов системы разностных уравнений. В соответствии с выбранным способом формирования сеток определяется оператор интерполяции с грубой сетки на подробную. Число узлов (уравнений) на самой грубой сетке обычно выбирается достаточно малым, что позволяет применить для решения системы разностных уравнений прямой метод (например, метод исключения Гаусса).

В настоящей статье обсуждаются различные подходы к реализации алгебраических многосеточных методов в задачах вычислительной физики и сравнивается эффективность разработанных средств численного решения систем разностных уравнений, порожденных дискретизацией модельных уравнений. Приводятся результаты сравнительного анализа эффективности различных компонентов вычислительной процедуры.

2. Уравнения и операторы. Реализация алгебраического многосеточного метода не требует информации о геометрии решаемой задачи, используется лишь структура матрицы коэффициентов системы разностных уравнений (рис. 1). Реализация алгебраического многосеточного метода состоит из шага формирования сеток (матриц) на различных уровнях и шага решения [5].

2.1. Основные идеи. Рассмотрим систему разностных уравнений $A_h u^h = f^h$, или $\sum_{j \in \Omega^h} a_{ij}^h u_j^h = f_i^h$ ($i \in \Omega^h$). Матрица A размером $n \times n$ состоит из коэффициентов a_{ij} ($i, j = 1, \dots, n$), связанных с дискретизацией. Вектор u длины n состоит из неизвестных узловых значений искомой функции. Вектор f длины n составлен из коэффициентов, обусловленных дискретизацией, а также из известных значений вектора решения, задаваемых граничными условиями. Значения искомой функции в узлах сетки $\Omega = \{1, 2, \dots, n\}$ обозначаются через u_i ($i = 1, \dots, n$).

Отличие от геометрического многосеточного метода, в котором множество узлов Ω^h представляет собой сетку наилучшей разрешающей способности, в алгебраическом многосеточном методе под $\Omega^h = \{1, 2, \dots, n\}$ понимается множество индексов неизвестных. Множество Ω^H имеет меньшее число элементов и соответствует грубой сетке.

Для переноса решения с грубой сетки на подробную используется оператор интерполяции I_H^h , а оператор ограничения на грубый сеточный уровень I_h^H находится из соотношения, полученного в соответствии с принципом Галеркина $A_H = I_h^H A_h I_H^h$, где $I_h^H = (I_H^h)^T$. Преимущество такого определения оператора на грубом сеточном уровне состоит в том, что он удовлетворяет вариационным принципам. Для симметричных и положительно-определенных матриц A_h и A_H имеет место соотношение

$$(A_H u^H, u^H) = (I_h^H A_h I_H^h u^H, u^H) = (A_h I_H^h u^H, I_h^H u^H) = (u^H, A_H u^H).$$

Решение на подробной сетке находится из соотношения $u_{\text{new}}^h = u_{\text{old}}^h + I_H^h e^H$. Коррекция решения на грубой сетке e^H находится из решения системы уравнений $A_H e^H = r^H$, или $\sum_{j \in \Omega^H} a_{ij}^H e_j^H = r_i^H$ ($i \in \Omega^H$), где $r^H = I_h^H(r_{\text{old}}^h)$ и $r_{\text{old}}^h = f^h - A_h u_{\text{old}}^h$. Погрешность точного решения $e^h = u_*^h - u^h$ (звездочка относится к точному решению) находится при помощи оператора коррекции на грубой сетке $e_{\text{new}}^h = K_{h,H} e_{\text{old}}^h$, где $K_{h,H} = I_h -$

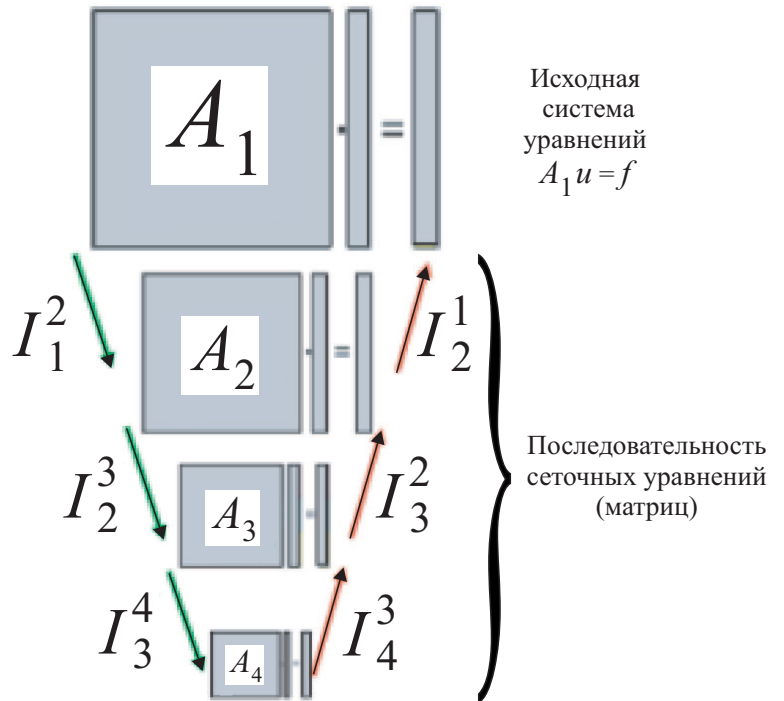


Рис. 1. Реализация алгебраического многосеточного метода

$I_H^h A_H^{-1} I_H^H A_h$. Под I_h понимается тождественный оператор.

Для сглаживания решения используется оператор S_h . На шаге сглаживания имеем (для обозначения решения, полученного после сглаживания, используется черта) $\bar{u}^h = S_h u^h + (I_h - S_h) A_h^{-1} f^h$. Сглаживание погрешности решения дает $\bar{e}^h = S_h e^h$.

При использовании ν_1 и ν_2 итераций для предварительного и окончательного сглаживания оператор коррекции записывается в виде $e_{\text{new}}^h = M_{h,H} e_{\text{old}}^h$, где $M_{h,H}(\nu_1, \nu_2) = S_h^{\nu_2} K_{h,H} S_h^{\nu_1}$.

В классическом подходе переменные на грубом сеточном уровне строятся как подмножество переменных, принадлежащих подробной сетке [6–8]. Множество переменных подробной сетки разделяется на два несвязанных подмножества $\Omega^h = C^h \cup F^h$, где C^h — множество переменных, которые принадлежат грубой сетке (C -переменные), F^h — множество переменных, которые принадлежат подробной сетке (F -переменные). При данном C/F -разбиении полагается, что $\Omega^H = C^h$, а интерполяция погрешности решения $e^h = I_H^h e^H$ определяется в виде

$$e_i^h = (I_H^h e^H)_i = \begin{cases} e_i^H, & \text{если } i \in C^h, \\ \sum_{k \in P_i^h} w_{ik}^h e_k^H, & \text{если } i \in F^h, \end{cases} \quad (1)$$

где $P_i^h \subset C^h$ представляет собой множество интерполяционных переменных. При интерполяции с грубой на подробную сетку погрешность решения e_i^h полагается равной e_i^H , если переменная i является C -переменной, и взвешенной сумме переменных из множества P_i^h , если переменная i принадлежит подмножеству F . Множество P_i^h является малым подмножеством множества C -переменных, находящихся в некоторой близости от переменной i , что гарантирует разреженность матрицы A_H . С другой стороны, множество P_i^h содержит достаточное число переменных, с которыми переменная i является сильно связанной. Для простоты верхний индекс h опускается, а вместо (1) используется соотношение

$$e_i = \sum_{k \in P_i} w_{ik} e_k \quad (i \in F). \quad (2)$$

Сходимость многосеточного метода зависит от изменения нормы погрешности решения

$$\|e^h\|_{A_h} = (A_h e^h, e^h)^{1/2}.$$

После предварительного сглаживания ν итераций вариационный принцип приводит к [7, 8]

$$\|K_{h,H} S_h^\nu e^h\|_{A_h} = \min_{e^H} \|S_h^\nu e^H - I_H^h e^H\|_{A_h}. \quad (3)$$

Процедура, описываемая (3), расширяется рекурсивным образом на любое число сеточный уровней. Скорость сходимости зависит от выбора релаксационной процедуры и оператора интерполяции.

2.2. Шаги реализации. Множество переменных подробной сетки разбивается (coarsening) на подмножество C -переменных и подмножество F -переменных. Сеточному уровню Ω^k ($k = 1, 2, \dots, M - 1$) соответствуют подмножества C^k и F^k . Каждому сеточному уровню соответствуют сеточные операторы A^1, A^2, \dots, A^M (при этом $A^1 = A$), а также операторы интерполяции $P^k = I_{k+1}^k$ и ограничения $R^k = I_k^{k+1}$, где $k = 1, 2, \dots, M - 1$. Оператор ограничения представляет собой транспонированный оператор интерполяции $R^k = (P^k)^T$. Для построения матрицы системы на грубом сеточном уровне вычисляется произведение Галеркина $R^k A^k P^k$. Сглаживание погрешности на каждом сеточном уровне производится при помощи оператора S^k ($k = 1, 2, \dots, M - 1$). Процесс огрубления повторяется до тех пор, пока размер системы не уменьшается до уровня, когда становится эффективным прямой метод решения системы разностных уравнений (например, метод исключения Гаусса).

Построение подмножеств C^k и F^k , а также построение операторов интерполяции, ограничения и сглаживания производится на шаге инициализации (setup phase).

После выполнения шага инициализации находится решение исходного уравнения (solution phase) путем рекурсивного применения многосеточной процедуры. Задается число сглаживающих итераций, а также число

рекурсивных вызовов метода на каждом сеточном уровне. Чувствительность шага решения к выбору сглаживающей процедуры обычно является сравнительно слабой, в связи с чем наибольшее распространение получили классические итерационные методы.

2.3. Показатели эффективности. К основным факторам, показывающим эффективность реализации многосеточной процедуры, относятся фактор сходимости (convergence factor) и фактор сложности (complexity factor). Скорость сходимости характеризуется уменьшением нормы невязки на двух соседних циклах $\varrho = \|r^{k+1}\|/\|r^k\|$. Фактор сходимости оценивается при помощи осреднения скорости сходимости по всем многосеточным циклам (при достижении заданного уровня невязки) или при помощи осреднения по заданному числу циклов, если заданный уровень невязки в расчетах не достигается. Фактор асимптотической сходимости рассчитывается по отношению к норме невязки на первом многосеточном цикле.

Фактор сложности выражается в виде числа операций, которые необходимо выполнить на одной итерации, и требуемой для этого памяти. Операторная сложность (operator complexity) определяется как отношение суммарного числа ненулевых элементов матриц A^k на всех сеточных уровнях ($k = 1, 2, \dots, M$) к числу ненулевых элементов матрицы A^1 на самой подробной сетке и служит индикатором требуемой памяти, указывая на число операций, приходящихся на один многосеточный цикл на шаге решения. Уменьшение операторной сложности приводит к сокращению времени, требуемого для расчета.

Операторная сложность служит индикатором памяти, нужной для реализации многосеточного метода $C_O = \sum_k \frac{|A^{(k)}|}{|A^{(1)}|}$, где $|A^{(k)}|$ — число ненулевых коэффициентов на уровне k . Фактор сложности сетки (grid complexity) показывает, насколько быстро производится огрубление сетки $C_G = \sum_k \frac{n_k}{n_1}$, где n_k — число переменных (точек сетки или узлов графа) на уровне k . Сложность многосеточного цикла (cycle complexity) характеризуется параметром $C_C = \sum_k \frac{|A^{(k)}|}{|A^{(1)}|} \nu_k \gamma^k$, где $\nu_k = \nu_1 + \nu_2$. Параметр γ соответствует типу многосеточного цикла ($\gamma = 1$ для V-цикла и $\gamma = 2$ для W-цикла). Объединение фактора сходимости и сложности многосеточного цикла дает объем вычислительной работы, приходящейся на единицу точности $C_W = -C_C / \log \varrho$.

3. Построение C/F-разбиения. Учет сильных связей между переменными в процедуре интерполяции приводит к ускорению сходимости, в то время как слабые связи оказывают негативное влияние на сходимость, увеличивая объем вычислительной работы. Многообразие имеющихся подходов связывается с поиском компромисса между общей эффективностью алгоритма и объемом требуемой вычислительной работы.

3.1. Основные идеи. Вместо матрично-векторной терминологии используются термины, связанные с последовательностью фиктивных сеток, под узлами которых понимаются узлы направленного графа, связанного с данной матрицей. Узел сетки $i \in \Omega^h$ (имеет смысл переменной u_i^h) связан с переменной $j \in \Omega^h$, если $a_{ij}^h \neq 0$. Множество переменных, соседних с переменной i , имеет вид $N_i^h = \{j \in \Omega^h : j \neq i, a_{ij}^h \neq 0\}$ ($i \in \Omega^h$). Уравнение $A_h u^h = f^h$ представляет собой фиктивное сеточное уравнение на подробной сетке Ω^h , а уравнение $A_H u^H = f^H$ — фиктивное сеточное уравнение на грубой сетке $\Omega^H \subset \Omega^h$.

Имеющиеся подходы относятся к решению скалярных эллиптических дифференциальных уравнений в частных производных, дискретизация которых приводит к системам разностных уравнений с M -матрицей (скорость сходимости не зависит от размера задачи). При наличии как отрицательных, так и положительных коэффициентов, стоящих вне главной диагонали, используются определения

$$a_{ij}^- = \begin{cases} a_{ij}, & \text{если } a_{ij} < 0, \\ 0, & \text{если } a_{ij} \geq 0, \end{cases} \quad a_{ij}^+ = \begin{cases} 0, & \text{если } a_{ij} \leq 0, \\ a_{ij}, & \text{если } a_{ij} > 0. \end{cases}$$

При этом имеется два несвязанных подмножества переменных

$$N_i^- = \{j \in N_i : a_{ij}^h < 0\}, \quad N_i^+ = \{j \in N_i : a_{ij}^h > 0\}.$$

На практике используется два основных подхода к построению последовательности сеток. Метод агломерации (agglomeration method) основан на разделении множества переменных на подмножество C -переменных и подмножество F -переменных [6–8]. При этом принимается, что C -переменные образуют следующий сеточный уровень, а интерполяция решения производится между C - и F -переменными. Другой подход (aggregation)

method) заключается в формировании агрегатов узлов, которые принимаются в качестве переменных грубой сетки [9]. В ряде случаев методы агрегации имеют преимущества перед подходами, основанными на C/F -разбиении [10]. Подход, реализованный в работе [11], объединяет достоинства различных методов.

3.2. Метод стандартного огрубления. Для выбора матричных коэффициентов, используемых для построения грубого сеточного уровня, вводятся понятия сильного влияния переменной и сильной зависимости между переменными. Переменная i сильно зависит от переменной j , а переменная j имеет сильное влияние на переменную i , если матричный коэффициент a_{ij} по величине превосходит все внедиагональные коэффициенты матрицы (standard coarsening): $-a_{ij} \geq \theta \max_{k \neq i} \{-a_{ik}\}$. Параметр $0 < \theta \leq 1$ контролирует число сильных связей между переменными (обычно $\theta = 0.25$). Множество S_i представляет собой множество всех переменных j , имеющих сильные связи с переменной i (множество переменных, от которых переменная i сильно зависит): $S_i = \left\{ j : j \neq i, -a_{ij} \geq \theta \max_{k \neq i} (-a_{ik}) \right\}$.

На практике C/F -разбиение строится таким образом, чтобы множество C -переменных приблизительно представляло собой максимальное независимое множество (в пределах C -множества переменные не имеют сильных связей друг с другом), а F -переменные были бы окружены интерполяционными C -переменными [12]. Каждой переменной i присваивается некоторый весовой коэффициент λ_i , равный числу переменных, на которые переменная i имеет сильное влияние: $\lambda_i = |S_i^T \cap U| + 2|S_i^T \cap F|$ ($i \in U$).

Под U понимается множество переменных, для которых решение еще не принято. Переменная с максимальным весовым коэффициентом λ_i выбирается в качестве первой переменной грубой сетки, а все переменные, которые сильно зависят от переменной i , становятся F -переменными. Для всех переменных, оказывающих сильное влияние на эти новые F -переменные, коэффициент λ_j увеличивается на число новых F -переменных, на которые переменная j имеет сильное влияние. Процесс повторяется до тех пор, пока все переменные не станут принадлежать C - или F -подмножествам.

3.3. RS-метод. Проход 1 начинается с присваивания каждой переменной i некоторого весового коэффициента λ_i , величина которого зависит от числа переменных, на которые переменная i оказывает сильное влияние. Переменная i с максимальным коэффициентом λ_i выбирается в качестве первой точки подмножества C . Переменные, которые сильно зависят от переменной i , заносятся в подмножество F . Поскольку все другие переменные, которые оказывают сильное влияние на эти новые F -переменные, являются потенциальными C -переменными, то для каждой новой F -переменной $j \in S_i^T$ весовой коэффициент λ_k увеличивается для каждой переменной $k \in S_j$. Процесс повторяется до тех пор, пока все переменные не станут принадлежать C - или F -подмножествам.

В общем случае прохода 1 оказывается недостаточно для построения качественного C/F -разбиения [13]. Имеется большое количество связей между F -переменными, не разделяющими C -переменную. На проходе 2 производится перебор F -переменных. Если имеются сильные зависимости между переменными, не имеющими общей C -переменной, то одна из двух таких F -переменных временно становится C -переменной.

4. Интерполяция. Построение C/F -разбиения и процедура интерполяции оказываются тесно взаимосвязанными. Разбиение множества переменных должно быть таким, чтобы каждая F -переменная имела достаточное количество сильных связей с переменными из подмножества C .

4.1. Особенности построения. Погрешность решения допускает хорошее приближение на грубом сеточном уровне и находится из решения уравнения для невязки $A_H e^H = r^H$. Алгебраически гладкая погрешность характеризуется малой невязкой, поэтому $A_H e^H = 0$, что служит основой для выбора грубых сеточных уровней и нахождения весовых множителей в процедуре интерполяции.

После нескольких релаксационных шагов масштабированная невязка решения становится много меньшей погрешности решения: $|r_i| \ll a_{ii}|e_i|$. Локальное приближение для алгебраически гладкой погрешности решения (algebraically smooth error), такой, что $Se = e$ и $|r_i| \ll a_{ii}|e_i|$, имеет вид

$$e_i = -\frac{1}{a_{ii}} \sum_{j \in N_i} a_{ij} e_j \quad (i \in \Omega). \tag{4}$$

Реализация метода заключается в построении подходящего C/F -разбиения, а также в определении множества интерполяционных переменных $P_i \subset C$ ($i \in F$) и весовых множителей w_{ik} , таких, что соотношение (2) дает приемлемое приближение для любой алгебраически гладкой погрешности.

Точная процедура интерполяции дается соотношением (4) при $P_i = N_i$ и $w_{ik} = -a_{ik}/a_{ii}$. Подход требует построения такого C/F -разбиения, что для каждой переменной $i \in F$ все переменные, соседние с переменной i , содержались бы в подмножестве C , и приводит к построению прямого метода решения системы разностных уравнений [7, 8]. Для построения эффективной вычислительной процедуры требуется построение малых подмножеств P_i (настолько малых, насколько это представляется возможным) для того, чтобы получить разреженный оператор Галеркина и достичь высокой скорости сходимости.

4.2. Прямая интерполяция. Для прямой интерполяции (direct interpolation) имеет место $P_i \subseteq N_i$, а оператор интерполяции строится из соотношения (4) при известном подмножестве переменных, не участвующих в интерполяции (часть суммы, для которой $j \in N_i \setminus P_i$).

Для любой переменной i , имеющей сильные связи с переменными из множества P_i , наилучшее приближение для алгебраически гладкой погрешности удовлетворяет соотношению

$$\left(\sum_{k \in P_i} a_{ik} \right)^{-1} \sum_{k \in P_i} a_{ik} e_k = \left(\sum_{j \in N_i} a_{ij} \right)^{-1} \sum_{j \in N_i} a_{ij} e_j \quad (i \in \Omega).$$

Подстановка в соотношение (4) приводит к интерполяционной процедуре (2) с положительными весовыми множителями [7, 8]:

$$w_{ik} = -\alpha_i \frac{a_{ik}}{a_{ii}}, \quad \text{где} \quad \alpha_i = \frac{\sum_{j \in N_i} a_{ij}}{\sum_{l \in P_i} a_{il}} \quad \text{и} \quad i \in F, \quad l \in P_i. \quad (5)$$

На практике соотношение (5) означает, что для построенного C/F -разбиения каждая переменная $i \in F$ имеет достаточно большое число переменных из подмножества C , с которыми она имеет сильные связи и которые используются в качестве множества интерполяционных переменных P_i .

Дискретизация эллиптических дифференциальных уравнений в частных производных приводит к матрицам, содержащим отрицательные коэффициенты вне главной диагонали. При наличии малых положительных коэффициентов, находящихся вне главной диагонали, процедура интерполяции обычно не изменяется, а связи малых положительных коэффициентов игнорируются в силу их незначительности. В случае наличия больших положительных коэффициентов, стоящих вне главной диагонали, алгебраически гладкая погрешность осциллирует вдоль направления таких связей. Процедура интерполяции изменяется, например, при помощи подходящего разделения переменных с положительными и отрицательными связями, что дает как положительные, так и отрицательные весовые множители [7, 8].

Для матриц общего вида используются коэффициенты a_{ij}^+ и a_{ij}^- и подмножества N_i^+ и N_i^- , а положительные коэффициенты добавляются к коэффициентам, стоящим на главной диагонали. Процедура интерполяции определяется соотношением

$$\tilde{a}_{ii} e_i + \alpha_i \sum_{k \in P_i} a_{ik}^- e_k = 0, \quad \tilde{a}_{ii} = a_{ii} + \sum_{j \in N_i} a_{ij}^+, \quad \alpha_i = \frac{\sum_{j \in N_i} a_{ij}^-}{\sum_{k \in P_i} a_{ik}^-}.$$

Такой подход приводит к положительным весовым коэффициентам $w_{ik} = -\alpha_i \frac{a_{ik}^-}{a_{ii}}$ ($i \in F, k \in P_i$).

При наличии в строке матрицы положительных коэффициентов сумма $\sum_{j \in N_i} a_{ij}$ становится нулевой или положительной для некоторой переменной $i \in F$, что приводит к нулевым или отрицательным весовым множителям, поэтому положительные коэффициенты матрицы добавляются к диагональным.

В общем случае при построении процедуры интерполяции учет положительных связей оказывается более важным, чем учет отрицательных связей [7, 8] (для положительных связей погрешность решения изменяется наиболее медленно). Для некоторой переменной $i \in F$, имеющей как отрицательные, так и положительные

связи, предполагается, что $N_i^- \neq \emptyset$ и $N_i^+ \neq \emptyset$, а C/F -разбиение является таким, что как минимум одна связь любого знака принадлежит подмножеству C . Выбирается два множества интерполяционных переменных, таких, что $\emptyset = P_i^- \subseteq C \cap N_i^-$ и $\emptyset = P_i^+ \subseteq C \cap N_i^+$.

Для каждой переменной $i \in F$ определяется множество интерполяционных переменных $P_i = N_i$, что дает $a_{ii}e_i + \sum_{j \in N_i} a_{ij}e_j = 0$. Полагая $P_i = P_i^- \cup P_i^+$, запишем

$$a_{ii}e_i + \alpha_i \sum_{k \in P_i} a_{ik}^- e_k + \beta_i \sum_{k \in P_i} a_{ik}^+ e_k = 0, \tag{6}$$

где $\alpha_i = \frac{\sum_{j \in N_i} a_{ij}^-}{\sum_{k \in P_i} a_{ik}^-}$, $\beta_i = \frac{\sum_{j \in N_i} a_{ij}^+}{\sum_{k \in P_i} a_{ik}^+}$. Погрешность находится из соотношения $e_i = \sum_{k \in P_i} w_{ik}e_k$. Весовые множители

находятся из соотношений $w_{ik} = \begin{cases} -\alpha_i a_{ik}^- / a_{ii} & \text{при } k \in P_i^-, \\ -\beta_i a_{ik}^+ / a_{ii} & \text{при } k \in P_i^+. \end{cases}$

При этом $w_{ik} > 0$, если $k \in P_i^-$, и $w_{ik} < 0$, если $k \in P_i^+$. При $N_i^+ = \emptyset$ или $N_i^- = \emptyset$ определения видоизменяются: $P_i^+ = \emptyset$, $\beta_i = 0$ и $P_i^- = \emptyset$, $\alpha_i = 0$. При наличии положительных элементов они добавляются к диагональным.

4.3. Непрямая интерполяция. Метод прямой интерполяции учитывает прямые связи между переменными (в процедуре интерполяции переменной $i \in F$ участвуют только те переменные из подмножества C , которые имеют с переменной i сильные связи). В методе не прямой интерполяции (indirect interpolation) учитываются сильные связи между F -переменными.

Предполагается, что для данного C/F -разбиения имеется некоторая переменная $i \in F$, которая не имеет сильных связей с переменными из подмножества C . Вместо множества P_i выбирается множество $P_i^F \subseteq F \cap N_i$, а погрешность находится из соотношения

$$e_i = \sum_{j \in P_i^F} w_{ij}^F e_j, \quad \text{где } w_{ij}^F = -\alpha_i \frac{a_{ij}}{a_{ii}}. \tag{7}$$

Процедура интерполяции для соседних переменных $j \in P_i^F$ дается соотношением

$$e_j = \sum_{k \in P_j} w_{jk} e_k, \quad \text{где } w_{jk} = -\alpha_j \frac{a_{jk}}{a_{jj}}. \tag{8}$$

Подстановка соотношения (8) в (7) дает $e_i = \sum_{j \in P_i^F} \sum_{k \in P_j} w_{ij}^F w_{jk} e_k = \sum_{k \in P_i} w_{ik} e_k$, где $P_i = P_i^F \cup P_j$.

4.4. Стандартная интерполяция. Для улучшения процедуры прямой интерполяции предполагается, что имеется такое C/F -разбиение, при котором для каждой переменной $i \in F$ множество интерполяционных переменных $P_i \subseteq N_i \cap C$ является данным. Вместо непосредственного приближения неинтерполяционной части уравнения для переменной i в соотношении (4), производится исключение погрешностей решения e_j для всех переменных $j \notin P_i$, имеющих сильные связи с переменной i в уравнении j . Стандартная интерполяция (standard interpolation) приводит к расширению множества интерполяционных переменных (уменьшение разреженности оператора Галеркина), но оказывается достаточно эффективной на практике.

В процедуре интерполяции для каждой переменной $i \in F$ учитываются все сильные F -связи. В уравнении для переменной i производится исключение погрешности e_j ($j \in F_i^s$) при помощи уравнения j . Для каждой переменной $j \in F_i^s$ производится замена $e_j \rightarrow -\sum_{k \in n_j} \frac{a_{jk}}{a_{jj}} e_k$. Новое уравнение для погрешности e_i имеет вид

$$\hat{a}_{ii}e_i + \sum_{j \in \hat{N}_i} \hat{a}_{ij}e_j = 0, \tag{9}$$

где $\widehat{N}_i = \{j \neq i : \widehat{a}_{ij} \neq 0\}$. Определяя множество P_i как объединение множеств C_i^s и C_j^s для всех переменных $j \in F_i^s$, соотношение (9) дает формулу прямой интерполяции (6), в которой коэффициенты a заменяются на \widehat{a} , а множество N_i заменяется на множество \widehat{N}_i .

4.5. Интерполяция amg1r5. Процедура интерполяции (amg1r5 interpolation), предложенная в работе [6], представляет собой компромисс между прямой и стандартной интерполяцией. Делается попытка уменьшить погрешности решения e_j ($j \in F_i^s$) в соотношении (4) для всех переменных $j \notin P_i$, имеющих сильные связи, некоторыми средними значениями, построенными на основе переменных из множества C_i^s .

Основная идея состоит в том, чтобы улучшить качество прямой интерполяции без добавления новых переменных к множеству интерполяционных переменных P_i . При невозможности такой интерполяции к имеющемуся C/F -разбиению добавляются новые C -переменные, основываясь на некоторых дополнительных критериях, что приводит к расширению множества C_i^s . В некоторых случаях этот подход дает нерегулярное C/F -разбиение, которое увеличивает сложность оператора Галеркина.

5. Сглаживание. Применение сглаживающей процедуры общего вида дает

$$e_{n+1} = S e_n, \quad \text{или} \quad u_{n+1} = S u_n + (I - S) A^{-1} f, \quad (10)$$

где $e_n = u_n - u$ представляет собой ошибку. В качестве сглаживающего оператора выбирается матрица $S = I - Q^{-1}A$, где Q — нижняя треугольная часть матрицы A . Итерационная схема, используемая в качестве сглаживающей процедуры, представляется в виде

$$u_{n+1} = u_n + Q^{-1}(f - A u_n). \quad (11)$$

В качестве сглаживающей процедуры наиболее широкое применение находит метод Гаусса–Зейделя.

6. Особенности реализации. Программная реализация многосеточного метода требует формирования векторных и матричных структур данных, включая структуры данных для хранения разреженных матриц, а также реализации основных операций линейной алгебры с разреженными матрицами. Для хранения разреженных матриц применяются форматы CRS (Compressed Row Storage) и формат ELLPACK [14].

На шаге инициализации производится построение сеточных уровней и определение операторов переноса. Формирование сеточных уровней основывается на свойстве сильной зависимости между переменными. Для построения C/F -разбиения формируются несколько множеств $N_i = \{j \in \Omega^h : j \neq i, a_{ij} \neq 0\}$; $S_i = \left\{j \in N_i : -a_{ij} \geq \theta \max_{a_{ik} < 0} |a_{ik}|, 0 < \theta < 1\right\}$; $S_i^T = \{j \in \Omega^h : i \in S_j\}$. Множество N_i представляет собой множество переменных, соседних с переменной $i \in \Omega^h$ на подробной сетке, где $\Omega^h = \{1, 2, \dots, n\}$. Множество S_i содержит переменные, имеющие сильное влияние на переменную i , а множество S_i^T — переменные, которые сильно зависят от переменной i .

Переменная i сильно зависит от переменной j (переменная i сильно связана с переменной j), если коэффициент $a_{ij} \neq 0$ сравним с наибольшим внедиагональным коэффициентом в строке i с тем же самым знаком $a_{ij} \leq \theta^- \min_{k \neq i} a_{ik}$, $a_{ij} \geq \theta^+ \max_{k \neq i} a_{ik}$. Приведенные соотношения соответствуют сильным отрицательным и положительным связям переменных i и j . Параметр θ контролирует число сильных связей между переменными каждого знака.

Соотношения сильной зависимости определяют направленный подграф S сопряженного графа, соответствующего матрице A [18]. Хотя исходная матрица A и сопряженный граф являются симметричными, подграф S свойством симметричности не обладает (из сильной зависимости переменной i от переменной j не следует сильная зависимость переменной j от переменной i). Для хранения подграфа S используется список смежных вершин графа. Список смежных вершин S_i строится для каждой переменной i , смежной с переменной j . После построения подграфа S строится транспонированный граф S^T при помощи обращения всех граней графа S . Граф S^T отражает соотношения сильной зависимости между переменными (если переменная i сильно зависит от переменной j , то переменная j оказывает сильное влияние на переменную i). В подмножество C помещаются переменные, наиболее подходящие для интерполяции. Качество интерполяции переменной i определяется числом переменных, на которые переменная i оказывает сильное влияние, и равняется $|S_i^T|$ (число элементов множества). После добавления переменной i в подмножество C все другие переменные, на которые переменная i оказывает сильное влияние, добавляются в подмножество F .

Переменная i грубой сетки ($i \in C$) переносится на подробную сетку, а соответствующая строка оператора интерполяции представляет собой единичный вектор. Переменная i , которая существует только на подробной

сетке ($i \in F$), интерполируется на множестве переменных $P_i = S_i \cap C$. Интерполяционная формула имеет вид

$$e_i = \sum_{j \in P_i} p_{ij} e_j, \text{ где } p_{ij} = \begin{cases} -\alpha_i a_{ij} / a_{ii}, & \text{если } a_{ij} < 0, \\ -\beta_i a_{ij} / a_{ii}, & \text{если } a_{ij} > 0. \end{cases}$$

Коэффициенты α_i и β_i находятся из соотношений
$$\alpha_i = \frac{\sum_{j \neq i, a_{ij} < 0} a_{ij}}{\sum_{j \in P_i, a_{ij} < 0} a_{ij}}, \quad \beta_i = \frac{\sum_{j \neq i, a_{ij} > 0} a_{ij}}{\sum_{j \in P_i, a_{ij} > 0} a_{ij}}.$$

Производится расчет тройного матричного произведения $P^T A P$ (на практике вычисление произведения Галеркина занимает до 90% общего времени счета).

Многосеточный цикл повторяется до тех пор, пока невязка не становится меньше заданного уровня или число итераций не превосходит их максимального числа.

Влияние различных параметров классических методов на время счета обсуждается в работе [19].

7. Решение модельных уравнений. Возможности алгебраического многосеточного метода демонстрируются на примере решения системы разностных уравнений, порожденной дискретизацией модельных уравнений математической физики.

7.1. Изотропное уравнение Пуассона. Рассмотрим в области $\Omega = [0, 1]^2$ решение уравнения Пуассона с граничными условиями Дирихле

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y), \quad u(x, y) = 0 \quad \text{при } x, y \in \partial\Omega,$$

где $f(x, y) = -8\pi^2 \sin(2\pi x) \sin(2\pi y)$. Точное решение: $u_*(x, y) = \sin(2\pi x) \sin(2\pi y)$.

Для дискретизации производных применяется пяти- и девятиточечный шаблоны с постоянным шагом h , что дает следующие дискретные операторы:

$$L^h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}_h, \quad L^h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 1/6 & 2/3 & 1/6 \\ 2/3 & -10/3 & 2/3 \\ 1/6 & 2/3 & 1/6 \end{pmatrix}_h.$$

После разбиения узлов сетки на C - и F -подмножества производится построение оператора интерполяции.

Весовые множители во внутренних узлах сетки находятся из $w_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{ii}} \frac{\sum_{k \in N_i} a_{ik}}{\sum_{k \in C_i^s} a_{ik}} = \frac{a_{ij}}{a_{ii}}$ ($j \in C_i^s$). Оператор

интерполяции имеет вид $I_H^h = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$. Для интерполяции используется 4 узла сетки.

После вычисления произведения Галеркина проводится дальнейшее огрубление сетки. Примеры разбиения узлов на подмножества C и F при дискретизации уравнения Пуассона на сетке 32^2 показывает рис. 2 (используется пятиточечный шаблон). Темные кружки соответствуют узлам из подмножества C , а точки — узлам из подмножества F . Уровень 1 соответствует разбиению узлов на узлы двух цветов, которое используется в геометрическом многосеточном методе (рис. 2а), а уровень 2 — дискретизации уравнения Пуассона на пятиточечном шаблоне (рис. 2б). В геометрическом многосеточном методе уровень 2 соответствует огрублению сетки под углом 45 градусов.

Недостаток пятиточечного шаблона состоит в том, что при огрублении сетки число неизвестных уменьшается наполовину, в то время как при использовании геометрического многосеточного метода число неизвестных уменьшается в 4 раза. При этом число ненулевых элементов матрицы умножается на коэффициент 0.9 (на коэффициент 0.25 в геометрическом многосеточном методе).

Примеры разбиения узлов на подмножества C и F при дискретизации уравнения Пуассона на сетке 32^2 показывает рис. 3 (используется девятиточечный шаблон). Темные кружки соответствуют узлам из подмножества

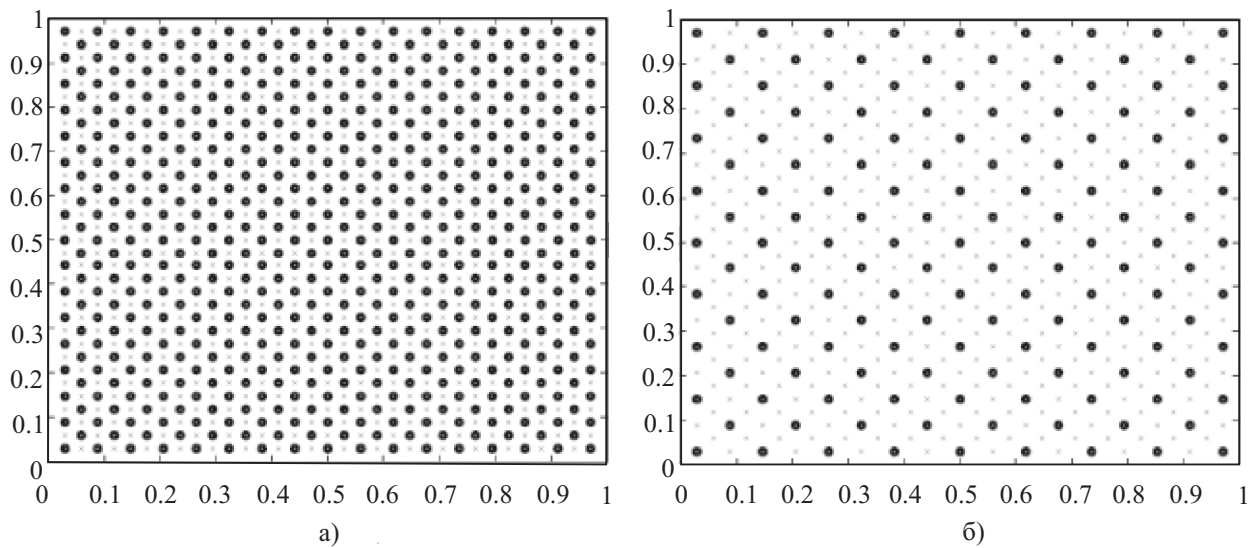


Рис. 2. Разбиение узлов на C - и F -подмножества на уровнях 1 (а) и 2 (б) при дискретизации уравнения Пуассона на пятиточечном шаблоне

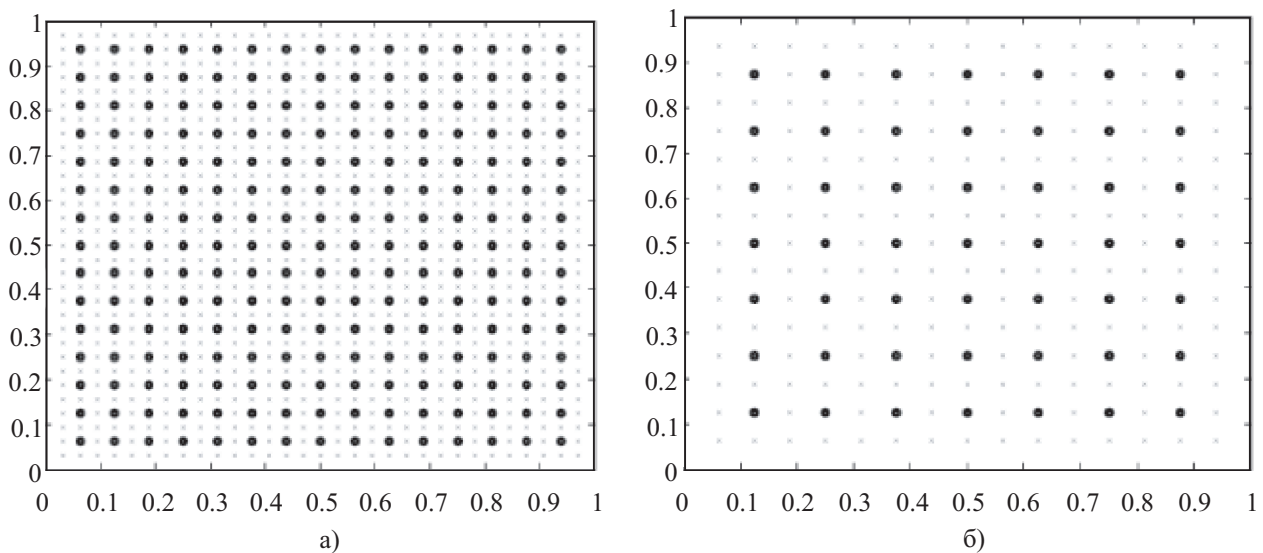


Рис. 3. Разбиение узлов на C - и F -подмножества на уровнях 1 (а) и 2 (б) при дискретизации уравнения Пуассона на девятиточечном шаблоне

жества C , а точки — узлам из подмножества F . На обоих уровнях получается такое же разбиение, как и в геометрическом многосеточном методе.

Сравнение числа неизвестных и числа ненулевых элементов матриц приводится в табл. 1 для сетки 256^2 . Число сеточных уровней составляет 7 при использовании пятиточечного шаблона и 6 — при использовании девятиточечного шаблона.

При использовании пятиточечного шаблона число неизвестных уменьшается в 2 раза при переходе к уровню 2, а число ненулевых элементов матрицы на уровне 2 составляет 90% от числа ненулевых элементов на уровне 1. Дальнейшее огрубление сетки приводит к уменьшению числа неизвестных в 4 раза. Применение девятиточечного шаблона так же приводит к уменьшению числа неизвестных в 4 раза. Оценка вычислительной работы, приходящейся на один многосеточный цикл, получается путем умножения числа ненулевых

Таблица 1
Сложность сеточных уровней при дискретизации уравнения Пуассона на различных шаблонах

| Уровень | Пятиточечный шаблон | | Девятиточечный шаблон | |
|---------|---------------------|---------|-----------------------|---------|
| | 1 | 65 536 | 326 656 | 65 536 |
| 2 | 32 768 | 292 866 | 16 384 | 380 870 |
| 3 | 8192 | 184 082 | 4096 | 126 366 |
| 4 | 2239 | 77 455 | 672 | 18 536 |
| 5 | 824 | 12 888 | 103 | 2536 |
| 6 | 67 | 1473 | 15 | 185 |
| 7 | 14 | 156 | — | — |

Таблица 2
Фактор сходимости для различных сглаживателей на равномерной сетке

| Сетка | Сглаживатель | ω | $\bar{\rho}$ | ρ |
|--------|----------------------|----------|--------------|--------|
| 21^2 | Метод Якоби | 0.8 | 0.194 | 0.236 |
| | Метод Гаусса–Зейделя | 1.0 | 0.073 | 0.096 |
| 41^2 | Метод Якоби | 0.8 | 0.197 | 0.210 |
| | Метод Гаусса–Зейделя | 1.0 | 0.075 | 0.105 |
| 81^2 | Метод Якоби | 0.8 | 0.206 | 0.211 |
| | Метод Гаусса–Зейделя | 1.0 | 0.071 | 0.100 |

элементов матрицы на каждом сеточном уровне на число релаксационных итераций на том же уровне и суммирования по всем сеточным уровням. При использовании цикла V(1,1) получим 9×10^4 для пятиточечного шаблона и 1.12×10^5 для девятиточечного шаблона, поэтому решение уравнения Пуассона на пятиточечном шаблоне оказывается более быстрым.

Сравнивается скорость сходимости при использовании сеток различной разрешающей способности и различных сглаживающих процедур (метод Якоби и метод Гаусса–Зейделя). Для расчетов используется цикл V(2,1). Расчеты останавливаются, когда $\|r\| < 10^{-16}$. Средний фактор сходимости многосеточного цикла $\bar{\rho}$ находится из соотношения $\bar{\rho}^n = \|r^n\|/\|r^0\|$, где n — число многосеточных циклов. Фактор асимптотической сходимости ρ определяется как средний фактор сходимости по последним пяти многосеточным циклам. Результаты расчетов приводятся в табл. 2, демонстрируя независимость скорости сходимости от шага разностной сетки и согласуясь с теоретической скоростью сходимости метода Гаусса–Зейделя ($\bar{\rho} \leq 0.1$), имеющей место при дискретизации уравнения Пуассона на равномерной сетке. Под ω понимается релаксационный параметр.

Таблица 3
Фактор сходимости для различных сглаживателей на неравномерной сетке

| δ | Сглаживатель | ω | ρ (вариант 1) | ρ (вариант 2) |
|----------|----------------------|----------|--------------------|--------------------|
| 1 | Метод Якоби | 0.8 | 0.211 | 0.211 |
| | Метод Гаусса–Зейделя | 1.0 | 0.100 | 0.100/0.054 |
| 2 | Метод Якоби | 0.8 | 0.352 | 0.315 |
| | Метод Гаусса–Зейделя | 1.0 | 0.105 | 0.100/0.067 |
| 4 | Метод Якоби | 0.8 | 0.647 | 0.642 |
| | Метод Гаусса–Зейделя | 1.0 | 0.345 | 0.339/0.072 |
| 100 | Метод Якоби | 0.8 | 0.979 | 0.672 |
| | Метод Гаусса–Зейделя | 1.0 | 0.949 | 0.408/0.059 |

Таблица 4
Зависимость фактора сходимости от параметра ε в неизотропном случае

| ε | ρ |
|---------------|--------|
| 0.001 | 0.082 |
| 0.01 | 0.094 |
| 0.1 | 0.063 |
| 1 | 0.054 |
| 10 | 0.079 |
| 100 | 0.095 |
| 1000 | 0.083 |

Результаты расчетов, соответствующие решению уравнения Пуассона на неравномерной сетке, приводятся в табл. 3 для случаев полного огрубления сетки (вариант 1) и огрубления сетки в одном из координатных направлений (вариант 2). Для варианта 2 в числителе дается фактор сходимости для точечного метода Гаусса–Зейделя, а в знаменателе — для метода Гаусса–Зейделя с релаксацией по линиям. Узлы сетки в направлении оси x располагаются с шагом h_x . Шаг сетки в направлении оси y изменяется по закону геометрической прогрессии $h_y = h_x/\delta$ с фактором 1.1, где δ — начальное отношение шагов сетки, до тех пор, пока $h_y \approx h_x$, а затем шаг сетки в направлении оси y полагается постоянным. В расчетах число узлов сетки в направлении

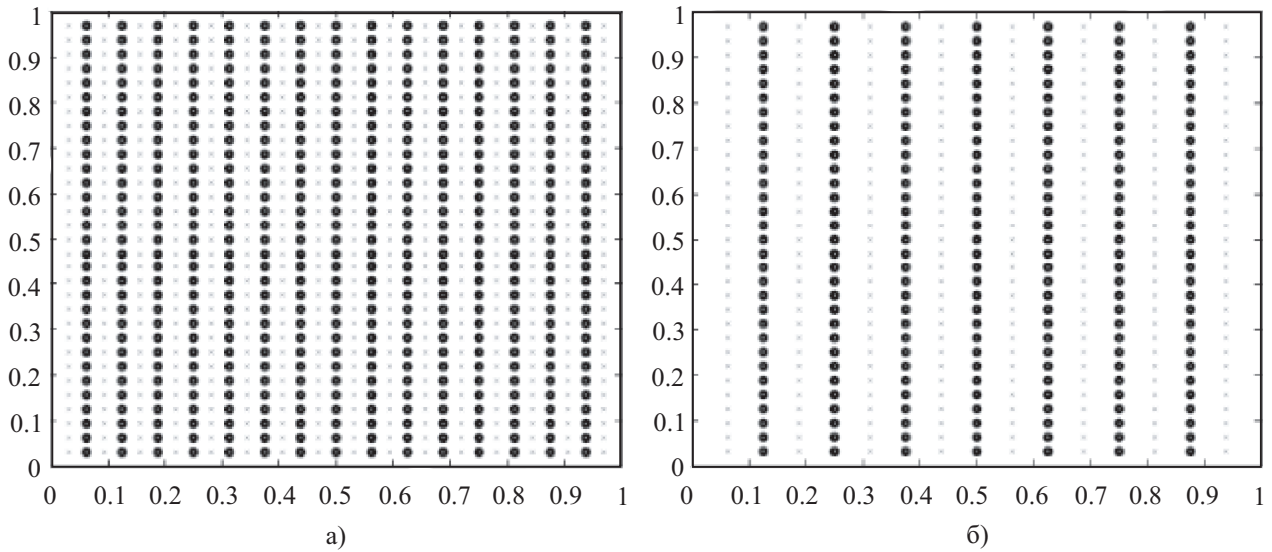


Рис. 4. Разбиение узлов на C - и F -подмножества на уровнях 1 (а) и 2 (б) при дискретизации неизотропного уравнения Пуассона на пятиточечном шаблоне

оси x полагается равным 81, а факторы сходимости, полученные при использовании различных итерационных методов, сравниваются при $\delta = 1, 2, 4$ и 100. При увеличении параметра δ , характеризующего степень растянутости ячеек сетки, сходимость многосеточной процедуры ухудшается. Использование огрубления сетки в одном координатном направлении приводит к некоторому улучшению сходимости. Применение метода Гаусса–Зейделя с релаксацией по линиям позволяет достичь сеточно-независимой скорости сходимости.

7.2. Неизотропное уравнение Пуассона. Рассмотрим решение уравнения Пуассона в неизотропном случае в области $\Omega = [0, 1]^2$ с граничными условиями Дирихле: $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left[\varepsilon(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right] = f(x, y), u(x, y) = 0$ при $x, y \in \partial\Omega$. Параметр ε задается в виде $\varepsilon(x, y) = \exp[3 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y)]$.

Правая часть уравнения Пуассона: $f(x, y) = -4\pi^2 u(x, y) \left\{ 1 + \varepsilon(x, y) [1 + 3 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \ln 10] \right\}$.

Точное решение задачи записывается в виде $u_*(x, y) = \sin(2\pi x) \sin(2\pi y)$.

На пятиточечном шаблоне разностный оператор имеет вид $L^h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon^- & 0 \\ 1 & -2 - \varepsilon^- - \varepsilon^+ & 1 \\ 0 & \varepsilon^+ & 0 \end{pmatrix}$, где $\varepsilon^- =$

$\varepsilon(x, y - h/2)$ и $\varepsilon^+ = \varepsilon(x, y + h/2)$.

Примеры разбиения узлов на подмножества C и F при дискретизации уравнения Пуассона на сетке 32^2 показывает рис. 4 (при $\varepsilon = 10$). Темные кружки соответствуют узлам из подмножества C , а точки — узлам из подмножества F . Уровень 2 соответствует огрублению сетки в одном координатном направлении, что позволяет уменьшить степень неизотропности разностного оператора.

Зависимость фактора сходимости многосеточной процедуры от параметра ε показывает табл. 4. Для дискретизации уравнения Пуассона используется пятиточечный шаблон и сетка 64^2 с равномерным шагом.

Разбиение множества узлов сетки на C - и F -подмножества при параметре ε , зависящем от пространственных координат, показывает рис. 5. Дискретизация уравнения Пуассона проводится на пятиточечном шаблоне на сетке 64^2 . Темные кружки соответствуют узлам из подмножества C , а точки — узлам из подмножества F . Имеются области с плотным и с разреженным расположением C - и F -переменных.

При $\varepsilon \gg 1$ (в углах и в центре расчетной области) и при $\varepsilon \ll 1$ наиболее сильные связи между переменными имеют место в направлении осей y и x , поэтому в этих областях огрубление сетки производится только в одном координатном направлении (вдоль оси y или вдоль оси x).

Информация о сходимости многосеточного метода, сеточной и операторной сложности, а также времени, необходимого на выполнение шагов инициализации (шаг 1) и решения (шаг 2) на сетках различной раз-

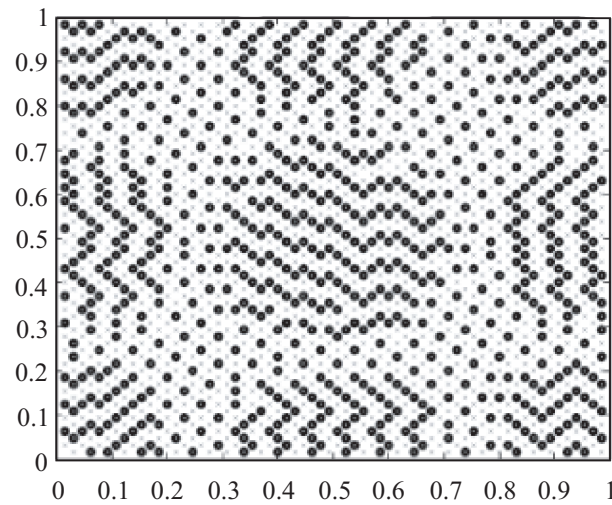


Рис. 5. Разбиение узлов на C - и F -подмножества при дискретизации неізотропного уравнения Пуассона на пятиточечном шаблоне и при параметре ϵ , зависящем от пространственных координат

решающей способности, показывает табл. 5. При этом полагается, что $\theta = 0.4$. В качестве сглаживающей процедуры используется метод Гаусса–Зейделя. Итерации продолжаются до тех пор, пока невязка не станет меньше 10^{-9} . Время инициализации и время решения приводятся по отношению к шагу инициализации на сетке 64^2 .

Таблица 5

Сходимость многосеточного метода в неізотропном случае

| Сетка | Число итераций | Фактор сходимости | Число уровней | Сеточная сложность | Операторная сложность | Шаг 1 | Шаг 2 |
|---------|----------------|-------------------|---------------|--------------------|-----------------------|-------|-------|
| 32^2 | 9 | 0.19 | 5 | 1.6 | 1.7 | — | — |
| 64^2 | 10 | 0.23 | 6 | 1.6 | 1.6 | 1 | 2 |
| 128^2 | 9 | 0.23 | 8 | 1.6 | 1.7 | 5 | 7 |
| 256^2 | 9 | 0.23 | 9 | 1.6 | 1.7 | 25 | 32 |

7.3. Уравнение конвективно-диффузионного переноса. Рассмотрим решение уравнения конвективно-диффузионного переноса в области $\Omega = [0, 1]^2$:

$$-\epsilon \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial au}{\partial x} + \frac{\partial bu}{\partial y} = f(x, y), \quad x, y \in \Omega.$$

Используются зависимости коэффициентов от пространственных координат: $a(x, y) = -\sin(\pi x) \cos(\pi y)$, $b(x, y) = \sin(\pi y) \cos(\pi x)$. Правая часть полагается равной нулю, а коэффициенту ϵ присваивается значение $\epsilon = 10^{-5}$. Граничные условия Дирихле задаются на входной границе расчетной области, а граничные условия Неймана — на выходной границе. Для дискретизации конвективных слагаемых используется противоточная схема 1-го порядка. Предполагая, что $b > 0$, представление разностного оператора зависит от знака коэффициента a . Разностный оператор имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 &\text{— при } a > 0 \quad L^h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon & 0 \\ -\epsilon - ah & 4\epsilon + ah + bh & -\epsilon \\ 0 & -\epsilon - bh & 0 \end{pmatrix}; \\
 &\text{— при } a < 0 \quad L^h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon & 0 \\ -\epsilon & 4\epsilon - ah + bh & -\epsilon + ah \\ 0 & -\epsilon - bh & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

При доминирующем влиянии конвективного переноса вдоль оси x внутренние узлы сетки имеют сильные связи с узлами, расположенными вверх по потоку. Узлы сетки, расположенные на входной границе расчетной области, оказывают сильное влияние на все соседние узлы, а узлы сетки, расположенные на выходной

границе, не оказывают влияния на какие-либо узлы. Оператор интерполяции имеет вид $I_H^h = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$. В

случае преобладающего влияния диффузионного переноса каждый внутренний узел сетки имеет сильные связи с 4 соседними узлами, что соответствует дискретизации уравнения Пуассона на пятиточечном шаблоне. Разбиение узлов на подмножества C и F имеет такой же вид, что и для уравнения Пуассона, а оператор

интерполяции имеет вид $I_H^h = \frac{1}{ah + bh + 4\varepsilon} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon & 0 \\ ah + \varepsilon & ah + bh + 4\varepsilon & \varepsilon \\ 0 & bh + \varepsilon & 0 \end{pmatrix}$.

При наличии доминирующего конвективного переноса вдоль координатных осей x и y все узлы сетки имеют сильные связи с узлами, расположенными вниз по потоку. Разностный оператор имеет вид

$$L^h = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a_* & 1 & 0 \\ 0 & b_* & 0 \end{pmatrix}, \quad a_* = \frac{ah + \varepsilon}{(a+b)h + 2\varepsilon}, \quad b_* = \frac{bh + \varepsilon}{(a+b)h + 2\varepsilon}.$$

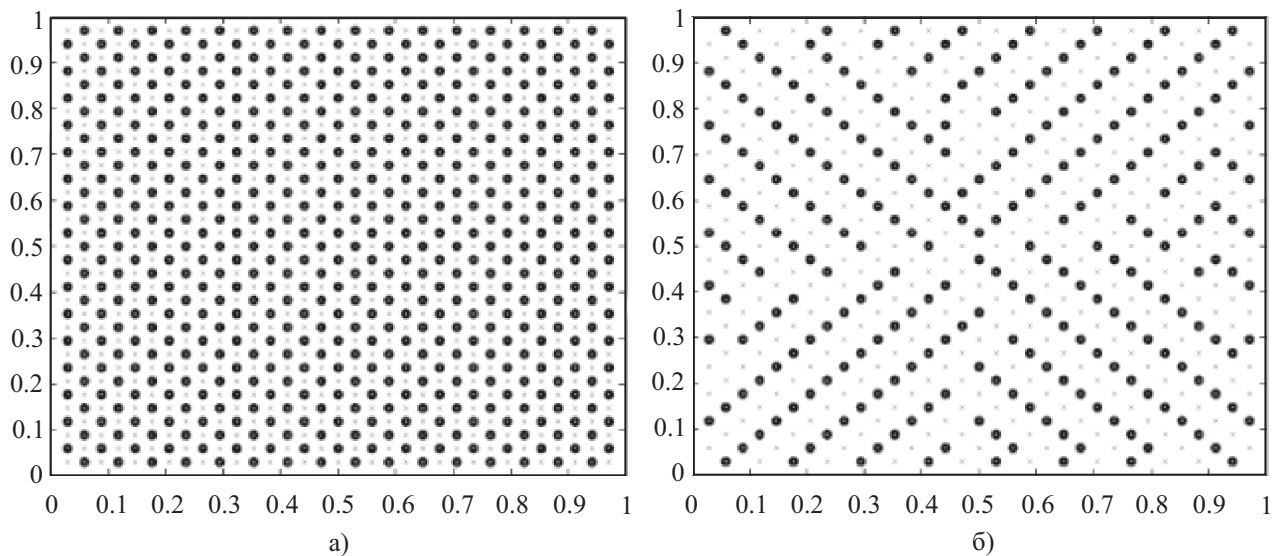


Рис. 6. Разбиение узлов на C - и F -подмножества на уровнях 1 (а) и 2 (б) при дискретизации уравнения конвективно-диффузионного переноса

Примеры разбиения узлов на подмножества C и F при дискретизации уравнения конвективно-диффузионного переноса на сетке 32^2 показывает рис. 6. Темные кружки соответствуют узлам из подмножества C , а точки — узлам из подмножества F . Уровень 1 соответствует разбиению узлов на подмножества, которые используются в геометрическом многосеточном методе (рис. 6а). На уровне 2 огрубление сетки производится в направлении потока — по диагонали (рис. 6б).

Информация о числе неизвестных и числе ненулевых элементов матрицы приводится в табл. 6 для сетки 256^2 .

Результаты расчетов приводятся в табл. 7. Для реализации многосеточной процедуры используется цикл $V(1,1)$ и метод Гаусса–Зейделя с релаксацией по линиям в качестве сглаживающей процедуры (при $\omega = 0.95$). Общее число сеточных уровней равняется 7.

Таблица 6
Число неизвестных и число ненулевых элементов матрицы при решении уравнения конвективно-диффузионного переноса

| Уровень | Число неизвестных | Число ненулевых элементов |
|---------|-------------------|---------------------------|
| 1 | 65 536 | 326 656 |
| 2 | 32 207 | 264 351 |
| 3 | 15 568 | 186 168 |
| 4 | 7245 | 135 811 |
| 5 | 3179 | 92 351 |
| 6 | 1322 | 56 490 |
| 7 | 498 | 26 750 |
| 8 | 163 | 8327 |
| 9 | 44 | 1260 |
| 10 | 8 | 62 |

Таблица 7
Сравнение сходимости на различных сетках

| Сетка | Средний фактор сходимости | Фактор сходимости |
|--------|---------------------------|-------------------|
| 3849 | 0.31 | 0.29 |
| 15 763 | 0.47 | 0.50 |
| 60 399 | 0.67 | 0.69 |

Таблица 8
Сравнение сходимости при различных параметрах ε

| ε | Операторная сложность | Число циклов |
|---------------|-----------------------|--------------|
| 1 | 1.3 | 10 |
| 10^{-2} | 1.4 | 12 |
| 10^{-4} | 1.8 | 16 |
| 10^{-6} | 1.6 | 14 |

Информация о сходимости приводится в табл. 8. Сетка содержит 3.6×10^5 узлов ($h = 1/600$). Увеличение относительного вклада диффузионного переноса (уменьшение параметра ε) приводит к более быстрой сходимости.

Ускорение сходимости при решении уравнения конвективно-диффузионного переноса при преобладающем влиянии конвекции требует использования неявной релаксационной процедуры по линиям, соответствующим наиболее сильным связям между переменными [20].

7.4. Неизотропное уравнение Пуассона в случае вращательной симметрии. Неизотропность задачи обуславливается либо особенностью построения сетки (различие шагов сетки в разных координатных направлениях), либо представлением дифференциального оператора. Случай неизотропной сетки сравнительно просто преодолевается в рамках геометрического многосеточного метода за счет применения направленного огрубления сетки [4]. Неизотропность дифференциального оператора представляет собой более сложный случай [8].

Рассмотрим решение следующего уравнения в области $\Omega = [0, 1]^2$ с граничными условиями Дирихле:

$$-(\varepsilon c^2 + s^2) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2(\varepsilon - 1)cs \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} - (\varepsilon s^2 + c^2) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y), \quad u(x, y) = 0 \quad \text{при } x, y \in \partial\Omega,$$

где $0 < \varepsilon < 1$, $c = \cos \varphi$, $s = \sin \varphi$. Уравнение получается из неизотропного уравнения Пуассона путем вращения координатных осей на угол φ . При $\varphi = 0$ и $\varepsilon = h_y^2/h_x^2$ (при этом $\varepsilon = 1$ на сетке с одинаковыми шагами в обоих координатных направлениях) уравнение сводится к уравнению Пуассона. Смешанная производная исчезает при $\varphi = k\pi/2$ ($k = 1, 2, \dots$). Возникновение смешанной производной обуславливается неортогональностью системы координат

В данном случае направление наиболее сильных связей между переменными не является выровненным вдоль координатных линий сетки и зависит от угла φ . Геометрический многосеточный метод во многих случаях приводит к расходимости итерационного процесса при $0^\circ < \varphi < 90^\circ$ [15, 16]. Постановка граничных условий типа Неймана или периодических граничных условий приводит к замедлению сходимости и усилению ее зависимости от параметра ε [3, 17]. Например, при $\varepsilon = 10^{-8}$ и $\varphi = 45^\circ$ фактор сходимости составляет $\rho = 0.884$ (расчеты на сетке 128^2 при использовании V-цикла и метода Якоби в качестве сглаживающей процедуры).

На симметричном шаблоне разностный оператор имеет вид

$$L^h = \frac{\varepsilon c^2 + s^2}{h_x^2} \begin{pmatrix} -1 & 2 & -1 \end{pmatrix} + \frac{(\varepsilon - 1)cs}{h_x h_y} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\varepsilon s^2 + c^2}{h_y^2} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Для дискретизации вторых производных по координатным направлениям x и y используется пятиточечный шаблон, и разностный оператор имеет такой же вид, как и в случае уравнения Пуассона. Дискретный оператор для смешанной производной представляется в виде $L^h = \frac{1}{4h^2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Такое представление игнорирует направление наиболее сильных связей между переменными. Представление дискретного оператора, учитывающего направление, в котором связи между переменными являются наиболее сильными (при $\varphi = 45^\circ$ наиболее сильные связи имеют место в направлении с юго-запада на северо-восток), имеет вид $L^h = \frac{1}{2h^2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & 2 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$.

В расчетах полагается, что $\varepsilon = 0.001$ и $\varphi = \pi/4$, поэтому наиболее сильные связи между переменными имеются в диагональном направлении. Дискретный оператор: $L^h = \begin{pmatrix} 0 & -0.001 & -0.4995 \\ -0.001 & 1.003 & -0.001 \\ -0.4995 & -0.001 & 0 \end{pmatrix}$.

В более сложной ситуации $\varphi = \pi/4$ при $x < 1/2$ и $\varphi = -\pi/4$ при $x > 1/2$. Дискретный оператор:

$$\begin{aligned} \text{— при } x \leq 1/2 \quad L^h &= \begin{pmatrix} (\varepsilon - 1)/2 & -\varepsilon & 0 \\ -\varepsilon & 3\varepsilon + 1 & -\varepsilon \\ 0 & -\varepsilon & (\varepsilon - 1)/2 \end{pmatrix}; \\ \text{— при } x > 1/2 \quad L^h &= \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon & (\varepsilon - 1)/2 \\ -\varepsilon & 3\varepsilon + 1 & -\varepsilon \\ (\varepsilon - 1)/2 & -\varepsilon & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Изменение угла φ от 0 до 45 градусов приводит к замедлению скорости сходимости и увеличению фактора сходимости, что обуславливается увеличением отклонения направления наиболее сильных связей между переменными от координатных линий сетки. При всех углах φ фактор сходимости находится в интервале от 0.3 до 0.5. Операторная сложность составляет приблизительно 2.4 при $\varphi = 45^\circ$ и возрастает до 3.3 при $\varphi = 60^\circ$.

8. Заключение. Рассмотрены особенности реализации и применения алгебраических многосеточных методов для решения систем разностных уравнений, порожденных дискретизацией дифференциальных уравнений в частных производных. В вычислительной процедуре реализованы различные подходы к построению C/F-разбиения (метод стандартного огрубления, RS-метод), методы интерполяции (непрямая интерполяция, стандартная интерполяция, интерполяция `amg1r5`) и сглаживания (классические итерационные схемы). Приведены результаты численного решения ряда модельных уравнений математической физики на сетках различной разрешающей способности при использовании различных компонентов вычислительной процедуры. Алгебраический метод оказывается чувствительным к изменению сетки и ее разрешению на самом грубом уровне. Выбор параметров в алгебраическом многосеточном методе позволяет сократить общее время счета на 15–25%.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 13–07–12079.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Brandt A. Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems // Math. Comput. 1977. **31**, N 138. 333–390.

2. *Brandt A.* Guide to multigrid development // *Lecture Notes in Mathematics*. Vol. 960. Heidelberg: Springer, 1982. 220–312.
3. *Wesseling P.* An introduction to multigrid methods. Chichester: Wiley, 1992.
4. *Волков К.Н.* Многосеточные технологии для решения задач газовой динамики на неструктурированных сетках // *Журн. вычислит. матем. и матем. физики*. 2010. **50**, № 11. 1938–1952.
5. *Cleary A.J., Falgout R.D., Henson V.E., Jones J.E., Manteuffel T.A., McCormick S.F., Miranda G.N., Ruge J.W.* Robustness and scalability of algebraic multigrid (AMG), // *SIAM J. on Scientific and Statistical Computing*. 2000. **21**, N 5. 1886–1908.
6. *Ruge J., Stüben K.* Algebraic multigrid (AMG) // *Multigrid Methods*. *Frontiers in Applied Mathematics*. Vol. 3. Philadelphia: SIAM, 1987. 73–130.
7. *Stüben K.* A review of algebraic multigrid // *J. of Computational and Applied Mathematics*. 2001. **128**, N 1/2. 281–309.
8. *Stüben K.* An introduction to algebraic multigrid // *Multigrid*. London: Academic Press, 2001. 413–532.
9. *Vaněk P., Mandel J., Brezina M.* Algebraic multigrid by smoothed aggregation for second and fourth order elliptic problems // *Computing*. 1996. **56**, N 3. 179–196.
10. *Emans M.* Performance of parallel AMG-preconditioners in CFD-codes for weakly compressible flows // *Parallel Computing*. 2010. **36**, N 5/6. 326–338.
11. *Notay Y.* An aggregation-based algebraic multigrid method // *Electronic Transactions on Numerical Analysis*. 2010. **37**. 123–146.
12. *Yang U.M.* Parallel algebraic multigrid methods — high performance preconditioners // *Numerical Solution of Partial Differential Equations on Parallel Computers*. Vol. 51. Heidelberg: Springer, 2006. 209–236.
13. *Henson V.E., Yang U.M.* BoomerAMG: a parallel algebraic multigrid solver and preconditioner // *Applied Numerical Mathematics*. 2002. **41**, N 1. 155–177.
14. *Saad Y.* Iterative methods for sparse linear systems. Philadelphia: SIAM, 2003.
15. *Griebel M., Metsch B., Oeltz D., Schweitzer M.A.* Coarse grid classification: a parallel coarsening scheme for algebraic multigrid methods // *Numer. Linear Algebra Appl.* 2006. **13**, N 2/3. 193–214.
16. *Griebel M., Metsch B., Schweitzer M.A.* Coarse grid classification: AMG on parallel computers. Technical Report N 368. University of Bonn, Bonn, 2008.
17. *Oosterlee C.W.* The convergence of parallel multiblock multigrid methods // *Applied Numerical Mathematics*. 1995. **19**, N 1/2. 115–128.
18. *Livne O.E., Brandt A.* Lean algebraic multigrid (LAMG): fast graph Laplacian linear solver // *SIAM J. on Scientific Computing*. 2012. **34**, N 4. B499–B522.
19. *Suero R., Pinto M.A.V., Marchi C.H., Araki L.K., Alves A.C.* Analysis of algebraic multigrid parameters for two-dimensional steady-state heat diffusion equations // *Applied Mathematical Modelling*. 2012. **36**, N 7. 2996–3006.
20. *Reusken A.* Convergence analysis of a multigrid method for convection–diffusion equations // *Numer. Math.* 2002. **91**, N 2. 323–349.

Поступила в редакцию
23.02.2014

An Algebraic Multigrid Method in Problems of Computational Physics

K. N. Volkov¹, Yu. N. Deryugin², V. N. Emelyanov³, A. S. Kozelkov⁴, and I. V. Teterina⁵

¹ *Ustinov Baltic State Technical University, Faculty of Power Engineering; ulitsa Pervaya Krasnoarmeiskaya 1, St. Petersburg, 190005, Russia; Ph.D., Leading Scientist, e-mail: dsci@mail.ru*

² *Russian Federal Nuclear Center, All-Russian Institute of Experimental Physics; prospekt Mira 37, Sarov, 607188, Russia; Professor, Head of Department, e-mail: askozelkov@mail.ru*

³ *Ustinov Baltic State Technical University, Faculty of Power Engineering; ulitsa Pervaya Krasnoarmeiskaya 1, St. Petersburg, 190005, Russia; Professor, e-mail: vlademelyanov@gmail.com*

⁴ *Russian Federal Nuclear Center, All-Russian Institute of Experimental Physics; prospekt Mira 37, Sarov, 607188, Russia; Ph.D., Head of Laboratory, e-mail: askozelkov@mail.ru*

⁵ *Ustinov Baltic State Technical University, Faculty of Power Engineering; ulitsa Pervaya Krasnoarmeiskaya 1, St. Petersburg, 190005, Russia; Associate Professor, e-mail: yaiv@mail.ru*

Received February 23, 2014

Abstract: Implementation features and application of the algebraic multigrid methods to the solution of systems of difference equations resulting from the discretization of partial differential equations are considered. A number of approaches to the generation of C/F coarsening (standard coarsening and RS-coarsening), to the interpolation (direct interpolation, indirect interpolation, standard interpolation, and amg1r5 interpolation), and to the smoothing (iterative schemes) are discussed. Different storing formats for sparse matrices are used to calculate the Galerkin products. The results of numerical solving several model equations of mathematical physics are reported. The efficiency of the proposed approach is compared when using different components of the computational procedure.

Keywords: multigrid methods, interpolation, smoothing, computational physics.

References

1. A. Brandt, "Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary-Value Problems," *Math. Comput.* **31** (138), 333–390 (1977).
2. A. Brandt, "Guide to Multigrid Development," in *Lecture Notes in Mathematics* (Springer, Heidelberg, 1982), Vol. 960, pp. 220–312.
3. P. Wesseling, *An Introduction to Multigrid Methods* (Wiley, Chichester, 1992).
4. K. N. Volkov, "Multigrid Techniques as Applied to Gasdynamic Simulation on Unstructured Meshes," *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **50** (11), 1938–1952 (2010) [*Comput. Math. Math. Phys.* **50** (11), 1837–1850 (2010)].
5. A. J. Cleary, R. D. Falgout, V. E. Henson, et al., "Robustness and Scalability of Algebraic Multigrid," *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **21** (5), 1886–1908 (2000).
6. J. W. Ruge and K. Stüben, "Algebraic Multigrid (AMG)," in *Multigrid Methods. Frontiers in Applied Mathematics* (SIAM, Philadelphia, 1987), Vol. 3, pp. 73–130.
7. K. Stüben, "A Review of Algebraic Multigrid," *J. Comput. Appl. Math.* **128** (1/2), 281–309 (2001).
8. K. Stüben, "An Introduction to Algebraic Multigrid," in *Multigrid* (Academic, London, 2001), pp. 413–432.
9. P. Vaněk, J. Mandel, and M. Brezina, "Algebraic Multigrid by Smoothed Aggregation for Second and Fourth Order Elliptic Problems," *Computing* **56** (3), 179–196 (1996).
10. M. Emans, "Performance of Parallel AMG-Preconditioners in CFD-Codes for Weakly Compressible Flows," *Parallel Comput.* **36** (5/6), 326–338 (2010).
11. Y. Notay, "An Aggregation-Based Algebraic Multigrid Method," *Electron. Trans. Numer. Anal.* **37**, 123–146 (2010).
12. U. M. Yang, "Parallel Algebraic Multigrid Methods — High Performance Preconditioners," in *Numerical Solution of Partial Differential Equations on Parallel Computers* (Springer, Heidelberg, 2006), Vol. 51, pp. 209–236.
13. V. E. Henson and U. M. Yang, "BoomerAMG: A Parallel Algebraic Multigrid Solver and Preconditioner," *Appl. Numer. Math.* **41** (1), 155–177 (2002).
14. Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems* (SIAM, Philadelphia, 2003).
15. M. Griebel, B. Metsch, D. Oeltz, and M. A. Schweitzer, "Coarse Grid Classification: A Parallel Coarsening Scheme for Algebraic Multigrid Methods," *Numer. Linear Algebra Appl.* **13** (2/3), 193–214 (2006).
16. M. Griebel, B. Metsch, and M. A. Schweitzer, *Coarse Grid Classification: AMG on Parallel Computers*, Tech. Rep. 368 (Univ. of Bonn, Bonn, 2008).
17. C. W. Oosterlee, "The Convergence of Parallel Multiblock Multigrid Methods," *Appl. Numer. Math.* **19** (1/2), 115–128 (1995).
18. O. E. Livne and A. Brandt, "Lean Algebraic Multigrid (LAMG): Fast Graph Laplacian Linear Solver," *SIAM J. Sci. Comput.* **34** (4), B499–B522 (2012).
19. R. Suero, M. A. V. Pinto, C. H. Marchi, et al., "Analysis of Algebraic Multigrid Parameters for Two-Dimensional Steady-State Heat Diffusion Equations," *Appl. Math. Model.* **36** (7), 2996–3006 (2012).
20. A. Reusken, "Convergence Analysis of a Multigrid Method for Convection–Diffusion Equations," *Numer. Math.* **91** (2), 323–349 (2002).