

Лекция 12. Параллельные алгоритмы решения уравнения Пуассона.

1. Постановка модельной двумерной краевой задачи

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(k_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(k_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) = -f, \quad \bar{x} \in D = \{(x_1, x_2) : 0 < x_\alpha < 1, \alpha = 1, 2\}, \quad (1)$$

Варианты граничных условий:

- 1) условия Дирихле: $u = g, \bar{x} \in \partial D$;
- 2) условия Неймана: $\partial u / \partial n = 0, \bar{x} \in \partial D$;
- 3) условия третьего рода: $\partial u / \partial n = -\eta u, \bar{x} \in \partial D$;
- 4) условия смешанного типа: $g_1 u + g_2 \partial u / \partial n = g_3, \bar{x} \in \partial D$;
- 5) периодические условия;
- 6) интегральные условия.

Проблема решения задачи Неймана, регуляризация.

Координаты: декартовы, цилиндрические, сферические, обобщенные.

Варианты задачи: линейная, квазилинейная, нелинейная.

2. Численные алгоритмы на базе метода конечных разностей и конечных элементов.

Метод конечных разностей – дискретизация области и решения.

Схема получается путем интегрирования уравнения с весом 1:

$$\Lambda_h y_h = -\varphi_h, \quad \Lambda_h y_h \equiv \sum_{\alpha=1,2} \Lambda_{h,\alpha} y_h, \quad \Lambda_{h,\alpha} y_h = (\bar{k}_\alpha y_{x_\alpha})_{\bar{x}_\alpha}, \quad \bar{x} \in \Omega = \omega_{x_1} \times \omega_{x_2} \quad (1_h)$$

Метод конечных элементов – дискретизация только области.

Схема получается путем умножения уравнения на базисную функцию и интегрирования по всему пространству.

3. Свойства алгебраической задачи.

Численная схема (2) записывается с учетом граничных условий. Пример:

Равномерная сетка: $\Omega = \omega_{x_1} \times \omega_{x_2}, \omega_{x_\alpha} = \{x_{\alpha,i_\alpha} = i_\alpha h_\alpha, i_\alpha = 0, \dots, N_\alpha, h_\alpha = 1/N_\alpha\}, \alpha = 1, 2.$

Разностная схема с учетом граничных условий Дирихле в индексной форме:

$$\frac{1}{h_1} \left\{ k_{1,i+1/2,i_2} \frac{y_{i+1,i_2} - y_{i,i_2}}{h_1} - k_{1,i-1/2,i_2} \frac{y_{i,i_2} - y_{i-1,i_2}}{h_1} \right\} + \frac{1}{h_2} \left\{ k_{2,i,i_2+1/2} \frac{y_{i,i_2+1} - y_{i,i_2}}{h_2} - k_{2,i,i_2-1/2} \frac{y_{i,i_2} - y_{i,i_2-1}}{h_2} \right\} = -f_{i,i_2}, \quad i_\alpha = 1, \dots, N_\alpha - 1, \quad (1_i)$$

$$y_{i,i_2} = g_{i,i_2}, \quad i_\alpha = 0, N_\alpha, \quad \alpha = 1, 2.$$

Далее мы преобразуем ее в алгебраическую задачу вида $AY = F$, где $Y, F \in \mathbb{R}^N$ ($N = (N_1 + 1)(N_2 + 1)$),

$A \in \mathbb{R}^{N \times N}, A \geq 0$ – симметричная разреженная матрица, имеющая клеточную структуру. Естественное

упорядочение: $Y = (y_{00}, y_{10}, \dots, y_{N_1 0}, y_{01}, y_{11}, \dots, y_{N_1 1}, \dots, y_{0N_2}, y_{1N_2}, \dots, y_{N_1 N_2})$.

Задача Неймана: проблема вырожденности оператора, решается заданием доп. условия $y_{N_1 N_2} = 1$ или возмущением матрицы: $A \rightarrow A + \delta I$, δ – малое число.

4. Прямые методы решения линейной алгебраической задачи.

Линейные системы с полностью заполненной матрицей.

Метод Гаусса, Метод квадратного корня: арифметическая сложность – $O(N^3)$, N – число неизвестных.

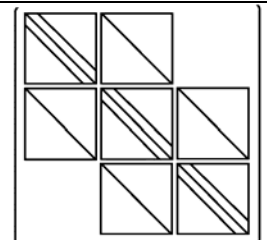
Линейные системы с разреженной матрицей: максимальная арифметическая сложность – $O(N^2)$.

Универсальные:

- 1) Ленточный метод Гаусса (ЛМГ),
- 2) Ленточный метод квадратного корня (ЛМКК) или Метод Холецкого,

Специальные:

- 3) Дискретное преобразование Фурье (ДПФ),
- 4) Быстрое дискретное преобразование Фурье (БДПФ),
- 5) БДПФ + метод прогонки (МП).



Число операций

ЛМГ и ЛМКК: $Q_1 = O(N^2)$ (l – полуширина ленты – N_1 или N_2), для квадратной сетки $Q_1 = O(N^2)$.

ДПФ: $Q_1 = O(N^2)$. **БДПФ:** $Q_1 = O(N \log_2 N)$ – экономичный метод (ограничение по использованию).

БДПФ+МП: $Q_1 = O(N \log_2 \sqrt{N})$ – экономичный метод (ограничение по использованию).

Параллельные варианты: **ЛМГ** и **МКК** плохо параллелятся даже на МВС с общей памятью. **ДПФ** параллелится хорошо на МВС с общей и распределенной памятью. **БДПФ** практически не параллелится. **БДПФ+МП** параллелится хорошо на МВС с общей и распределенной памятью.

5. Итерационные методы решения линейной алгебраической задачи.

Двухслойная схема: $B_{s+1} \frac{Y^{s+1} - Y^s}{\tau_{s+1}} + AY^s = F, s = 0, 1, 2, \dots, Y^0$ – начальное приближение.

Сходится, если $A = A^* > 0, B_{s+1} = B_{s+1}^* > 0, B_{s+1} - \frac{\tau_{s+1}}{2} A > 0$.

Количество операций необходимое для решения: $Q_1 = q_1 \cdot n(\varepsilon)$, число действий для реализации одной итерации, обычно $q_1 = O(N)$, $n(\varepsilon)$ – число итераций необходимое для достижения точности ε .

Методы с диагональной матрицей перехода ("диагональные" методы).

1) Метод простой итерации (**МПИ**): $B_s \equiv E, \tau_s \equiv \tau_0$. Число итераций $n(\varepsilon) = O(N \ln[2/\varepsilon])$. Диагональный, в целом не экономичный, нужны границы спектра, легко параллелится.

2) **МПИ** с чебышевским набором параметров (**ЧНП**): $n(\varepsilon) = O(\sqrt{N} \ln[2/\varepsilon])$. Диагональный, не экономичный, нужны границы спектра, легко параллелится.

3) Метод Якоби (**МЯ**): $B_s \equiv D, \tau_s \equiv 1$. Пример: $D = D_A = \text{diag}(A)$. $n(\varepsilon) = O(N \ln[2/\varepsilon])$. Диагональный, не экономичный, не нужны границы спектра, легко параллелится.

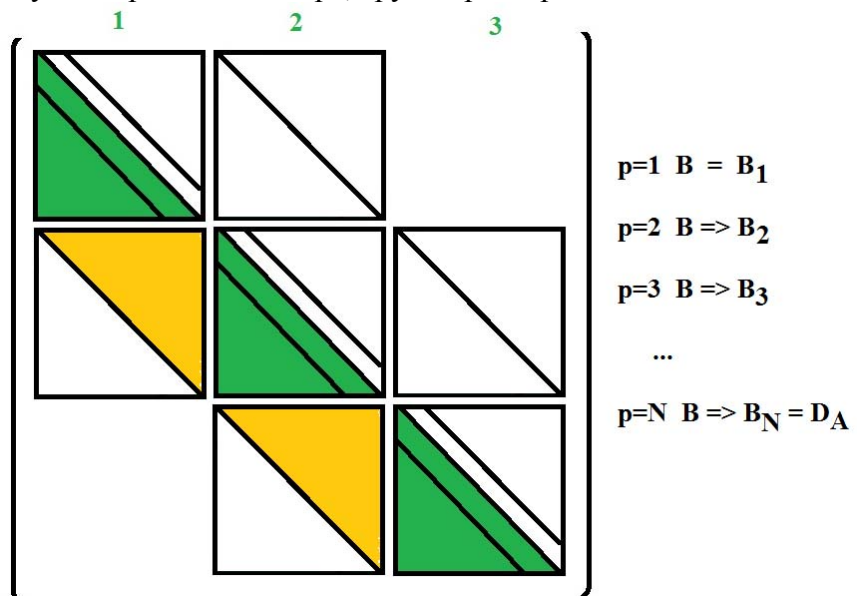
4) Метод Якоби с чебышевским набором параметров (**МЯ-ЧНП**) – МПИ с ЧНП для задачи $D_A^{-1}AY = D_A^{-1}F$. $n(\varepsilon) = O(\sqrt{N} \ln[2/\varepsilon])$. Диагональный, в целом не экономичный, нужны границы спектра, легко параллелится.

Методы с треугольной матрицей перехода ("треугольные" методы).

5) Метод Зейделя–Некрасова (**МЗН**): $B_s \equiv A^- + D, \tau_s \equiv 1$ ($A = A^- + D_A + A^+$), $n(\varepsilon) = O(\sqrt{N} \ln[2/\varepsilon])$. Треугольный, в целом не экономичный, не нужны границы спектра, трудно распараллелить.

Идея возможного распараллеливания состоит в коррекции матрицы перехода B (см. рис., зеленым и желтым цветом показаны блоки матрицы, лежащие в памяти разных вычислителей). Для каждого числа параллельных процессов p , строится свой оператор B_p , такой, обращение которого можно производить независимо. Для этого из исходной матрицы B удаляются "мешающие" блоки (на рис. выделены желтым цветом).

Результат – можно пользоваться, но появляется зависимость $n(\varepsilon, p)$. При выполнении условия $p \ll N$ зависимость не очень сильная.



6) Метод верхней релаксации (**МВР**): $B_s \equiv A^- + \frac{1}{\omega} D, \tau_s \equiv 1, n(\varepsilon) = O(\sqrt{N} \ln[2/\varepsilon])$. Треугольный, не экономичный, нужны границы спектра, трудно распараллелить.

7) Попеременно-треугольный метод (ПТМ): $B_s \equiv (E + \omega R_1)(E + \omega R_2)$, $R = R_1 + R_2 = R^* > 0$, $R_1^* = R_2$.

Пример: $R_1 y = \frac{y_{x_1}}{h_1} + \frac{y_{x_2}}{h_2}$, $R_2 y = -\frac{y_{x_1}}{h_1} - \frac{y_{x_2}}{h_2}$. $n(\varepsilon) = O(\sqrt[4]{N} \ln[2/\varepsilon])$. Треугольный, почти экономичный,

нужны границы спектра, проблема с задачей Неймана, трудно распараллелить.

8) Модифицированный ПТМ (МПТМ): $B_s \equiv (D + \omega A_1)(D + \omega A_2)$, $A = A_1 + A_2 = A^* > 0$, $A_1^* = A_2$, $D > 0$ – диагональный. $n(\varepsilon) = O(\sqrt[4]{N} \ln[2/\varepsilon])$. Треугольный, почти экономичный, нужны границы спектра, проблема с задачей Неймана, трудно распараллелить.

Методы с факторизованной матрицей перехода (методы "факторизации").

9) Метод переменных направлений (МПН): $A = A_1 + A_2 = A^* > 0$, $A_1^* = A_1 > 0$, $A_2^* = A_2 > 0$, $A_1 A_2 = A_2 A_1$.

Аналог ЛОС: $(Y^{s+1/2} - Y^s) / \tau^{(1)} + A_1 Y^{s+1/2} + A_2 Y^s = F$, $(Y^{s+1} - Y^{s+1/2}) / \tau^{(2)} + A_1 Y^{s+1/2} + A_2 Y^{s+1} = F$.

$n(\varepsilon) = O(\ln \sqrt{N} \cdot \ln[4/\varepsilon])$. Факторизованный, почти экономичный, не нужны границы спектра, проблема с задачей Неймана, легко распараллелить.

10) МПН2: $A = A_1 + A_2 = A^* > 0$, $A_1^* = A_1 > 0$, $A_2^* = A_2 > 0$, $A_1 A_2 \neq A_2 A_1$. Схема:

$(E + \omega_1 A_1) Y^{s+1/2} = (E - \omega_1 A_2) Y^s + \omega_1 F$, $(E + \omega_2 A_2) Y^{s+1} = (E - \omega_2 A_1) Y^{s+1/2} + \omega_2 F$. $n(\varepsilon) = O(\sqrt{N} \ln[1/\varepsilon])$.

Факторизованный, почти экономичный, не нужны границы спектра, проблема с задачей Неймана, легко распараллелить.

11) Альфа-Бета алгоритм

Данный алгоритм предложен Б.Н. Четверушкиным и является комбинацией прямых и итерационных методов. В его основе лежат метод прогонки и простой итерации по нелинейности (см. описание на сайте http://polyakov.imamod.ru/arc/stud/parallel/books/alpha-beta_algorithm.pdf).

Трехслойные итерационные методы

12) Трехслойный метод Чебышева

$$Y^1 = (E - \tau_0 A) Y^0 + \tau_0 F, \quad Y^{s+1} = \alpha_{s+1} (E - \tau_0 A) Y^s + (1 - \alpha_{s+1}) Y^{s-1} + \tau_0 \alpha_{s+1} F, \quad s = 1, 2, \dots,$$

$$\alpha_1 = 2, \quad \alpha_{s+1} = \frac{4}{4 - \rho^2 \alpha_s}, \quad \rho = \frac{\mu - 1}{\mu + 1}, \quad \mu = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}.$$

Можно объединить с методом Якоби: $D_A^{-1} A Y = D_A^{-1} Y$. Число итераций $n(\varepsilon) = O(\sqrt{N} \ln[2/\varepsilon])$, нужно знать границы спектра, хорошо распараллеливается.

13) Схема сопряженных градиентов (ССГ):

$$R^0 = A Y^0 - F, \quad \forall s = 0, 1, 2, \dots:$$

$$B_s W^s = R^s; \quad \beta_0 = 0, \quad \beta_s = (W^s, R^s) / (W^{s-1}, R^{s-1});$$

$$G^0 = W^0, \quad G^s = W^s + \beta_s G^{s-1}; \quad \alpha_s = (W^s, R^s) / (G^s, A G^s);$$

$$Y^{s+1} = Y^s - \alpha_s G^s, \quad R^{s+1} = A Y^{s+1} - F = R^s - \alpha_s A G^s.$$

Если $B_s = B_s^* > 0$ – сходится за конечное число итераций при любом начальном приближении.

Предлагается брать $B_s = (D^{-1} + A^-) D (D^{-1} + A^+)$. Тогда $n(\varepsilon) = O(\sqrt{N} \ln[2/\varepsilon])$ или $O(\sqrt[4]{N} \ln[2/\varepsilon])$.

Треугольный, почти экономичный, не нужны границы спектра, трудно распараллелить.

Современные методы на основе ССГ: различный выбор составляющих оператора B и упорядочения неизвестных.

(1) ССГ + МПТМ;

(2) ССГ + метод неполного разложения Холецкого (МНРХ) без заполнения \Rightarrow ICCG(0);

(3) ССГ + модифицированный МНРХ \Rightarrow MICCG(0);

(4) ССГ + метод симметричной верхней релаксации (МСВР) \Rightarrow SSORCG;

(5) ССГ + метод минимальных поправок;

(6) ССГ + метод минимальных невязок (GMRES).

Общая идея: $A \rightarrow A' = P A P^{-1} \rightarrow B' = (D'^{-1} + A'_1) D' (D'^{-1} + A'_2) \rightarrow$ решаем задачу \rightarrow переупорядочиваем решение.

ICCG(0): $D = D_A$, $A_1 = A^-$, $A_2 = A^+$, $n(\varepsilon) = O(\sqrt{N} \ln[2/\varepsilon])$. В остальных методах $n(\varepsilon) = O(\sqrt[4]{N} \ln[2/\varepsilon])$.

MICCG(0): D выбираем из условия $A e + \sigma D_A e = B e$, $e = (1, 1, \dots, 1)^*$, $\sigma = O(N^{-1})$.

С ростом числа процессоров имеем асимптотику: $n(\varepsilon) = O(\sqrt{Np})$ или $O(\sqrt[4]{Np})$.

Альтернативный подход: Метод Шварца (МШ) разделения областей. Работает даже на дифференциальном уровне.

Задача $Au = f$ в $D = D_1 \cup D_2$. Тогда $u^0 = 0, \forall k = 0, 1, 2, \dots$ решаем

$$P_{11}(A)u_1^{k+1} + P_{12}(A)P_2(u^k) = P_1(f), \text{ в } D_1, \quad u_1^{k+1} = 0 \text{ в } D_2;$$

$$P_{21}(A)P_1(u^k) + P_{22}(A)u_2^{k+1} = P_2(f), \text{ в } D_2, \quad u_2^{k+1} = 0 \text{ в } D_1;$$

$$u^{k+1} = u_1^{k+1} + u_2^{k+1} \text{ в } D.$$

Можно записать итерационную схему с параметрами, а области брать с налеганием. Число итераций $n(\varepsilon) = O(N \ln[2/\varepsilon])$. При увеличении области налегания скорость сходимости увеличивается.

6. Многомерное уравнение Пуассона

6.1. Прямые методы решения линейной алгебраической задачи.

Универсальные:

- 1) Ленточный метод Гаусса (ЛМГ),
- 2) Метод квадратного корня (МКК) или Метод Холецкого.

Специальные:

- 3) Дискретное преобразование Фурье (ДПФ),
- 4) Быстрое дискретное преобразование Фурье (БДПФ),
- 5) БДПФ по $(m-1)$ направлениям + метод прогонки (МП) по одному из направлений.

Число операций: ЛМГ, МКК: $Q_1 = O(Nl^2)$, $N = \prod_{\alpha=1}^m N_\alpha$ – общее число неизвестных, $l = \prod_{\alpha=2}^m N_\alpha$ –

полуширина ленты. ДПФ: $Q_1 = O(N^2)$. БДПФ: $Q_1 = O(N \log_2 N)$. БДПФ+МП: $Q_1 = O(N \log_2 N^{(m-1)/m})$.

Упорядочение: Джорж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. М.: Мир, 1984; С. Писсанецки, Технология разреженных матриц. М.: Мир, 1988.

Параллельные варианты: ЛМГ и МКК – плохо распараллеливаются даже на МВС с общей памятью. ДПФ распараллеливается хорошо на МВС с общей памятью и похуже на МВС с распределенной памятью. БДПФ практически не распараллеливается. БДПФ+МП распараллеливается хорошо на МВС с общей и распределенной памятью за счет прогонки.

6.2. Итерационные методы решения линейной алгебраической задачи.

Многомерный МПН:

$$B_s = \prod_{\alpha=1}^m (E + \tau_s^{(\alpha)} A_\alpha), \quad \tau_s^{(\alpha)} > 0. \text{ Число итераций } n(\varepsilon) = O(\sqrt{h^{-1}} \ln[2/\varepsilon]) = O(\sqrt{N_\alpha} \ln[2/\varepsilon]) = O(\sqrt[2m]{N} \ln[2/\varepsilon])$$

– с циклическим набором параметров.

Методы на основе ССГ: различный выбор составляющих оператора В и упорядочения неизвестных.

- (1) ССГ + МПТМ;
- (2) ССГ + метод неполного разложения Холецкого (МНРХ) без заполнения => ICCG(0);
- (3) ССГ + модифицированный МНРХ => MICCG(0);
- (4) ССГ + метод симметричной верхней релаксации (МСВР) => SSORCG;
- (5) ССГ + метод минимальных поправок;
- (6) ССГ + метод минимальных невязок (GMRES).

Все тяжело реализуются на МВС, если не применять приближенную факторизацию оператора В.

Число итераций: $n(\varepsilon) = O(\sqrt[\beta]{N} \ln[2/\varepsilon])$, $\beta = m, 2m$.

С ростом числа процессоров имеем асимптотику: $n(\varepsilon) = O(\sqrt[\beta]{Np})$.

Метод Шварца: хорошо распараллеливается, хотя медленно сходится. Поэтому используется в комбинации с другими методами.