

УДК 519.63

На правах рукописи

Василевский Юрий Викторович

**ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ**

Специальность 01.01.07 – вычислительная математика

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2006

Работа выполнена в Институте вычислительной математики РАН

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Агошков В.И.

доктор физико-математических наук,
профессор Лапин А.В.

доктор физико-математических наук,
профессор Чижонков Е.В.

Ведущая организация: Институт математического моделирования
РАН

Защита состоится 27 апреля 2006 г. в 11 часов на заседании диссертационного совета Д 002.45.01 в Институте вычислительной математики РАН по адресу: 119991, г. Москва, ГСП-1, ул. Губкина, 8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института вычислительной математики РАН.

Автореферат разослан 24 марта 2006 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физико-математических наук

Г.А. Бочаров

Общая характеристика работы

Диссертация посвящена разработке современных вычислительных математических технологий нахождения приближенного решения краевых задач с эллиптическими операторами второго порядка. Под вычислительными математическими технологиями здесь понимается совокупность численных методов, структур данных и программных реализаций для решения вычислительных задач на вычислительных системах.

Актуальность тематики. Основные черты рассматриваемых технологий — параллельность и эффективность, базирующиеся на современных численных методах. Параллельность вызвана необходимостью решать задачи настолько большой размерности, что это возможно лишь на параллельных компьютерах с распределенной памятью. Распределенная память подразумевает разбиение данных на блоки, каждый из которых обрабатывается отдельным процессором, поэтому блочность алгоритмов характерна для большинства параллельных методов и технологий. Эффективность связана с разумным распределением и использованием вычислительных ресурсов, для достижения заданной точности расчетов минимальными вычислительными затратами, или, что равнозначно, для повышения точности расчетов на заданной вычислительной системе. Одним из самых мощных средств повышения эффективности технологии является ее адаптация к конкретной задаче. В данной работе рассматриваются два вида адаптивности: адаптивное построение расчетной сетки и адаптация алгоритма решения дискретных задач. Таким образом, ключевыми инструментами при разработке параллельных и эффективных вычислительных технологий являются блочность и адаптивность, которые проявляются на двух основных этапах решения краевых задач — построении расчетных сеток и дискретизаций, и решении порожденных ими систем. Область применения предлагаемых методов включает, помимо эллиптических уравнений второго порядка, уравнения аэро- и гидродинамики (уравнения полного потенциального обтекания, уравнения Стокса, Озеена, Навье-Стокса), а также уравнения многофазной фильтрации.

Цель исследования заключается в конструировании и исследовании новых параллельных численных методов адаптивного решения краевых задач с использованием разных типов сеток (анизотропных неструктурированных, нестыкующихся, иерархических) и применении этих методов к решению актуальных прикладных задач.

Методология исследования опирается на аппроксимационные свойства конечно-элементных пространств, сеточные аналоги теорем продолжения, матричный анализ и теорию итерационных алгоритмов. При построении новых алгоритмов использовались известные свойства базовых многосеточных алгоритмов и методов декомпозиции. Все предложенные методы проиллюстрированы численными экспериментами.

Научная новизна и теоретическая значимость. В рамках теории конечно-элементных

пространств впервые даны оценки снизу интерполяционной ошибки для оптимальных симплициальных (треугольных и тетраэдральных) сеток, оценки сверху для квази-оптимальных сеток, являющихся их конструктивными приближениями, и показана их асимптотическая эквивалентность; исследована возможность управления адаптацией и его влияние на интерполяционную ошибку; предложен новый метод восстановления дискретного гессиана сеточной функции, обеспечивающий его локальную сходимость даже для задач с особенностями. В рамках декомпозиционных алгоритмов впервые предложен метод, теоретическая скорость сходимости которого не зависит от гетерогенности (т.е. сильных изменений от ячейки сетки к ячейке) коэффициента диффузии; построены и исследованы итерационные методы решения седловых систем, порожденных макро-гибридными аппроксимациями на нестыкующихся сетках, и доказано, что скорость сходимости этих методов не зависит от скачка коэффициента диффузии, малости коэффициента реакции, количества подобластей; впервые предложен и обоснован двухуровневый метод Шварца для уравнения конвекции-диффузии с доминирующим направлением конвективного поля, чья скорость сходимости ограничена константой, не зависящей от малости коэффициента диффузии. В рамках итерационных алгоритмов предложены новые методы выбора начального приближения для последовательности линейных и нелинейных систем, возникающих при аппроксимациях нестационарных краевых задач. В рамках адаптивных алгоритмов рассмотрены три различных параллельных стратегии: (а) адаптации на основе восстановления гессиана решения, (б) независимой адаптации по подобластям с использованием нестыкующихся сеток, (в) адаптации на основе параллельного многосеточного метода для иерархических сеток с локальным сгущением.

Практическая ценность разработанных адаптивных технологий состоит в их применимости для решения широкого круга краевых задач математической физики. Важным свойством этих технологий является модульность технологических составляющих, что позволяет использовать их как в уже реализованных технологических цепочках в качестве ингредиента, так и создавать новые технологические цепочки. Актуальность параллельности предложенных численных методов заключается в их приложении к трехмерным задачам, требующим решения сеточных систем с большим числом неизвестных. Основные технологические направления, рассмотренные в работе: известные и новые технологии решения неструктурированных систем; адаптивные параллельные технологии построения квази-оптимальных сеток; параллельные технологии для практически значимых аппроксимаций с использованием нестыкующихся сеток и консервативных смешанных конечных элементов; блочные параллельные алгоритмы для решения сингулярно-возмущенного уравнения конвекции-диффузии, трехмерных уравнений Навье-Стокса и уравнений многофазной фильтрации; адаптивные технологии выбора начального при-

ближения для итерационного решения последовательности сеточных систем.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались автором: на всероссийской школе-конференции (Казань, 1999), всероссийских конференциях по построению расчетных сеток (Москва, 2002, 2004), международных конференциях по методам декомпозиции области DDM (Чиба, 1999), параллельной вычислительной гидродинамике ParCFD (Москва, 2003), геофизическим наукам SIAM (Остин, 2003, Авиньон, 2005), Европейских конференциях по вычислительной математике ENUMATH (Париж, 1995, Юваскюла, 1999, Иския, 2001), Европейской конференции по вычислительным методам ECCOMAS (Париж, 1996), Франко-Русско-Итаलो-Узбекских симпозиумах по численному анализу и приложениям (Ташкент, 1995, Марсель, 1997), международной конференции по анализу, вычислениям и применениям дифференциальных и интегральных уравнений (Штуттгарт, 1996), международной конференции GAMM по параллельным многосеточным методам (С.-Вольфганг, 1996), международной конференции “Domain decomposition and multifield theory” (Обервольфах, 1998), международных симпозиумах “Finite element workshop” (Хьюстон, 1999, Колледж Стэйшн, 2002) международной конференции “50 лет сопряженным градиентам” (Юваскюла, 2002), на научно-исследовательских семинарах Института вычислительной математики РАН, Вычислительного центра РАН, Института математического моделирования РАН, Университетов Париж 6, Париж 13, Лион 1, Ренн, Гейдельберг, Мюнхен, Аугсбург, Юваскюла, Наймеген, Остин, Хьюстон, Национальной Лаборатории в Лос Аламосе, а также на семинарах INRIA, Institut Francais du Pétrol, ExxonMobil Upstream Research C.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 42 работы, из них 21 в рецензируемых журналах, 18 в материалах конференций, 3 в научных изданиях.

Личный вклад автора. Вклад автора в совместные работы заключался: в формировании постановки проблемы [2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,16,17,18,19,20,21], предложении идеи решения [2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,16,17,18,19,20,21], теоретическом обосновании [3,4,6,10,11,16,17,20], совместном теоретическом обосновании [2,5,7,8,9,12,13,14,15,19,21], технической реализации [6,13,14], совместной технической реализации [3,5,7,9,10,11,12,15,16,17,18,19,20,21], постановке численных экспериментов [3,5,6,7,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,21].

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Текст работы изложен на 254 страницах, содержит библиографию из 275 наименований, 33 рисунка и 57 таблиц.

Содержание диссертации

Во введении обосновывается актуальность разрабатываемых в диссертации технологий и методов и дана краткая характеристика работ, примыкающих к ее тематике. Там

же кратко излагается содержание диссертации по главам и представлен обзор основных результатов диссертации.

В первой главе, состоящей из четырех разделов, рассматриваются блочные технологии решения неструктурированных систем, порождаемых дискретизациями эллиптических краевых задач на неструктурированных симплицальных сетках и/или с гетерогенным коэффициентом диффузии. Некоторые известные методы представлены в рамках обзора; некоторые новые технологии представлены без численного анализа алгоритмов, но с экспериментальными данными; метод агрегирования рассмотрен подробно как в теоретическом, так и в экспериментальном плане.

Обзор современных последовательных методов решения неструктурированных систем представлен в **разделе 1.1**. Рассмотрены основные асимптотические характеристики методов точной факторизации, неполной факторизации, алгебраических многосеточных методов и метода фиктивного пространства. Характерные черты современных реализаций методов проиллюстрированы на последовательностях матриц возрастающей размерности и заданной структуры разреженности.

Далее рассматриваются *новые* комбинации известных методов, оказывающиеся весьма эффективными для неструктурированных систем специального вида. Быстрое приближенное решение систем с матрицами, порождаемыми аппроксимациями на неструктурированных призматических сетках, рассмотрено в **разделе 1.2**. Такие матрицы обладают тензорным рангом 2, т.е. представимы в виде $A_1 \otimes M_{23} + M_1 \otimes A_{23}$. Здесь A_{23} , M_{23} (A_1 , M_1) — матрицы жесткости и масс (диагонализированная) на двумерном (соотв., одномерном) сечении призматической сетки. Метод представляет собой обобщение быстрого прямого метода (Ю.А.Кузнецов) на случай неструктурированных матриц A_{23} с двумерным графом и использует явный вид матриц A_1 , A_{23} , M_1 , M_{23} . Смысл обобщения — замена прямого решения двумерных систем с матрицами $A_{23} + \lambda M_{23}$ с произвольным параметром λ на приближенное итерационное решение с переобуславливателем, базирующемся на факторизации одной из трех матриц $A_{23} + 10M_{23}$, $A_{23} + 150M_{23}$, $A_{23} + 1500M_{23}$. При этом разрешающий оператор будет нелинейным, и для решения системы применим быстро сходящийся итерационный метод FGMRES с построенным нелинейным переобуславливателем, арифметическая цена применения которого на практике пропорциональна порядку матрицы с полилогарифмическим множителем.

В разделе 1.3 излагается новая технология переупорядочивания неизвестных, позволяющая для диффузионных задач с анизотропными коэффициентами успешно использовать блочные метод Гаусса-Зейделя и легко параллелизуемый метод Якоби. Даже для аппроксимаций на неструктурированных сетках удается переупорядочить матрицу и разбить ее на блоки таким образом, что эти методы становятся весьма эффективными. Для

этого с помощью жадного алгоритма (С.А.Горейнов) степени свободы, связанные большими матричными элементами, объединяются в группы, порождающие искомые блоки. Поскольку отбрасываемые в блочных переобуславливателях блоки содержат только малые матричные элементы, итерационная скорость сходимости остается достаточно высокой.

В разделе 1.4 предложен и проанализирован декомпозиционный метод агрегирования, позволяющий использовать в качестве блоков любые последовательные методы решения подзадач, обладающий очень удобной структурой для параллелизации и сконструированный для эффективного параллельного решения задач на неструктурированных сетках и/или с гетерогенными коэффициентами.

Рассмотрим конформную триангуляцию Ω^h области Ω , которая разбита на m перекрывающихся подобластей регулярной формы Ω_i с минимальным перекрытием в один элемент. Пусть матрица A получена стандартной конечно-элементной P_1 -аппроксимацией диффузионного оператора с коэффициентом $\rho(x)$ с условиями Дирихле. Разбиения сетки и области порождают блочное представление матрицы A , для которого можно определить блочно-диагональный переобуславливатель B_1 :

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & \dots & A_{mm} \end{pmatrix}, \quad B_1 = \begin{pmatrix} B_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & B_{mm} \end{pmatrix}.$$

Здесь блоки $B_{ii} = B_{ii}^T > 0$ размерности n_i — переобуславливатели для блоков A_{ii} , $i = 1, \dots, m$, с константами эквивалентности $0 < \alpha_1 \leq \alpha_2$. Матрица B_1 — легко параллелизуемый аддитивный переобуславливатель Шварца с минимальными перекрытиями между подобластями. Его эффективность зависит от числа подобластей m , ширины налегания δ и скачка диффузионного коэффициента ρ . Для того, чтобы уменьшить негативное влияние малого налегания и исключить зависимость от числа подобластей и скачков $\rho(x)$, применим поправку на некотором грубом сеточном уровне. Результирующий гибридный декомпозиционный переобуславливатель B_h определяется выражением

$$B_h = (I - B_2 A) B_1 (I - A B_2) + B_2,$$

где матрица B_2 задается следующим образом. Пусть число ненулевых строк в матрице $A_i = [A_{i1}, \dots, A_{i,i-1}, A_{i,i+1}, \dots, A_{i,m}]$ (без диагонального блока) равно \tilde{n}_i . Определим $\tilde{n} = \sum_{i=1}^m \tilde{n}_i + m$ и предположим, что строки матрицы A упорядочены таким образом, что в каждой матрице A_i ненулевые строки идут первыми. Тогда локальная T_{ii} и глобальная

T матрицы агрегирования задаются как

$$T_{ii} = \begin{pmatrix} I_i & 0 \\ 0 & e_i \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} T_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & T_{mm} \end{pmatrix}, \quad T_{ii} \in \mathbf{R}^{n_i \times (\tilde{n}_i + 1)}$$

где $e_i = (1, \dots, 1)^T \in \mathbf{R}^{n_i - \tilde{n}_i}$, I_i — единичная матрица.

Определим на “грубом” подпространстве агрегированную матрицу жесткости $\tilde{A} = T^T A T \in \mathbf{R}^{\tilde{n} \times \tilde{n}}$ и переобуславливатель \tilde{B} для нее. Матрица $B_2 = T \tilde{B} T^T$ — переобуславливатель в пространстве агрегированных векторов $\tilde{V} = \{v \in \mathbf{R}^n : v = T \tilde{v}, \tilde{v} \in \mathbf{R}^{\tilde{n}}\}$.

Теорема 1.3. Пусть Ω разбита на m налегающих подобластей регулярной формы Ω_i с шириной минимального налегания δ и диаметром H , триангуляция Ω квазиравномерна в области налегания, расширенной на один сеточный слой, коэффициент $\rho(x)$ гетерогенен в области налегания подобластей и гладок во внутренних (неналегающих) частях подобластей: $\rho_{1,i} \leq \rho(x) \leq \rho_{2,i}$, $x \in \Omega_{i,int}$, и пусть \tilde{B} и B_{ii} , $i = 1, \dots, m$, — переобуславливатели для \tilde{A} и A_{ii} , соответственно, с константами эквивалентности $0 < \alpha_1 \leq \alpha_2$. Тогда для числа обусловленности матрицы $B_h A$ верна оценка:

$$\text{Cond}(B_h A) \leq 2 \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \left(1 + 2C \max_{1 \leq i \leq m} \left(\frac{\rho_{2,i}}{\rho_{1,i}} \right) \frac{H}{\delta} \right).$$

Здесь и далее c , C (с индексами и без индексов) будут обозначать некоторые положительные константы, не зависящие от параметров задачи, а выражение $A \sim B$ будет обозначать спектральную эквивалентность матриц A и B с константами, не зависящими от размеров матриц, или приближенное равенство или пропорциональность величин A и B .

На практике оказалось, что число обусловленности не зависит от гетерогенности коэффициента не только в зоне налегания, но и внутри подобластей. Отметим, что можно использовать более экономичный вариант переобуславливателя $B = B_1 + B_2(I - AB_1)$, который при выборе $\tilde{B} = \tilde{A}^{-1}$ и соответствующей коррекции начального приближения, $u_0 := u_0 + B_2(f - Au_0)$, оказывается эквивалентным B_h .

Тип переобуславливателя \tilde{B} зависит от конкретного приложения. В двумерном случае достаточно использовать прямую факторизацию матрицы \tilde{A} , поскольку ее размерность не велика, а методы факторизации являются весьма эффективными для матриц с двумерными графами, как показано в разделе 1.1. В трехмерном случае можно использовать методы неполной факторизации. При параллельных расчетах для переобуславливания \tilde{A} удобно применить несколько итераций BSOR, где блоки получены жадным алгоритмом расцветивания и переупорядочивания строк и столбцов. Последний подход

оказался чрезвычайно удобным технологически, поскольку параллельная версия переобуславливателя использует те же процедуры межпроцессорного обмена, что и процедура умножения матрицы A на вектор. Представленные численные эксперименты подтверждают теоретические оценки и показывают параллельную эффективность метода при решении неструктурированных систем.

Основные результаты **первой главы** состоят в следующем: (а) экспериментально исследована арифметическая сложность известных технологий решения неструктурированных систем; (б) представлен новый метод эффективного решения систем с матрицами тензорного ранга 2; (в) рассмотрена и протестирована технология формирования блочных переобуславливателей для неструктурированных задач с анизотропным коэффициентом диффузии; (г) предложен и исследован теоретически и экспериментально метод агрегирования, удобный для параллелизации и применимый для задач с гетерогенными коэффициентами, аппроксимированных на неструктурированных сетках, доказана универсальность метода по отношению к гетерогенности диффузионного коэффициента.

Доступные методы решения неструктурированных систем позволяют использовать полностью неструктурированные симплициальные сетки в адаптивных технологиях приближенного решения краевых задач, которые, в свою очередь, открывают путь к анизотропной адаптации. Это расширяет границы современных адаптивных технологий, поскольку позволяет эффективно аппроксимировать решения с анизотропными свойствами на сетках, близких к оптимальным.

Во второй главе, состоящей из пяти разделов, рассматриваются свойства оптимальных симплициальных сеток, а также свойства и методы построения их аппроксимаций, квази-оптимальных сеток. В разделах последовательно исследуются асимптотические свойства интерполяционной ошибки на оптимальных и квази-оптимальных сетках; предлагается адаптивный алгоритм построения квази-оптимальных сеток на основе восстановления гессиана сеточной функции и излагается новый метод восстановления, обеспечивающий локальную сходимость гессиана для задач с особенностями; рассматривается управление адаптацией в рамках предложенного алгоритма и дается теоретический базис для вывода оценок ошибки на сетках с управляемой адаптацией. Последние два раздела посвящены важным технологическим компонентам трехмерного адаптивного алгоритма: для уменьшения аппроксимационной ошибки в областях с криволинейной границей предлагается кусочно-квадратичная реконструкция дискретной границы, порождаемой САПР технологиями; для ускорения построения трехмерных квази-оптимальных сеток рассматривается новая параллельная технология генерации адаптивных тетраэдральных сеток и эффективного решения сеточных систем.

В разделе 2.1 представлен теоретический анализ оптимальных и квази-оптимальных

сеток, принадлежащих классу конформных симплицальных разбиений области $\bar{\Omega}$.

Определение 2.1. Пусть задана $u \in C^0(\bar{\Omega})$ и оператор $\mathcal{P}_{\Omega_h} : C^0(\bar{\Omega}) \rightarrow P_1(\Omega_h)$ — проектор на пространство непрерывных кусочно-линейных функций $P_1(\Omega_h)$. Сетка $\Omega_h^{opt}(N_T, u)$, состоящая из не более чем N_T элементов, называется оптимальной, если она — решение оптимизационной задачи

$$\Omega_h^{opt}(N_T, u) = \arg \min_{\Omega_h : \mathcal{N}(\Omega_h) \leq N_T} \|u - \mathcal{P}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)}.$$

Здесь $\mathcal{N}(\Omega_h)$ обозначает число симплексов в Ω_h .

В качестве оператора \mathcal{P}_{Ω_h} могут выступать, например, оператор P_1 -интерполяции \mathcal{I}_{Ω_h} или конечно-элементная аппроксимация краевой задачи.

Большинство теоретических результатов, представленных ниже, основано на предположении, что функция $u \in C^2(\bar{\Omega})$, а $\mathcal{P}_{\Omega_h} = \mathcal{I}_{\Omega_h}$ — оператор интерполяции. Однако постоянные, входящие в наши оценки ошибок, не зависят от действительного значения C^2 -нормы u . Это позволяет применять оценки для функций, близких к функциям с характерными для краевых задач особенностями. Если $\mathcal{P}_{\Omega_h} \neq \mathcal{I}_{\Omega_h}$, то теоретическое обоснование базируется на связи между $\|u - \mathcal{P}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)}$ и $\|u - \mathcal{I}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)}$.

При определенных предположениях на оператор \mathcal{P}_{Ω_h} можно доказать существование оптимальных сеток в двумерном случае.

Теорема 2.3. Пусть $u \in C^0(\bar{\Omega})$ и $\|u - \mathcal{P}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)}$ — непрерывный функционал от координат сеточных узлов, т.е.

$$\left| \|u - \mathcal{P}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)} - \|u - \mathcal{P}_{\Omega_h^\varepsilon} u\|_{L_\infty(\Omega)} \right| \leq C(u)\varepsilon,$$

где Ω_h^ε — триангуляция, полученная любым ε -возмущением узлов некоторой конформной триангуляции Ω_h . Кроме этого, пусть проектор \mathcal{P}_{Ω_h} удовлетворяет неравенству

$$\|u - \mathcal{P}_{\Omega_h^2} u\|_{L_\infty(\Omega)} \leq \|u - \mathcal{P}_{\Omega_h^1} u\|_{L_\infty(\Omega)}$$

для любой триангуляции Ω_h^2 , являющейся иерархическим разбиением любой триангуляции Ω_h^1 . Тогда оптимальная сетка существует.

Если существование оптимальной сетки доказано только в двумерном случае, то ее свойства проанализированы как в двумерном ($d = 2$), так и в трехмерном ($d = 3$) случаях.

Теорема 2.4. Пусть гессиан H функции $u \in C^2(\bar{\Omega})$ невырожден в Ω , и пусть для любого симплекса $\Delta \in \Omega_h^{opt}$ выполняется следующая оценка:

$$\|H_{ps} - (H_\Delta)_{ps}\|_{L_\infty(\Delta)} < q_\Delta |\lambda_1(H_\Delta)|, \quad 0 < q_\Delta \leq q < 1, \quad p, s = 1, \dots, d,$$

где $H_\Delta = H(\arg \max_{x \in \Delta} |\det H(x)|)$, $\lambda_1(H_\Delta)$ — ближайшее к 0 собственное значение H_Δ . Тогда

$$C(q) \left(\frac{|\Omega|_{|H|}}{\mathcal{N}(\Omega_h^{opt})} \right)^{2/d} \leq \|u - \mathcal{I}_{\Omega_h^{opt}} u\|_{L_\infty(\Omega)}$$

Здесь $|\Omega|_{|H|}$ обозначает объем области Ω в метрике $|H|$, описанной ниже.

Верхняя граница для $\|u - \mathcal{I}_{\Omega_h^{opt}} u\|_{L_\infty(\Omega)}$ аналогична нижней и доказана в Теореме 2.8 через оценку ошибки на квази-оптимальных сетках. Определение оптимальных сеток допускает обобщение на случай L_p -нормы:

Определение 2.6. Пусть заданы $u \in C^0(\bar{\Omega})$ и $p \in]0, +\infty]$. Сетка $\Omega_h^{opt}(N_T, u)$, состоящая из не более, чем N_T элементов, называется оптимальной по отношению к L_p -норме, если она — решение оптимизационной задачи

$$\Omega_h^{opt}(N_T, u) = \arg \min_{\Omega_h: \mathcal{N}(\Omega_h) \leq N_T} \|u - \mathcal{P}_{\Omega_h} u\|_{L_p(\Omega)}.$$

Теорема 2.7. Пусть выполнены условия Теоремы 2.4. Для случая незнакоопределенного гессиана H предположим дополнительно существование положительных констант c_0, c_1 , таких, что для любого симплекса $\Delta \subset \Omega_h^{opt}$ верно $c_0(H_\Delta \zeta, \zeta) \leq (H(x)\zeta, \zeta) \leq c_1(H_\Delta \zeta, \zeta) \forall \zeta \in \mathbf{R}^d$. Тогда для оптимальных по отношению к L_p -норме сеток справедлива оценка

$$C(q, c_0) \frac{|\Omega|_{|\bar{H}|}^{\frac{d+2p}{pd}}}{\mathcal{N}^{\frac{2}{d}}(\Omega_h^{opt})} \leq \|u - \mathcal{I}_{\Omega_h^{opt}} u\|_{L_p(\Omega)}, \quad |\bar{H}| := (\det |H|)^{-1/(2p+d)} |H|.$$

Приемлемыми аппроксимациями оптимальных сеток являются сетки, квази-равномерные в некоторой метрике. Определим качество $Q_G(\Omega_h)$ сетки Ω_h как меру ее равномерности в заданной непрерывной метрике G . Пусть $|e|_G$ — объем симплекса e в метрике G , а $|\partial\partial e|_G$ — суммарная длина его ребер в метрике G . Тогда $0 < Q_G(\Omega_h) \leq 1$ задается через качество элементов $Q_G(e)$:

$$Q_G(\Omega_h) = \min_{e \in \Omega_h} Q_G(e), \quad Q_G(e) = S_d \frac{|e|_G}{|\partial\partial e|_G^d} F \left(\frac{|\partial\partial e|_G}{P_d h^*} \right),$$

где

$$S_2 = 12\sqrt{3}, \quad P_2 = 3, \quad h^* = \sqrt{\frac{4|\Omega_h|_G}{\sqrt{3}\mathcal{N}(\Omega_h)}}, \quad (d = 2),$$

$$S_3 = 6\sqrt[4]{2}, \quad P_3 = 6, \quad h^* = \sqrt[3]{\frac{12|\Omega_h|_G}{\sqrt{2}\mathcal{N}(\Omega_h)}}, \quad (d = 3),$$

и $|\Omega_h|_G = \sum_{e \in \Omega_h} |e|_G$ — объем расчетной области в метрике G . Таким образом, если качество сетки достигает 1, то она состоит из равносторонних в метрике G симплексов диаметра h^* . Сетки с качеством $Q_G(\Omega_h) \sim 1$ называются G -квази-равномерными.

Пусть H — невырожденный гессиан функции $u \in \mathcal{C}^2(\bar{\Omega})$ и $H = W^T \Lambda W$ — его спектральное разложение с ортонормальной матрицей W и диагональной матрицей $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_i\}$, $i = 1, \dots, d$, ($|\lambda_1| \leq \dots \leq |\lambda_d|$). Определим метрический тензор (в дальнейшем просто метрика) $|H| = W^T |\Lambda| W$. Основным конструктивным результатом является утверждение о том, что $|H|$ -квази-равномерная сетка является квази-оптимальной, т.е. аппроксимирует оптимальную сетку.

Теорема 2.8. Пусть гессиан H функции $u \in \mathcal{C}^2(\bar{\Omega})$ невырожден в Ω , и пусть Ω_h — $|H|$ -квази-равномерная сетка с N_T элементами, такая, что $Q_{|H|}(\Omega_h) > Q_0$. Далее, пусть для симплекса $\Delta \in \Omega_h$, где достигается $\|u - \mathcal{I}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)}$, выполняется оценка:

$$\|H_{ps} - (H_\Delta)_{ps}\|_{L_\infty(\Delta)} < q_\Delta |\lambda_1(H_\Delta)|, \quad 0 < q_\Delta \leq q < 1, \quad p, s = 1, \dots, d,$$

где $H_\Delta = H(\arg \max_{x \in \Delta} |\det H(x)|)$, $\lambda_1(H_\Delta)$ — ближайшее к 0 собственное значение H_Δ . Тогда Ω_h является квази-оптимальной сеткой, т.е.

$$\|u - \mathcal{I}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)} \leq C(Q_0, q) \|u - \mathcal{I}_{\Omega_h}^{\text{opt}} u\|_{L_\infty(\Omega)},$$

причем $\|u - \mathcal{I}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)} \leq C(Q_0, q) \left(\frac{|\Omega| |H|}{N_T} \right)^{2/d}$.

Для проекторов \mathcal{P}_{Ω_h} , удовлетворяющих $\|u - \mathcal{P}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)} \leq \hat{C} \|u - \mathcal{I} u\|_{L_\infty(\Omega)}$, оценка ошибки преобразуется к виду

$$\|u - \mathcal{P}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)} \leq \hat{C} C(Q_0, q) \left(\frac{|\Omega| |H|}{N_T} \right)^{2/d}.$$

В разделе 2.2 рассмотрены основные технологии адаптивного алгоритма построения квази-оптимальных сеток: представлены способы восстановления сеточного гессиана и их анализ, методика построения сеток, квази-равномерных в заданной метрике, а также приведен сам адаптивный алгоритм. Для случая минимизации ошибки кусочно-линейной интерполяции гладкой функции рассмотрен механизм сходимости этого алгоритма.

Как правило, гессиан $H(x)$ является неизвестной тензорной функцией. На практике используется его приближение $H^h = \{H_{ps}^h\}_{p,s=1}^d$, $H_{ps}^h \in P_1(\Omega_h)$, восстановленное в узлах сетки из сеточной функции $u^h = \mathcal{P}_{\Omega_h} u \in P_1(\Omega_h)$ следующим образом. Для внутреннего узла a_i

$$\int_{\sigma_i} H_{ps}^h(a_i) v^h dx = - \int_{\sigma_i} \frac{\partial u^h}{\partial x_p} \frac{\partial v^h}{\partial x_s} dx \quad \forall v^h \in P_1(\sigma_i), \quad v^h = 0 \text{ на } \partial\sigma_i,$$

где суперэлемент σ_i — объединение симплексов с общим узлом a_i . В граничных узлах $H_{ps}^h(a_i)$ — взвешенные экстраполяции значений с близлежащих внутренних узлов.

Теорема 2.11. Пусть $u \in C^2(\bar{\Omega})$, $u^h = \mathcal{P}_{\Omega_h} u$, H — гессиан u , а H^h — восстановленный дискретный гессиан. Более того, пусть для любого суперэлемента $\sigma \in \Omega_h$, ассоциированного с каким-то узлом a , выполняются следующие оценки:

$$\|H_{ps} - H_{\sigma, ps}\|_{L_\infty(\sigma)}, \sigma < \delta, \quad |H_{ps}^h(a) - H_{\sigma, ps}| < \varepsilon,$$

где $H_\sigma = H(x_\sigma)$ и $x_\sigma = \arg \max_{x \in \sigma} |\det(H(x))|$. Тогда для ε и δ достаточно малых по отношению к минимальному собственному значению $|H_\sigma|$, $|H^h|$ -квази-равномерная сетка Ω_h ($Q_{|H^h|, N_T}(\Omega_h) \geq Q_0$) является также и $|H|$ -квази-равномерной: $Q_{|H|, N_T}(\Omega_h) \geq C Q_0$ где постоянная C не зависит от N_T и u .

Теорема 2.11 утверждает, что при некоторых предположениях достаточным условием квази-оптимальности является $|H^h|$ -квази-равномерность. Первое предположение означает малые вариации гессиана на любом суперэлементе σ , что достигается на сетках с большим N_T , а второе предположение — требование аппроксимации гессиана в узлах, что подразумевает малую градиентную ошибку для u^h . Малая градиентная ошибка не характерна для решений с особенностями. Для восстановления дискретного гессиана в случае негладких функций мы предлагаем другое определение его компонент \hat{H}_{ps}^h , удовлетворяющих второму предположению в более слабой норме.

Определение 2.12. Триангуляция Ω_h удовлетворяет условию **A**, если для любого внутреннего суперэлемента существует аффинное отображение $\mathcal{F}_i = \mathcal{S}_i \circ \mathcal{R}_i$ такое, что $\mathcal{F}_i(\sigma_i)$ — регулярный суперэлемент диаметра 1, для которого радиус наибольшей вписанной сферы $O(1)$. Здесь \mathcal{S}_i и \mathcal{R}_i обозначают матрицы масштабирования и вращения, соответственно.

Фактически, условие **A** — требование локального подобия форм соседних симплексов. Пусть для узла a_i сетки, удовлетворяющей условию **A**, \hat{B}_i обозначает наибольшую сферу с центром $\mathcal{F}_i(a_i)$, вписанную в $\mathcal{F}_i(\sigma_i)$. В силу регулярности $\mathcal{F}_i(\sigma_i)$, радиус \hat{R}_i сферы $O(1)$. Вводя полярные координаты с центром в $\mathcal{F}_i(a_i)$, мы можем определить гладкую функцию $\hat{v}_i = 1 - r^2/\hat{R}_i^2$ на \hat{B}_i . Линейная оболочка функций $v = \alpha \mathcal{F}_i^{-1}(\hat{v}_i)$, $\alpha \in \mathbf{R}^1$, задает пространство пробных функций V_i . Отметим, что $v \in V_i$ означает $v \in C^2(B_i)$, $v = 0$ на ∂B_i , где $B_i = \mathcal{F}_i^{-1}(\hat{B}_i)$, $|B_i| \gtrsim |\sigma_i|$. Для повернутого симплекса $\Delta_{\mathcal{R}} = \mathcal{R}\Delta$ можно определить его размеры $h_{\mathcal{R}, k} = \max_{x, y \in \Delta_{\mathcal{R}}} |(x)_k - (y)_k|$, $k = 1, \dots, d$.

Во внутреннем узле сетки a_i компоненты \hat{H}_{rs}^h удовлетворяют равенству

$$\int_{B_i} \hat{H}_{rs}^h(a_i) v^h dx = \int_{B_i} u^h \frac{\partial^2 v^h}{\partial x_s \partial x_r} dx - \int_{\partial B_i} u^h \frac{\partial v}{\partial x_s} n_r dt, \quad \forall v^h \in V_i.$$

В граничных узлах $\hat{H}_{rs}^h(a_i)$ — взвешенные экстраполяции значений с близлежащих внутренних узлов.

Теорема 2.15. Пусть заданы функция $u \in W_p^1(\Omega) \cap W_1^2(\Omega)$, $p > d$, и внутренний суперэлемент σ_i , удовлетворяющий условию **A**. Предположим, что на симплексах $\Delta_i \subset \sigma_i$ градиентная ошибка для функции наилучшей линейной аппроксимации $\overline{u_{\mathcal{R}}}$ функции $u_{\mathcal{R}} = u(\mathcal{R}_{\Delta}(x))$ изотропно распределена:

$$\max_{|\alpha|=1} h_{\mathcal{R}}^{\alpha} \|\partial^{\alpha}(u_{\mathcal{R}} - \overline{u_{\mathcal{R}}})\|_{L_p(\Delta_{\mathcal{R}})} \leq C_B \min_{|\alpha|=1} h_{\mathcal{R}}^{\alpha} \|\partial^{\alpha}(u_{\mathcal{R}} - \overline{u_{\mathcal{R}}})\|_{L_p(\Delta_{\mathcal{R}})},$$

причем имеет место сходимость $\overline{u_{\mathcal{R}}}$ к $u_{\mathcal{R}}$:

$$h_{\mathcal{R}}^{\alpha} \|\partial^{\alpha}(u_{\mathcal{R}} - \overline{u_{\mathcal{R}}})\|_{L_p(\Delta_{\mathcal{R}})} \leq C_C h_{\mathcal{R}}^{\alpha+\beta}, \quad |\alpha| = 1, \beta > 0,$$

где β — параметр дополнительной гладкости u . Кроме того, пусть на σ_i дифференциальный гессиан H отклоняется незначительно от своего среднего \bar{H} : $\|H_{rs} - \bar{H}_{rs}\|_{L_1(\sigma_i)} \leq \delta$, $r, s = 1, \dots, d$. Тогда дискретный гессиан \hat{H}_{rs} , восстановленный из кусочно-линейного интерполянта $\mathcal{I}_{\sigma_i}^h u$, сходится к дифференциальному гессиану:

$$\|H_{rs} - \hat{H}_{rs}^h\|_{L_1(B_i)} \lesssim \delta + C_B C_C |\sigma_i|^{1-1/p} \min_{k=1, \dots, d} h_{\mathcal{R}_{i,k}}^{\beta-1},$$

причем оценку можно упростить: $\|H_{rs} - \hat{H}_{rs}^h\|_{L_1(B_i)} \lesssim \delta + C_B C_C \min_{k=1, \dots, d} h_{\mathcal{R}_{i,k}}^{\beta-1/p}$.

Отметим, что последняя оценка означает локальную сходимость дискретного гессиана в слабой норме, т.к. для любой триангуляции, адаптированной к функции с невырожденным гессианом, $\lim_{N(\Omega_h) \rightarrow \infty} \max_{\sigma_i} \min_{k=1, \dots, d} h_{\mathcal{R}_{i,k}} = 0$. Важность теоремы в том, что это первое утверждение, где локальная сходимость восстановленного гессиана показана на анизотропных сетках и для функций с особенностями. Примеры применения теоремы рассмотрены в [8].

Пусть G — непрерывная кусочно-линейная метрика, заданная через значения своих компонент в узлах сетки. Построение G -квази-равномерной триангуляции, состоящей из приблизительно N_T симплексов, — ключевой элемент технологии адаптивного построения сеток на основе восполнения дискретного гессиана сеточного решения. Симплексы сетки должны как можно меньше отличаться от равностороннего (в метрике G) симплекса с длиной ребра h^* , чей объем равен $|\Omega|_G/N_T$. Алгоритм состоит в генерации последовательности сеток $\Omega_h^0, \Omega_h^{\frac{1}{l_{\max}}}, \dots, \Omega_h^{\frac{l}{l_{\max}}}, \dots, \Omega_h^1$, такой, что

$$Q_{G, N_T}(\Omega_h^0) \leq Q_{G, N_T}(\Omega_h^{\frac{1}{l_{\max}}}) \leq \dots \leq Q_{G, N_T}(\Omega_h^{\frac{l}{l_{\max}}}) \leq \dots \leq Q_{G, N_T}(\Omega_h^1).$$

Каждая сетка — член последовательности — является локальной модификацией предыдущей сетки, не уменьшающей ее качества по отношению к h^* в G и представляющей

собой следующие действия. Сначала выбирается симплекс с наихудшим качеством. Затем формируется множество симплексов текущей сетки, имеющих ненулевое пересечение с выбранным симплексом. К созданному множеству пробуются ряд топологических операций, которые сохраняют его границу и могут повысить локальное качество сетки. Та виртуальная операция, которая повышает локальное качество, выполняется реально и приводит к очередной сетке $\Omega_h^{\frac{l+1}{\max}}$. Если ни одна из операций не повышает качества сетки, то рассматриваемый симплекс на некоторое время удаляется (фиктивно) из сетки, и операции модификации пробуются к множеству, ассоциированному со следующим симплексом наихудшего качества. Подобная гибкость обеспечивает устойчивость алгоритма к появлению неразрешимых ситуаций. Важным технологическим преимуществом этого алгоритма является то, что он может быть реализован как черный ящик.

Алгоритм генерации квази-оптимальных сеток

Шаг инициализации. Построить начальную сетку Ω_h . Выбрать качество конечной сетки Q_0 , $Q_0 < 1$, и нужное число N_T сеточных элементов.

Итерационный Шаг.

1. Вычислить сеточное решение $u^h = \mathcal{P}_{\Omega_h} u$.
2. Восстановить дискретный гессиан H^h сеточной функции u^h . Если $Q_{|H^h|, N_T}(\Omega_h) > Q_0$, остановиться.
3. Построить следующую сетку $\tilde{\Omega}_h$ такую, что $Q_{|H^h|, N_T}(\tilde{\Omega}_h) > Q_0$.
4. Положить $\Omega_h := \tilde{\Omega}_h$ и перейти к 1.

Структура алгоритма предполагает выполнение четырех совершенно независимых друг от друга шагов, среди которых шаги, отвечающие за построение адаптивной сетки, не зависят от данных конкретной задачи и могут быть реализованы как технологии черного ящика. Обмены данными между шагами минимальны, поскольку представляют собой лишь базовую информацию о сетке и значениях дискретного решения или гессиана в узлах сетки.

Вопрос анализа сходимости адаптивного алгоритма для решения краевых задач с особенностями остается открытым. Для случая минимизации ошибки кусочно-линейной интерполяции гладкой функции рассмотрен механизм сходимости адаптивного алгоритма. Теорема 2.18 утверждает, что при определенных условиях в ходе адаптивных итераций градиентная ошибка уменьшается и восстановленный гессиан сходится поточечно к дифференциальному, обеспечивая рост качества сетки $Q_{|H|, N_T}(\tilde{\Omega}_h)$, и, следовательно, уменьшение интерполяционной ошибки.

Одно из основных преимуществ представленного алгоритма — простота управления адаптацией за счет модификации метрики — рассмотрено в **разделе 2.3**. Исследуются модификации $|\tilde{H}|$ метрики $|H|$, основанные на модификации собственных значений в ее спектральном разложении: $|H| = W^T |\Lambda| W$, $|\tilde{H}| = W^T |\tilde{\Lambda}| W$.

Теорема 2.19 Пусть $u \in C^2(\bar{\Omega})$, гессианы H и \tilde{H} — невырождены в Ω , $\tilde{\Omega}_h$ — $|\tilde{H}^h|$ -квази-равномерная сетка, $Q_{|\tilde{H}^h|}(\tilde{\Omega}_h) > Q_0$, а Ω_h — $|H^h|$ -квази-равномерная сетка, $Q_{|H^h|}(\Omega_h) > Q_0$. Кроме того, пусть для любого симплекса $\Delta \in \Omega_h$ и симплекса $\Delta^* \in \tilde{\Omega}_h$, где достигается $\|u - \mathcal{I}_{\tilde{\Omega}_h} u\|_{L_\infty(\Omega)}$, выполнены следующие оценки:

$$\|H_{ps} - (H_\Delta)_{ps}\|_{L_\infty(\Delta)} < q_\Delta \lambda_1(|H_\Delta|), \quad \|\tilde{H}_{ps} - (\tilde{H}_\Delta)_{ps}\|_{L_\infty(\Delta)} < q_\Delta \lambda_1(|\tilde{H}_\Delta|),$$

для $0 < q_\Delta \leq q < 1$ и $p, s = 1, \dots, d$. Если $H_{\Delta^*}^h$ — не знакоопределенный тензор, потребуем дополнительно, чтобы $\text{Cond}(\Lambda_{\Delta^*} \tilde{\Lambda}_{\Delta^*}^{-1}) q_{\Delta^*} \leq q$. Тогда

$$\|u - \mathcal{I}_{\tilde{\Omega}_h} u\|_{L_\infty(\Omega)} \leq \alpha(H, \tilde{H}) \|u - \mathcal{I}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)}, \quad \alpha(H, \tilde{H}) = C(Q_0, q) \max_{x \in \Delta^*} \rho(|\Lambda \tilde{\Lambda}^{-1}|) \left(\frac{|\Omega|_{|\tilde{H}|}}{|\Omega|_{|H|}} \right)^{2/d},$$

где $\rho(A)$ обозначает спектральный радиус матрицы A .

В качестве примеров метода управления рассматривается построение изотропной метрики, для которой $\tilde{\lambda}_i = \arg \max\{|\lambda_1|, \dots, |\lambda_d|\}$ и $\text{Cond}(|\Lambda_{\Delta^*} \tilde{\Lambda}_{\Delta^*}^{-1}|) = |\lambda_d/\lambda_1|$, а также ослабление (усиление) влияния особенности за счет весовой функции $\omega(x) > 0$, при котором $\tilde{\lambda}_i = \lambda_i \omega(x)$, $i = 1, \dots, d$, и $\text{Cond}(|\Lambda_{\Delta^*} \tilde{\Lambda}_{\Delta^*}^{-1}|) = 1$. В последнем случае верно

Следствие 2.20. Пусть $\omega \leq 1$. Тогда верна следующая оценка:

$$\|u - \mathcal{I}_{\tilde{\Omega}_h} u\|_{L_\infty^\omega(\Omega)} \leq C(Q_0, q) \|u - \mathcal{I}_{\Omega_h} u\|_{L_\infty(\Omega)}, \quad \|u\|_{L_\infty^\omega(\Omega)} := \sup_{x \in \Omega} |\omega(x) u(x)|.$$

Таким образом, локальное подавление гессиана и результирующая релаксация сгущения адаптивной сетки приводят к оптимальным оценкам в весовой норме $\|\cdot\|_{L_\infty^\omega(\Omega)}$.

В **разделе 2.4** обсуждаются сложности в адаптации, порождаемые дискретным заданием границы расчетной трехмерной области, и предлагается и анализируется метод квадратичного восполнения кусочно-линейной поверхности, частично решающий проблему недостаточного разрешения границы.

Во многих прикладных расчетах граничные поверхности описываются треугольными сетками в пространстве (характерными для систем САПР). Неточность в представлении кусочно-гладкой поверхности существенно влияет на уменьшение ошибки в ходе адаптивных итераций, поэтому желательно повысить точность аппроксимации границы за счет восстановления поверхности более высокого порядка, чем заданная кусочно-линейная дискретизация. Восстановление базируется на применении формулы Грина для вычисления гессиана непрерывной кусочно-линейной функции φ_h , представляющей собой интерполянт неизвестной функции φ на суперэлементе $\hat{\sigma}_t$, содержащем треугольник $\hat{\Gamma}_t$.

Квадратичная экстраполяция φ_2 функции φ_h с гессианом H^{φ_2} использует многоточечную формулу Тейлора $\varphi_2(\xi) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (H^{\varphi_2}(\xi - a_i), (\xi - a_i)) p_i(\xi)$, где a_1, a_2, a_3 — вершины Γ_t , а $p_i(\xi)$ — кусочно-линейная функция, такая что $p_i(a_j) = \delta_{ij}$.

Теорема 2.22. Пусть $\hat{\sigma}_t$ — квази-равномерная триангуляция с шагом h , H^φ и H^h — дифференциальный и дискретный гессианы функций φ и φ_h соответственно, и

$$\|H_{ps}^\varphi - H_{\sigma^t, ps}^\varphi\|_{L_\infty(\hat{\sigma}^t)} < \delta, \quad \|\vec{\nabla}(\varphi - \mathcal{I}_{\hat{\sigma}^t}\varphi)\|_{L_2(\hat{\sigma}^t)} < \epsilon.$$

Тогда квадратичное восполнение φ_2 функции φ_h , удовлетворяет оценке

$$\|\varphi - \varphi_2\|_{L_\infty(\hat{\Gamma}_t)} \leq C(\epsilon + \delta h^2),$$

где константа C не зависит от δ , ϵ , h и φ .

В частности, если φ принадлежит $\mathcal{C}^3(\hat{\sigma}^t)$, то $\epsilon \sim h^3$, $\delta \sim h$ и оценка аппроксимации границы становится $\|\varphi - \varphi_2\|_{L_\infty(\hat{\Gamma}_t)} \leq Ch^3$, что на порядок выше, чем у φ_h : $\|\varphi - \varphi_h\|_{L_\infty(\hat{\Gamma}_t)} \leq Ch^2$. В силу этого, влияние неточности задания границы на аппроксимационную ошибку существенно уменьшается.

В разделе 2.5 излагается параллельный метод адаптивного построения квази-оптимальных сеток, включающий как параллельную генерацию сеток, так и параллельное решение сеточных задач, а также рассматривается влияние управления адаптацией на параллельное ускорение. Поскольку все этапы адаптивного алгоритма, приведенного **в разделе 2.2**, технологически независимы и обмениваются минимальными данными (сетка и решение), они могут распараллеливаться автономно. Процедура восстановления дискретного гессиана сеточного решения легко параллелизуема, поскольку является локальной по суперэлементам. Технология параллельного решения сеточных систем методом агрегирования обсуждена **в разделе 1.4**. Вопросы параллелизации генерации трехмерных $|H^h|$ -квази-равномерных сеток рассмотрены **в разделе 2.5**. Там же представлено детальное экспериментальное исследование адаптивного алгоритма в применении к двум трехмерным краевым задачам с анизотропными особенностями.

Основные результаты **второй главы** состоят в следующем: (а) представлен теоретический анализ оптимальных симплициальных сеток (существование и асимптотические свойства ошибки интерполяции); (б) доказаны оптимальные свойства ошибки на их приближениях (квази-оптимальных сетках); (в) представлен и проанализирован новый способ восстановления гессиана сеточной функции; (г) предложен теоретический базис для вывода оценок ошибки на сетках с управляемой адаптацией; (д) предложен, проанализирован и протестирован новый метод квадратичного восполнения кусочно-линейной поверхности, повышающий разрешение дискретной границы; (е) рассмотрен и проанализирован параллельный метод адаптивного построения квази-оптимальных сеток и исследовано влияние управления метрикой на параллельное ускорение.

Использование неконформных аппроксимаций дает дополнительные возможности для построения параллельных адаптивных технологий решения краевых задач. В третьей главе, состоящей из пяти разделов, рассматриваются блочные параллельные методы решения систем линейных уравнений, возникающих в некоторых прикладных неконформных аппроксимациях, и основанные на этих методах параллельные адаптивные технологии. Разбиение области на подобласти и использование нестыкующихся на границах подобластей сеток позволяет сформулировать адаптивную технологию, позволяющую строить сетки независимо по подобластям, т.е. параллельно. При этом основная тяжесть параллелизации переносится на создание эффективных параллельных технологий решения возникающих сеточных систем, чему посвящены первые два раздела главы. Формулировка и тестирование адаптивной технологии с использованием нестыкующихся сеток вынесены в третий раздел. Случай декомпозиции области со стыкующимися сетками рассмотрен в разделе 3.4, где предложен новый параллельный метод решения сеточных систем на основе мозаично-скелетонных аппроксимаций плотных матриц. Сужение класса симплициальных адаптивных сеток до иерархических локально сгущающихся сеток позволяет сформулировать в разделе 3.5 еще одну параллельную адаптивную технологию, основанную на многосеточном алгоритме. Используемые на практике консервативные смешанные конечно-элементные аппроксимации порождают системы уравнений, эквивалентные неконформным аппроксимациям, на которые и опирается разработанная технология.

В разделе 3.1 дается макро-гибридная формулировка краевых (диффузионных) задач на нестыкующихся сетках [15], а также общая технология параллельного итерационного решения соответствующих линейных систем. Аппроксимации на нестыкующихся сетках являются неконформными, поскольку используемые конечно-элементные пространства порождают разрывные на интерфейсах решения, которые не принадлежат пространству обобщенных решений $W_2^1(\Omega)$. Разобьем область Ω на m непересекающихся подобластей Ω_i регулярной формы и рассмотрим в Ω краевую задачу

$$-\nabla \cdot \rho \nabla u + \varepsilon u = f \text{ в } \Omega, \quad \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ на } \partial\Omega,$$

с кусочно-постоянным коэффициентом диффузии на подобластях Ω_i и малым параметром $\varepsilon > 0$, так что оператор задачи хорошо приближает оператор диффузии (наличие главных краевых условий не налагает дополнительных ограничений). Помимо диффузионных задач, такие уравнения возникают при моделировании потенциального обтекания, а также при решении уравнений Навье-Стокса проекционным методом.

Макро-гибридная конечно-элементная аппроксимация этого уравнения приводит к

системе линейных уравнений в седловой форме:

$$\begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}, \text{ или } \begin{bmatrix} A_1 & & 0 & B_1^T \\ & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & A_m & B_m^T \\ B_1 & \dots & B_m & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_m \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_m \\ 0 \end{bmatrix},$$

где блоки A_i — матрицы конечно-элементных аппроксимаций сужений оператора на Ω_i , B_i — матрицы склейки решений на интерфейсах между подобластями, обеспечивающие слабую непрерывность сеточных функций на интерфейсах, λ — вектор неизвестных множителей Лагранжа.

Для построения быстроходящегося итерационного алгоритма можно воспользоваться блочно-диагональным переобуславливателем $R = \begin{bmatrix} R_A & 0 \\ 0 & R_\lambda \end{bmatrix}$, для которого необходимо определить переобуславливатели в подобластях R_A и на интерфейсе R_λ для матриц A и $BA^{-1}B^T$, соответственно: $R_A \sim A$, $R_\lambda \sim BA^{-1}B^T$.

Переобуславливатель в подобластях R_A выберем блочно-диагональным с блоками R_i , переобуславливающими матрицы A_i порядка n_i . Отметим, что $A_i = \rho_i \mathring{A}_i + \varepsilon_i M_i$, где \mathring{A}_i и M_i — матрицы жесткости и масс в подобласти Ω_i . Пусть K_i — переобуславливатель для матрицы $\mathring{A}_i + \frac{1}{d_i^2} M_i$: $c_1 K_i \leq \mathring{A}_i + \frac{1}{d_i^2} M_i \leq c_2 K_i$, где $c_1 > 0$, d_i — диаметр подобласти регулярной формы Ω_i . Определим матрицу $P_i = w_{1,i} w_{1,i}^T$ через вектор $w_{1,i} = \alpha_i e_i$, $(M_i w_{1,i}, w_{1,i}) = 1$, $e_i = [1 \dots 1]^T \in \mathbf{R}^{n_i}$, $\alpha_i = \frac{1}{\sqrt{|\Omega_i|}}$.

Лемма 3.5. Пусть Ω_i^h — произвольная конформная сетка, $\varepsilon_i \leq \frac{c\rho_i}{d_i^2}$, $R_i^{-1} = \rho_i^{-1} K_i^{-1} + \varepsilon_i^{-1} P_i$, тогда $R_i \sim A_i$ с константами, зависящими от c_1 , c_2 и не зависящими от $\rho_i, \varepsilon_i, d_i, n_i$.

Таким образом, задача построения переобуславливателя R_i для оператора $-\nabla \cdot \rho \nabla + \varepsilon I$ в подобласти Ω_i диаметра d_i свелась к построению переобуславливателя для оператора $-\Delta + I$ на растянутой до диаметра 1 сетке $\hat{\Omega}_i^h$, что осуществимо многими способами (см. раздел 1.1). Технология построения переобуславливателя в подобластях R_A обоснована.

В разделе 3.2 рассматриваются интерфейсные переобуславливатели R_λ , являющиеся ключевыми аспектами решения седловых систем. Строятся два типа переобуславливателей, применимых к широкому классу конформных сеток в подобластях и универсальных по отношению к скачку коэффициента диффузии ρ , количеству подобластей m и малости коэффициента реакции ε .

Пусть матрица $\tilde{B} \tilde{H} \tilde{B}^T$ спектрально эквивалентна матрице $BA^{-1}B^T$, однако эффективное решение системы с матрицей $\tilde{B} \tilde{H} \tilde{B}^T$ невозможно, в отличие от эффективного

умножения на эту матрицу. Определим интерфейсный переобуславливатель R_λ следующим образом (Ю.А.Кузнецов):

$$R_\lambda = \tilde{B}\tilde{H}\tilde{B}^T \left(I_\lambda - \prod_{j=1}^{L_\lambda} (I_\lambda - \beta_j \tilde{R}_\lambda^{-1} \tilde{B}\tilde{H}\tilde{B}^T) \right)^{-1},$$

что соответствует L_λ итерациям ричардсоновского процесса с нулевым начальным приближением. Если в качестве β_j выбрать чебышевские параметры, то число итераций L_λ , необходимых для $R_\lambda \sim \tilde{B}\tilde{H}\tilde{B}^T$, должно быть порядка $\sqrt{\nu}$, где ν — число обусловленности $\tilde{R}_\lambda^{-1} \tilde{B}\tilde{H}\tilde{B}^T$. Выбор матриц \tilde{B} и \tilde{H} базируется на предположении, что наряду с сетками Ω_i^h имеются разреженные сетки $\tilde{\Omega}_i^h$ (необязательно конформные), имеющие тот же след на $\Gamma_i = \partial\Omega_i$, что и Ω_i^h , но содержащие гораздо меньше узлов. Построение таких сеток, как правило, не является сложной задачей. Матрица \tilde{B} является аналогом матрицы B на сетках $\tilde{\Omega}_i^h$, а матрица \tilde{H} есть либо факторизованный аналог матрицы A на сетках $\tilde{\Omega}_i^h$, либо его переобуславливатель оптимального порядка вычислительной сложности. В диссертации приведены оценки арифметической сложности внутренних итераций для некоторых наиболее распространенных случаев сеток. Аналогично выводу переобуславливателя в подобластях R_i , воспользуемся следующим утверждением.

Лемма 3.6. Пусть разреженная сетка $\tilde{\Omega}_i^h$ такова, что для нее выполняется сеточный аналог теоремы о следах, а матрица $\tilde{K}_i = \tilde{K}_i^T > 0$ спектрально эквивалентна матрице $\tilde{A}_i + \frac{1}{d_i^2} \tilde{M}_i$, $\varepsilon_i \leq \frac{c\rho_i}{d_i^2}$, $\tilde{T}_i := [I_{\Gamma_i} \ 0] \in \mathbf{R}^{\tilde{n}_i \times n_{\Gamma_i}}$. Тогда для дополнения по Шуру матрицы $\tilde{A}_i \in \mathbf{R}^{\tilde{n}_i \times \tilde{n}_i}$, $\tilde{S}_{\Gamma_i} = \tilde{A}_{\Gamma_i} - \tilde{A}_{\Gamma_i I_i} \tilde{A}_{I_i}^{-1} \tilde{A}_{I_i \Gamma_i} \in \mathbf{R}^{n_{\Gamma_i} \times n_{\Gamma_i}}$, верно

$$\frac{1}{\rho_i} \tilde{T}_i \tilde{K}_i^{-1} \tilde{T}_i^T + \frac{1}{\varepsilon_i d_i} P_{\Gamma_i} \sim \tilde{S}_{\Gamma_i}^{-1},$$

где $P_{\Gamma_i} = w_{1,\Gamma_i} w_{1,\Gamma_i}^T$, $w_{1,\Gamma_i} = \beta_i e_{\Gamma_i}$, $(M_{\Gamma_i} w_{1,\Gamma_i}, w_{1,\Gamma_i}) = 1$, $e_{\Gamma_i} = [1 \dots 1]^T \in \mathbf{R}^{n_{\Gamma_i}}$, $\beta_i = \frac{1}{\sqrt{|\partial\Omega_i|}}$, M_{Γ_i} — интерфейсная матрица масс. Константы спектральной эквивалентности не зависят от ρ_i , ε_i , d_i , \tilde{n}_i .

С помощью леммы легко показать спектральную эквивалентность матриц $BA^{-1}B^T$ и $\tilde{B}\tilde{H}\tilde{B}^T = \sum_{k=1}^m B_{\Gamma_i} \left(\frac{1}{\varepsilon_i d_i} P_{\Gamma_i} + \frac{1}{\rho_i} \tilde{T}_i \tilde{K}_i^{-1} \tilde{T}_i^T \right) B_{\Gamma_i}^T$.

Легко обратимая матрица $\tilde{R}_\lambda = \sum_{i=1}^m B_{\Gamma_i} \left(\frac{1}{\varepsilon_i d_i} P_{\Gamma_i} + \frac{d_i}{\rho_i} M_{\Gamma_i}^{-1} \right) B_{\Gamma_i}^T$ введена во внутренние итерации для устранения зависимости величины ν от таких параметров задачи, как скачки коэффициента диффузии ρ_i , малость коэффициента реакции ε_i , большое число подобластей m , малый диаметр подобластей d_i .

Теорема 3.7. Пусть выполнены условия Леммы 3.6. Тогда число обусловленности ν матрицы $\tilde{R}_\lambda^{-1} \tilde{B}\tilde{H}\tilde{B}^T$ не зависит от ρ_i , ε_i , d_i , и пропорционально $\mu_i = \lambda_{n_{\Gamma_i}, \Gamma_i} / \lambda_{2, \Gamma_i}$, где

λ_{k,Γ_i} — собственные значения задачи $\tilde{S}_{\Gamma_i} w_{\Gamma_i} = \lambda_{k,\Gamma_i} M_{\Gamma_i} w_{\Gamma_i}$, \tilde{S}_{Γ_i} — дополнение по Шуру сеточной аппроксимации оператора $-\Delta$ на сетке $\tilde{\Omega}_i^h$.

Для случая квази-равномерных сеток с шагом h имеем $\lambda_{n_{\Gamma_i},\Gamma_i}/\lambda_{2,\Gamma_i} \sim d_i/h$, и для решения системы с матрицей $\tilde{B}\tilde{H}\tilde{B}^T$ с заданной точностью $O(1)$ необходимо выполнить $L_\lambda \sim \sqrt{d_i/h}$ внутренних чебышевских итераций, причем $L_\lambda \sim \sqrt{d_i/h}$ не зависит от параметров задачи $\rho_i, \varepsilon_i, m, d_i$.

Параллелизация внутреннего итерационного процесса аналогична параллелизации решения систем с переобуславливателем R_A : для этого достаточно распределить разреженные сетки в подобластях по тем же процессорам, что и исходные сетки. Дополнительная сложность привносится необходимостью решать системы с матрицей \tilde{R}_λ , что реализуется за счет решения некоторой каркасной задачи собиранием данных (одно число на подобласть) со всех процессоров на один, решением каркасной системы и распределением данных (одно число на подобласть) с выделенного процессора всем остальным.

Альтернативой внутреннему итерационному процессу может служить Дирихле-Дирихле переобуславливатель. Из Леммы 3.6, примененной к исходной сетке Ω_i^h , следует, что для интерфейсного блока верно:

$$BA^{-1}B^T = \sum_{i=1}^m B_i A_i^{-1} B_i^T = \sum_{i=1}^m B_{\Gamma_i} S_{\Gamma_i}^{-1} B_{\Gamma_i}^T \sim \sum_{i=1}^m \frac{1}{\varepsilon_i d_i} B_{\Gamma_i} P_{\Gamma_i} B_{\Gamma_i}^T + \hat{G},$$

где $\hat{G} = \sum_{i=1}^m B_{\Gamma_i} \left(\hat{A}_{\Gamma_i} - \hat{A}_{\Gamma_i I_i} \hat{A}_{I_i}^{-1} \hat{A}_{I_i \Gamma_i} \right)^{-1} B_{\Gamma_i}^T$, $\hat{A}_{\Gamma_i} - \hat{A}_{\Gamma_i I_i} \hat{A}_{I_i}^{-1} \hat{A}_{I_i \Gamma_i}$ — дополнение по Шуру для матрицы $\hat{A}_i = \hat{A}_i + \frac{1}{d_i^2} M_i$.

Теорема 3.8. Пусть сетка Ω_i^h такова, что для нее выполняется сеточный аналог теоремы о следах, а матрица $\hat{J} = \hat{J}^T > 0$ такова, что спектр матрицы $\hat{J}\hat{G}$ принадлежит отрезку $[c_1, c_2]$, $0 < c_1 < c_2$ и пусть

$$\hat{R}_\lambda = \sum_{i=1}^m \frac{1}{\varepsilon_i d_i} B_{\Gamma_i} P_{\Gamma_i} B_{\Gamma_i}^T + \hat{J}^{-1}.$$

Тогда $\hat{R}_\lambda \sim BA^{-1}B^T$. Константы спектральной эквивалентности не зависят от $\rho_i, \varepsilon_i, d_i, n_{\Gamma_i}, m$, но зависят от c_1, c_2 .

Вывод Дирихле-Дирихле переобуславливателя \hat{J} для \hat{G} является эмпирическим. В случае $\rho_i = 1, i = 1, \dots, m$:

$$\hat{J}_1 = \sum_{i=1}^m F_{\Gamma_i}^{-1} B_{\Gamma_i} \omega_{\Gamma_i} \left(\hat{A}_{\Gamma_i} - \hat{A}_{\Gamma_i I_i} \hat{A}_{I_i}^{-1} \hat{A}_{I_i \Gamma_i} \right) \omega_{\Gamma_i} B_{\Gamma_i}^T F_{\Gamma_i}^{-1},$$

$$F_{\Gamma_i} = \text{blockdiag}\{F_{\Gamma_i, j}\}, \quad F_{\Gamma_i, j} = B_{\Gamma_i, j} \omega_{\Gamma_i} B_{\Gamma_i, j}^T + B_{\Gamma_i^*, j^*} \omega_{\Gamma_i^*} B_{\Gamma_i^*, j^*}^T.$$

Здесь элементы диагональных матриц ω_{Γ_i} обратны к числу подобластей, которым принадлежит соответствующий узел на интерфейсе, Ω_{i^*} обозначает область, соседнюю с Ω_i , с общими гранями j и j^* , а $B_{\Gamma_i,j}$ — вклад грани j в интерфейсную матрицу B_{Γ_i} . Факторизация матрицы F_{Γ_i} недорога, поскольку F_{Γ_i} — разреженная матрица. Блочная конструкция переобуславливателя обеспечивает его легкую параллелизацию. Наличие матрицы F_{Γ_i} не усложняет параллелизации, поскольку она блочно-диагональна и оперирует исключительно с распределенными по процессорам данными. Рассмотрены также эмпирические обобщения метода на случай разрывных коэффициентов диффузии ρ_i .

Преимущество этого метода интерфейсного переобуславливания по сравнению с внутренним итерационным процессом в том, что он оперирует только с исходными сетками в подобластях. Его недостатками является отсутствие завершеного теоретического обоснования и необходимость решать системы с матрицами A_{I_i} в подобластях.

Сочетание параллельной итерационной технологии с адаптивной генерацией расчетных сеток независимо по подобластям порождает новый класс параллельных адаптивных алгоритмов, описанный в разделе 3.3. В дополнение к уже изложенному инструментарию (процедура решения и макро-гибридная дискретизация) предположим, что нам доступен адаптивный генератор симплицальных сеток в расчетной области, а также в подобластях-симплексах.

Адаптивный алгоритм параллельного решения краевых задач

Шаг инициализации. Построить начальную симплицальную сетку, задающую разбиение на $m \gg P$ подобластей Ω_i . Распределить (равномерно) подобласти по P процессорам. В каждой подобласти построить квази-равномерную сетку с примерно одинаковым числом элементов.

Итерационный Шаг.

1. Применить макро-гибридную аппроксимацию на основе сетки в подобласти и следа сеток из соседних подобластей.
2. Инициализировать переобуславливатель R , формируя локальные переобуславливатели и оценивая арифметическую нагрузку на каждой подобласти.
3. Найти оптимальное распределение подзадач по процессорам, основанное на балансировке суммарных загрузок процессоров.
4. Перераспределить подзадачи по процессорам согласно новому распределению.
5. Решить систему уравнений.
6. Адаптивно перестроить сетку в каждой подобласти независимо друг от друга и перейти к 1.

Оптимальное распределение подзадач по процессорам осуществляется решением следующей оптимизационной задачи: разбить массив нагрузок $Q = \{q_1, \dots, q_m\}$ на P подмножеств P_k таким образом, чтобы индекс балансировки $\min_{k=1, \dots, P} \sum_{i \in P_k} q_i / \max_{k=1, \dots, P} \sum_{i \in P_k} q_i$ был как можно ближе к 1. Эта задача может быть эффективно решена в предположении, что $m \gg P$. Предложенная технология была успешно протестирована на ряде краевых задач.

В последних разделах **третьей главы** рассматриваются неконформные аппроксимации на конформных (стыкующихся) сетках. В **разделе 3.4** используются макрогибридные формулировки с неконформными множителями Лагранжа, обеспечивающие поузловую непрерывность сеточного решения и его потока на интерфейсе. С учетом конформности сетки можно показать, что полученное решение удовлетворяет стандартной конечно-элементной системе на стыкующихся сетках. Для построения интерфейсного переобуславливателя $R_\lambda \sim BA^{-1}B^T$ в некоторых случаях удается использовать нормировку сеточных функций в пространстве следов (С.В.Непомнящих) на интерфейсах. Эффективность применения R_λ достигается технологией мозаично-скелетонной аппроксимации (Е.Е.Тыртышников). Основная идея технологии состоит в аппроксимации плотной матрицы, возникающей из нормализации следа, некоторой разреженной матрицей, которую легко умножать на вектор. Реализация переобуславливателя, использующая в качестве входных данных коэффициенты задачи и интерфейсную сетку, была протестирована на ряде трехмерных краевых задач и показала свою эффективность.

В **разделе 3.5** рассмотрен параллельный многосеточный алгоритм для решения неконформных конечно-элементных систем, эквивалентных компактной алгебраически конденсированной форме записи смешанных конечно-элементных систем для эллиптических уравнений второго порядка. Реализация алгоритма на локально сгущающихся иерархических симплициальных сетках позволила построить эффективную параллельную технологию решения смешанных конечно-элементных систем:

1. на входе дается линейная смешанная конечно-элементная система в дисассемблированном (по ячейкам сетки) виде, а также координаты вершин симплексов и граф связности вершин;
2. с использованием геометрических данных система преобразуется локально по ячейкам в гибридную систему за счет добавления множителей Лагранжа на грани симплексов;
3. в расширенной системе локально по ячейкам исключаются скалярные неизвестные внутри симплексов и потоки на гранях симплексов, порождая симметричную положительно определенную разреженную матрицу;

4. итерационно решается разреженная конденсированная система для множителей Лагранжа;
5. восстанавливаются локально по ячейкам скалярные неизвестные внутри симплексов и потоки на гранях симплексов.

Ключевым наблюдением является то, что все этапы технологии, кроме четвертого, арифметически дешевы и легко параллелизуемы, в силу локальности действий. Генерация локально сгущающейся иерархической симплицальной сетки чрезвычайно экономична и эффективна, поэтому не требует параллелизации. Генерация смешанной конечно-элементной системы в дисассемблированном виде полностью параллелизуема, если исходная сетка разбита каким-либо образом на подобласти и распределена по процессорам. Параллельное решение линейной системы, как наиболее трудоемкий этап всей цепочки, осуществляется быстросходящимся многосеточным методом, реализация которого позволила сформировать всю технологическую цепочку. Эффективно параллелизуемая инициализация метода (В.Н.Чугунов) использует лишь данные об иерархии сетки и дисассемблированную систему на мелкой сетке, не требуя данных об уравнении. Параллельная реализация итерационного решения показывает свою эффективность лишь на умеренном числе процессоров, что связано с ростом заполненности матриц более грубых уровней.

Основные результаты **третьей главы** состоят в следующем: (а) в рамках параллельного итерационного решения макро-гибридных систем технология с внутренним итерационным процессом обобщена и обоснована для произвольных симплицальных сеток; (б) предложен и частично обоснован новый параллельный интерфейсный Дирихле-Дирихле переобуславливатель; (в) предложена и протестирована новая параллельная технология адаптивного решения краевых задач на неструктурированных нестыкующихся сетках; (г) рассмотрен новый метод декомпозиции с использованием мозаично-скелетной аппроксимации плотных матриц в качестве интерфейсного переобуславливателя; (д) предложена и протестирована новая параллельная технология решения смешанных конечно-элементных систем, порождаемых иерархическими локально сгущающимися сетками.

В четвертой главе, состоящей из четырех разделов, рассматриваются блочные параллельные технологии решения систем линейных уравнений, порождаемых аппроксимациями на трехмерных прямоугольных сетках. Несмотря на приложения на прямоугольных сетках, большинство из рассматриваемых технологий не требует прямоугольности расчетной сетки. В первых двух разделах двухуровневый метод Шварца, предложенный и обоснованный для сингулярно возмущенного уравнения конвекции-диффузии, применяется в нескольких задачах вычислительной гидродинамики, включая нестационарные уравнения Навье-Стокса. В разделе 4.4 для уравнений многофазной фильтрации предложены две блочные параллельные технологии решения возникающих систем уравнений. В

разделе 4.3 представлено несколько новых эффективных технологий адаптивного выбора начального приближения для итерационного решения последовательности систем.

В разделе 4.1 формулируется и анализируется параллельный двухуровневый метод Шварца в применении к сингулярно возмущенному уравнению конвекции-диффузии. Предлагаемый алгоритм базируется на том, что возмущения решения этого уравнения, вызванные локальным возмущением краевого условия, распространяются анизотропно. В случае постоянного вектора переноса точечное возмущение распространяется только вниз по потоку, быстро убывая в поперечном направлении и вверх по потоку. На первом уровне метода область разбивается на налегающие полосы (слои) Ω_k , $k = 1, \dots, m$, перпендикулярные доминирующему направлению переноса, и определяются итерации Шварца в направлении вниз по потоку. На втором уровне каждая подобласть-полоса разбивается на налегающие подобласти-квадраты Ω_{ks} , $s = 1, \dots, p$, и задаются несколько итераций Шварца между квадратами с четными и нечетными индексами s . Естественный параллелизм методу дает именно второй уровень, поскольку каждая подобласть-квадрат может обрабатываться своим процессором. Если вектор переноса сильно отклоняется от заданного направления (например, вследствие завихрений), разбиение первого уровня должно быть адаптировано к поведению вектора. Доказана универсальность метода по отношению к большим числам Пекле.

Рассмотрим в области $\Omega = (0; 1) \times (0; 1)$ двумерное уравнение конвекции-диффузии с оператором $\mathcal{L} = -\varepsilon\Delta + \frac{\partial}{\partial x_1}$ ($\varepsilon \equiv const \in (0; 1)$) с естественными и главными краевыми условиями на Γ_N и $\partial\Omega \setminus \Gamma_N$, соответственно, и аппроксимирующую систему разностных уравнений на квадратной сетке Ω_h , $h = 1/n \gg \varepsilon$:

$$\mathcal{L}_h u_{ij} = f_{ij}, \quad x_{ij} \in \Omega \cup \Gamma_N, \quad u_{ij} = g_{ij}, \quad x_{ij} \in \partial\Omega \setminus \Gamma_N, \quad x_{ij} = (ih, jh), \quad i, j = 0, \dots, n.$$

Сформулируем двухуровневый метод Шварца для случая $\Omega_k = (a_k, b_k) \times (0, 1)$, разбитых последовательностью целых чисел $0 = n_1^{(1)} < n_2^{(1)} = n_1^{(2)} < \dots < n_2^{(p)} = n$ на $\Omega_{ks} = \begin{cases} (a_k; b_k) \times (\hat{n}_1^{(s)}h; \hat{n}_2^{(s)}h), & s \text{ четное,} \\ (a_k; b_k) \times (n_1^{(s)}h; n_2^{(s)}h), & s \text{ нечетное} \end{cases}$, где $\hat{n}_1^{(s)} = \max\{0; n_1^{(s)} - d_h\}$, $\hat{n}_2^{(s)} = \min\{n; n_2^{(s)} + d_h\}$, $d_h = \min_{1 \leq k \leq m-1} (b_k - a_{k+1})$ — минимальная ширина налегания полос Ω_k . Пусть задано текущее приближение u_{ij}^{t-1} к сеточному решению u_{ij} . Новое приближение u_{ij}^t находится с помощью двухуровневого метода Шварца:

Алгоритм. Пусть заданы целые $T_k > 0$. Для $k = 1, \dots, m$ найти сужение сеточной функции u_{ij}^t на $(a_k; a_{k+1}] \times (0; 1)$ следующими внутренними итерациями:

1. Положить $l = 0$. Для всех четных s решить подзадачи $\mathcal{A}_{k,s}^t \hat{u}_{ij}^{(s)} = f_{ij}$.
2. Повторять пока ($l \leq T_k$)
Положить $l = l + 1$.

Если l нечетно, то

для всех нечетных s решить подзадачи $\mathcal{M}_{k,s}^t \hat{u}_{ij}^{(s)} = f_{ij}$

иначе

для всех четных s решить подзадачи $\mathcal{M}_{k,s}^t \hat{u}_{ij}^{(s)} = f_{ij}$

Конец цикла

3. Определить сеточную функцию u_{ij}^t на $[a_k, a_{k+1}] \times (0; 1)$ через $u_{ij}^t = \hat{u}_{ij}^{(s)}$, $x \in [a_k, a_{k+1}] \times [n_1^{(s)}h; n_2^{(s)}h]$, $s = 1, \dots, p$.

Здесь через $\mathcal{A}_{k,s}^t \hat{u}_{ij}^{(s)} = f_{ij}$ обозначено сужение на Ω_{ks} исходной разностной задачи с главным краевым условием u_{ij}^t там, где u_{ij}^t уже известно ($x_1 = a_k$), или u_{ij}^{t-1} в противном случае. Отличие подзадач $\mathcal{M}_{k,s}^t \hat{u}_{ij}^{(s)} = f_{ij}$ от $\mathcal{A}_{k,s}^t \hat{u}_{ij}^{(s)} = f_{ij}$ заключается в том, что там, где известно итерационное приближение $\hat{u}_{ij}^{(s\pm 1)}$ к u_{ij}^t со стороны соседних подобластей $\Omega_{ks\pm 1}$, краевые условия с u_{ij}^{t-1} заменяются на $\hat{u}_{ij}^{(s\pm 1)}$.

Для случая $\varepsilon \ll h$ сходимость метода с $T_k = 1$, $k = 1, \dots, m$, устанавливается следствием более общего утверждения (Теорема 4.1)

Следствие 4.5. Пусть $\varepsilon \ll h$, $T_k = 1$, $k = 1, \dots, m$, $f_{ij} \geq 0$, $g_{ij} \geq 0$, и задана неотрицательная сеточная функция u_{ij}^{t-1} на $\bar{\Omega}$ такая, что $\max_{\Omega_h} |u_{ij} - u_{ij}^{t-1}| \leq 1$. Тогда

$$\max_{\Omega_h} |u_{ij} - u_{ij}^t| \leq 3mq_1^{-d_n/h} \max_{\Omega_h} |u_{ij} - u_{ij}^{t-1}|, \quad q_1 = \frac{h}{\varepsilon}.$$

Таким образом, для сингулярно возмущенного оператора конвекции-диффузии с постоянным конвективным полем геометрическая скорость сходимости метода Шварца обеспечивается минимальными перекрытиями между подобластями и всего лишь одной внутренней итерацией в полосах Ω_k .

В случае переменного конвективного поля с доминирующим направлением геометрическая скорость сходимости метода Шварца обеспечивается за счет адаптивного разбиения первого уровня на подобласти, точного решения подзадач в подобластях-полосах с противотоком, минимальными перекрытиями между подобластями-полосами и всего лишь одной внутренней итерацией в полосах Ω_k без противотока, где налегание подобластей второго уровня $\Omega_{k,s}$ должно быть порядка ширины Ω_k .

Оператор задачи с переменным конвективным полем имеет вид $\mathcal{L} = -\varepsilon \Delta + B^1(x_1, x_2) \cdot \frac{\partial}{\partial x_1} + B^2(x_1, x_2) \cdot \frac{\partial}{\partial x_2}$, с дополнительным предположением, что функции B^1 и B^2 достаточно гладкие, не превышающие по модулю 1, и $B^1(1, x_2) > 0$. Разбиение Ω на полосы Ω_k должно быть адаптировано (что может быть реализовано автоматически) таким образом, что вектор переноса $\vec{B} = (B^1, B^2)^T$ в Ω_k удовлетворяет одному из двух условий: либо $B_{ij}^1 \geq B_0 > 0$, $-B_{ij}^2 \leq R \cdot B_0$ в Ω_k , с некоторой константой $0 < R < 1$, либо

$B_{ij}^1 \geq B_0 > 0$, в $\Omega_k \setminus (a_k; a_{k+1}) \times (0; 1)$. В первом случае индекс Ω_k принадлежит множеству \mathcal{P}_s , во втором — множеству \mathcal{P}_v . Формулировка двухуровневого метода Шварца ничем не отличается от случая постоянного поля переноса. В случае переменного поля мы определим последовательность T_k следующим образом:

$$T_k = \begin{cases} T, & k \in \mathcal{P}_v \\ 1, & k \in \mathcal{P}_s. \end{cases},$$

где T — некоторое большое целое число. Предположение $T \gg 1$, означает, что задачи в подобластях Ω_k , $k \in \mathcal{P}_v$, решаются точно. Упрощенное для случая $\varepsilon \ll h$ утверждение о сходимости метода выглядит следующим образом:

Теорема 4.6. Пусть $\varepsilon \ll h$, $T \gg 1$, $f_{ij} \geq 0$, $g_{ij} \geq 0$, разбиение на Ω_k адаптировано к \vec{B} , и задана неотрицательная сеточная функция u_{ij}^{t-1} на $\bar{\Omega}$ такая, что $\max_{\Omega_h} |u_{ij} - u_{ij}^{t-1}| \leq 1$. Если

$$d_h = \min_{\substack{1 \leq k \leq m-1 \\ k \in \mathcal{P}_s}} (b_k - a_{k+1}) \geq h \cdot \frac{\ln 6m}{\ln q_3}, \quad \min_{k \in \mathcal{P}_v} \frac{b_k - a_{k+1}}{h} \geq 1 + \frac{\ln 2\#\mathcal{P}_v}{\ln q_3}, \quad q_3 = 1 + \frac{B_0 h}{\varepsilon},$$

$$(\hat{n}_2^{(s)} - n_2^{(s)})h \equiv (n_1^{(s)} - \hat{n}_1^{(s)})h \geq \max_{\substack{1 \leq k \leq m \\ k \in \mathcal{P}_s}} (b_k - a_k) + \left[\frac{d_h \ln q_3}{h \ln q_4} \right] h, \quad q_4 = \frac{1 + \frac{B_0 h}{2\varepsilon}}{1 + R \cdot \frac{B_0 h}{2\varepsilon}},$$

то

$$\max_{\Omega_h} |u_{ij} - u_{ij}^t| \leq Q \max_{\Omega_h} |u_{ij} - u_{ij}^{t-1}|,$$

с константой $Q < 1$, не зависящей от ε , h .

Метод легко обобщается на трехмерный случай. В случае отсутствия зон с противотоком арифметическая сложность одной итерации пропорциональна числу неизвестных как в двумерном, так и в трехмерном случае. В случае наличия локальных вихревых зон арифметическая эффективность метода фактически не ухудшается. Метод допускает эффективную параллелизацию за счет внутренних итераций второго уровня.

Различные параллельные приложения этого метода в трехмерных нестационарных задачах вычислительной гидродинамики представлены в разделе 4.2, где рассматриваются уравнения конвекции-диффузии, реакции-конвекции-диффузии с полями, включающими сильные вихри, уравнения Навье-Стокса для задач обтекания, уравнения тепло-массопереноса в простейшем химическом реакторе. Наряду с уравнениями конвекции-диффузии, последние два приложения порождают еще один класс проблем: необходимость решать последовательность больших жестких систем, возникающих на каждом шаге по времени.

В разделе 4.3 представлено несколько адаптивных итерационных технологий, ускоряющих время решения последовательности систем, порождаемых в процессе дискретизации по времени. Эти технологии легко параллелизуются и не используют свойства расчетной сетки: их основной целью является построение хорошего начального приближения для текущей системы на основе информации, полученной при решении предыдущих систем. Рассматриваются три типа последовательностей систем уравнений: (а) линейные системы с одной квадратной матрицей A и разными правыми частями b^k ; (б) линейные системы с разными, но близкими квадратными матрицами A^k и разными правыми частями b^k ; (в) нелинейные системы.

В первом случае используется обобщенный метод сопряженных невязок, где помимо $A^T A$ -ортогональных крыловских векторов $\mathcal{K} = \{p_j\}_{j=1}^m$, известны векторы $\{Ap_j\}_{j=1}^m$. Поскольку проекция b^k на пространство $A\mathcal{K}$ есть $\sum_{j=1}^m \frac{(b^k, Ap_j)}{(Ap_j, Ap_j)} Ap_j$, то проекция решения $x^k = A^{-1}b^k$ на \mathcal{K} есть $\hat{x}^k = \sum_{j=1}^m \frac{(b^k, Ap_j)}{(Ap_j, Ap_j)} p_j$. Таким образом, проекция неизвестного решения на накопленное крыловское подпространство может быть легко вычислена посредством k скалярных произведений, а накопление подпространств \mathcal{K} и $A\mathcal{K}$ может быть продолжено для разных векторов b^k , если начальное приближение для каждого последующего решения есть \hat{x}^k . Эта стратегия приводит к 1.5-2-кратному ускорению расчета больших жестких линейных систем, порождаемых проекционным алгоритмом для решения нестационарных уравнений Навье-Стокса.

Во втором случае используется обобщенный метод минимальных невязок GMRES и накапливаются базисы крыловских пространств V_{m_k} и данные о проекции A^k на V_{m_k} , матрицы G_{m_k} и H_{m_k, m_k} . Начальное приближение x_0^k для k -й системы вычисляется последовательностью проектирований $x_0^{i+1} = x_0^i - V_{m_i} \hat{H}_{m_i, m_i}^{-1} \hat{G}_{m_i} V_{m_i}^T (A^i x_0^i - b^i)$, $i = k-l, \dots, k-1$, где $x_0^{k-l} = 0$. Число накапливаемых данных l ограничено не только емкостью компьютерной памяти, но и расхождением между собственными векторами и значениями матриц A^{k-l} и A^{k-1} . Эта стратегия приводит к 15-процентному ускорению расчета больших жестких линейных систем, порождаемых проекционным алгоритмом для решения уравнения тепло-массопереноса в простейшем химическом реакторе.

В третьем случае рассматривается применение метода Ньютона для полностью неявных дискретизаций нелинейных нестационарных краевых задач. Физически мотивированный выбор начального приближения — использование решения с предыдущего временного шага. Для нахождения лучшего приближения воспользуемся собственным ортогональным разложением (POD). POD порождает оптимальные аппроксимации малых размерностей для наборов данных, генерируя ортонормированный базис для представления данных с помощью метода наименьших квадратов. Используя галеркинскую про-

екцию текущего нелинейного оператора на базис POD, можно построить текущую нелинейную модель гораздо меньшей размерности. Эта модель дает лучшее начальное приближение для метода Ньютона на следующем временном шаге. Платой за лучшее приближение является дополнительная нелинейная система, которую необходимо решать на каждом временном шаге. Однако арифметическая цена этого решения оказывается меньшей, чем решение исходной системы (в силу малой размерности и отсутствия переобуславливания), а уменьшение ньютоновских итераций настолько значительно, что общее время решения уменьшается в несколько раз. Важным преимуществом предложенного алгоритма в параллельных вычислениях (стандартных или распределенных) является то, что он не строго детерминирован: неявная схема может считаться как без, так и с POD ускорением, а также как с новой, так и устаревшей упрощенной моделью, причем POD базис может вычисляться на удаленной вычислительной системе.

В разделе 4.4 излагаются параллельные технологии эффективного решения систем уравнений многофазной фильтрации как многоуровневого, так и блочного типов. В случае неявных дискретизаций многофазных многокомпонентных течений, порождаемые методом Ньютона линейные системы содержат уравнения, соответствующие различным процессам, происходящим в разных масштабах, поэтому прямой перенос современных технологий (многосеточные методы, методы декомпозиции), разработанных для эффективного решения эллиптических уравнений, невозможен. Рассмотренный метод алгебраического выделения уравнения для давления имеет два потенциальных преимущества: во-первых, можно строить хороший переобуславливатель только для самых жестких блоков, переобуславливая другие блоки вычислительно дешевыми технологиями; во-вторых, этот подход не зависит от структуры сетки, поскольку переобуславливатели для блоков могут опираться только на их алгебраическую структуру. Второй предлагаемый метод, многосеточный метод с ускоренным огрублением SCMG, использует иерархичность трехмерной прямоугольной сетки и вертикальное агрегирование неизвестных. Несмотря на структурное подобие SCMG и стандартного V-цикла геометрического многосеточного метода, они опираются на разные итерационные механизмы. SCMG оказался эффективным методом решения задач с сильно меняющимися коэффициентами, несмотря на простейшие операторы интерполирования данных между уровнями сетки.

Основные результаты **четвертой главы** состоят в следующем: (а) параллельный двухуровневый метод Шварца в применении к сингулярно возмущенному уравнению конвекции-диффузии обобщается и обосновывается на случай произвольных полей вектора скорости с доминирующим направлением конвекции; (б) рассмотрены параллельные трехмерные приложения разработанной технологии; (в) рассмотрены и протестированы три параллельные стратегии адаптивного выбора начального приближения при итераци-

онном решении последовательностей линейных систем с одной матрицей, разными матрицами, и нелинейных систем; (г) разработаны и исследованы две параллельные технологии решения линейных систем, возникающих при полностью неявных аппроксимациях уравнений многофазной фильтрации.

Основные результаты диссертации

Основным научным результатом диссертации является разработка новых эффективных математических технологий параллельного решения краевых задач с использованием адаптивных сеток. Автор выносит на защиту следующие научные результаты:

1. предложен, проанализирован и реализован новый декомпозиционный метод агрегирования, удобный в параллельной реализации, доказана его универсальность по отношению к гетерогенности коэффициента диффузии и количеству подобластей;
2. представлен теоретический анализ оптимальных симплициальных сеток; теоретически исследованы свойства их приближений, квази-оптимальных сеток; доказаны оценки сверху и снизу для интерполяционных ошибок на этих сетках;
3. реализованы и расширены основные компоненты технологии параллельного адаптивного алгоритма построения квази-оптимальных сеток на основе восстановления гессиана (новый метод восстановления гессиана сеточной функции с особенностями и его теоретический анализ, последовательные и параллельные методики построения сеток, квази-равномерных в заданной метрике, тестирование технологии на ряде приложений);
4. рассмотрены теоретические и практические вопросы управления адаптацией в рамках вышеупомянутой адаптивной технологии; доказаны оценки сверху для интерполяционных ошибок на сетках с управляемой адаптацией;
5. предложены, обоснованы и реализованы два параллельных алгоритма решения систем, порожденных макро-гибридными формулировками на нестыкующихся сетках; доказана их универсальность по отношению к количеству подобластей (для одного из них доказана универсальность по отношению к скачкам коэффициента диффузии и малости коэффициента реакции); на основе этих алгоритмов предложена и реализована новая параллельная технология адаптивного решения краевых задач;
6. предложен, обоснован и реализован параллельный двухуровневый метод Шварца для решения сингулярно возмущенного уравнения конвекции-диффузии с домини-

- рующим направлением поля скорости; доказана универсальность метода по отношению к большим числам Пекле; рассмотрен ряд трехмерных приложений метода;
7. предложены, реализованы и протестированы параллельные технологии адаптивного выбора начального приближения при итерационном решении последовательностей линейных систем с одной матрицей, разными матрицами, и нелинейных систем;
 8. разработаны и исследованы параллельные технологии решения линейных систем, возникающих при неявных аппроксимациях уравнений многофазной фильтрации.

Основные публикации автора по теме диссертации

1. Василевский Ю.В. Методы решения краевых задач с использованием нестыкующихся сеток. // Тр. Матем. центра им. Н.И.Лобачевского, Т.2. Итерационные методы решения линейных и нелинейных сеточных задач. - Казань: УНИПРЕСС, 1999, С.94-121.
2. Василевский Ю.В., Агузал А. Объединенный асимптотический анализ интерполяционных ошибок на оптимальных сетках. // ДАН, 2005, Т.405, No.3, С.1-4.
3. Василевский Ю.В., Липников К.Н. Адаптивный алгоритм построения квазиоптимальных сеток.// ЖВМ и МФ, 1999, Т.39, No.9, С.1532-1551.
4. Василевский Ю.В., Липников К.Н. Оптимальные триангуляции: существование, аппроксимация и двойное дифференцирование P_1 конечно-элементных функций. // ЖВМ и МФ, 2003, Т.43, No.6, С.866-874.
5. Василевский Ю.В., Липников К.Н. Оценки ошибки для управляемых адаптивных алгоритмов на основе восстановления гессиана. // ЖВМ и МФ, 2005, Т.45, No. 8, С.1424-1434.
6. Василевский Ю.В., Капранов С.А. Параллельное моделирование особенностей кровотока в окрестности кава-фильтра с захваченным тромбом. // Математическое моделирование, 2005, Т.17, No.11, С.3-15.
7. Agouzal A., Lipnikov K., Vassilevski Yu. Adaptive generation of quasi-optimal tetrahedral meshes. // East-West J. Numer. Math., 1999, V.7, P.223-244.
8. Agouzal A., Vassilevski Yu. On a discrete Hessian recovery for P_1 finite elements.// J. Numer. Math., 2002, V.10, P.1-12.
9. Chugunov V., Vassilevski Yu. Parallel multilevel data structures for a non-conforming finite element problem on unstructured meshes.// Russ.J.Numer.Anal.Math.Modelling, 2003, V.18, No.1, P.1-11.
10. Chugunov V., Svyatski D., Tyrtysnikov E., Vassilevski Yu. Parallel iterative multilevel solution of mixed finite element systems for scalar equations.// Concurrency and Computation: Practice and Experience, 2006, V.18, No.5, P.501-518.

11. Dyadechko V., Iliash Yu., Vassilevski Yu. Structuring preconditioners for unstructured meshes. // Russ.J. Numer.Anal. Math.Modelling, 1996, V.11, No.2, P.139-154.
12. Dyadechko V., Lipnikov K., Vassilevski Yu. Hessian based anisotropic mesh adaptation in domains with discrete boundaries. // Russ.J.Numer.Anal.Math.Modelling, 2005, V.20, No.4, P.391-402.
13. Garbey M., Kuznetsov Yu., Vassilevski Yu. Parallel Schwarz method for a convection-diffusion problem.// SIAM J.Sci.Comp., 2000, V.22, No.3, P.891-916.
14. Garbey M., Vassilevski Yu. A parallel solver for unsteady incompressible 3D Navier-Stokes equations.// Parallel Computing, 2001, V.27, No.4, P.363-389.
15. Hoppe R., Iliash Yu., Kuznetsov Yu., Vassilevski Yu., Wohlmuth B. Analysis and parallel implementation of adaptive mortar element methods. // East-West J. Numer. Math., 1998, V.6, No.3, P.223-248.
16. Lacroix S., Vassilevski Yu., Wheeler M., Wheeler J., Iterative solution methods for modeling multiphase flow in porous media fully implicitly.// SIAM J.Sci.Comp., 2003, V.25, No.3, P.905-926.
17. Lipnikov K., Vassilevski Yu. Parallel adaptive solution of 3D boundary value problems by Hessian recovery.// Comp.Methods Appl.Mech.Engnr., 2003, V.192, No.11-12, P.1495-1513.
18. Lipnikov K., Vassilevski Yu. Parallel adaptive solution of the Stokes and Oseen problems on unstructured 3D meshes. // Proceedings of Int.Conf. Parallel CFD 2003, Elsevier, 2004, P.153-162.
19. Lipnikov K., Vassilevski Yu. On control of adaptation in parallel mesh generation. // Engrg. with Comput., 2004, V.20, No.3, P.193-201.
20. Tromeur-Dervout D., Vassilevski Yu. POD acceleration of fully implicit solvers for unsteady nonlinear problems and its GRID applications. // Advances in Engineering Software, 2006, to appear.
21. Tyrtysnikov E., Vassilevski Yu. A mosaic preconditioner for a dual schur complement.// Numerical Mathematics and Advanced Applications, Proc. of ENUMATH'01. -Milano: Springer-Verlag Italia, 2003, P.867-880.
22. Vassilevski Yu. A hybrid domain decomposition method based on aggregation.// Numer. Linear Algebra Appl., 2004, V.11, P.327-341.
23. Vassilevski Yu. A parallel interface preconditioner for the mortar element method in case of jumping coefficients.// Domain Decomposition Methods in Sciences and Engineering, DDM.org, 2001, P.231-240.
24. Vassilevski Yu. A parallel CG solver based on domain decomposition and non-smooth aggregation. // Conjugate gradient algorithms and finite element methods (Proceedings of Int.Conf. 50 years of CG), -Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 2004, P.93-102.

Изд.лиц. ИД N 03991 от 12.02.2001. Компьютерный набор
Подписано в печать 27.02.2006. Усл. печ. л. 2,0. Тираж 80 экз.

Институт вычислительной математики РАН

119991 ГСП-1, г.Москва, ул.Губкина 8.

