РЕАЛИЗАЦИЯ КОНСЕРВАТИВНОГО ИТЕРАЦИОННОГО МЕТОДА В БИБЛИОТЕКЕ PMLP/PARSOL

Л. С. Макаров, Ю. А. Бондаренко

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Возникающие на практике задачи математической физики всегда характеризуются некоторым набором законов сохранения, иногда довольно большим их списком. Давно понято, что при конструировании разностных схем выполнение разностных аналогов соответствующих законов сохранения улучшает точность и надежность численных методов. Отсюда и возник термин «консервативные разностные схемы».

В данной работе рассматривается аналогичное понятие консервативных итерационных методов, используемых для приближенного решения систем неявных разностных уравнений. Приводятся точные условия в виде ограничений на предобусловливающий оператор, при выполнении которых предобусловленные итерационные методы крыловского типа на каждой итерации дают приближенное решение, удовлетворяющее заданному списку линейных законов сохранения (такие итерационные методы названы консервативными). Предложен способ построения консервативных итерационных методов, основанный на модификации данного предобусловливающего оператора, который используется как «черный ящик». В случае разностных схем теплопроводности общие результаты конкретизированы для одного закона сохранения тепловой энергии.

В рамках библиотеки линейных решателей PMLP/PARSOL [1] реализованы решатели типа сопряженных градиентов для задач теплопроводности, учитывающие закон сохранения тепловой энергии. Эти методы протестированы на ряде конкретных задач.

Результаты теоретического анализа

Рассматривается линейная задача $Au \equiv \equiv (A_0 + D)u = f$, для которой выполнены условия

$$\begin{gathered} A_0 = (A_0)^T \geq 0; \quad D = D^T; \quad A = A^T > 0; \\ A_0 a^{(j)} = 0, \quad j = 1,\dots,J, \\ \left\langle a^{(j)}, a^{(j)} \right\rangle = 1, \quad j = 1,\dots,J; \\ \left\langle a^{(i)}, a^{(j)} \right\rangle = 0, \quad j = 1,\dots,J, \quad i = 1,\dots,J, \quad i \neq j. \end{gathered} \tag{1}$$

Обычно D – диагональный оператор или блочно диагональный оператор с малой шириной ленты. Из предположений следует, что $Aa^{(j)} = Da^{(j)}$. Поэтому набор векторов $a^{(j)}$, $j = 1,\dots,J$ определяет набор линейных законов сохранения $\left\langle u, Da^{(j)} \right\rangle = \left\langle f, a^{(j)} \right\rangle$. Линейное пространство неизвестных H (размерности n) рассматриваем как прямую сумму подпространства вырождения H_0 и ортогонального ему подпространства H_1 (P_0, P_1 – соответствующие проекторы)

$$\begin{gathered} H = H_0 \oplus H_1; \\ H_0 = P_0 H, \quad \dim H_0 = J; \\ H_0 = span\left\{ a^{(1)},\dots,a^{(J)} \right\}; \\ H_1 = P_1 H; \\ \left\langle u_1, a^{(j)} \right\rangle = 0, \quad \forall u_1 \in H_1, \quad \forall j = 1,\dots,J; \\ \left\langle u_0, u_1 \right\rangle = 0, \quad \forall u_0 \in H_0, \quad \forall u_1 \in H_1. \end{gathered} \tag{2}$$

Экономично обратимый линейный оператор M, близкий оператору A, будем называть предобусловливателем, а обратный ему оператор M^{-1}, который и используется в реализациях итерационного метода, – предобусловливающим оператором. Предобусловленный метод сопряженных градиентов может быть записан в виде итерационного процесса

$$\begin{gathered} u^{n+1} = u^n + a_n \left(u^n - u^{n-1} \right) + \\ + b_n \left(M^{-1} A u^n - M^{-1} f \right), a_0 = 0, n = 0,\dots \end{gathered} \tag{3}$$

Теорема. *Чтобы в итерационном методе с предобусловливателем M и начальным приближением $u^0 = u_0$ все приближенные решения $\{u^1, u^2,\dots\}$ удовлетворяли законам сохранения в форме*

$$\left\langle u^n, Da^{(j)} \right\rangle = \left\langle f, a^{(j)} \right\rangle, \quad \forall n = 1,\dots, \quad \forall j = 1,\dots,J, \tag{4}$$

достаточно и в условиях общего положения *(для всех правых частей f и для ненулевых произвольных значений параметров a_n и b_n)* **необходимо**, *чтобы одновременно были выполнены следующие два условия:*

(i) *начальное приближение $u^0 = u_0$ должно удовлетворять законам сохранения в форме*

$$\left\langle u_0, Da^{(j)} \right\rangle = \left\langle f, a^{(j)} \right\rangle, \quad \forall j = 1,\dots,J, \tag{5}$$

(ii) *предобусловливающий оператор* M^{-1} *в блочном представлении* $D_{kj} = P_k D P_j$ *имеет вид*

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 1_{11} & 0 \\ -(D_{00})^{-1} D_{01} & 1_{00} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ 0 & B_{00} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1_{11} & -D_{10}(D_{00})^{-1} \\ 0 & 1_{00} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Пусть дан произвольный предобусловливающий оператор, не удовлетворяющий второму условию теоремы, и пусть он имеет блочное представление

$$(M_{\text{нач}})^{-1} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{10} \\ L_{01} & L_{00} \end{pmatrix}, \quad L_{k,j} = P_k (M_{\text{нач}})^{-1} P_j. \quad (7)$$

Тогда ясно, что модифицированный предобусловливающий оператор, обеспечивающий консервативность итерационного метода, определяется формулой

$$M_{\text{mod}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1_{11} & 0 \\ -(D_{00})^{-1} D_{01} & 1_{00} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{11} & 0 \\ 0 & B_{00} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1_{11} & -D_{10}(D_{00})^{-1} \\ 0 & 1_{00} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где симметричный положительно определенный оператор $B_{00}:H_0 \to H_0$ можно выбрать произвольным.

«Наилучший» в некотором смысле выбор оператора B_{00} основан на следующих двух требованиях: (1) чтобы модифицированный предобусловливающий оператор как можно меньше отличался от исходного предобусловливающего оператора; (2) дополнительно потребуем, чтобы в случае «идеального» предобусловливания $M = A$ модифицированный предобусловливающий оператор не отличался от идеального A^{-1}. Тогда получается следующая формула для «оптимального» оператора B_{00}, который надо вычислить один раз перед проведением итераций:

$$B_{00} = L_{00} - (D_{00})^{-1} D_{01} L_{11} D_{10} (D_{00})^{-1}. \quad (9)$$

Модификация метода сопряженных градиентов

Для задач типа теплопроводности диагональный оператор D образован суммой элементов строк матрицы $d_i = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}$, где $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$. Закон сохранения тепловой энергии принимает вид $\langle x, d \rangle = \langle f, \mathbf{1} \rangle$, где $\mathbf{1} = (1,1,\ldots,1)$ – вектор из единичных компонент. Консервативный вариант предобусловленного метода сопряженных градиентов имеет вид

$$r_0 = f - Ax_0,\ z_0 = M^{-1} r_0,\ p_0 = z_0;$$

$$\alpha^j = \frac{(r^j, z^j)}{(Ap^j, p^j)};$$

$$x^{j+1} = x^j + \alpha^j p^j;$$

$$r^{j+1} = r^j - \alpha^j A p^j;$$

$$\left[\begin{aligned} & y^{j+1} = r^{j+1} - \frac{\sum_{i=1}^{n} r_i^{j+1}}{\sum_{i=1}^{n} d_i} d; \\ & u^{j+1} = M^{-1} y^{j+1}; \\ & v^{j+1} = u^{j+1} - \mathbf{1} \cdot \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} u_i^{j+1} + \mathbf{1} \cdot \frac{1}{n} b_0 \sum_{i=1}^{n} r_i^{j+1}; \\ & z^{j+1} = v^{j+1} - \mathbf{1} \cdot \sum_{k=1}^{n} \frac{d_k - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} d_i}{\sum_{i=1}^{n} d_i} v_k^{j+1}; \end{aligned} \right] \quad (10)$$

$$\beta^j = \frac{(r^{j+1}, z^{j+1})}{(r^j, z^j)};$$

$$p^{j+1} = z^{j+1} + \beta^j p^j.$$

Консервативная модификация итерационного цикла метода заключена в квадратные скобки. Индекс j – это номер итерации. Индексы i, k – порядковые номера элементов вектора; n – размерность задачи (количество уравнений/неизвестных); b_0 – оптимизирующий параметр, он вычисляется один раз перед итерационным циклом

$$\begin{gathered} q = M^{-1}(\mathbf{1}); \quad s = \frac{n}{\sum_{i=1}^{n} d_i} d - \mathbf{1}; \quad t = M^{-1} s; \\ b_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n} q_i}{n} - \frac{\sum_{k=1}^{n} \left(d_k - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} d_i \right) t_k}{\sum_{i=1}^{n} d_i}. \end{gathered} \quad (11)$$

Необходимо также модифицировать начальное приближение

$$x_{\text{mod}}^0 = x^0 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (d_i x_i^0 - f_i)}{\sum_{i=1}^{n} (d_i)^2} d. \quad (12)$$

Тогда закон сохранения тепловой энергии

$$\left\langle x^j, d \right\rangle = \left\langle f, \mathbf{1} \right\rangle \qquad (13)$$

выполняется на каждой итерации (j = 0,1,…).

Результаты тестирования

Консервативный решатель модифицированного метода сопряженных градиентов был протестирован на ряде задач типа теплопроводности. Это задачи фильтрации на трехмерной нерегулярной сетке, взятые из задач методики НИМФА [2]. Использовался параллельный предобусловливатель «Блочный Якоби» и внутри блоков метод неполной факторизации ILU(0). Все системы решались с точностью $\| Ax - b \|_2 \le 10^{-6} \| b \|_2$. Результаты приведены в таблице, в которой используются следующие обозначения: n – полное число неизвестных, nnz – полное число ненулевых элементов в матрице, CG – метод сопряженных градиентов, CG_Cons – консервативный метод сопряженных градиентов.

Результаты тестирования консервативного и неконсервативного методов сопряженных градиентов

Название и характеристики СЛАУ	Метод решения	Количество процессоров	Число итераций	Общее время решения, с
89ths n = 89250 nnz = 2262832	CG_Cons CG	8 8	2623 3257	3,89 3,97
415ths n = 415800 nnz = 10904374	CG_Cons CG	2 2	13 12	0,93 0,8
3,6mln n = 3670720 nnz = 94478848	CG_Cons CG	16 16	224 341	7,82 12
12mln n = 12140928 nnz = 314737280	CG_Cons CG	128 128	709 754	19,79 19,08
32mln n = 32022528 nnz = 815096620	CG_Cons CG	600 600	687 3277	16,2 64,47
97mln n = 97127424 nnz = 2426402000	CG_Cons CG	1200 1200	2208 2382	81,5 80,79

Как видно, почти во всех случаях консервативная поправка помогла сократить количество итераций, а в половине случаев сократила и время решения.

Литература

1. Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г. Басалов В. Г. и др. Библиотека решателей разреженных линейных систем // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2004. Вып. 7. С. 80–95.

2. Дерюгин Ю. Н., Панов А. И., Костерин А. В. и др. Методика и пакет программ НИМФА как инструмент постоянно действующих моделей бассейна подземных вод // Сб. статей Всероссийского семинара «Наука – фундамент решения технологического развития России». Казань, 2006.