

УДК 621.039.051:532.517.4

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

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

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

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

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

### Введение

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

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

Другой подход к решению задач с несимметричными матрицами коэффициентов заключается в использовании подпространств Крылова [6]. В этих методах на каждой итерации строится подпро-

странство Крылова и векторы невязки выражаются с помощью матричных многочленов от исходной матрицы, причем эти многочлены выбираются таким образом, чтобы вектор невязки был наименьшим в определенном смысле. Здесь существуют два подхода: один заключается в минимизации нормы невязки, другой — в применении метода Галеркина (использовании ортогональности вектора невязки некоторому подпространству).

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

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

### Метод неполной факторизации для двумерных задач

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

$$A\varphi = f, \quad (1)$$

где

$$A\varphi_{i,k} = a_{i,k}^1\varphi_{i-1,k-1} + a_{i,k}^2\varphi_{i-1,k} + a_{i,k}^3\varphi_{i-1,k+1} + a_{i,k}^4\varphi_{i,k-1} + a_{i,k}^5\varphi_{i,k} + a_{i,k}^6\varphi_{i,k+1} + a_{i,k}^7\varphi_{i+1,k-1} + a_{i,k}^8\varphi_{i+1,k} + a_{i,k}^9\varphi_{i+1,k+1} = f_{i,k}; \quad (2)$$

$$a_{i,k}^l \leq 0, \quad l = \overline{1,4,6,9}; \quad a_{i,k}^5 > 0; \quad \sum_{l=1}^9 a_{i,k}^l \geq 0; \quad (3)$$

$$i = 1, 2, \dots, n_1; \quad k = 1, 2, \dots, n_2.$$

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

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

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

Матрица  $A$  соответствует следующему двумерному 9-точечному разностному шаблону:

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

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

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

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

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

$$MN\varphi = f + B\varphi. \quad (5)$$

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

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

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

$$MN = A + B. \quad (6)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$Cw = \mu^1 \mu_{i-1,k-1}^7 w_{k-2} + \mu^3 \mu_{i-1,k+1}^6 w_{i-1,k-2} + \mu^3 \mu_{i-1,k+1}^9 w_{k+2} + \mu^4 \mu_{k-1}^7 w_{i+1,k-2}. \quad (9)$$

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

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

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

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

Используя этот алгоритм, находим желаемый вид оператора  $B$ :

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

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

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

Решив эту систему, найдем рекуррентные формулы для определения  $\mu^l$ :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$Bw = \mu^1 \mu_{i-1,k-1}^7 (w_{k-2} - \theta w) + \mu^3 \mu_{i-1,k+1}^6 (w_{i-1,k+2} - \theta w) + \mu^3 \mu_{i-1,k+1}^9 (w_{k+2} - \theta w) + \mu^4 \mu_{k-1}^7 (w_{i+1,k-2} - \theta w), \quad (14)$$

где  $0 \leq \theta \leq 1$ .

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

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

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

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

### Метод неполной факторизации для трехмерных задач

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

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

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

$$a_{j,i,k}^l \leq 0, \quad l = \overline{1, 13, 15, 27}; \quad a_{j,i,k}^{14} > 0; \quad \sum_{l=1}^{27} a_{j,i,k}^l \geq 0; \quad (17)$$

$$j = 1, 2, \dots, n_1; \quad i = 1, 2, \dots, n_2; \quad k = 1, 2, \dots, n_3.$$

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

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

Матрица  $A$  соответствует следующему трехмерному 27-точечному разностному шаблону:

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

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

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

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

$$\begin{aligned} Mz &= \mu^1 z_{j-1, i-1, k-1} + \mu^2 z_{j-1, i-1} + \mu^3 z_{j-1, i-1, k+1} + \mu^4 z_{j-1, k-1} + \mu^5 z_{j-1} + \mu^6 z_{j-1, k+1} + \\ &+ \mu^7 z_{j-1, i+1, k-1} + \mu^8 z_{j-1, i+1} + \mu^9 z_{j-1, i+1, k+1} + \mu^{10} z_{i-1, k-1} + \mu^{11} z_{i-1} + \mu^{12} z_{i-1, k+1} + \\ &+ \mu^{13} z_{k-1} + z = -r^{j-1}; \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} Nw &= \mu^{14} w + \mu^{15} w_{k+1} + \mu^{16} w_{i+1, k-1} + \mu^{17} w_{i+1} + \mu^{18} w_{i+1, k+1} + \mu^{19} w_{j+1, i-1, k-1} + \\ &+ \mu^{20} w_{j+1, i-1} + \mu^{21} w_{j+1, i-1, k+1} + \mu^{22} w_{j+1, k-1} + \mu^{23} w_{j+1} + \mu^{24} w_{j+1, k+1} + \\ &+ \mu^{25} w_{j+1, i+1, k-1} + \mu^{26} w_{j+1, i+1} + \mu^{27} w_{j+1, i+1, k+1} = z \end{aligned}$$

с неопределенными пока коэффициентами  $\mu^l$ ,  $l = 1, \dots, 27$ .

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

$$\begin{aligned} \mu^1 &= \frac{a^1}{\mu_{j-1, i-1, k-1}^{14}}; & \mu^2 &= \frac{1}{\mu_{j-1, i-1}^{14}} (a^2 - \mu^1 \mu_{j-1, i-1, k-1}^{15}); & \mu^3 &= \frac{1}{\mu_{j-1, i-1, k+1}^{14}} (a^3 - \mu^2 \mu_{j-1, i-1}^{15}); \\ \mu^4 &= \frac{1}{\mu_{j-1, k-1}^{14}} (a^4 - \mu^1 \mu_{j-1, i-1, k-1}^{17} - \mu^2 \mu_{j-1, i-1}^{16}); \\ \mu^5 &= \frac{1}{\mu_{j-1}^{14}} (a^5 - \mu^1 \mu_{j-1, i-1, k-1}^{18} - \mu^2 \mu_{j-1, i-1}^{17} - \mu^3 \mu_{j-1, i-1, k+1}^{16} - \mu^4 \mu_{j-1, k-1}^{15}); \\ \mu^6 &= \frac{1}{\mu_{j-1, k+1}^{14}} (a^6 - \mu^2 \mu_{j-1, i-1}^{18} - \mu^3 \mu_{j-1, i-1, k+1}^{17} - \mu^5 \mu_{j-1}^{15}); \\ \mu^7 &= \frac{1}{\mu_{j-1, i+1, k-1}^{14}} (a^7 - \mu^4 \mu_{j-1, k-1}^{17} - \mu^5 \mu_{j-1}^{16}); \end{aligned}$$

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



$$\begin{aligned}\mu^{23} &= a^{23} - \mu^{10} \mu_{i-1, k-1}^{27} - \mu^{11} \mu_{i-1}^{26} - \mu^{12} \mu_{i-1, k+1}^{25} - \mu^{13} \mu_{k-1}^{24}; \\ \mu^{24} &= a^{24} - \mu^{11} \mu_{i-1}^{27} - \mu^{12} \mu_{i-1, k+1}^{26}; & \mu^{25} &= a^{25} - \mu^{13} \mu_{k-1}^{26}; \\ \mu^{26} &= a^{26} - \mu^{13} \mu_{k-1}^{27}; & \mu^{27} &= a^{27}.\end{aligned}$$

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

### DIF и PIF как предобусловливатели для метода бисопряженных градиентов

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

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

для  $i = 0, 1, 2, \dots$

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

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

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

Оптимальное значение параметра  $\theta$  при построении предобусловливателей для BiCGSTAB также определяется выражением (13).

### Результаты тестирования предобусловливателей DIF и PIF

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

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

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

Функция  $f$  выбиралась такой, чтобы решение имело вид

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

Выбирался следующий критерий близости приближенного решения к точному:

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

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

В качестве начального приближения выбиралось

$$\varphi = 0. \quad (21)$$

Варьировались значения  $k_x, k_y$ .

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

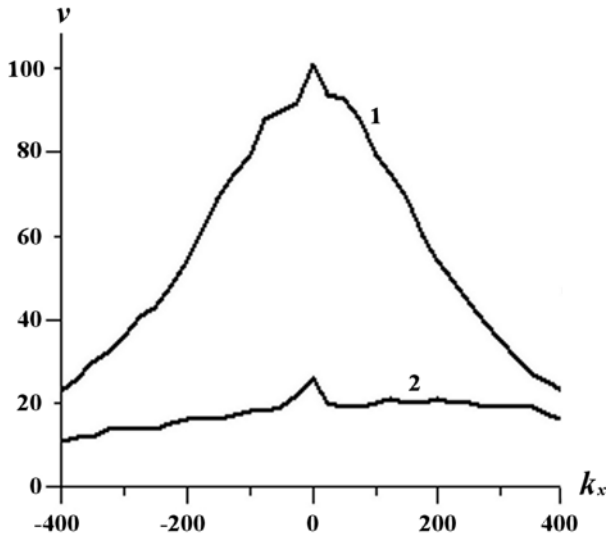


Рис. 1. Число итераций BiCGSTAB с PIF при  $-400 < k_x < 400, k_y = 0, n = 400$  для двух значений  $\theta$ : 1 —  $\theta = 0$ ; 2 —  $\theta = 1 - 1/(2n)$

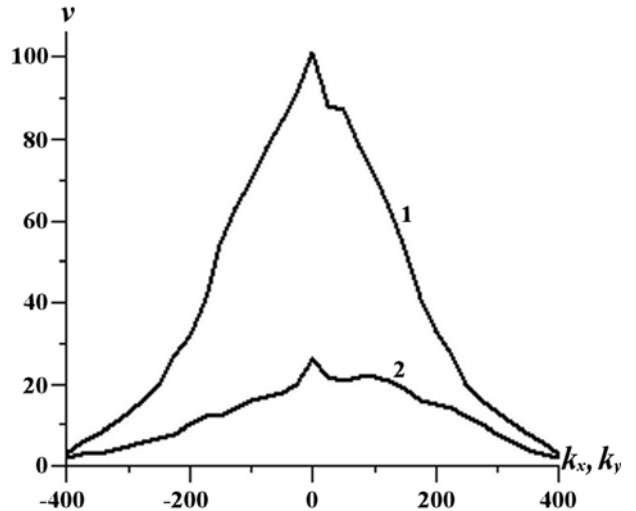


Рис. 2. Число итераций BiCGSTAB с PIF при  $-400 < k_x = k_y < 400, n = 400$  для двух значений  $\theta$ : 1 —  $\theta = 0$ ; 2 —  $\theta = 1 - 1/(2n)$

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

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

Функция  $f$  выбиралась такой, чтобы решение имело вид

$$\varphi = (1 + \cos(\pi x))(1 + \cos(\pi y))(1 + \cos(\pi z)). \quad (22)$$

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

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

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

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

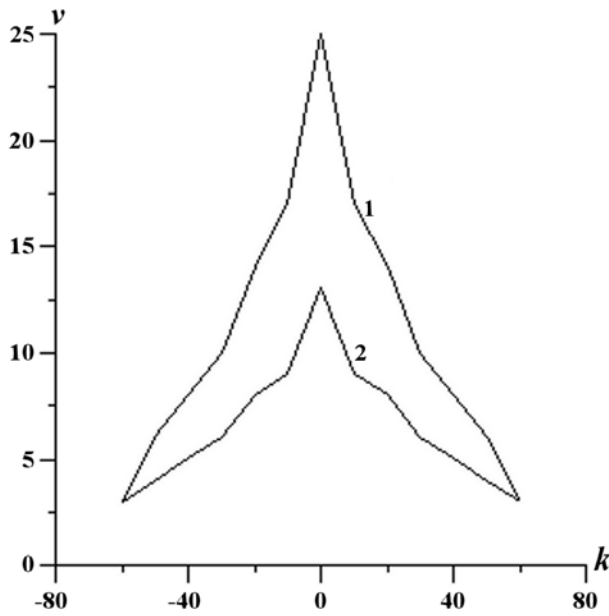


Рис. 3. Зависимости числа итераций от  $k$  при  $n = 61$  для двух значений  $\theta$ : 1 —  $\theta = 0$ ; 2 —  $\theta = 1 - 1/(2n)$

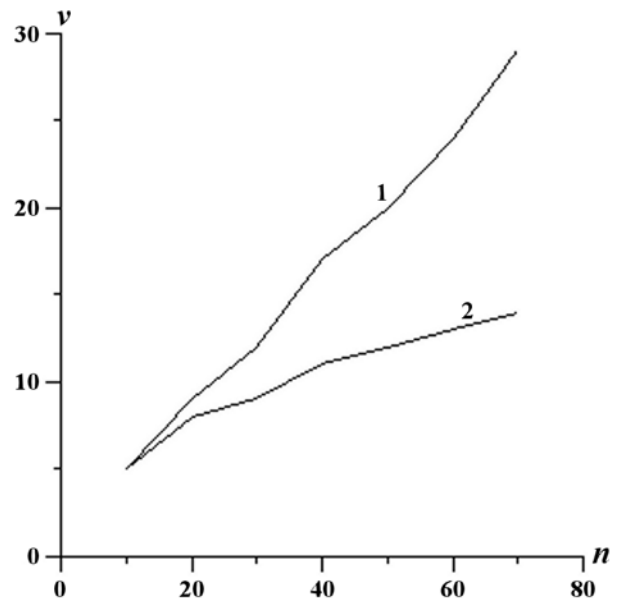


Рис. 4. Зависимости числа итераций от  $n$  при  $k = 0$  для двух значений  $\theta$ : 1 —  $\theta = 0$ ; 2 —  $\theta = 1 - 1/(2n)$

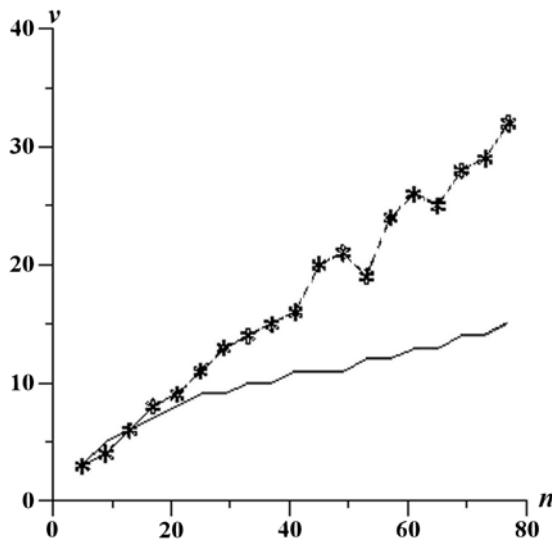


Рис. 5. Зависимость числа итераций от  $n$  для метода BiCGSTAB на 27-точечном шаблоне: \* — ILU0; - - - — DIF для  $\theta = 0$ ; — — — DIF для  $\theta = 1 - 1/(2n)$

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

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

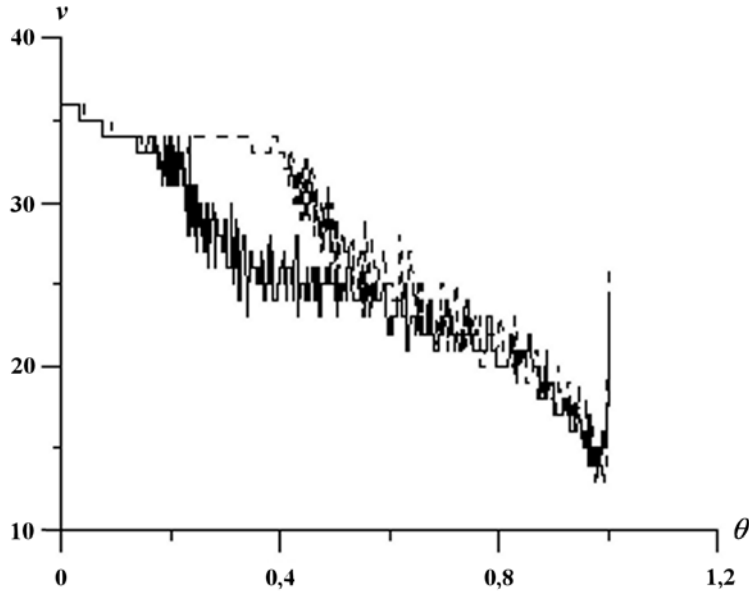


Рис. 6. Число итераций в зависимости от параметра  $\theta$ : - - - — DIF; — — — PIF

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Номер теста	Сетка	ILU0 из	DIF/	DIF1/	PIF, $\theta = 1$	PIF1, $\theta = 1$	DIF, $\theta = 1$	DIF1, $\theta = 1$
		PMLP/ ParSol	PIF, $\theta = 0$	PIF1, $\theta = 0$				
1	$N_X = 180, N_Y = 3146$	97	111	99	—*	401	—	17
2	$N_X = 256, N_Y = 733$	11	12	24	18	15	10	12
3	$N_X = 100, N_Y = 228$	686	531	1123	663	724	261	258
4	$N_X = 100, N_Y = 228$	10	11	19	12	16	4	5
5	$N_X = 100, N_Y = 228$	—	—	—	—	—	113	138
6	$N_X = 600, N_Y = 988$	11	11	141	4	5	3	3
7	$N_X = 47, N_Y = 144$	198	252	76	—	91	—	69

\* Отсутствие сходимости за 5 000 итераций.

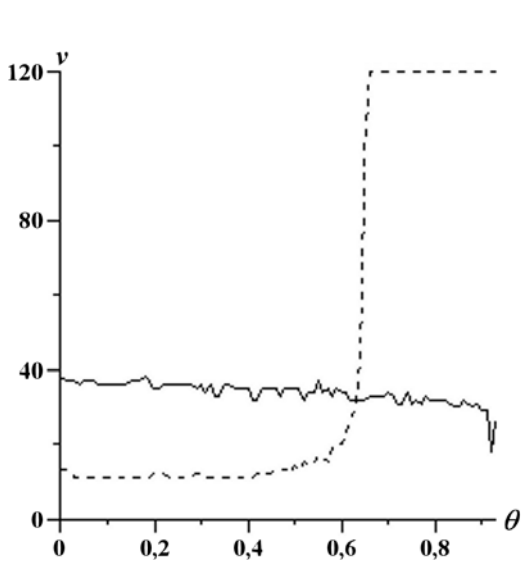


Рис. 7. Зависимость числа итераций от параметра  $\theta$  для предобусловливателей при  $\varphi^0 = 0$ : - - - — DIF; — — — — DIF1

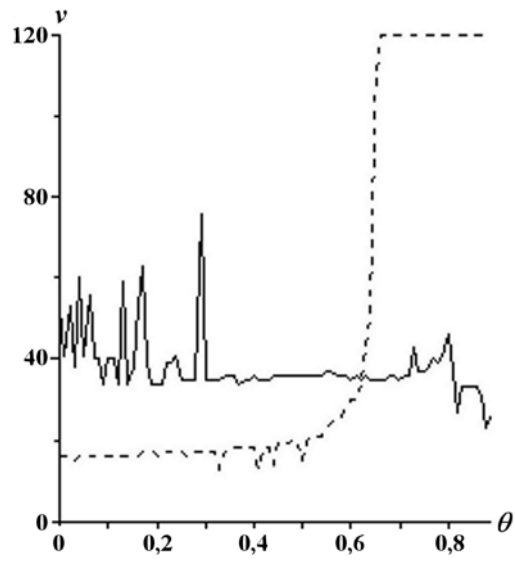


Рис. 8. Зависимость числа итераций от параметра  $\theta$  для предобусловливателей при  $\varphi^0 = (-1)^i, i = 1, 2, \dots, n^3$ : - - - — DIF; — — — — DIF1

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

### Распараллеливание

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

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

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

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

### Заключение

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

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

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

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

### Список литературы

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

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

Статья поступила в редакцию 10.03.09.

---