

94-161



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P11-94-161

Е.П.Жидков, М.Б.Юлдашева, О.И.Юлдашев

ВЕКТОРНЫЕ АЛГОРИТМЫ
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ
НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧ МАГНИТОСТАТИКИ

Направлено в журнал «Математическое моделирование»

1994

Введение

В 1989 году для наиболее известной программы TOSCA [1], предназначенной для расчетов трехмерных электромагнитных полей, были апробированы векторные алгоритмы, которые использовались в методе неполного разложения Холесского с сопряженными градиентами. Авторами работы [2] был предложен алгоритм умножения конечно-элементной матрицы на вектор, основанный на выделении в матрице "псевдодиагоналей". Таким образом, процедура умножения разреженной матрицы на вектор сводилась к операциям с векторами длиной $\leq N$, где N - размерность решаемой системы, однако при этом существенно использовались особенности параллельно-векторной ЭВМ CRAY X-MP.

В настоящей работе предлагается другой подход к построению векторных алгоритмов, связанный с введением двух видов нумераций неизвестных: естественного и многоцветного упорядочения для регулярных сеток. Рассматривается степень векторизации не только процедуры умножения конечно-элементной матрицы на вектор, но и решения системы с факторизованным предобусловливателем. Разработанный подход для решения трехмерных нелинейных задач магнитостатики эффективен, в частности, для векторных и параллельно-векторных ЭВМ, выполняющих быстрые операции с векторами средней длины.

В результате предлагаемого многоцветного упорядочения матрица линейризованной системы становится блочной, при этом каждый блок имеет только одну отличную от нуля диагональ. Естественная нумерация используется для стандартного метода неполного разложения Холесского, а многоцветное упорядочение - для алгоритмов умножения матрицы на вектор и решения системы с предобусловливателем. При таком комбинированном подходе удастся, во-первых, сохранить свойства предобусловливателя, а, во-вторых, в значительной мере использовать возможности векторного компьютера, поскольку указанные алгоритмы при многоцветном упорядочении сводятся к операциям с векторами длиной $\leq N/c$, где N - размерность системы, а c - максимальное число отличных от нуля коэффициентов матрицы в одной строке. Процедуры умножения матрицы на вектор и решения треугольных систем за счет использования векторов такой длины выполняются, например на векторной ЭВМ CONVEX C120 в 2-3 раза быстрее, чем по программам из библиотек CONVEX SCILIB, CPC Program Library, SPARSPAK оттранслированных с векторной оптимизацией.

Преимущества предлагаемого комбинированного подхода продемонстрированы на примере расчета пространственного магнитного поля спектрометрического магнита на нескольких сетках. Приводятся резуль-

таты сравнения алгоритмов неполной факторизации, решения системы уравнений с предобуславливателем и умножения матрицы на вектор для различных способов упорядочения неизвестных. В результате применения разработанных векторных алгоритмов, общее время решения нелинейной системы уравнений на сетке из 42120 узлов сократилось в 2,3 раза по сравнению с вариантом программы, использующей оттранслированные с векторной оптимизацией стандартные алгоритмы.

В первом параграфе приводятся формулировка задачи магнитостатики, свойства используемой модели, конечно-элементная дискретизация и итерационный процесс решения нелинейной системы уравнений.

Во втором параграфе рассматриваются три различных способа нумерации неизвестных:

- естественное упорядочение;
- упорядочение по обратному алгоритму Катхилла-Макки;
- многоцветное упорядочение.

В этом же параграфе обсуждаются структуры матриц, возникающие при выборе определенного способа нумерации. Приводятся формулы алгоритмов неполной факторизации Холесского, решения системы с предобуславливателем; рассматриваются методы умножения разреженной матрицы на вектор. Указывается степень векторизации всех алгоритмов.

В третьем параграфе приводятся сравнительные характеристики алгоритмов - процессорное время и средняя степень векторизации - на примере расчетов пространственного магнитного поля спектрометрического магнита на последовательности из нескольких сеток. Размер максимальной сетки 42120 узлов. Более подробные результаты расчетов опубликованы в работе [3].

1. Математическая постановка задачи и дискретизация

Рассмотрим дифференциальную формулировку задачи магнитостатики относительно общего ψ и редуцированного ϕ скалярных потенциалов:

$$\operatorname{div}(\mu \nabla \psi) = 0, \quad x \in \Omega_F; \quad (1)$$

$$\operatorname{div}(\nabla \phi) = 0, \quad x \in \Omega_A;$$

с условиями на границах:

$$\mu(\partial \psi / \partial n) = \partial \phi / \partial n + \vec{n} \cdot \vec{H}^s, \quad x \in \Gamma;$$

$$\begin{aligned}\psi &= \phi + \phi^S, & x \in \Gamma; \\ \phi &\approx 0, & x \in \Gamma_0,\end{aligned}\quad (2)$$

где Ω_F — область, занимаемая ферромагнетиком. Выберем некоторую область Ω , внутри которой находится Ω_F . Границу Ω обозначим через Γ_0 , а $\Omega_A = \Omega/\Omega_F$. Γ — граница между Ω_F и Ω_A . Функция $\mu = \mu(|\nabla\psi|)$ известна, причем $1 \leq \mu_* \leq \mu \leq \mu^*$ где μ_* и μ^* — определенные константы, а вектор \vec{H}^S и потенциал ϕ^S вычисляются по некоторым формулам.

Вектора $\vec{B}_1 = \mu \nabla \psi$, $\vec{H}_1 = \nabla \psi$, $\vec{B}_2 = \vec{H}_2 = \nabla \phi + \vec{H}^s$, $\vec{B}_i, \vec{H}_i \in (L^2(\Omega))^3$, $i = 1, 2$, удовлетворяют неравенствам [4]:

$$|\Delta \vec{B}_i| \leq 2\mu^* |\Delta \vec{H}_i|, \quad (3)$$

$$\Delta \vec{B}_i \cdot \Delta \vec{H}_i \geq |\Delta \vec{H}_i|^2,$$

где $\Delta \vec{B}_i = \vec{B}_i^{(1)} - \vec{B}_i^{(2)}$, $\Delta \vec{H}_i = \vec{H}_i^{(1)} - \vec{H}_i^{(2)}$, $i = 1, 2$. Верхние индексы 1 и 2 означают, что используются два различных значения векторов.

Эти свойства обеспечивают на основе теории сильно-монотонных операторов существование и единственность обобщенного решения задачи (1)-(2) [3]. При использовании метода конечных элементов для дискретизации непрерывной задачи (1)-(2) свойства (3) обеспечивают также существование и сходимость конечно-элементных приближений к точному решению [5].

Вектор \vec{H}^S вычисляется по закону Био - Савара:

$$\vec{H}^S(x) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_S} \vec{J} \times \nabla \frac{1}{|x-y|} dy, \quad (4)$$

где Ω_S — область, занимаемая обмоткой, \vec{J} — заданный вектор плотности тока, $|x-y|$ — расстояние между точками x и y . Для нахождения потенциала ϕ^S решается уравнение Лапласа внутри области Ω_F :

$$\Delta \phi^S(x) = 0, \quad x \in \Omega_F, \quad (5)$$

с краевыми условиями:

$$\frac{\partial \phi^S}{\partial n} = -\vec{n} \cdot \vec{H}^S, \quad x \in \Gamma, \quad \int_{\Gamma} \vec{n} \cdot \vec{H}^S ds = 0. \quad (6)$$

Для дискретизации задачи (1)-(2), а также (5)-(6) используем метод конечных элементов (например, [6]).

Будем предполагать, что область Ω имеет непрерывные по Липшицу границы Γ и Γ_0 . В качестве конечных элементов $\bar{\Omega}_j$ выберем выпуклые шестигранники. Разобьем Ω на конечные элементы так, чтобы $\bar{\Omega} = \cup \bar{\Omega}_j$;

$\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$, когда $i \neq j$, предполагая также, что каждая грань элемента $\bar{\Omega}_j$ является либо подмножеством Γ_0 , либо является гранью другого элемента, а граница Γ составлена из граней выбранных элементов.

Введем в пространстве с прямоугольной декартовой системой координат относительно переменной $\xi = (\xi^1, \xi^2, \xi^3)$ линейные функции формы N_m^e для куба $[-1, 1]^3$ в виде:

$$N_m^e(\xi) = (1/8)(1 + \sigma_{m1}\xi^1)(1 + \sigma_{m2}\xi^2)(1 + \sigma_{m3}\xi^3), \quad m = 1, \dots, 8,$$

где коэффициенты σ_{mk} выбираются равными 1 или -1, чтобы N_m^e была равна 1 в вершине с номером m и равна 0 в любой другой вершине. Учитывая, что куб $[-1, 1]^3$ переходит в элемент $\bar{\Omega}_j$ при использовании преобразования [7]:

$$x^k = \sum_{m=1}^8 x_{j,m}^k N_m^e(\xi), \quad k = 1, 2, 3,$$

где $x_{j,m}^k$, $k = 1, 2, 3$ - координаты вершины элемента $\bar{\Omega}_j$ с номером m , можно получить базисные функции на элементе $\bar{\Omega}_j$ - $N_m(\xi(x))$, $m = 1, \dots, 8$. Решение задач (1)-(2), а также (5)-(6) будем искать в виде:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_j \psi_j N_j(x), \quad x \in \bar{\Omega}_F; \\ \phi(x) &= \sum_j \phi_j N_j(x), \quad x \in \bar{\Omega}_A; \\ \phi^S(x) &= \sum_j \phi_j^S N_j(x), \quad x \in \bar{\Omega}_F, \end{aligned} \quad (7)$$

где через ψ_j, ϕ_j, ϕ_j^S обозначены неизвестные значения потенциалов в узлах пространственной сетки, полученной в результате дискретизации области $\bar{\Omega}$. Подставляя выражения для ψ и ϕ через базисные функции (7) в обобщенную формулировку задачи (1)-(2) и учитывая краевые условия, получим уравнение:

$$\begin{aligned} \sum_{z_j \in \bar{\Omega}_F} \psi_j \int_{\Omega_F} \mu \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega + \sum_{z_j \in \Gamma} \psi_j \int_{\Omega_A} \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega + \sum_{z_j \in \Omega_A} \phi_j \int_{\Omega_A} \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega = (8) \\ - \int_{\Gamma} N_i \cdot \vec{n} \cdot \vec{H}^S dS + \sum_{z_j \in \Gamma} \phi_j^S \int_{\Omega_A} \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega. \end{aligned}$$

Потенциал ϕ^S находится из уравнения:

$$\sum_{z_j \in \bar{\Omega}_F} \phi_j^S \int_{\Omega_F} \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega = - \int_{\Gamma} N_i \cdot \vec{n} \cdot \vec{H}^S dS \quad (9)$$

Интегралы по областям Ω_F, Ω_A , входящие в (8) - (9), вычисляются при помощи суммирования вкладов от отдельных элементов $\bar{\Omega}_j$. В пределах

каждого такого элемента μ считается постоянной, ее аргумент вычисляется в центре. Под центром элемента понимается точка, каждая координата которой является средним арифметическим координат вершин шестигранника.

Дискретизация непрерывной задачи приводит к нелинейной системе уравнений с разреженной матрицей:

$$F(\mu)y = f, \quad \mu = \mu(y) . \quad (10)$$

Для ее решения обычно используется известная итерационная схема [8]:

$$B_n \frac{y_{n+1} - y_n}{\tau_n} = -(F_n y_n - f) . \quad (11)$$

На практике чаще всего используют итерационные процессы двух видов: 1) $B_n = F_n = F(y_n)$; 2) $B_n = F'_n$, где F'_n — производная Фреше. В последнем случае получаем метод Ньютона. Параметр τ_n выбирается на каждой нелинейной итерации в зависимости от поведения нормы вектора невязки.

Независимо от вида B_n на каждой нелинейной итерации необходимо решать линейризованную систему уравнений:

$$Ax = b. \quad (12)$$

Обычно для этой цели используется хорошо зарекомендовавший себя при решении задач магнитостатики метод неполного разложения Холецкого с сопряженными градиентами (IC+CG) [9].

2. Метод IC+CG для векторной ЭВМ

Рассмотрим общий алгоритм предобусловленного метода сопряженных градиентов для решения линейризованной системы (12).

Выбрать x^0 , положить $r^0 = b - Ax^0$;

Решить систему $M\tilde{r}^0 = r^0$; положить $p^0 = \tilde{r}^0$.

Для $k = 0, 1, \dots$ вычислить :

$$\alpha_k = -(\tilde{r}^k, r^k) / (p, Ap^k);$$

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

$$r^{k+1} = r^k + \alpha Ap^k;$$

проверить сходимость итераций; если сходимость

не достигнута, то продолжить вычисления;

решить систему $M\tilde{r}^{k+1} = r^{k+1}$;

$$\beta_k = (\tilde{r}^{k+1}, r^{k+1}) / (\tilde{r}^k, r^k);$$

$$p^{k+1} = \tilde{r}^{k+1} + \beta_k p^k.$$

Матрица M выбирается так, чтобы она удовлетворяла двум требованиям: во-первых, вспомогательная система $M\tilde{r} = r$ должна решаться быстро, а, во-вторых, матрица M должна "аппроксимировать" матрицу A в том смысле, что число обусловленности

$$\text{cond}(M^{-1}A) = \lambda_{\max}(M^{-1}A) / \lambda_{\min}(M^{-1}A)$$

должно быть минимальным.

Для скорости сходимости предобусловленного метода сопряженных градиентов справедлива оценка [10]:

$$\|x^k - x^*\| \leq 2\sqrt{\kappa}\alpha^k \|x^0 - x^*\|,$$

где x^* - точное решение системы (12), $\alpha = (\sqrt{\kappa} - 1) / (\sqrt{\kappa} + 1)$ и $\kappa = \text{cond}(M^{-1}A)$.

Рассмотрим особенности векторизации предобусловленного метода сопряженных градиентов.

Определение [10]. Степенью векторизации вычислений на векторном компьютере называется длина используемых векторов. Если на разных отрезках вычислений длины векторов различны, то их средняя длина называется средней степенью векторизации.

Для многих векторных компьютеров скорость вычислений растет с увеличением длины вектора по крайней мере до достижения некоторого максимального значения длины. Это обстоятельство предъявляет соответствующие требования к тому или иному векторному алгоритму: он должен обеспечивать работу с достаточно длинными векторами.

В алгоритме предобусловленного метода сопряженных градиентов можно выделить следующие типичные операции:

- 1) сложение и вычитание векторов;
- 2) вычисление скалярных произведений;
- 3) умножение разреженной матрицы на вектор;
- 4) решение систем с матрицей M .

Первые два типа операций имеют степень векторизации N , где N - размерность системы. Степень же векторизации третьей и четвертой процедур существенным образом зависит от структуры матрицы A и вида предобусловливателя M .

Рассмотрим подробнее некоторые способы нумерации неизвестных и соответственно возникающие при этом структуры матрицы A . Отметим, что все способы нумерации характеризуются вектором перестановки неизвестных относительно выбранной основной нумерации. В работе [11] были проведены исследования зависимости скорости сходимости метода IC+CG от способа нумерации неизвестных. На модельных примерах, в частности, была продемонстрирована хорошая скорость сходимости при естественной нумерации неизвестных, а также при упорядочении неизвестных по обратному алгоритму Катхилла-Макки (RCM) [12]. Поэтому рассмотрим сначала указанные два способа нумерации, предполагая, что в результате дискретизации непрерывной задачи используется регулярная сетка.

Под регулярной сеткой будем понимать сетку, топологически эквивалентную сетке, полученной при разбиении некоторого параллелепипеда на конечные элементы в виде единичных кубов.

2.1. Естественная нумерация неизвестных

При естественном упорядочении узлов такого параллелепипеда нумеруются последовательно, например сначала вдоль оси ox , затем - в направлении оси oy и далее - по оси oz . На рис.1 показана часть сетки параллелепипеда (три последовательных плоскости вдоль оси oz , параллельные плоскости $хоу$) с естественной нумерацией узлов; n_x, n_y, n_z - число точек сетки вдоль осей ox, oy, oz соответственно.

При таком способе нумерации возникает строго диагональная структура матрицы A , и количество диагоналей равно 13. В этом случае естественным является представление матрицы в виде суммы диагоналей.

Пусть

$$A = D + \sum_{i=1}^{13} (A_i^T + A_i),$$

где D - главная диагональ матрицы A , A_i и A_i^T - ненулевая диагональ и транспонированная к ней, $i=1,2,\dots,13$.

Тогда процедура умножения матрицы на вектор :

$$Ax = Dx + \sum_{i=1}^{13} (A_i^T x + A_i x) \quad (13)$$

- имеет степень векторизации $\leq N$, где N - размерность системы.

Что касается решения вспомогательной системы уравнений $M\bar{r} = r$, то с целью сохранения диагональной структуры матрицы A , в качестве преобусловливателя естественным является выбор главной диагонали матрицы D .

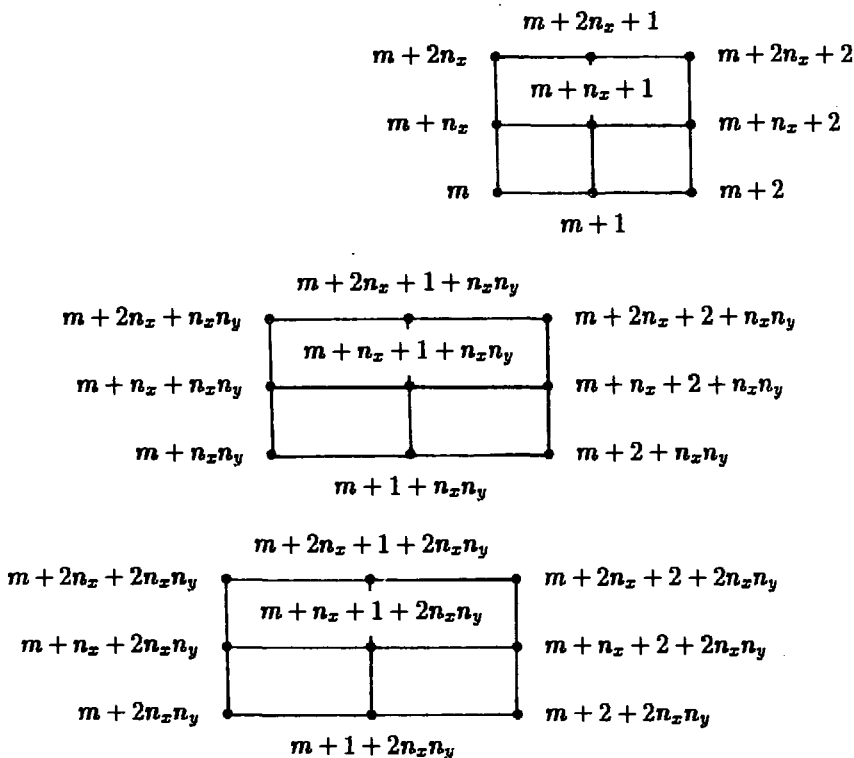


Рис. 1. Естественная нумерация узлов регулярной сетки

Как известно, в этом случае наиболее оптимальным является следующий подход. К системе $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$, где

$$\tilde{A} = D^{-1/2}AD^{-1/2}, \quad \tilde{x} = D^{1/2}x, \quad \tilde{b} = D^{-1/2}b,$$

применяется алгоритм метода сопряженных градиентов:

Выбрать \tilde{x}^0 , положить $\tilde{r}^0 = \tilde{b} - \tilde{A}\tilde{x}^0$, $\tilde{p}^0 = \tilde{r}^0$.

Для $k=0,1,\dots$ вычислить :

$$\tilde{\alpha}_k = -(\tilde{r}^k, \tilde{r}^k)/(\tilde{p}^k, \tilde{A}\tilde{p}^k);$$

$$\tilde{x}^{k+1} = \tilde{x}^k - \tilde{\alpha}_k \tilde{p}^k;$$

$$\tilde{r}^{k+1} = \tilde{r}^k + \tilde{\alpha}_k \tilde{A}\tilde{p}^k;$$

проверить сходимость итераций, если сходимость не достигнута, то продолжить вычисления;

$$\tilde{\beta}_k = (\tilde{r}^{k+1}, \tilde{r}^{k+1}) / (\tilde{r}^k, \tilde{r}^k);$$

$$\tilde{p}^{k+1} = \tilde{r}^{k+1} + \tilde{\beta}_k \tilde{p}^k.$$

В этом алгоритме, называемом масштабированным методом сопряженных градиентов (SCG), степень векторизации $\leq N$. Для умножения матрицы \tilde{A} на вектор применяются формулы (13). После того, как \tilde{x} будет найден с удвлетворительной точностью, находят $x = D^{-1/2}\tilde{x}$. Этот простой алгоритм, ввиду высокой степени векторизации, особенно эффективен для векторных и параллельно-векторных ЭВМ, на которых предусмотрены быстрые операции с длинными векторами (например CRAY X-MP, Y-MP, 2; ETA 10-E и другие) [13,14].

2.2. Упорядочение неизвестных по обратному алгоритму Катхилла-Макки

Как видно из рис. 1 и 2, максимальное число связей для одного узла составляет 26. Поэтому в каждой строке матрицы A будет не более 26 отличных от нуля элементов вне главной диагонали. Вследствие симметрии матрицы, как правило, достаточно хранить не более 13 отличных от нуля элементов матрицы в каждой строке. Отметим, что при использовании нерегулярных сеток это число может быть другим.

Для векторных ЭВМ, быстро оперирующих с векторами длиной, значительно больше 13, векторный вариант стандартного алгоритма умножения матрицы на вектор по строкам [15,16] оказывается неэффективным, поскольку степень векторизации в этом случае ≤ 13 . С целью увеличения длины векторов можно хранить и умножать матрицу A по диагоналям. Но после применения алгоритма RCM выделение таких диагоналей затруднительно.

Для решения вспомогательной системы с предобуславливателем M используем алгоритм неполной факторизации Холецкого без заполнения IC+CG(0). Матрицу M представим в виде:

$$M = \tilde{U}^T \hat{D} \tilde{U},$$

Матрица $A = \{a_{ij}\}_{i,j=1,n}$ - задана, $\hat{D} = \{\hat{d}_i\}_{i=1,n}$ - диагональная матрица, $\tilde{U} = \{\tilde{u}_{ij}\}_{i,j=1,n}$ - верхнетреугольная. Алгоритм определения элементов матриц \hat{D} и \tilde{U} выглядит следующим образом:

$$\text{для } i \text{ от } 1 \text{ до } N : \quad \hat{d}_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{u}_{ki}^2 \hat{d}_k$$

$$\text{для } j \text{ от } i+1 \text{ до } N : \left\{ \begin{array}{l} \text{если } a_{ij} = 0, \text{ то } \tilde{u}_{ij} = 0; \\ \text{иначе } \tilde{u}_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{u}_{ki} \hat{d}_k \tilde{u}_{kj}) / \hat{d}_i. \end{array} \right.$$

Степень векторизации этого алгоритма ≤ 13 .

Алгоритм решения системы с факторизованным предобуславливателем сводится к последовательному решению систем с нижнетреугольной и верхнетреугольной матрицами:

$$\tilde{U}^T w = r, \quad \tilde{U} \tilde{r} = \hat{D}^{-1} w. \quad (14)$$

Стандартный алгоритм решения таких систем [12,15,16] для векторных ЭВМ аналогичен векторному алгоритму решения систем с полностью заполненными нижнетреугольными и верхнетреугольными матрицами [10] с обработкой только ненулевых элементов. В нашем случае степень векторизации также ≤ 13 .

2.3. Многоцветная нумерация неизвестных

С точки зрения решения системы линейных алгебраических уравнений с разреженной матрицей методом Холецкого на векторных и параллельно-векторных ЭВМ, использующих быстрые операции с векторами средней длины, "идеальной" разреженной матрицей можно считать блочную матрицу, каждый блок которой имеет отличные от нуля элементы только на своей главной диагонали. В этом случае, если матрица имеет вид:

$$A = \begin{pmatrix} D_1 & A_{12} & \dots & A_{1c} \\ A_{12}^T & D_2 & \dots & A_{2c} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1,c}^T & \dots & A_{c-1,c}^T & D_c \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} I_1 & 0 & \dots & 0 \\ U_{12}^T & I_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{1c}^T & \dots & U_{c-1,c}^T & I_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{D}_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \tilde{D}_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 & U_{12} & \dots & U_{1c} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & I_{c-1} & U_{c-1,c} \\ 0 & \dots & 0 & I_c \end{pmatrix}, \quad (15)$$

то блоки-элементы матриц-множителей вычисляются по формулам:

$$\tilde{D}_i = D_i - \sum_{k=1}^{i-1} U_{ki}^T \tilde{D}_k U_{ki}, \quad i = 1, \dots, c$$

$$U_{ij} = \tilde{D}_i^{-1} (A_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} U_{ki}^T \tilde{D}_k U_{kj}), \quad j > i \quad (16)$$

без всякого заполнения. Степень векторизации в этом "идеальном" случае алгоритмов факторизации и решения систем с треугольными матрицами $\leq N/c$, где N - размерность системы, а c - число блоков в каждой строке и в каждом столбце матрицы. Хорошим приближением к "идеальной" разреженной матрице может служить матрица, полученная в

результате многоцветной нумерации неизвестных. Критерием удачной раскраски является требование, чтобы любая точка сетки имела цвет, отличный от цвета соседних узлов [10]. С увеличением количества цветов степень векторизации снижается, поэтому желательно использовать минимальное число цветов, позволяющее добиться приведения матрицы к виду (15). Такой способ раскраски не обязательно будет единственным. Анализ матриц-блоков A_{ij} при разном количестве цветов позволяет утверждать, что однодиагональной структуры этих блоков можно добиться, если использовать минимальное число цветов $s = 27$. При этом диагонали в A_{ij} могут быть и неглавными. На рис.2 показан пример 27-цветной нумерации узлов для части трехмерной регулярной сетки, $n_v = N/27$. Рассмотрим соответствующие блочные алгоритмы.

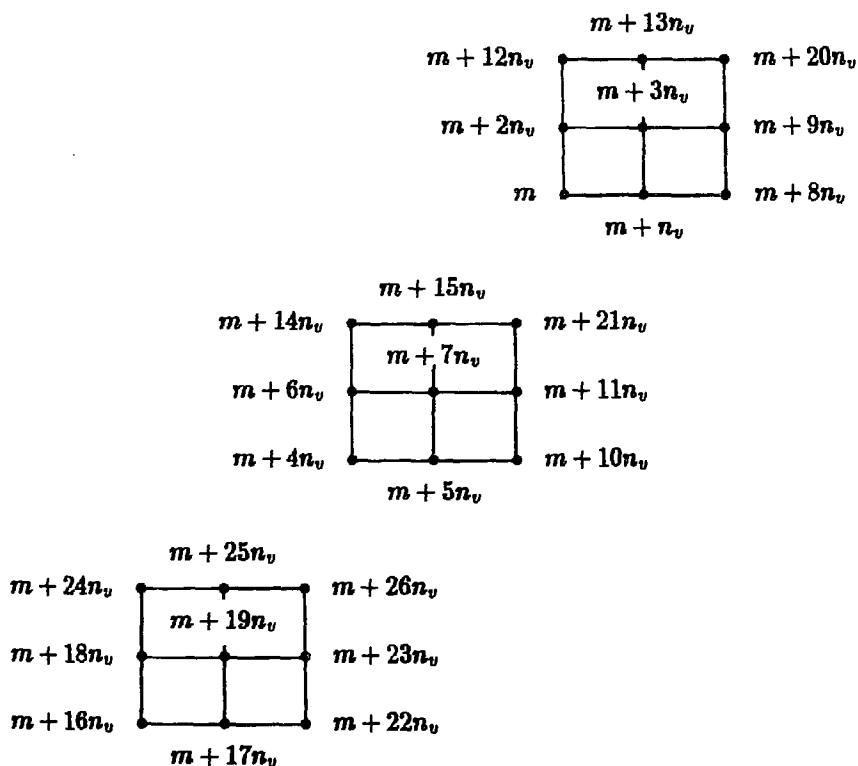


Рис. 2. 27-цветная нумерация узлов регулярной сетки.

Поскольку матрица A представляется в виде однодиагональных блоков, степень векторизации алгоритма умножения матрицы на вектор -

$\leq N/27$. Формулы блочного неполного разложения без заполнения в нашем случае имеют вид:

$$\hat{D}_i = D_i - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{U}_{ki}^T \hat{D}_k \tilde{U}_{ki}, \quad i = 1, \dots, c \quad (17)$$

$$\tilde{U}_{ij} = \hat{D}_i^{-1} (A_{ij} - E(A_{ij}) * \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{U}_{ki}^T \hat{D}_k \tilde{U}_{kj}), \quad j > i, \quad (18)$$

где

$$E(A_{ij}) = \{e_{nm}^{(ij)}\}_{n,m=1, \overline{N/c}}$$

$$e_{nm}^{(ij)} = \begin{cases} 1, & \text{если в блоке } A_{ij} \text{ его элементы } a_{nm}^{(ij)} \neq 0; \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Под произведением матриц (символ $*$) $C = E * S$ понимается прямое произведение элементов: $c_{ij} = e_{ij} s_{ij}$, где c_{ij}, e_{ij}, s_{ij} - элементы матриц C, E и S соответственно.

В формуле (17) для нахождения \hat{D}_i произведение \tilde{U}_{ki}^T на \hat{D}_k повторяет структуру блока \tilde{U}_{ki}^T . Последующее умножение на \tilde{U}_{ki} в результате дает диагональную матрицу. Принцип незаполнения состоит в том, что сумма в формуле (18) должна повторять структуру A_{ij} , т.е. возникающие дополнительные диагонали в дальнейших вычислениях не учитываются и блоки \tilde{U}_{ij} по-прежнему остаются однодиагональными. Степень векторизации этого алгоритма - $\leq N/c$, здесь c - число цветов.

В результате использования формул (17), (18) получаем факторизацию предобуславливателя в виде (15), где матрицы \tilde{U} и \hat{D} имеют блочную структуру:

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} \hat{D}_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \hat{D}_c \end{pmatrix}, \quad \tilde{U} = \begin{pmatrix} I_1 & \tilde{U}_{12} & \dots & \tilde{U}_{1c} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & I_{c-1} & \tilde{U}_{c-1,c} \\ 0 & \dots & 0 & I_c \end{pmatrix}.$$

Здесь \hat{D} - диагональная матрица.

Для решения систем (14) можно использовать блочные алгоритмы:

$$w_i = r_i - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{U}_{ki}^T w_k, \quad i = 1, \dots, c$$

и

$$\tilde{r}_i = \hat{D}_i^{-1} w_i - \sum_{i+1}^c \tilde{U}_{ik} r_k, \quad i = c, \dots, 1,$$

степень векторизации которых $\leq N/c$.

3. Результаты сравнения алгоритмов

Сравним вышеописанные алгоритмы на примере расчета пространственного магнитного поля спектрометрического магнита [3]. На рис.3 представлен общий вид магнита и некоторые характерные размеры, а на рис.4 - зависимость $\mu(B)$ для электротехнической стали.

Для решения дискретизованной системы уравнений (10), использовался итерационный процесс (11) при $B_n = F(y_n)$. Критерием окончания нелинейного итерационного процесса служило равенство:

$$(1/N_e) \sum_{j=1}^{N_e} |\mu_j^{n+1} - \mu_j^n| / \mu_j^n \leq 10^{-4},$$

где N_e - число элементов в области Ω_F . На каждой нелинейной итерации решение линеаризованной системы заканчивалось, как только выполнялось неравенство:

$$\|F_n y_n - f\|_2 / \|y_n\|_2 \leq 10^{-15},$$

где для некоторого вектора x : $\|x\|_2^2 = \sum_{i=1}^N x_i^2$.

Рассматривались четыре метода решения линеаризованной системы (12):

- 1 - многоцветная нумерация неизвестных, соответствующие блочные алгоритмы;
- 2 - естественная нумерация неизвестных, SCG;
- 3 - упорядочение по алгоритму RCM, стандартные алгоритмы неполной факторизации Холецкого, умножения матрицы на вектор и решения треугольных систем [16];
- 4 - естественная нумерация неизвестных для стандартного алгоритма неполной факторизации Холецкого и многоцветное упорядочение для умножения блочной матрицы на вектор и решения блочных треугольных систем.

Расчеты проводились на векторной ЭВМ CONVEX C120, характерной особенностью которой являются быстрые операции с векторами длиной 64 при вычислениях с двойной точностью.

Результаты сравнения методов представлены в таблице 1.

На самой грубой сетке время выполнения отдельных процедур для всех методов, за исключением второго, приблизительно одинаково. Для второго метода умножение матрицы на вектор осуществляется примерно в 2,5 раза быстрее благодаря более длинным векторам, участвующим в

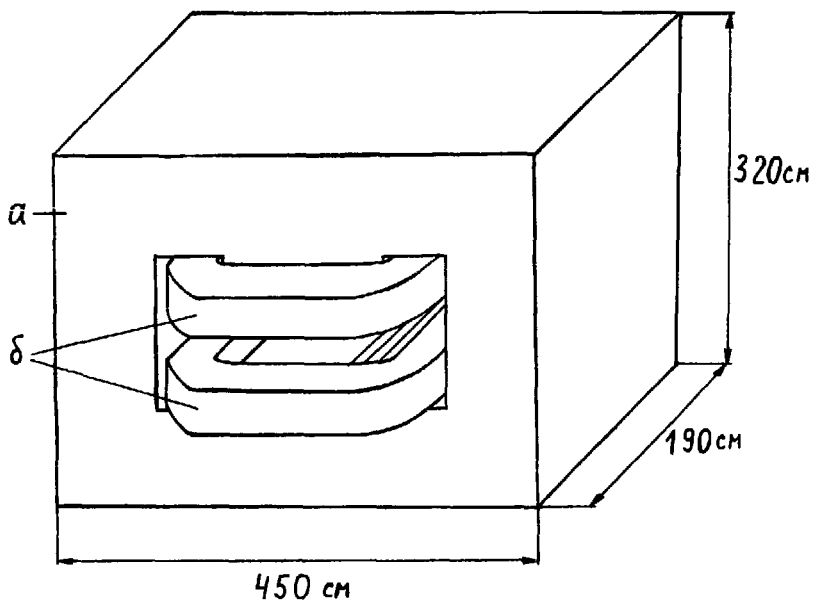


Рис. 3. Общий вид спектрометрического магнита: а) ферромагнетик, б) обмотка

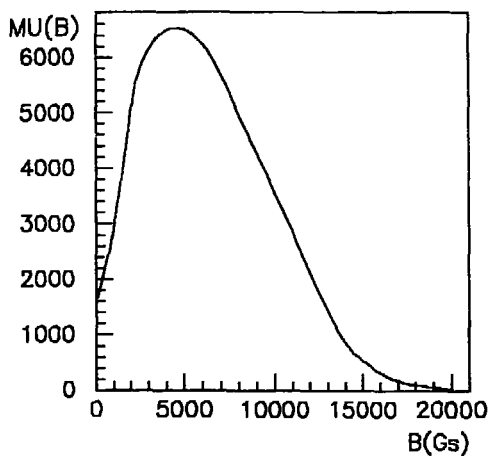


Рис. 4. Зависимость $\mu(B)$ для электротехнической стали

этой процедуре. По мере увеличения длины векторов методы 1 и 4 дают существенное сокращение процессорного времени, особенно для неполной факторизации и решения треугольных систем. Под средней длиной вектора в таблице 1 понимается среднее арифметическое длин всех ненулевых векторов.

Таблица 1

N	Метод	Средняя длина вектора	Неполная факторизация, с	Умножение матрицы на вектор, с	Решение системы с предобуславливателем, с
729	1	18,72	0,260	0,038	0,023
	2	670,77	-	0,013	-
	3	9,81	0,211	0,033	0,035
	4	9,81; 18,72	0,211	0,038	0,023
2916	1	99,95	0,378	0,045	0,047
	2	2857,77	-	0,041	-
	3	10,49	1,024	0,112	0,248
	4	10,49; 99,95	1,024	0,045	0,047
22680	1	793,23	1,90	0,278	0,339
	3	11,99	10,39	0,826	1,34
	4	11,99; 793,23	10,39	0,278	0,339
42120	1	1478,65	3,05	0,58	0,63
	3	12,20	20,47	1,79	2,49
	4	12,20; 1478,65	20,47	0,58	0,63

Отметим, что масштабирование системы (12) положительно сказывается на скорости сходимости практически всех видов метода неполного разложения Холецкого с сопряженными градиентами. Поэтому в наших экспериментах осуществлялось масштабирование системы (12) на каждой нелинейной итерации.

Из таблицы 2 видно влияние многоцветного упорядочения неизвестных на скорость сходимости метода 1. Блочное неполное разложение Холецкого выполняется существенно быстрее, чем стандартная факторизация (метод 3), но при этом качество предобуславливателя ухудшается, что приводит к значительному увеличению числа итераций. По мере увеличения размерности системы число итераций для метода 2 становится намного больше, чем для остальных методов, а использование

длинных векторов, ввиду особенности ЭВМ CONVEX C120, не дает существенного выигрыша во времени по сравнению с остальными методами. Лучшими качествами обладает комбинированный метод 4, объединяющий хорошие свойства предобуславливания, а также быстрые алгоритмы умножения матрицы на вектор и решения факторизованной системы.

Таблица 2

N	Метод	Число нелинейных итераций	Среднее число линейных итераций	Среднее время решения линейной системы, с
729	1	20	44,3	2,24
	2	20	123,15	1,45
	3	20	23,75	1,86
	4	20	23,75	2,28
2916	1	18	116,61	11,95
	2	18	379	18,99
	3	18	33,06	9,93
	4	18	33,06	4,33
22680	1	19	159,63	272,64
	3	19	61,10	212,64
	4	19	61,10	114,95
42120	1	22	166,54	439,37
	3	22	95,77	599,35
	4	22	95,77	269,45

В таблице 3 приведено общее время решения нелинейной системы методами 1, 3, 4. В это общее время входит:

- считывание с диска координат элементов, данных о структуре матрицы, потенциала ϕ^S ;
- вычисление градиентов в каждом элементе ферромагнетика, всех элементных матриц и сборка всей матрицы;
- на каждой нелинейной итерации:
 - а) - решение линеаризованной масштабированной системы;
 - б) - вычисление невязки и релаксация вектора неизвестных;
 - в) - вычисление новых значений μ в каждом элементе ферромагнетика и их включение в матрицу.

Анализ результатов таблицы 3 показывает, что даже более грубое предобусловливание с помощью блочных алгоритмов (метод 1) для достаточно большой размерности системы дает лучшее время решения нелинейной системы, чем стандартные алгоритмы (метод 3). Комбинированный метод 4, использующий для неполной факторизации вектора такой же длины как метод 3, а для остальных алгоритмов ICCG -вектора такой же длины как метод 1, по общему времени решения нелинейной системы превосходит метод 3 не меньше, чем в 2,3 раза.

Таблица 3

N	Метод	Общее время решения нелинейной системы
42120	1	3 часа 11 минут
	3	5 часов 5 минут
	4	2 часа 10 минут

Данная работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант N 94-01-01354-а).

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. *J.Simkin, C.W.Trowbridge*. Three dimensional non-linear electromagnetic field computations using scalar potentials. // Proc. IEE, 1980, vol. 127, Pt. B, N 6, pp. 368-374.
2. *N.J.Diserens, A.R.Mayhook*. Experience in the use of vector processors for 3D static analysis. // IEEE Trans. Mag., 1990, v. 26, N 2, pp. 831-833.
3. *Е.П.Жидков, М.Б.Юлдашева, И.П.Юдин, О.И.Юлдашев*, Математическое моделирование пространственного магнитного поля спектрометрического магнита СП-40. - Дубна: ОИЯИ, 1994, P11-94-160
4. *S.J.Polak, A.Wachters, A.de Beer* // Proc. 1-st Computmag Conf., - Oxford, 1976, pp. 19-27.
5. *Х.Гаевский, К.Грегер, К.Захарнас*. Нелинейные операторные уравнения и операторные дифференциальные уравнения.- М.: Мир, 1978, 336 с.
6. *Г.И.Марчук, В.И.Агошков*. Введение в проекционно-сеточные методы.- М.: Наука, 1981.

7. А.Р.Митчелл, Р.Уэйт. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными.- М.: Мир, 1981.
8. А.А.Самарский, Е.С.Николаев. Методы решения сеточных уравнений.- М.: Наука, 1978, 591 с.
9. D.Kershaw. The incomplete Choleski-conjugate gradient method for the iterative solution of systems of linear equations. // J. Comp. Phys., 1978, v. 26, pp. 43-65.
10. Дж.Ортега. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем.- М.: Мир, 1991, 364 с.
11. I.S.Duff, G.A.Meurant. The effect of ordering on preconditioned conjugate gradients. // BIT, 1987, v.29, N 4, pp.635-657.
12. А.Джордж, Дж.Лю. Численное решение больших разреженных систем уравнений.- М.: Мир, 1984, 333 с.
13. H.van der Vorst. ICCG and related methods for 3D problems on vector computers. // Computer Physics Communications, 1989, v.53, N 1-3, pp. 223-235.
14. G.Meurant. Practical use of the conjugate gradient method on parallel supercomputers.// Computer Physics Communications, 1989, v.53, N 1-3, pp. 467-477.
15. Math. Advantage. User manual-fortran version 4.0. - Quantitative Technology Corporation, 1992;
S.J.Sciutto. SPARSEM: a subroutine package to operate with large sparse matrices. // Computer Physics Communications, 1993, v.77, N 1, pp.84-94.
16. С.Писсанецки. Технология разреженных матриц.- М.: Мир, 1988, 411 с.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 мая 1994 года.