

О СХОДИМОСТИ И ТОЧНОСТИ МЕТОДА ИТЕРИРУЕМОЙ ПРИБЛИЖЕННОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ ОПЕРАТОРОВ МНОГОМЕРНЫХ ВЫСОКОТОЧНЫХ БИКОМПАКТНЫХ СХЕМ

© 2019 г. *Б.В. Rogov¹, А.В. Chikitkin²*

¹ Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Моск. обл.
rogov.boris@gmail.com, alexchikitkin@gmail.com

DOI: 10.1134/S0234087919120098

Исследована сходимость и точность метода решения высокоточных бикомпактных схем, имеющих четвертый порядок аппроксимации по пространственным переменным на минимальном шаблоне, для многомерного неоднородного уравнения переноса. Метод основан на приближенной факторизации разностных операторов многомерных бикомпактных схем. Кроме того, в нем используются итерации для сохранения высокого (выше второго) порядка точности бикомпактных схем по времени. С помощью спектрального метода удалось доказать сходимость этих итераций как для двумерных, так и для трехмерных бикомпактных схем для линейного неоднородного уравнения переноса с постоянными положительными коэффициентами. Проведено сравнение эффективности двух параллельных алгоритмов решения уравнений многомерных бикомпактных схем. Первый из них есть пространственный маршевый алгоритм счета нефакторизованных схем, а второй основан на итерируемой приближенной факторизации разностных операторов схем.

Ключевые слова: многомерное неоднородное линейное уравнение переноса, бикомпактные схемы, параллельные алгоритмы, метод итерируемой приближенной факторизации.

ABOUT THE CONVERGENCE AND ACCURACY OF THE METHOD OF ITERATIVE APPROXIMATE FACTORIZATION OF OPERATORS OF MULTIDIMENSIONAL HIGH-ACCURACY BICOMPACT SCHEMES

B.V. Rogov¹, A.V. Chikitkin²

¹ Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow

² Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny

In the work, the convergence and accuracy of the method of solving high-precision bicomcompact schemes having the fourth order of approximation in spatial variables on the minimum stencil for a multidimensional inhomogeneous advection equation are investigated. The method is based on the approximate factorization of difference operators of multidimensional bicomcompact schemes. In addition, it uses iterations to preserve a high

(higher than second) order of accuracy of bicomcompact schemes in time. Using the spectral method, we were able to prove the convergence of these iterations for both two-dimensional and three-dimensional bicomcompact schemes for a linear inhomogeneous advection equation with constant positive coefficients. The effectiveness of two parallel algorithms for solving multidimensional bicomcompact schemes equations is compared. The first of them is the spatial marching algorithm for calculation of non-factorized schemes, and the second is based on an iterative approximate factorization of difference operators of the schemes.

Key words: multidimensional inhomogeneous advection equation, bicomcompact schemes, parallel algorithms, iterative approximate factorization method.

1. Введение

Необходимость решения линейного неоднородного уравнения переноса возникает в задачах переноса излучения и переноса незаряженных частиц (нейтронов). Подобные задачи возникают во многих областях науки и техники: от расчетов атмосферной радиации и термоядерных мишеней до расчета активной зоны ядерного реактора (см., например, [1-3]).

Решение уравнения переноса является функцией распределения в фазовом пространстве и по физическому смыслу должно быть неотрицательно. Во многих случаях приходится решать это уравнение в сильно гетерогенной среде с большим количеством контактных разрывов (облака в атмосфере или различные материалы в активной зоне реактора). Поэтому к дискретной схеме для расчета уравнения переноса предъявляются соответствующие требования: схема должна обладать консервативностью и хорошим разрешением, чтобы адекватно учитывать разрыв коэффициентов и источников уравнения. Эта цель лучше всего достигается при аппроксимации определяющего уравнения на сеточном шаблоне, расположенном в рамках одной расчетной ячейки.

Схема, удовлетворяющая указанным требованиям, была предложена в работах [4,5] для одномерного (1D) однородного линейного уравнения переноса. Она построена методом прямых на минимальном пространственном шаблоне, состоящем из двух узлов, и названа бикомпактной схемой. В полудискретной (дискретной по пространству и непрерывной по времени) форме этой схемы четвертый порядок пространственной аппроксимации достигнут за счет добавления в число искомых функций вспомогательной зависимой переменной – первообразной основной искомой функции. Для этой зависимой переменной выводится дополнительное дискретное уравнение, являющееся аппроксимацией интегрального следствия основного дифференциального уравнения. Поскольку в схему [4,5] входила только конечная разность первообразной функции, то, начиная с [6], бикомпактная схема

стала записываться в более удобной для вычислений форме: конечные разности первообразной функции были заменены интегральными средними искомой функции по ячейкам сетки. В дальнейшем бикомпактные схемы были построены для двумерного (2D) и трехмерного (3D) нестационарного неоднородного линейного уравнения переноса [7, 8], для систем нестационарных многомерных квазилинейных уравнений гиперболического типа [9-11]. Отметим, что в бикомпактных схемах [9-13] для квазилинейных уравнений гиперболического типа повышение порядка пространственной аппроксимации обеспечивается не с помощью вспомогательных значений интегральных средних искомой функции по ячейкам сетки, а с помощью вспомогательных значений искомой функции в полужелтых узлах пространственной сетки. Для нахождения этих значений выводятся дополнительные разностные уравнения, которые являются аппроксимацией следствий основных дифференциальных уравнений. Для интегрирования уравнений полудискретных бикомпактных схем по времени обычно использовались A- и L-устойчивые диагонально неявные методы Рунге-Кутты (DIRK методы) [4-13]. Важнейшими достоинствами бикомпактных схем при нахождении гладких решений являются сохранение порядка точности на произвольной неравномерной пространственной сетке, экономичность маршевого метода решений уравнений схемы по каждой пространственной переменной, а также хорошее спектральное разрешение [5, 14, 15]. На основе высокоточных бикомпактных схем построены гибридные схемы для расчета разрывных решений уравнений гиперболического типа [7, 11]. Отметим, что бикомпактные схемы [7, 10, 11] для гиперболических уравнений первого порядка по каждой пространственной переменной, несмотря на четвертый порядок пространственной аппроксимации, имеют первый разностный порядок по каждой пространственной дискретной переменной (см. точное определение разностного порядка в [15, с.141]). Поэтому количество вычислительных граничных условий для бикомпактной схемы совпадает с количеством граничных условий для дифференциального уравнения первого порядка.

Для эффективного решения разностных уравнений высокоточных бикомпактных схем для нестационарного многомерного неоднородного линейного уравнения переноса в [8] предложен параллельный алгоритм бегущего счета. В настоящей работе рассматривается другой параллельный алгоритм решения этой системы разностных уравнений. Он основан на приближенной факторизации многомерных разностных операторов. В этом алгоритме используются итерации для сохранения высокого (выше второго) порядка точности схем по времени [12, 13]. Важнейшей частью данной ра-

боты являются доказательства сходимости этих итераций как в двумерном, так и в трехмерном случае. В работе проведено сравнение эффективности двух вышеуказанных параллельных алгоритмов счета уравнений многомерных бикompактных схем – алгоритма бегущего счета нефакторизованных схем и алгоритма счета факторизованных схем.

Статья организована следующим образом. В разд.2 описана процедура получения полудискретных многомерных бикompактных схем четвертого порядка пространственной аппроксимации на примере трехмерного нестационарного линейного неоднородного уравнения переноса. В разд.3 излагается метод итерированной приближенной факторизации операторов многомерной бикompактной схемы для нестационарного неоднородного линейного уравнения переноса, приводятся доказательства сходимости итераций в этом методе и тестовые расчеты для оценки его точности. В разд.4 проведено сравнение эффективности двух параллельных алгоритмов решения уравнений многомерных бикompактных схем. Выводы сформулированы в разд.5.

2. Бикompактные схемы

2.1. Уравнение переноса с постоянными коэффициентами. Основные содержательные моменты способа построения многомерных бикompактных схем [7, 8] без ограничения общности могут быть рассмотрены на примере трехмерного нестационарного уравнения переноса

$$L_3(u) = 0, \quad L_3(u) \equiv \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} + c \frac{\partial u}{\partial z} + \sigma u - q(x, y, z, t) \quad (1)$$

и его двумерного аналога

$$L_2(u) = 0, \quad L_2(u) \equiv \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} + \sigma u - q(x, y, t) \quad (2)$$

в предположении, что a, b, c и σ – постоянные положительные параметры.

Полудискретные схемы для уравнения переноса выводятся методом прямых путем дискретизации пространственных производных на минимальном шаблоне. В одномерном (1D) случае пространственный шаблон состоит из двух узлов x_{j+1}, x_j , в двумерном (2D) случае – из четырех узлов $(x_j, y_k), (x_{j+1}, y_k), (x_j, y_{k+1}), (x_{j+1}, y_{k+1})$, а в трехмерном (3D) случае – из восьми узлов $(x_\alpha, y_\beta, z_\gamma), \alpha = j, j+1, \beta = k, k+1, \gamma = l, l+1$. Благодаря тому, что в каждом пространственном направлении шаблон является двухточечным, схемы называются *бикompактными*. Вывод схемы рассмотрим для 3D случая. Поскольку он будет проводиться на минимальном пространственном шаблоне, то он справедлив в общем случае неравномерных декартовых сеток с шагами $h_x \equiv h_{x,j+1/2} = x_{j+1} - x_j, h_y \equiv h_{y,k+1/2} = y_{k+1} - y_k, h_z \equiv h_{z,l+1/2} = z_{l+1} - z_l$.

Для получения полудискретной схемы повышенного порядка аппроксимации по пространственным переменным наряду со значениями искомой функции u в узлах шаблона

$$u_{\alpha,\beta,\gamma}, \quad \alpha = j, j+1, \quad \beta = k, k+1, \quad \gamma = l, l+1 \quad (3)$$

вводятся вспомогательные величины:

1) интегральные средние по 12 ребрам 3D ячейки $G_{3D}=[x_j, x_{j+1}] \times [y_k, y_{k+1}] \times [z_l, z_{l+1}]$

$$\bar{u}_{j+1/2,\beta,\gamma}^x = \frac{1}{h_x} \int_{x_j}^{x_{j+1}} u(x, y_\beta, z_\gamma, t) dx, \quad \bar{u}_{\alpha,k+1/2,\gamma}^y = \frac{1}{h_y} \int_{y_k}^{y_{k+1}} u(x_\alpha, y, z_\gamma, t) dy, \quad (4)$$

$$\bar{u}_{\alpha,\beta,l+1/2}^z = \frac{1}{h_z} \int_{z_l}^{z_{l+1}} u(x_\alpha, y_\beta, z, t) dz, \quad \alpha = j, j+1, \quad \beta = k, k+1, \quad \gamma = l, l+1,$$

2) интегральные средние по 6 граням ячейки

$$\bar{u}_{j+1/2,k+1/2,\gamma}^{xy} = \frac{1}{h_x h_y} \int_{x_j}^{x_{j+1}} \int_{y_k}^{y_{k+1}} u(x, y, z_\gamma, t) dy dx,$$

$$\bar{u}_{j+1/2,\beta,l+1/2}^{xz} = \frac{1}{h_x h_z} \int_{x_j}^{x_{j+1}} \int_{z_l}^{z_{l+1}} u(x, y_\beta, z, t) dz dx, \quad (5)$$

$$\bar{u}_{\alpha,k+1/2,l+1/2}^{yz} = \frac{1}{h_y h_z} \int_{y_k}^{y_{k+1}} \int_{z_l}^{z_{l+1}} u(x_\alpha, y, z, t) dz dy,$$

$$\alpha = j, j+1, \quad \beta = k, k+1, \quad \gamma = l, l+1,$$

3) интегральное среднее по этой ячейке

$$\bar{u}_{j+1/2,k+1/2,l+1/2}^{xyz} = \frac{1}{h_x h_y h_z} \int_{x_j}^{x_{j+1}} \int_{y_k}^{y_{k+1}} \int_{z_l}^{z_{l+1}} u(x, y, z, t) dz dy dx. \quad (6)$$

В (3)–(6) величины $u_{j+1,k+1,l+1}$, $\bar{u}_{j+1/2,k+1,l+1}^x$, $\bar{u}_{j+1,k+1/2,l+1}^y$, $\bar{u}_{j+1,k+1,l+1/2}^z$, $\bar{u}_{j+1/2,k+1/2,l+1}^{xy}$, $\bar{u}_{j+1/2,k+1,l+1/2}^{xz}$, $\bar{u}_{j+1,k+1/2,l+1/2}^{yz}$, $\bar{u}_{j+1/2,k+1/2,l+1/2}^{xyz}$ являются неизвестными функциями времени при $a > 0$, $b > 0$, $c > 0$ (другие знаки рассматриваются аналогично), а другие величины известны либо из расчетов в соседних ячейках, либо из начальных и граничных условий. Уравнения для этих переменных могут быть получены интегрированием по пространственной

ячейке G_{3D} исходного уравнения (1), а также семи независимых его дифференциальных следствий:

$$\begin{aligned} \partial L_3(u) / \partial x = 0, \quad \partial L_3(u) / \partial y = 0, \quad \partial L_3(u) / \partial z = 0, \quad \partial^2 L_3(u) / (\partial x \partial y) = 0, \\ \partial^2 L_3(u) / (\partial x \partial z) = 0, \quad \partial^2 L_3(u) / (\partial y \partial z) = 0, \quad \partial^3 L_3(u) / (\partial x \partial y \partial z) = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Результаты интегрирования уравнений (1), (7) по ячейке G_{3D} можно представить в компактной форме

$$\begin{aligned} A^z A^y A^x (u_t)_C + (aA^z A^y \Lambda_1^x + bA^z \Lambda_1^y A^x + c\Lambda_1^z A^y A^x + \sigma A^z A^y A^x) u_C = A^z A^y A^x q_C, \\ A^z A^y \Lambda_1^x (u_t)_C + (aA^z A^y \Lambda_2^x + bA^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + c\Lambda_1^z A^y \Lambda_1^x + \sigma A^z A^y \Lambda_1^x) u_C = A^z A^y \Lambda_1^x q_C, \\ A^z \Lambda_1^y A^x (u_t)_C + (aA^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + bA^z \Lambda_2^y A^x + c\Lambda_1^z \Lambda_1^y A^x + \sigma A^z \Lambda_1^y A^x) u_C = A^z \Lambda_1^y A^x q_C, \\ A^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x (u_t)_C + (aA^z \Lambda_1^y \Lambda_2^x + bA^z \Lambda_2^y \Lambda_1^x + c\Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + \sigma A^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x) u_C = A^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x q_C, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_1^z A^y A^x (u_t)_C + (a\Lambda_1^z A^y \Lambda_1^x + b\Lambda_1^z \Lambda_1^y A^x + c\Lambda_2^z A^y A^x + \sigma \Lambda_1^z A^y A^x) u_C = \Lambda_1^z A^y A^x q_C, \\ \Lambda_1^z A^y \Lambda_1^x (u_t)_C + (a\Lambda_1^z A^y \Lambda_2^x + b\Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + c\Lambda_2^z A^y \Lambda_1^x + \sigma \Lambda_1^z A^y \Lambda_1^x) u_C = \Lambda_1^z A^y \Lambda_1^x q_C, \\ \Lambda_1^z \Lambda_1^y A^x (u_t)_C + (a\Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + b\Lambda_1^z \Lambda_2^y A^x + c\Lambda_2^z \Lambda_1^y A^x + \sigma \Lambda_1^z \Lambda_1^y A^x) u_C = \Lambda_1^z \Lambda_1^y A^x q_C, \\ \Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x (u_t)_C + (a\Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_2^x + b\Lambda_1^z \Lambda_2^y \Lambda_1^x + c\Lambda_2^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + \sigma \Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x) u_C = \Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x q_C, \end{aligned}$$

если ввести следующие операторы:

$$\begin{aligned} A^x u_{j+1/2, \beta, \gamma} = \bar{u}_{j+1/2, \beta, \gamma}^x, \quad A^y u_{\alpha, k+1/2, \gamma} = \bar{u}_{\alpha, k+1/2, \gamma}^y, \quad A^z u_{\alpha, \beta, l+1/2} = \bar{u}_{\alpha, \beta, l+1/2}^z, \\ \Lambda_1^x u_{j+1/2, \beta, \gamma} = (u_{j+1, \beta, \gamma} - u_{j, \beta, \gamma}) / h_x, \quad \Lambda_1^y u_{\alpha, k+1/2, \gamma} = (u_{\alpha, k+1, \gamma} - u_{\alpha, k, \gamma}) / h_y, \\ \Lambda_1^z u_{\alpha, \beta, l+1/2} = (u_{\alpha, \beta, l+1} - u_{\alpha, \beta, l}) / h_z, \\ A^x u_{j+1/2, \beta, \gamma} = \bar{u}_{j+1/2, \beta, \gamma}^x, \quad A^y u_{\alpha, k+1/2, \gamma} = \bar{u}_{\alpha, k+1/2, \gamma}^y, \quad A^z u_{\alpha, \beta, l+1/2} = \bar{u}_{\alpha, \beta, l+1/2}^z, \\ \Lambda_1^x u_{j+1/2, \beta, \gamma} = (u_{j+1, \beta, \gamma} - u_{j, \beta, \gamma}) / h_x, \quad \Lambda_1^y u_{\alpha, k+1/2, \gamma} = (u_{\alpha, k+1, \gamma} - u_{\alpha, k, \gamma}) / h_y, \\ \Lambda_1^z u_{\alpha, \beta, l+1/2} = (u_{\alpha, \beta, l+1} - u_{\alpha, \beta, l}) / h_z, \\ \Lambda_2^x u_{j+1/2, \beta, \gamma} = 6(u_{j+1, \beta, \gamma} - 2\bar{u}_{j+1/2, \beta, \gamma}^x + u_{j, \beta, \gamma}) / h_x^2, \\ \Lambda_2^y u_{\alpha, k+1/2, \gamma} = 6(u_{\alpha, k+1, \gamma} - 2\bar{u}_{\alpha, k+1/2, \gamma}^y + u_{\alpha, k, \gamma}) / h_y^2, \\ \Lambda_2^z u_{\alpha, \beta, l+1/2} = 6(u_{\alpha, \beta, l+1} - 2\bar{u}_{\alpha, \beta, l+1/2}^z + u_{\alpha, \beta, l}) / h_z^2. \end{aligned} \quad (9)$$

В уравнениях (8) $u_t \equiv du / dt$, $C = (j+1/2, k+1/2, l+1/2)$ – мультииндекс. Операторы $A^r, \Lambda_1^r, \Lambda_2^r$ ($r = x, y, z$) имеют смысл операторов осреднения, первой и второй разностных производных соответственно.

Первое уравнение в (8) есть результат точного интегрирования основного уравнения (1), а остальные уравнения в (8) получены из уравнений (7) с использованием квадратурных формул Эйлера–Маклорена

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} u dx = \frac{h_x}{2}(u_{j+1} + u_j) - \frac{h_x^2}{12}(\partial_x u_{j+1} - \partial_x u_j) + O(h_x^5), \quad \partial_x u \equiv \frac{\partial u}{\partial x},$$

$$\int_{y_k}^{y_{k+1}} u dy = \frac{h_y}{2}(u_{k+1} + u_k) - \frac{h_y^2}{12}(\partial_y u_{k+1} - \partial_y u_k) + O(h_y^5), \quad \partial_y u \equiv \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (10)$$

$$\int_{z_l}^{z_{l+1}} u dz = \frac{h_z}{2}(u_{l+1} + u_l) - \frac{h_z^2}{12}(\partial_z u_{l+1} - \partial_z u_l) + O(h_z^5), \quad \partial_z u \equiv \frac{\partial u}{\partial z}.$$

и имеют 4-й порядок аппроксимации по пространственным переменным.

Уравнения полудискретной 2D бикompактной схемы могут быть получены интегрированием по пространственной ячейке $G_{2D} = [x_j, x_{j+1}] \times [y_k, y_{k+1}]$ исходного уравнения (2), а также трех независимых его дифференциальных следствий:

$$\partial L_2(u) / \partial x = 0, \quad \partial L_2(u) / \partial y = 0, \quad \partial^2 L_2(u) / (\partial x \partial y) = 0. \quad (11)$$

Полудискретная форма бикompактной схемы для уравнения (2) состоит из четырех обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

$$\begin{aligned} A^y A^x (u_t)_C + (aA^y \Lambda_1^x + b\Lambda_1^y A^x + \sigma A^y A^x) u_C &= A^y A^x q_C, \\ A^y \Lambda_1^x (u_t)_C + (aA^y \Lambda_2^x + b\Lambda_1^y \Lambda_1^x + \sigma A^y \Lambda_1^x) u_C &= A^y \Lambda_1^x q_C, \\ \Lambda_1^y A^x (u_t)_C + (a\Lambda_1^y \Lambda_1^x + b\Lambda_2^y A^x + \sigma \Lambda_1^y A^x) u_C &= \Lambda_1^y A^x q_C, \\ \Lambda_1^y \Lambda_1^x (u_t)_C + (a\Lambda_1^y \Lambda_2^x + b\Lambda_2^y \Lambda_1^x + \sigma \Lambda_1^y \Lambda_1^x) u_C &= \Lambda_1^y \Lambda_1^x q_C \end{aligned} \quad (12)$$

для определения четырех неизвестных величин $u_{j+1, k+1}$, $\bar{u}_{j+1/2, k+1}^x$, $\bar{u}_{j+1, k+1/2}^y$, $\bar{u}_{j+1/2, k+1/2}^{xy}$ при $a > 0$, $b > 0$ (другие знаки рассматриваются аналогично). В уравнениях (12) мультииндекс C равен $(j+1/2, k+1/2)$.

Для интегрирования по времени ОДУ (8) и (12) предлагается использовать А- и L-устойчивые диагонально неявные методы Рунге-Кутты (DIRK методы). Эти методы обеспечивают абсолютную устойчивость полностью дискретных бикompактных схем. Кроме того, DIRK методы являются экономичными по сравнению с полностью неявными методами Рунге-Кутты (РК). Вычисления на каждой стадии DIRK метода сводятся к решению уравнений полностью дискретной базовой бикompактной схемы со своим

стадийным начальным условием и шагом по времени. Базовая бикомпактная схема получается путем интегрирования полудискретной схемы по неявному методу Эйлера. Эта схема для 2D уравнения переноса (2) состоит из четырех разностных уравнений и имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 ((1 + \sigma\tau)A^y A^x + \tau a A^y \Lambda_1^x + \tau b \Lambda_1^y A^x) \hat{u}_C &= A^y A^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)A^y \Lambda_1^x + \tau a A^y \Lambda_2^x + \tau b \Lambda_1^y \Lambda_1^x) \hat{u}_C &= A^y \Lambda_1^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)\Lambda_1^y A^x + \tau a \Lambda_1^y \Lambda_1^x + \tau b \Lambda_2^y A^x) \hat{u}_C &= \Lambda_1^y A^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)\Lambda_1^y \Lambda_1^x + \tau a \Lambda_1^y \Lambda_2^x + \tau b \Lambda_2^y \Lambda_1^x) \hat{u}_C &= \Lambda_1^y \Lambda_1^x (u_C + \tau \hat{q}_C),
 \end{aligned} \tag{13}$$

где τ – шаг по времени, $\hat{u} = u^{n+1}$, $u = u^n$, n – номер временного слоя. Для 3D уравнения переноса (1) базовая бикомпактная схема состоит из восьми разностных уравнений

$$\begin{aligned}
 ((1 + \sigma\tau)A^z A^y A^x + a\tau A^z A^y \Lambda_1^x + b\tau A^z \Lambda_1^y A^x + c\tau \Lambda_1^z A^y A^x) \hat{u}_C &= A^z A^y A^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)A^z A^y \Lambda_1^x + a\tau A^z A^y \Lambda_2^x + b\tau A^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + c\tau \Lambda_1^z A^y \Lambda_1^x) \hat{u}_C &= A^z A^y \Lambda_1^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)A^z \Lambda_1^y A^x + a\tau A^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + b\tau A^z \Lambda_2^y A^x + c\tau \Lambda_1^z \Lambda_1^y A^x) \hat{u}_C &= A^z \Lambda_1^y A^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)A^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + a\tau A^z \Lambda_1^y \Lambda_2^x + b\tau A^z \Lambda_2^y \Lambda_1^x + c\tau \Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x) \hat{u}_C &= A^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)\Lambda_1^z A^y A^x + a\tau \Lambda_1^z A^y \Lambda_1^x + b\tau \Lambda_1^z \Lambda_1^y A^x + c\tau \Lambda_2^z A^y A^x) \hat{u}_C &= \Lambda_1^z A^y A^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)\Lambda_1^z A^y \Lambda_1^x + a\tau \Lambda_1^z A^y \Lambda_2^x + b\tau \Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + c\tau \Lambda_2^z A^y \Lambda_1^x) \hat{u}_C &= \Lambda_1^z A^y \Lambda_1^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)\Lambda_1^z \Lambda_1^y A^x + a\tau \Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + b\tau \Lambda_1^z \Lambda_2^y A^x + c\tau \Lambda_2^z \Lambda_1^y A^x) \hat{u}_C &= \Lambda_1^z \Lambda_1^y A^x (u_C + \tau \hat{q}_C), \\
 ((1 + \sigma\tau)\Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x + a\tau \Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_2^x + b\tau \Lambda_1^z \Lambda_2^y \Lambda_1^x + c\tau \Lambda_2^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x) \hat{u}_C &= \Lambda_1^z \Lambda_1^y \Lambda_1^x (u_C + \tau \hat{q}_C).
 \end{aligned} \tag{14}$$

2.2. Уравнение переноса с переменными коэффициентами. Уравнения полудискретной бикомпактной схемы для двумерного уравнения переноса

$$L_2(u) = 0, \quad L_2(u) \equiv \partial u / \partial t + \partial(a u) / \partial x + \partial(b u) / \partial y + \sigma u - q(x, y, t) \tag{15}$$

с переменными коэффициентами $a = a(x, y, t) > 0$, $b = b(x, y, t) > 0$, $\sigma = \sigma(x, y, t) > 0$ получаются за два шага. Сначала выводится система четырех уравнений

$$\begin{aligned}
 A^y A^x (u_t)_C + A^y \Lambda_1^x (a u)_C + \Lambda_1^y A^x (b u)_C + A^y A^x (\sigma u)_C &= A^y A^x q_C, \\
 A^y \Lambda_1^x (u_t)_C + A^y \Lambda_2^x (a u)_C + \Lambda_1^y \Lambda_1^x (b u)_C + A^y \Lambda_1^x (\sigma u)_C &= A^y \Lambda_1^x q_C, \\
 \Lambda_1^y A^x (u_t)_C + \Lambda_1^y \Lambda_1^x (a u)_C + \Lambda_2^y A^x (b u)_C + \Lambda_1^y A^x (\sigma u)_C &= \Lambda_1^y A^x q_C, \\
 \Lambda_1^y \Lambda_1^x (u_t)_C + \Lambda_1^y \Lambda_2^x (a u)_C + \Lambda_2^y \Lambda_1^x (b u)_C + \Lambda_1^y \Lambda_1^x (\sigma u)_C &= \Lambda_1^y \Lambda_1^x q_C
 \end{aligned} \tag{16}$$

таким же способом, как и система уравнений (12), из основного уравнения (15) и его дифференциальных следствий (11). Затем система уравнений (16) преобразуется к окончательному виду путем замены членов типа $A^x(au)_{j+1/2,\beta}$, $A^y(au)_{\alpha,k+1/2}$, $A^y A^x(au)_C$ на выражения в правых частях приближенных равенств

$$\begin{aligned}
 A^x(au)_{j+1/2,\beta} &\approx (a\bar{u}^x)_{j+1/2,\beta} + \frac{1}{6} \left[(au)_{j+1,\beta} + (au)_{j,\beta} - a_{j+1/2,\beta}(u_{j+1,\beta} + u_{j,\beta}) \right], \\
 A^y(au)_{\alpha,k+1/2} &\approx (a\bar{u}^y)_{\alpha,k+1/2} + \frac{1}{6} \left[(au)_{\alpha,k+1} + (au)_{\alpha,k} - a_{\alpha,k+1/2}(u_{\alpha,k+1} + u_{\alpha,k}) \right], \\
 A^y A^x(au)_C &\approx (a\bar{u}^{xy})_C - \frac{1}{6} a_C (\bar{u}_{j+1/2,k+1}^x + \bar{u}_{j+1/2,k}^x + \bar{u}_{j+1,k+1/2}^y + \bar{u}_{j,k+1/2}^x) + \\
 &+ \frac{1}{6} \left[(a\bar{u}^x)_{j+1/2,k+1} + (a\bar{u}^x)_{j+1/2,k} + (a\bar{u}^y)_{j+1,k+1/2} + (a\bar{u}^y)_{j,k+1/2} \right] + \\
 &+ \frac{1}{36} \left[(au)_{j+1,k+1} + (au)_{j+1,k} + (au)_{j,k+1} + (au)_{j,k} \right] + \\
 &+ \frac{1}{36} a_C (u_{j+1,k+1} + u_{j+1,k} + u_{j,k+1} + u_{j,k}) - \\
 &- \frac{1}{36} \left[a_{j+1,k+1/2}(u_{j+1,k+1} + u_{j+1,k}) + a_{j,k+1/2}(u_{j,k+1} + u_{j,k}) \right] - \\
 &- \frac{1}{36} \left[a_{j+1/2,k+1}(u_{j+1,k+1} + u_{j,k+1}) + a_{j+1/2,k}(u_{j+1,k} + u_{j,k}) \right],
 \end{aligned}$$

полученных с использованием квадратурной формулы Симпсона и выполняющихся с точностью до величин $O(h_x^4)$, $O(h_y^4)$, $O(h_x^4 + h_y^4 + h_x^4 h_y^4)$ соответственно. Окончательная система четырех полудискретных уравнений будет системой для определения четырех неизвестных величин $u_{j+1,k+1}$, $\bar{u}_{j+1/2,k+1}^x$, $\bar{u}_{j+1,k+1/2}^y$, $\bar{u}_{j+1/2,k+1/2}^{xy}$. Аналогичным образом можно вывести уравнения полудискретной бикомпактной схемы для трехмерного уравнения переноса с переменными коэффициентами.

3. Метод итерированной приближенной факторизации

С увеличением размерности задачи d число уравнений в каждой ячейке растёт как 2^d . При решении методом бегущего счёта в каждой ячейке решается система размерности 2^d с помощью прямого метода Гаусса, который имеет сложность $C \times (2^d)^3 = C \times 2^{3d}$. Уже при $d = 3$ это приводит к сильному росту вычислительных затрат по сравнению с одномерным случа-

ем. Среди способов, которые позволяют избежать такого роста, можно упомянуть расщепление по направлениям (local one-dimensional scheme – LOD scheme), метод переменных направлений и методы приближенной факторизации линейных систем разностных уравнений. Большинство этих способов приводят к падению порядка точности до второго.

Разностные уравнения многомерных бикompактных схем также могут быть приближенно факторизованы. Для сохранения высокого порядка схем по времени строится итерационная процедура на основе приближенной факторизации. Ниже эта процедура излагается для 2D и 3D бикompактных схем, предназначенных для численного решения неоднородного уравнения переноса.

3.1. Двумерная схема ($d = 2$). Рассмотрим базовую схему (13), когда система ОДУ (12) интегрируется неявным методом Эйлера. Введем следующие операторы:

$$\begin{aligned} B_1^r(s) &= A^r + \tau C_1^r(s), & B_2^r(s) &= \Lambda_1^r + \tau C_2^r(s), & r &= x, y, \\ C_1^r(s) &= \frac{1}{2} \sigma A^r + s \Lambda_1^r, & C_2^r(s) &= \frac{1}{2} \sigma \Lambda_1^r + s \Lambda_2^r. \end{aligned} \quad (17)$$

Операторы, стоящие в левых частях уравнений (13), допускают следующее представление:

$$\begin{aligned} A^y A^x (1 + \sigma\tau) + \tau a A^y \Lambda_1^x + \tau b \Lambda_1^y A^x &= B_1^y(b) B_1^x(a) - \tau^2 C_1^y(b) C_1^x(a), \\ A^y \Lambda_1^x (1 + \sigma\tau) + \tau a A^y \Lambda_2^x + \tau b \Lambda_1^y \Lambda_1^x &= B_1^y(b) B_2^x(a) - \tau^2 C_1^y(b) C_2^x(a), \\ \Lambda_1^y A^x (1 + \sigma\tau) + \tau a \Lambda_1^y \Lambda_1^x + \tau b \Lambda_2^y A^x &= B_2^y(b) B_1^x(a) - \tau^2 C_2^y(b) C_1^x(a), \\ \Lambda_1^y \Lambda_1^x (1 + \sigma\tau) + \tau a \Lambda_1^y \Lambda_2^x + \tau b \Lambda_2^y \Lambda_1^x &= B_2^y(b) B_2^x(a) - \tau^2 C_2^y(b) C_2^x(a). \end{aligned} \quad (18)$$

С учетом равенств (18) уравнения (13) можно записать таким образом:

$$\begin{aligned} B_1^y(b) B_1^x(a) \hat{u}_C &= A^y A^x (u_C + \tau \hat{q}_C) + \tau^2 C_1^y(b) C_1^x(a) \hat{u}_C, \\ B_1^y(b) B_2^x(a) \hat{u}_C &= A^y \Lambda_1^x (u_C + \tau \hat{q}_C) + \tau^2 C_1^y(b) C_2^x(a) \hat{u}_C, \\ B_2^y(b) B_1^x(a) \hat{u}_C &= \Lambda_1^y A^x (u_C + \tau \hat{q}_C) + \tau^2 C_2^y(b) C_1^x(a) \hat{u}_C, \\ B_2^y(b) B_2^x(a) \hat{u}_C &= \Lambda_1^y \Lambda_1^x (u_C + \tau \hat{q}_C) + \tau^2 C_2^y(b) C_2^x(a) \hat{u}_C. \end{aligned} \quad (19)$$

Из структуры системы уравнений (19) видно, что её можно приближенно факторизовать при малых τ , отбросив последние члены в правых частях. Это обстоятельство позволяет использовать для решения системы (19) следующий итерационный метод:

$$\begin{aligned}
 B_1^y(b)B_1^x(a)\hat{u}_C^{(i+1)} &= A^y A^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_1^y(b)C_1^x(a)\hat{u}_C^{(i)}, \\
 B_1^y(b)B_2^x(a)\hat{u}_C^{(i+1)} &= A^y \Lambda_1^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_1^y(b)C_2^x(a)\hat{u}_C^{(i)}, \\
 B_2^y(b)B_1^x(a)\hat{u}_C^{(i+1)} &= \Lambda_1^y A^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_2^y(b)C_1^x(a)\hat{u}_C^{(i)}, \\
 B_2^y(b)B_2^x(a)\hat{u}_C^{(i+1)} &= \Lambda_1^y \Lambda_1^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_2^y(b)C_2^x(a)\hat{u}_C^{(i)},
 \end{aligned} \tag{20}$$

где i – номер итерации. Начальное приближение $\hat{u}^{(0)}$ можно взять нулевым. Решение уравнений (20) относительно $\hat{u}^{(i+1)}$ можно найти, сначала решая две системы уравнений для сеточных функций v_1, v_2 :

$$\begin{cases}
 B_1^y(b)v_1 = A^y A^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_1^y(b)C_1^x(a)\hat{u}_C^{(i)}, \\
 B_2^y(b)v_1 = \Lambda_1^y A^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_2^y(b)C_1^x(a)\hat{u}_C^{(i)}, \\
 B_1^y(b)v_2 = A^y \Lambda_1^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_1^y(b)C_2^x(a)\hat{u}_C^{(i)}, \\
 B_2^y(b)v_2 = \Lambda_1^y \Lambda_1^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_2^y(b)C_2^x(a)\hat{u}_C^{(i)},
 \end{cases} \tag{21}$$

а затем – систему уравнений

$$\begin{cases}
 B_1^x(a)\hat{u}^{(i+1)} = v_1, \\
 B_2^x(a)\hat{u}^{(i+1)} = v_2.
 \end{cases} \tag{22}$$

Граничные условия для задач (21) относительно v_1, v_2 вычисляются из выражений (22).

Одномерные уравнения (21) требуется решать на координатных линиях $x = x_{j+1/2}$, $j = \overline{1, N_x}$ (N_x – число ячеек сетки по направлению x):

$$\begin{cases}
 B_1^y(b)v_{1,j+1/2,k+1/2} = A^y A^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_1^y(b)C_1^x(a)\hat{u}_C^{(i)}, \\
 B_2^y(b)v_{1,j+1/2,k+1/2} = \Lambda_1^y A^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_2^y(b)C_1^x(a)\hat{u}_C^{(i)}, \\
 B_1^y(b)v_{2,j+1/2,k+1/2} = A^y \Lambda_1^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_1^y(b)C_2^x(a)\hat{u}_C^{(i)}, \\
 B_2^y(b)v_{2,j+1/2,k+1/2} = \Lambda_1^y \Lambda_1^x(u_C + \tau\hat{q}_C) + \tau^2 C_2^y(b)C_2^x(a)\hat{u}_C^{(i)}.
 \end{cases} \tag{23}$$

Одномерные уравнения (22) требуется решать на линиях $y = y_{k+1/2}$

$$\begin{cases}
 B_1^x(a)(\hat{u}^y)_{j+1/2,k+1/2}^{(i+1)} = \bar{v}_{1,j+1/2,k+1/2}^y, \\
 B_2^x(a)(\hat{u}^y)_{j+1/2,k+1/2}^{(i+1)} = \bar{v}_{2,j+1/2,k+1/2}^y
 \end{cases} \tag{24}$$

и линиях $y = y_{k+1}$, $k = \overline{1, N_y}$ (N_y – число ячеек сетки по направлению y)

$$\begin{cases} B_1^x(a)\hat{u}_{j+1/2,k+1}^{(i+1)} = v_{1,j+1/2,k+1}, \\ B_2^x(a)\hat{u}_{j+1/2,k+1}^{(i+1)} = v_{2,j+1/2,k+1}. \end{cases} \quad (25)$$

Уравнения (24) следуют из уравнений (22), если к ним применить оператор осреднения A^y . В итоге на каждом временном слое нужно решить $2(N_x+N_y)$ одномерных задач. Каждая одномерная задача решается методом бегущего счета. Факторизованная схема имеет два преимущества перед исходной (нефакторизованной) схемой. Во-первых, при решении одномерных задач обрабатываются матрицы размерности 2×2 вместо матриц размерности $2^d \times 2^d$. Во-вторых, одномерные задачи вдоль разных сеточных линий на каждой итерации можно решать независимо, поэтому алгоритм может быть эффективно распараллелен, в отличие от исходной схемы с более сложной зависимостью данных.

Рассмотрим вопрос о сходимости итерационного метода (20). Этот метод можно записать в матрично-векторном виде:

$$\mathbf{M}_y \mathbf{M}_x \hat{\mathbf{v}}^{(i+1)} = \mathbf{N} \hat{\mathbf{v}}^{(i)} + \boldsymbol{\Psi}, \quad \mathbf{v} = (\bar{u}_{j+1/2,k+1/2}^{xy}, \bar{u}_{j+1,k+1/2}^y, \bar{u}_{j+1/2,k+1}^x, u_{j+1,k+1})^T, \quad (26)$$

$$\mathbf{M}_y = \begin{bmatrix} \theta & 0 & \kappa_y & 0 \\ 0 & \theta & 0 & \kappa_y \\ -12\kappa_y & 0 & \theta+6\kappa_y & 0 \\ 0 & -12\kappa_y & 0 & \theta+6\kappa_y \end{bmatrix}, \quad \mathbf{M}_x = \begin{bmatrix} \theta & \kappa_x & 0 & 0 \\ -12\kappa_x & \theta+6\kappa_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \theta & \kappa_x \\ 0 & 0 & -12\kappa_x & \theta+6\kappa_x \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} (\theta-1)^2 & (\theta-1)\kappa_x & (\theta-1)\kappa_y & \kappa_x\kappa_y \\ -12(\theta-1)\kappa_x & (\theta-1)(\theta-1+6\kappa_x) & -12\kappa_x\kappa_y & \kappa_y(\theta-1+6\kappa_x) \\ -12(\theta-1)\kappa_y & -12\kappa_x\kappa_y & (\theta-1)(\theta-1+6\kappa_y) & \kappa_x(\theta-1+6\kappa_y) \\ 144\kappa_x\kappa_y & -12\kappa_y(\theta-1+6\kappa_x) & -12\kappa_x(\theta-1+6\kappa_y) & (\theta-1+6\kappa_x)(\theta-1+6\kappa_y) \end{bmatrix},$$

где $\theta=1+(\sigma\tau)/d$; $\kappa_x=a\tau/h_x$, $\kappa_y=b\tau/h_y$ – числа Куранта; $\boldsymbol{\Psi}=(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)^T$ – вектор-столбец, включающий известные значения величин с предыдущего временного слоя, значения, известные из граничных условий или уже вычисленные в предыдущих ячейках, а также значения известной источниковой функции q .

Матрицы $\mathbf{M}_x, \mathbf{M}_y, \mathbf{N}$ можно представить в виде следующих кронекеровых произведений матриц:

$$\mathbf{M}_x = \mathbf{E} \otimes \mathbf{P}_x, \quad \mathbf{M}_y = \mathbf{P}_y \otimes \mathbf{E}, \quad \mathbf{N} = (\mathbf{P}_y - \mathbf{E}) \otimes (\mathbf{P}_x - \mathbf{E}), \quad (27)$$

$$\mathbf{P}_r = \theta \mathbf{E} + \kappa_r \mathbf{R}, \quad \mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -12 & 6 \end{bmatrix}. \quad (28)$$

Произведение матриц $\mathbf{M}_y, \mathbf{M}_x$ можно преобразовать следующим образом:

$$\mathbf{M}_y \mathbf{M}_x = (\mathbf{P}_y \otimes \mathbf{E})(\mathbf{E} \otimes \mathbf{P}_x) = \mathbf{P}_y \otimes \mathbf{P}_x. \quad (29)$$

Запишем итерационный метод (26) в рекуррентном виде

$$\mathbf{v}^{(i+1)} = \mathbf{S} \mathbf{v}^{(i)} + \xi, \quad (30)$$

где матрица шага метода

$$\mathbf{S} = (\mathbf{M}_y \mathbf{M}_x)^{-1} \mathbf{N}. \quad (31)$$

С учетом формул (27), (29) матрица шага (31) итерационного метода может быть записана как кронекерово произведение двух матриц, каждая из которых связана только с одним пространственным направлением:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= (\mathbf{P}_y \otimes \mathbf{P}_x)^{-1} [(\mathbf{P}_y - \mathbf{E}) \otimes (\mathbf{P}_x - \mathbf{E})] = (\mathbf{P}_y^{-1} \otimes \mathbf{P}_x^{-1}) [(\mathbf{P}_y - \mathbf{E}) \otimes (\mathbf{P}_x - \mathbf{E})] = \\ &= (\mathbf{E} - \mathbf{P}_y^{-1}) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{P}_x^{-1}) = (\mathbf{E} - \mathbf{T}_y) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_x), \quad \mathbf{T}_r = \mathbf{P}_r^{-1}. \end{aligned} \quad (32)$$

Благодаря представлению (32) для матрицы \mathbf{S} , ее собственные значения $\lambda(\mathbf{S})$ равны произведению собственных значений λ_y, λ_x матриц $\mathbf{E} - \mathbf{T}_y, \mathbf{E} - \mathbf{T}_x$

$$\lambda(\mathbf{S}) = \lambda_y \lambda_x, \quad (33)$$

$$\lambda_r = \frac{12\kappa_r^2 + (6\theta - 3 \pm i\sqrt{3})\kappa_r + \theta(\theta - 1)}{12\kappa_r^2 + 6\theta\kappa_r + \theta^2}. \quad (34)$$

Модули комплексно сопряженных чисел λ_r (34) одинаковы и равны

$$\begin{aligned} |\lambda_r| &= \frac{\sqrt{(12\kappa_r^2 + 3(2\theta - 1)\kappa_r + \theta(\theta - 1))^2 + 3\kappa_r^2}}{12\kappa_r^2 + 6\theta\kappa_r + \theta^2} = \\ &= \sqrt{1 - \frac{6\kappa_r + 2\theta - 1}{12\kappa_r^2 + 6\theta\kappa_r + \theta^2}} < 1 \quad \forall \kappa_r > 0, \quad \theta \geq 1, \end{aligned} \quad (35)$$

поэтому в силу равенства (33) спектральный радиус $\rho(\mathbf{S})$ матрицы шага \mathbf{S} равен

$$\rho(\mathbf{S}) = |\lambda_y| |\lambda_x| < 1 \quad \forall \kappa_x > 0, \quad \kappa_y > 0, \quad \theta \geq 1. \quad (36)$$

Поскольку спектральный радиус стационарного итерационного процесса (29) меньше единицы при любых $\kappa_y > 0, \kappa_x > 0, \theta \geq 1$, то итерации всегда сходятся.

Отметим, что ранее в работах [12, 13] дано доказательство сходимости метода итерируемой приближенной факторизации бикompактных схем для нестационарного 2D линейного *однородного* уравнения переноса с постоянными коэффициентами.

В случае уравнения переноса (15) с переменными коэффициентами описанный выше итерационный алгоритм метода итерируемой приближенной факторизации модифицируется. Рассмотрим эту модификацию на примере первого уравнения системы полудискретных уравнений (16). Сначала это уравнение перепишем в виде

$$\begin{aligned} A^y A^x (u_t)_C + (a_C A^y \Lambda_1^x + b_C \Lambda_1^y A^x + \sigma_C A^y A^x) u_C &= A^y A^x q_C + e_1, \\ e_1 &= A^y \Lambda_1^x ((a_C - a)u)_C + \Lambda_1^y A^x ((b_C - b)u)_C + A^y A^x ((\sigma_C - \sigma)u)_C, \end{aligned} \quad (37)$$

где величина $e_1 = O(h)$ мала для достаточно гладких коэффициентов уравнения (15) и $h \ll 1$. Уравнение (37) в случае базовой бикompактной схемы для уравнения (15) примет вид

$$\left((1 + \sigma_C \tau) A^y A^x + \tau a_C A^y \Lambda_1^x + \tau b_C \Lambda_1^y A^x \right) \hat{u}_C = A^y A^x (u_C + \tau \hat{q}_C) + \tau \hat{e}_1, \quad (38)$$

и отличается от первого уравнения системы (13) тем, что постоянные коэффициенты в левой части (38) вычисляются в центре пространственной ячейки, а в правой части (38) появляется дополнительный малый член, имеющий порядок $O(\tau h)$ и зависящий от решения. Остальные три уравнения базовой бикompактной схемы для уравнения (15) имеют вид, подобный (38). Изложенный в этом пункте алгоритм метода итерируемой приближенной факторизации для случая постоянных коэффициентов может быть применен к итерационному решению уравнений базовой бикompактной схемы для уравнения (15) с учетом указанного отличия разностных уравнений для (2) и (15). Численные эксперименты показали, что если коэффициенты уравнения (15) обладают достаточной гладкостью и не имеют больших пространственных градиентов, то число итераций в алгоритме итерируемой приближенной факторизации увеличивается незначительно по сравнению со случаем постоянных коэффициентов. Когда же градиенты переменных коэффициентов велики, количество итераций в рассматриваемом алгоритме может значительно возрасти. В этом случае безытерационный алгоритм бегущего счета нефакторизованной многомерной бикompактной схемы может оказаться более экономичным по сравнению с итерационным решением приближенно факторизованной бикompактной схемы.

3.2. Трехмерная схема ($d = 3$). Итерационный алгоритм решения уравнений базовой бикомпактной схемы (14), основанный на приближенной факторизации разностных операторов, можно записать в следующей матрично-векторной форме:

$$\mathbf{M}_z \mathbf{M}_y \mathbf{M}_x \hat{\mathbf{v}}^{(i+1)} = \mathbf{N} \hat{\mathbf{v}}^{(i)} + \boldsymbol{\Psi}, \quad \mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_7, v_8)^T \quad (39)$$

$$v_1 = \bar{u}_{j+1/2, k+1/2, l+1/2}^{xy}, \quad v_2 = \bar{u}_{j+1, k+1/2, l+1/2}^{yz}, \quad v_3 = \bar{u}_{j+1/2, k+1, l+1/2}^{xz}, \quad v_4 = \bar{u}_{j+1, k+1, l+1/2}^z,$$

$$v_5 = \bar{u}_{j+1/2, k+1/2, l+1}^{xy}, \quad v_6 = \bar{u}_{j+1, k+1/2, l+1}^y, \quad v_7 = \bar{u}_{j+1/2, k+1, l+1}^x, \quad v_8 = u_{j+1, k+1, l+1},$$

$$\mathbf{M}_z = \mathbf{P}_z \otimes \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}, \quad \mathbf{M}_y = \mathbf{E} \otimes \mathbf{P}_y \otimes \mathbf{E}, \quad \mathbf{M}_x = \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} \otimes \mathbf{P}_x,$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N} = & \mathbf{E} \otimes (\mathbf{P}_y - \mathbf{E}) \otimes (\mathbf{P}_x - \mathbf{E}) + (\mathbf{P}_z - \mathbf{E}) \otimes \mathbf{E} \otimes (\mathbf{P}_x - \mathbf{E}) + \\ & + (\mathbf{P}_z - \mathbf{E}) \otimes (\mathbf{P}_y - \mathbf{E}) \otimes \mathbf{E} + (\mathbf{P}_z - \mathbf{E}) \otimes (\mathbf{P}_y - \mathbf{E}) \otimes (\mathbf{P}_x - \mathbf{E}), \end{aligned} \quad (40)$$

где $\boldsymbol{\Psi} = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4, \psi_5, \psi_6, \psi_7, \psi_8)^T$ – известный вектор-столбец, а матрицы \mathbf{P}_r определяются следующими формулами:

$$\mathbf{P}_r = \theta \mathbf{E} + \kappa_r \mathbf{R}, \quad \theta = 1 + (\sigma\tau)/d, \quad r = x, y, z. \quad (41)$$

В формулах (41) величины $\kappa_x = a\tau/h_x$, $\kappa_y = b\tau/h_y$, $\kappa_z = c\tau/h_z$ – числа Куранта. Произведение матриц, стоящих в левой части уравнения (39), можно преобразовать к такому виду:

$$\mathbf{M}_z \mathbf{M}_y \mathbf{M}_x = \mathbf{P}_z \otimes \mathbf{P}_y \otimes \mathbf{P}_x.$$

Запишем итерационный метод (39) в рекуррентном виде

$$\hat{\mathbf{v}}^{(i+1)} = \mathbf{S} \hat{\mathbf{v}}^{(i)} + \boldsymbol{\xi}, \quad (42)$$

где матрица шага метода

$$\mathbf{S} = (\mathbf{M}_z \mathbf{M}_y \mathbf{M}_x)^{-1} \mathbf{N} = (\mathbf{P}_z \otimes \mathbf{P}_y \otimes \mathbf{P}_x)^{-1} \mathbf{N} = (\mathbf{P}_z^{-1} \otimes \mathbf{P}_y^{-1} \otimes \mathbf{P}_x^{-1}) \mathbf{N}. \quad (43)$$

С учетом формул (40), (43) матрица шага \mathbf{S} итерационного метода может быть преобразована к следующему виду:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} = & \mathbf{T}_z \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_y) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_x) + (\mathbf{E} - \mathbf{T}_z) \otimes \mathbf{T}_y \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_x) + \\ & + (\mathbf{E} - \mathbf{T}_z) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_y) \otimes \mathbf{T}_x + (\mathbf{E} - \mathbf{T}_z) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_y) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_x), \quad \mathbf{T}_r = \mathbf{P}_r^{-1}. \end{aligned} \quad (44)$$

Как видно из формулы (44), матрица \mathbf{S} есть сумма четырех матриц размера 8×8 , каждая из которых является кронекеровым произведением трех матриц размера 2×2 . В свою очередь, собственные векторы-столбцы матриц размера 8×8 в правой части (44) являются кронекеровыми произведениями собственных векторов-столбцов матриц размера 2×2 [16, с.596]. Поскольку собственные векторы-столбцы матриц \mathbf{T}_r и $\mathbf{E} - \mathbf{T}_r$ размера 2×2 совпадают, то совпадают и собственные векторы-столбцы всех четырех матриц размера 8×8 в правой части (44). Вследствие этого собственные значения $\lambda(\mathbf{S})$ матрицы шага \mathbf{S} равны сумме собственных значений четырех матриц размера 8×8 в правой части (44)

$$\begin{aligned} \lambda(\mathbf{S}) &= \lambda(\mathbf{T}_z \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_y) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_x)) + \lambda((\mathbf{E} - \mathbf{T}_z) \otimes \mathbf{T}_y \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_x)) + \\ &+ \lambda((\mathbf{E} - \mathbf{T}_z) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_y) \otimes \mathbf{T}_x) + \lambda((\mathbf{E} - \mathbf{T}_z) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_y) \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{T}_x)) = \\ &= (1 - \lambda_z) \lambda_y \lambda_x + \lambda_z (1 - \lambda_y) \lambda_x + \lambda_z \lambda_y (1 - \lambda_x) + \lambda_z \lambda_y \lambda_x, \end{aligned} \quad (45)$$

где λ_r – собственные значения матрицы $\mathbf{E} - \mathbf{T}_r$. При написании последнего равенства в формуле (45) было использовано свойство собственных значений матрицы, являющейся кронекеровым произведением матриц. Поскольку у матрицы $\mathbf{E} - \mathbf{T}_r$ имеются два комплексно сопряженных собственных значения (34), то число различных собственных значений матрицы \mathbf{S} , определяемых формулой (45), равно восьми. Из (34) следует

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(\lambda_r) &= \frac{12\kappa_r^2 + (6\theta - 3)\kappa_r + \theta(\theta - 1)}{12\kappa_r^2 + 6\theta\kappa_r + \theta^2} = 1 - \frac{3\kappa_r + \theta}{12\kappa_r^2 + 6\theta\kappa_r + \theta^2}, \\ \operatorname{Im}(\lambda_r) &= \pm \frac{\sqrt{3}\kappa_r}{12\kappa_r^2 + 6\theta\kappa_r + \theta^2}, \\ |\lambda_r|^2 &= \frac{(12\kappa_r^2 + (6\theta - 3)\kappa_r + \theta(\theta - 1))^2 + 3\kappa_r^2}{(12\kappa_r^2 + 6\theta\kappa_r + \theta^2)^2} = 1 - \frac{6\kappa_r + 2\theta - 1}{12\kappa_r^2 + 6\theta\kappa_r + \theta^2}. \end{aligned} \quad (46)$$

Вычислим квадрат модуля собственного значения $\lambda(\mathbf{S})$

$$\begin{aligned} |\lambda(\mathbf{S})|^2 &= \lambda(\mathbf{S})\bar{\lambda}(\mathbf{S}) = (1 - 4\operatorname{Re}\lambda_z) |\lambda_y|^2 |\lambda_x|^2 + (1 - 4\operatorname{Re}\lambda_y) |\lambda_z|^2 |\lambda_x|^2 + \\ &+ (1 - 4\operatorname{Re}\lambda_x) |\lambda_z|^2 |\lambda_y|^2 + 4|\lambda_z|^2 |\lambda_y|^2 |\lambda_x|^2 + \\ &+ 2(\operatorname{Re}\lambda_z \operatorname{Re}\lambda_y + \operatorname{Im}\lambda_z \operatorname{Im}\lambda_y) |\lambda_x|^2 + \\ &+ 2(\operatorname{Re}\lambda_z \operatorname{Re}\lambda_x + \operatorname{Im}\lambda_z \operatorname{Im}\lambda_x) |\lambda_y|^2 + 2(\operatorname{Re}\lambda_y \operatorname{Re}\lambda_x + \operatorname{Im}\lambda_y \operatorname{Im}\lambda_x) |\lambda_z|^2. \end{aligned} \quad (47)$$

Используя (46), (47), найдем квадрат спектрального радиуса матрицы S

$$\rho^2(S) = \max |\lambda(S)|^2 = 1 - \frac{f(\kappa_z, \kappa_y, \kappa_x)}{(12\kappa_z^2 + 60\kappa_z + \theta^2)(12\kappa_y^2 + 60\kappa_y + \theta^2)(12\kappa_x^2 + 60\kappa_x + \theta^2)}, \quad (48)$$

$$\begin{aligned} f(\kappa_z, \kappa_y, \kappa_x) = & -144\kappa_z\kappa_y\kappa_x(\kappa_z + \kappa_y + \kappa_x) - \\ & -72\theta \left[3\kappa_z\kappa_y\kappa_x + (\kappa_y + \kappa_x)\kappa_z^2 + (\kappa_z + \kappa_x)\kappa_y^2 + (\kappa_z + \kappa_y)\kappa_x^2 \right] - \\ & -12 \left[(2\theta^2 - 1)(\kappa_z^2 + \kappa_y^2 + \kappa_x^2) + (7\theta^2 - 2\theta - 2)(\kappa_z\kappa_y + \kappa_z\kappa_x + \kappa_y\kappa_x) \right] - \\ & -6(4\theta^3 - 2\theta^2 - 3\theta + 2)(\kappa_z + \kappa_y + \kappa_x) - (3\theta - 2)(2\theta^3 - 3\theta + 2). \end{aligned}$$

Из формулы (48) следует, что спектральный радиус матрицы шага стационарного итерационного процесса (42) меньше единицы при любых $\kappa_z > 0$, $\kappa_y > 0$, $\kappa_x > 0$, $\theta \geq 1$, поэтому итерации всегда сходятся.

Отметим, что ранее в [17] дано доказательство сходимости метода итерируемой приближенной факторизации бикомпактных схем для нестационарного 3D линейного *однородного* уравнения переноса.

3.3. Тестовые расчёты. Для проверки точности факторизованной схемы была рассчитана тестовая начально-краевая задача:

$$\begin{aligned} u_t + au_x + bu_y + \sigma u - q &= 0, \quad (x, y) \in [0, 1] \times [0, 1], \quad t \in [0, T], \\ u(x, y, 0) &= u^0(x, y), \quad u(0, y, t) = 0, \quad u(x, 0, t) = 0 \end{aligned} \quad (49)$$

с начальным условием в виде финитного гладкого импульса

$$u^0(x, y) = \begin{cases} (1 - (4x - 1)^2)^7 (1 - (4y - 1)^2)^6, & |4x - 1| \leq 1, |4y - 1| \leq 1, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (50)$$

с $a = b = 1$, $T = 0.5$, $\sigma = 1$, с источником $q = \sigma u^0(x - at, y - bt)$ и точным решением $u^{ex}(x, y, t) = u^0(x - at, y - bt)$.

Расчёты выполнялись по исходной и факторизованной схемам. В факторизованной схеме критерий остановки итераций был таким: на каждом s -м шаге DIRK метода при решении системы ОДУ полудискретной бикомпактной схемы вида $du/dt = f(t, u)$ разность величин $\mathbf{k}_s = \mathbf{f}(t_n + c_s \tau, \mathbf{u}^n + \tau \sum_{q=1}^s a_{sq} \mathbf{k}_q)$

(см. Приложение) на текущей i -й и предыдущей $(i - 1)$ -й итерациях должна быть меньше по модулю заданного параметра tol :

$$\max_{j,k} |(k_s^{(i)})_{j,k} - (k_s^{(i-1)})_{j,k}| < tol \quad (51)$$

во всех пространственных узлах (j, k) на рассчитываемом временном слое. В качестве начального приближения использовались нулевые значения $(k_s)_{j,k}$.

Расчёты выполнялись на сгущающихся сетках с одновременным увеличением числа шагов по времени и ячеек по пространству, на сетках с $N_x = N_y = 16, 32, 64, 128, 256$, числа Куранта постоянны: $\kappa_x = \kappa_y = 1$. Для интегрирования по времени использовался метод РК четвертого порядка точности с пятью стадиями SDIRK54 [18].

На рис.1 показаны ошибки в норме $\|\cdot\|_\infty$ решений, полученных с помощью исходной схемы и факторизованной схемы при двух значениях параметра $tol = 10^{-2}$ и $tol = 2 \cdot 10^{-4}$. В первом случае среднее число итераций до достижения критерия (51) равно 6, во втором – 12. График показывает, что даже в первом случае метод даёт удовлетворительную точность. Во втором случае факторизованная схема с итерациями даёт такую же точность, как и нефакторизованная схема во всех расчётах.

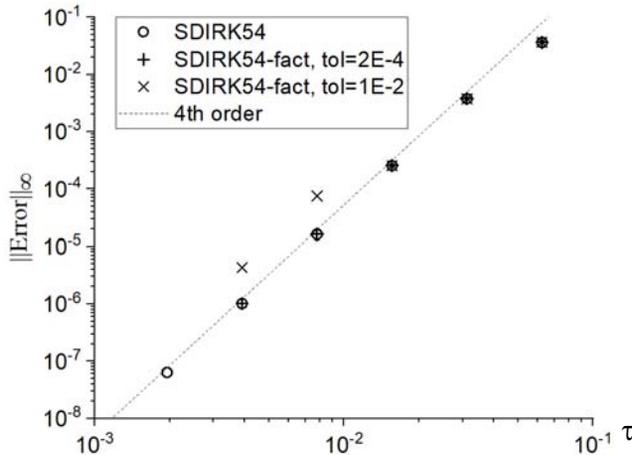


Рис.1. Ошибки исходной и факторизованной схем при двух значениях параметра tol .

4. Параллельная реализация вычислительных алгоритмов

Несмотря на то что бикомпактные схемы являются неявными, благодаря логической простоте они могут быть эффективно решены методом бегущего счёта, который допускает эффективное распараллеливание. Параллельный алгоритм бегущего счёта является методом волновой обработки данных и использует конвейерную загрузку процессоров. Алгоритм может быть реализован и на системах с общей памятью, и на системах с распределённой памятью. Стоит подчеркнуть, что компактность шаблона бикомпак-

тной схемы приводит к минимальному объёму данных, которыми должны обмениваться процессоры в случае распределённой памяти.

Кроме того, факторизованный вариант схемы также может быть распараллелен с большей эффективностью, поскольку одномерные задачи вдоль каждой сеточной линии могут решаться независимо.

В данном разделе описаны параллельные реализации исходной и факторизованной схемы. Эффективность параллельной обработки и масштабируемость обоих алгоритмов сравниваются на решении тестовой начально-краевой задачи для двумерного нестационарного уравнения переноса с жёстким источниковым членом.

4.1. Параллельный алгоритм бегущего счёта. Рассмотрим параллельную реализацию алгоритма бикompактной схемы для скалярного неоднородного уравнения переноса на системах с общей памятью с использованием технологии OpenMP. Последовательность вычислений в параллельном алгоритме схематично изображена на рис.2.

Пусть расчётная область состоит из $N_x \times N_y$ ячеек, число потоков равно p . Разобьём расчётную сетку по направлению x на p частей. Будем считать, что N_x/p – целое число. Процесс расчёта на одном шаге по времени внутри каждой стадии метода Рунге-Кутты представим в виде последовательности этапов. На каждом этапе каждый из задействованных потоков выполняет вычисления в блоке сетки размера $(N_x/p) \times 1$, вычисления выполняются всеми потоками параллельно и независимо. Следующий этап начинается, когда все потоки выполнят все действия на предыдущем этапе, т.е. в конце каждого этапа необходим барьер для потоков. Последовательность этапов, изображённая на рис.2, гарантирует, что на каждом этапе все граничные значения в каждом блоке, нужные для решения бегущим счётом, либо известны из граничных условий, либо уже вычислены ранее.

Можно грубо оценить эффективность распараллеливания, пренебрегая потерями из-за синхронизации потоков. Обозначим время расчёта в одной ячейке T_1 . Тогда время работы последовательного алгоритма на одном шаге по времени равно $N_x N_y T_1$. Число этапов в параллельном методе равно $N_y + p - 1$, каждый поток рассчитывает N_x/p ячеек, следовательно, время расчёта равно $T_1(N_y + p - 1)N_x$, а ускорение S равно:

$$S = \frac{N_x N_y T_1}{T_1(N_y + p - 1)N_x / p} = \frac{p}{1 + (p - 1) / N_y}$$

Эта формула показывает, что даже если отношение p / N_y не очень мало, то теоретическое ускорение близко к идеальному.

Следует отметить, что размер блока может подбираться в зависимости от размера кэша и других параметров вычислительного устройства для улучшения масштабируемости вычислений.

Для проверки масштабируемости параллельного алгоритма была рассчитана начально-краевая задача (49), (50) на сетке из 2048×2048 ячеек. Для интегрирования по времени использовался метод ESDIRK75 5-го порядка точности из [19].

Тестовые расчёты были проведены на вычислительном узле системы МВС-10П МСЦ РАН, состоящем из двух 8-ядерных процессоров Xeon E5-2690, а также на сопроцессоре Intel Xeon Phi 5110p лаборатории математического моделирования нелинейных процессов в газовых средах МФТИ. Сопроцессор Intel Xeon Phi 5110p содержит 61 физическое ядро, на каждом из которых может выполняться 4 потока.

На рис.3 показана зависимость времени расчёта одного шага по времени от числа потоков в логарифмической шкале. Ускорение алгоритма в обоих случаях близко к идеальному. На процессоре Xeon E5-2690 на 16 потоках ускорение равно 11, эффективность распараллеливания примерно 70%, на сопроцессоре Intel Xeon Phi 5110p на 60 потоках ускорение равно 47, эффективность распараллеливания около 80%. На основании этих данных можно сделать вывод, что параллельный алгоритм бегущего счёта хорошо масштабируется на системах с общей памятью.

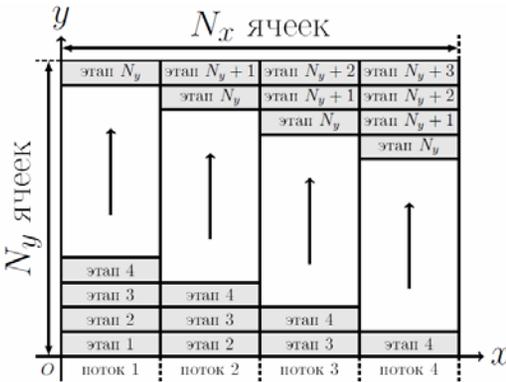


Рис.2. Схема параллельного бегущего счёта для четырех потоков.

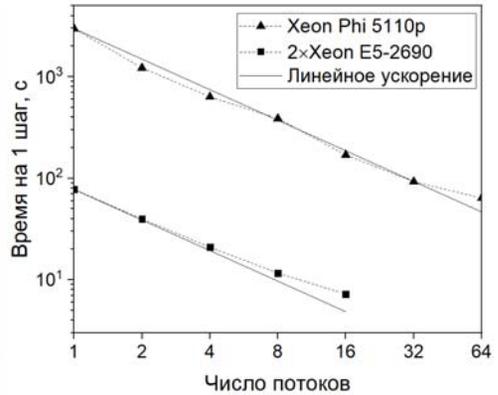


Рис.3. Зависимость времени на один шаг от числа потоков.

Описанная схема алгоритма почти без изменений распространяется на трехмерный случай: расчётная сетка разбивается, например, по переменной z на двумерные слои, на каждом из которых вычисления выполняются в порядке, изображённом на рис.2. Отличие будет только в том, что в каждой ячейке будет решаться линейная система из 8 уравнений.

4.2. Параллельный алгоритм счета по факторизованной схеме. На каждой итерации в факторизованной 2D схеме можно независимо решать методом бегущего счета одномерные задачи (23) вдоль каждого слоя ячеек $j=\text{const}$, $j = \overline{1, N_x}$, а одномерные задачи (24), (25) – вдоль слоя ячеек $k=\text{const}$, $k = \overline{1, N_y}$. Алгоритмически эти операции представляют собой одномерные циклы. На системах с общей памятью их можно сделать параллельными с помощью технологии OpenMP добавлением простой директивы `!$omp parallel do`. Если число ячеек по каждому направлению кратно числу потоков, или если не кратно, но значительно больше числа потоков, то можно ожидать хорошей балансировки нагрузки и хорошей масштабируемости алгоритма.

Масштабируемость параллельного алгоритма факторизованной схемы была изучена на тестовой задаче (49), (50). На практике для подобных задач используются относительно небольшие сетки с числом ячеек $\leq 10^2$ по каждому направлению, что в трёхмерном случае даёт сетку с числом ячеек 10^6 . Поэтому важно сравнить масштабируемость параллельного алгоритма бегущего счёта и параллельного алгоритма факторизованной схемы на таких сетках: в последовательном случае вычисления по факторизованной схеме занимают больше времени, чем бегущий счёт, из-за большого числа итераций; но параллельный алгоритм бегущего счёта плохо масштабируется, когда отношение числа потоков к числу ячеек по одному направлению p/N_x велико.

Подобные особенности алгоритмов особенно важны при использовании современных вычислительных архитектур, в которых число потоков становится большим, а производительность отдельного ядра (вычислителя) относительно небольшая. Например, процессоры Intel последнего поколения Xeon Phi имеют от 61 до 72 ядер на процессор, причем на каждом ядре может исполняться до 4 потоков. При этом такие процессоры обладают небольшой производительностью и небольшой памятью, по сравнению с процессорами с меньшим числом ядер (8-12). Поэтому для того, чтобы в полной мере использовать возможности таких процессоров, нужны алгоритмы, которые хорошо масштабируются на задачах небольшого размера.

На рис.4 показана зависимость времени расчёта задачи от числа потоков для алгоритма бегущего счёта и алгоритма факторизованной схемы при расчёте на 12-ядерном процессоре Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2697 v2 @ 2.70-GHz. Задача (49), (50) решалась на сетке 48×48 ячеек, число шагов по времени – 48, использовался метод SDIRK54 [18]. Параметр $tol=10^{-2}$, среднее число итераций для достижения заданной точности равно 3.65. При этом факторизованная схема даёт такую же ошибку, как и обычная схема, $\|Err\|_\infty=4.0 \times 10^{-4}$.

Как и следовало ожидать, алгоритм бегущего счёта плохо масштабируется на такой мелкой сетке, т.к. отношение числа потоков к числу ячеек по каждому направлению достаточно велико (0.25 для 12 потоков). Эффективность параллельного алгоритма составляет 40% на 12 потоках.

Алгоритм факторизованной схемы показывает хорошую масштабируемость до 12 потоков, эффективность равна 74%. Последовательный алгоритм факторизованной схемы в 1.6 раз медленнее последовательного алгоритма бегущего счёта. Но благодаря хорошей масштабируемости, на 12 потоках факторизованная схема считает быстрее, чем бегущий счёт.

На рис.5 показана зависимость времени расчёта задачи (49), (50) на сетке из 60×60 ячеек, число шагов по времени равно 60 от числа потоков для алгоритма бегущего счёта и алгоритма факторизованной схемы при расчёте на процессоре Intel Xeon Phi 5110p, который содержит 61 физическое ядро, на каждом из которых может выполняться до 4 потоков. Параметр $tol = 10^{-2}$, среднее число итераций для достижения заданной точности равно 2.77. При этом факторизованная схема даёт такую же ошибку $\|Err\|_{\infty} = 1.6 \times 10^{-4}$, как и обычная схема

В этом примере отношение максимального числа потоков к числу ячеек по каждому направлению равно 1, поэтому алгоритм бегущего счёта масштабируется только до 12 потоков. Эффективность составляет 50% на 12 потоках и 4% на 60 потоках. Это означает, что параллельный алгоритм бегущего счёта не позволяет использовать всю производительность процессора Xeon Phi при решении подобных задач.

Алгоритм факторизованной схемы показывает удовлетворительную масштабируемость, эффективность равна 50% на 60 потоках. На 1 ядре алгоритм факторизованной схемы в 1.6 раз медленнее последовательного алгоритма бегущего счёта. На 60 ядрах время расчёта по факторизованной схеме в 3 раза меньше, чем наименьшее время расчёта для бегущего счёта (на 12 ядрах).

Данные модельные расчёты показывают, что с точки зрения параллельной реализации более предпочтительной является факторизованная схема, т.к. факторизованный последовательный алгоритм легко распараллеливается. Кроме того, при решении многих прикладных задач, например задач переноса излучения, как правило, нет необходимости получать численное решение с очень малой относительной ошибкой, поскольку неопределённость коэффициентов в уравнениях, например, коэффициентов поглощения, приводит к гораздо большим погрешностям. Поэтому используются сетки с относительно небольшим числом ячеек по каждой координате. В то же время,

многопоточность современных вычислительных архитектур приводит к тому, что отношение числа ячеек сетки к числу потоков уменьшается, а в этом случае расчет по факторизованной схеме будет быстрее, чем бегущим счетом. Стоит отметить, что при решении трехмерных задач выигрыш будет ещё больше.

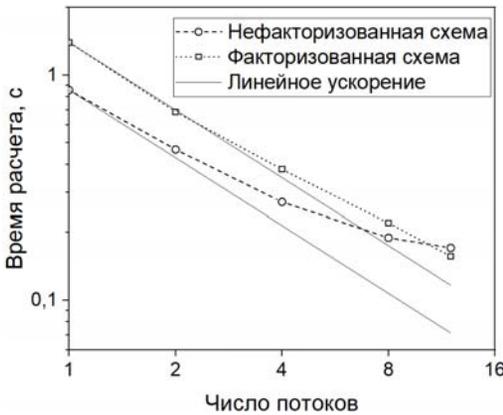


Рис.4. Зависимость времени расчёта от числа потоков для исходной и факторизованной схем.

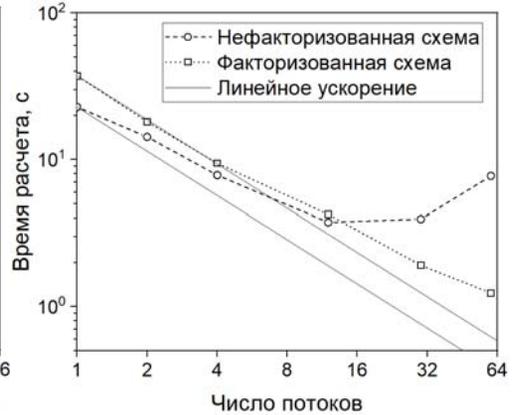


Рис.5. Зависимость времени расчёта от числа потоков для исходной и факторизованной схем.

5. Заключение

В работе описан метод итерируемой приближенной факторизации операторов бикомпактных схем четвертого порядка пространственной аппроксимации для многомерного неоднородного линейного уравнения переноса. В этом методе используются итерации для сохранения высокого (выше второго) порядка точности бикомпактных схем по времени. С помощью спектрального метода удалось доказать сходимость этих итераций как для двумерных, так и для трехмерных бикомпактных схем. Проведено сравнение эффективности двух параллельных алгоритмов решения уравнений высокоточных бикомпактных схем для многомерного неоднородного уравнения переноса. Первый из них есть маршевый по пространству алгоритм счета нефакторизованных схем, а второй основан на приближенной факторизации многомерных схем. Модельные расчёты показывают, что алгоритм на основе факторизованных бикомпактных схем является предпочтительным с точки зрения параллельной реализации на современных вычислительных архитектурах в силу слабой чувствительности к соотношению числа потоков и числа ячеек расчетной сетки.

Приложение. Коэффициенты диагонально неявных методов Рунге-Кутты

DIRK метод с m стадиями для решения системы ОДУ

$$du/dt = f(t, u)$$

в представлении Бутчера описывается уравнениями

$$u^{n+1} = u^n + \tau \sum_{s=1}^m b_s k_s, \quad k_s = f(t_n + c_s \tau, u^n + \tau \sum_{q=1}^s a_{sq} k_q), \quad s = \overline{1, m},$$

где b_s, c_s, a_{sq} – коэффициенты метода Рунге-Кутты.

Таблица Бутчера коэффициентов DIRK метода четвертого порядка с пятью неявными стадиями SDIRK54 [18] такова:

		1/4				
		0	-1/4	1/4		
c	A	1/2	1/8	1/8	1/4	
	b^T	1	-3/2	3/4	3/2	1/4
		1	0	1/6	2/3	-1/12 1/4
			0	1/6	2/3	-1/12 1/4

Таблица Бутчера коэффициентов DIRK метода пятого порядка с шестью неявными стадиями и одной явной стадией ESDIRK75 [19] такова:

		0						
		0.4	0.2	0.2				
		0.6	0.25	0.15	0.2			
c	A	1	0.6214285714	-0.9642857142	1.1428571428	0.2		
	b^T	0.8	0.2657743915	0.4927153439	-0.3035089947	0.1450192592	0.2	
		0.2	0.0448367885	-0.2368271451	0.2540183114	-0.1402888244	0.0782608695	0.2
		1	0.0659722222	0.1736111111	0.1736111111	-0.1340277777	0.2604166666	0.2604166666 0.2
			0.0659722222	0.1736111111	0.1736111111	-0.1340277777	0.2604166666	0.2604166666 0.2

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шильков А.В., Герцев М.Н., Аристова Е.Н., Шилькова С.В. Методика эталонных «line-by-line» расчетов атмосферной радиации // Комп. исслед. и моделирование, 2012, т.4, № 3, с.553-562;
Shilkov A.V., Gertsev M.N., Aristova E.N., Shilkova S.V. Metodika etalonnykh «line-by-line» raschetov atmosfornoj radiatsii // Komp. issledov. i modelir., 2012, v.4, №3, s.553–562.
2. Розанов В.Б., Вергунова Г.А., Аристова Е.Н. и др. Взаимодействие лазерного излучения с малоплотным структурированным абсорбером // ЖЭТФ, 2016, т.149, № 2, с.294–319;
Rozanov V.B., Vergunova G.A., Aristova E.N. et al. Interaction of laser radiation with a low-density structured absorber // JETP, 2016, v.122, №2, p.256–276.

3. *Байдин Д.Ф., Аристова Е.Н.* Параллельный код QuDiff для расчета критических параметров реактора на быстрых нейтронах в трехмерной гексагональной геометрии // *Мат. моделирование*, 2016, т.28, №1, с.107–116;
Baydin D.F., Aristova E.N. 3D hexagonal parallel code QuDiff for calculating a fast reactor's critical parameters // *Math. Models & Comp. Simul.*, 2016, v.8, №4, p.446–452.
4. *Рогов Б.В., Михайловская М.Н.* Бикомпактные схемы четвертого порядка аппроксимации для гиперболических уравнений // *Докл. АН*, 2010, т.430, №4, с.470–474;
Rogov B.V., Mikhailovskaya M.N. Fourth-order accurate bicomact schemes for hyperbolic equations // *Dokl. Math.*, 2010, v.81, №1, p.146–150.
5. *Рогов Б.В., Михайловская М.Н.* Монотонные бикомпактные схемы для линейного уравнения переноса // *Мат. моделирование*, 2011, т.23, № 6, с.98–110;
Rogov B.V., Mikhailovskaya M.N. Monotonic bicomact schemes for linear transport equations // *Math. Models & Comp. Simul.*, 2012, v.4, №1, p.92–100.
6. *Аристова Е.Н., Рогов Б.В.* О реализации граничных условий в бикомпактных схемах для линейного уравнения переноса // *Мат. моделирование*, 2012, т.24, №10, с.3–14;
Aristova E.N., Rogov B.V. Boundary conditions implementation in bicomact schemes for the linear transport equation // *Math. Models & Comp. Simul.*, 2013, v.5, №3, p.199–207.
7. *Аристова Е.Н., Рогов Б.В., Чикиткин А.В.* Оптимальная монотонизация высокоточной бикомпактной схемы для нестационарного многомерного уравнения переноса // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2016, т.56, № 6, с.973–988;
Aristova E.N., Rogov B.V., Chikitkin A.V. Optimal monotoneization of a high-order accurate bicomact scheme for the nonstationary multidimensional transport equation // *Comp. Math. & Math. Phys.*, 2016, v.56, №6, p.962–976.
8. *Чикиткин А.В., Рогов Б.В., Аристова Е.Н.* Высокоточные бикомпактные схемы для многомерного неоднородного уравнения переноса и их эффективная параллельная реализация // *Докл. АН*, 2016, т.470, № 2, с.144–149;
Chikitkin A.V., Rogov B.V., Aristova E.N. High-order accurate bicomact schemes for solving the multidimensional inhomogeneous transport equation and their efficient parallel implementation // *Dokl. Math.*, 2016, v.94, №2, p.517–522.
9. *Рогов Б.В.* Высокоточная монотонная компактная схема бегущего счета для многомерных уравнений гиперболического типа // *ЖВМиМФ*, 2013, т.53, №2, с.264–274;
Rogov B.V. High-order accurate monotone compact running scheme for multidimensional hyperbolic equations // *Comp. Math. & Math. Phys.*, 2013, v.53, №2, p.205–214.
10. *Чикиткин А.В., Рогов Б.В., Утузников С.В.* High-order accurate monotone compact running scheme for multidimensional hyperbolic equations // *Appl. Numer. Math.*, 2015, v.3, p.150–163.
11. *Брагин М.Д., Рогов Б.В.* Гибридные бикомпактные схемы с минимальной диссипацией для уравнений гиперболического типа // *ЖВМиМФ*, 2016, т.56, № 6, с.958–972;
Bragin M.D., Rogov B.V. Minimal dissipation hybrid bicomact schemes for hyperbolic equations // *Comp. Math. Math. Phys.*, 2016, v.56, №6, p.947–961.
12. *Брагин М.Д., Рогов Б.В.* Метод итерируемой приближенной факторизации операторов высокоточной бикомпактной схемы для систем многомерных неоднородных уравнений гиперболического типа // *Докл. АН*, 2017, т.473, №3, с.263–267;
Bragin M.D., Rogov B.V. Iterative approximate factorization for difference operators of high-order bicomact schemes for multidimensional nonhomogeneous hyperbolic systems // *Dokl. Math.*, 2017, v.95, №2, p.140–143.

13. Брагин М.Д., Рогов Б.В. Метод итерированной приближенной факторизации операторов высокоточной бикompактной схемы для систем многомерных неоднородных квазилинейных уравнений гиперболического типа // ЖВМиМФ, 2018, т.58, №3, с.313-325;
Bragin M.D., Rogov B.V. Iterative approximate factorization of difference operators of high-order accurate bicomcompact schemes for multidimensional nonhomogeneous quasilinear hyperbolic systems // Comp. Math. & Math. Phys., 2018, v.58, № 3, p.295–306.
14. Рогов Б.В., Брагин М.Д. О свойствах спектрального разрешения симметричных бикompактных схем четвертого порядка аппроксимации // ДАН, 2017, т.475, №2, с.140-144;
Rogov B.V., Bragin M.D. On spectral-like resolution properties of fourth-order accurate symmetric bicomcompact schemes // Dokl. Math., 2017, v.96, №1, p.339–343.
15. Рогов Б.В. Dispersive and dissipative properties of the fully discrete bicomcompact schemes of the fourth order of spatial approximation for hyperbolic equations // Appl. Numer. Math. 2019, v.139, p.136–155.
16. Уоткинс Д. Основы матричных вычислений. Пер. с англ. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2006, 664 с.;
Watkins D.S. Fundamentals of matrix computations. – New York: Wiley Interscience, 2002.
17. Рогов Б.В., Брагин М.Д. О сходимости метода итерированной приближенной факторизации операторов высокоточной бикompактной схемы для нестационарных трехмерных уравнений гиперболического типа // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2018, №132, 16с. doi:10.20948/prepr-2018-132. URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-132>;
Rogov B.V., Bragin M.D. On the convergence of the method of iterative approximate factorization of difference operators of high-order accurate bicomcompact scheme for nonstationary three-dimensional hyperbolic equations // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2018, No.132, 16p. doi:10.20948/prepr-2018-132-e. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-132&lg=e>.
18. Скворцов Л.М. Диагонально- неявные методы Рунге–Кутты для жестких задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2006, т.46, № 12, с.2209–2222;
Skvortsov L.M. Diagonally implicit Runge-Kutta methods for stiff problems // Comp. Math. & Math. Phys., 2006, v.46, №12, p.2110–2123.
19. Скворцов Л.М. Диагонально неявные FSAL-методы Рунге-Кутты для жестких и дифференциально-алгебраических систем // Мат. моделирование, 2002, т.14, № 2, с.3-17;
Skvortsov L.M. Diagonalno neyavnye FSAL-metody Runge-Kutty dlya zhestkikh i differentsialno algebraicheskikh sistem // Mat. modelirovanie, 2002, t.14, №2, s.3–17.

Поступила в редакцию 03.04.2019

После доработки 26.09.2019

Принята к публикации 21.10.2019