

# НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ПОСТРОЕНИЮ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ НА СТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ

В. М. Волохов<sup>1</sup>, С. И. Мартыненко<sup>2</sup>, П. Д. Токталиев<sup>3</sup>, Л. С. Яновский<sup>4</sup>, А. В. Волохов<sup>5</sup>

Рассмотрены новые подходы к построению высокоэффективных параллельных алгоритмов для численного решения краевых задач. В качестве базового алгоритма выбрана универсальная многосеточная технология — односеточный вариант метода Зейделя, позволяющий решать широкий класс прикладных задач с вычислительными затратами, близкими к оптимальным. Исследованы два подхода к распараллеливанию вычислений, основанные на комбинированном и чисто геометрическом построении предобусловливателя. Показаны преимущества данных подходов по сравнению с традиционными методами построения параллельных алгоритмов и получены оценки эффективности параллелизма.

**Ключевые слова:** параллельные вычисления, краевые задачи, многосеточные методы.

**Введение.** Значительная часть задач вычислительной математики сводится к решению систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$A\phi = b. \quad (1)$$

Как правило, матрица коэффициентов  $A$  в (1) является плохообусловленной, а порядок ее достаточно большой. Предположим, что для решения СЛАУ (1) использован итерационный метод

$$W(\phi^{(\nu+1)} - \phi^{(\nu)}) = b - A\phi^{(\nu)}, \quad (2)$$

где  $W$  — некоторая предобуславливающая матрица. Положим, что итерационный метод (2) сходится к точному решению  $\phi = A^{-1}b$ .

Простейший параллельный алгоритм решения линейной системы (1) основан на специальном выборе матрицы  $W$ . Пусть матрица  $A$  имеет размер  $9 \times 9$ , и имеется в наличии гомогенный кластер, состоящий из трех вычислительных узлов (ВУ). Разобьем матрицу  $A$  на блоки:

$$A = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \end{pmatrix} \longrightarrow A = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \end{pmatrix}$$

<sup>1</sup> Институт проблем химической физики РАН, просп. Семенова, 1, 142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка; зав. отделом, e-mail: vvm@icp.ac.ru

<sup>2</sup> Институт проблем химической физики РАН, просп. Семенова, 1, 142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка; инженер, e-mail: Martynenko@icp.ac.ru

<sup>3</sup> Институт проблем химической физики РАН, просп. Семенова, 1, 142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка; инженер, e-mail: Toktaliev@icp.ac.ru

<sup>4</sup> Институт проблем химической физики РАН, просп. Семенова, 1, 142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка; зав. отделом, e-mail: Yanovskiy@ciam.ru

<sup>5</sup> Институт проблем химической физики РАН, просп. Семенова, 1, 142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка; науч. сотр., e-mail: vav@icp.ac.ru

и образуем матрицу  $W$  из диагональных блоков матрицы  $A$ :

$$W = \begin{pmatrix} * & * & * & & & \\ * & * & * & & & \\ * & * & * & & & \\ \hline & & & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ \hline & & & & & * & * & * \\ & & & & & * & * & * \\ & & & & & * & * & * \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Итерации (2) определяют метод Якоби с блочным упорядочением неизвестных. Очевидно, что выбор матрицы  $W$  в виде (3) позволяет свести итерации (2) к независимому (параллельному) решению трех СЛАУ меньшей размерности, чем исходная система (1). После отыскания нового приближения к решению  $\phi^{(\nu+1)}$  необходимо пересчитать правую часть уравнения (2), причем тоже на трех ВУ.

Следуя [1], используем следующие меры параллелизма.

**Определение 1.** Ускорением параллельного алгоритма называется отношение времени  $T(1)$  выполнения алгоритма на одном ВУ к времени  $T(p)$  выполнения алгоритма в системе из  $p$  ВУ:

$$\bar{\mathcal{S}}_p = \frac{T(1)}{T(p)}. \quad (4)$$

**Определение 2.** Эффективностью параллельного алгоритма называется величина

$$\bar{\mathcal{E}}_p = \frac{\bar{\mathcal{S}}_p}{p}. \quad (5)$$

Достоинством рассмотренного способа построения матрицы  $W$  является простота и независимость от исходной задачи, которая привела к системе (1). Скорость сходимости итерационного метода (2) невелика, если матрица коэффициентов  $A$  не имеет сильного диагонального преобладания. Кроме того, при увеличении количества используемых ВУ эффективность параллельного алгоритма будет уменьшаться, так как возрастут потери, связанные с обменами данных между ВУ после каждой итерации. Меры параллелизма (4) и (5) характеризуют непосредственно сам параллельный алгоритм, в то время как пользователей многопроцессорных вычислительных систем интересует главным образом сравнение времени счета с наиболее эффективным последовательным алгоритмом. Поэтому, следуя [1], введем такие меры параллелизма.

**Определение 3.** Ускорением параллельного алгоритма по сравнению с наилучшим последовательным алгоритмом называется отношение

$$\tilde{\mathcal{S}}_p = \frac{\tilde{T}(1)}{T(p)}, \quad (6)$$

где  $\tilde{T}(1)$  — время выполнения быстрого последовательного алгоритма на одном ВУ и  $T(p)$  — время выполнения параллельного алгоритма на системе из  $p$  ВУ.

**Определение 4.** Эффективностью параллельного алгоритма по отношению к наилучшему последовательному алгоритму называется величина

$$\tilde{\mathcal{E}}_p = \frac{\tilde{\mathcal{S}}_p}{p}. \quad (7)$$

Меры параллелизма (6) и (7) представляют наибольший прикладной интерес, поскольку показывают максимальное уменьшение времени счета, которое достижимо на используемом многопроцессорном компьютере.

Далее ограничимся рассмотрением параллельных алгоритмов для численного решения краевых задач. Долгое время оставался открытым вопрос о наилучшем численном методе решения краевых задач, пока в 1961 г. не была опубликована статья выдающегося отечественного математика Р. П. Федоренко [2], положившая начало новому направлению вычислительной математики. Основная идея многосеточных методов заключается в использовании быстрой и не зависящей от шага сетки скорости сходимости некоторых итерационных методов на первых итерациях (так называемые сглаживатели). При этом численное

решение разностных краевых задач осуществляют на последовательности вычислительных сеток разного размера. Хотя доказательство сходимости многосеточных алгоритмов является сложной проблемой, требующей рассмотрения многих частных случаев, для простейших краевых задач быстро удалось доказать оптимальность многосеточного метода Федоренко [3–6]. Было показано, что объем вычислительной работы составляет  $O(N)$  арифметических операций, где  $N$  — количество узлов сетки.

Многосеточный метод Федоренко стали активно применять для решения прикладных задач начиная с середины 80-х годов прошлого столетия, и с той поры класс задач, решаемых многосеточными методами, постоянно расширяется [7]. Однако сразу стали понятны и недостатки метода, которые являются следствием его оптимальной (неулучшаемой) скорости сходимости.

1) Необходимо оптимально адаптировать все проблемно-зависимые компоненты многосеточного алгоритма (сглаживающая процедура, количество сглаживающих итераций, способ построения грубых сеток, операторы на грубых сетках, операторы переходов и многосеточный цикл) к решаемой краевой задаче. Оптимальный выбор проблемно-зависимых компонентов зачастую требует проведения дополнительных вычислительных экспериментов и не всегда возможен в приложениях, особенно при использовании программного обеспечения, устроенного по принципу черного ящика.

2) Использование вычислительных сеток с малым количеством узлов (так называемые грубые сетки) приводит к снижению эффективности параллельного многосеточного алгоритма из-за увеличения обменов данными между ВУ. Более того, размер СЛАУ, ассоциированных с грубыми сетками, может быть меньше количества используемых ВУ, что неизбежно приводит к их простоям при выполнении сглаживающих итераций на грубых сетках.

В настоящее время предложено несколько подходов к построению параллельных сглаживающих итераций на грубых сетках. Иногда, начиная с сеток некоторого уровня  $l^*$  и более грубых, сглаживание выполняют последовательно, допуская простой  $p - 1$  ВУ. Однако в [8] было показано, что в этом случае справедлива оценка  $\tilde{S} = p\tilde{E} < 2^{dl^*}$ , т.е. невозможно достичь высоких значений ускорения и эффективности параллелизма при использовании достаточно большого количества ВУ  $p$ . Иногда поступают следующим образом: сетку уровня  $l^* - 1$  считают самой грубой, хотя возможно построение более грубых сеток. На сетке уровня  $l^* - 1$  в качестве сглаживателя используют некоторый итерационный метод, обладающий достаточно высокой скоростью сходимости на достаточно мелких сетках и высоким параллелизмом. В работе [9] использованы явные чебышевские итерации для построения сглаживающей процедуры, хотя данный подход применим не во всех случаях.

Таким образом, к концу 80-х годов классические многосеточные методы (КММ) разделили на оптимизированные (достижение максимальной вычислительной эффективности посредством оптимального выбора проблемно-зависимых компонентов алгоритма, используя априорную информацию о решаемой краевой задаче) и робастные (решение широкого класса задач при помощи унифицированного алгоритма) [7]. С одной стороны, дополнительные сетки, используемые в КММ, позволяют получить численное решение краевой задачи с оптимальными вычислительными усилиями, с другой стороны — дополнительные сетки порождают проблемно-зависимые компоненты многосеточного алгоритма и не позволяют эффективно распараллеливать сглаживающие итерации. Как правило, в КММ на достаточно мелких сетках параллельное сглаживание выполняют с использованием блочно-диагональных предобуславливающих матриц. Такой подход, не требующий информации о вычислительных сетках, в многосеточных методах называют алгебраическим.

Возможность построения робастного алгоритма, получившего название Универсальная Многосеточная Технология (УМТ), при решении краевых задач на структурированных сетках показана в [10]. Чтобы избежать проблем с дополнительными сетками, основной многосеточный принцип об аппроксимации длинноволновых компонентов вектора ошибки на грубых сетках был применен в односеточном алгоритме. Это сразу позволило минимизировать количество проблемно-зависимых компонентов и избежать уменьшения эффективности параллелизма на грубых сетках. Фактически, УМТ представляет собой проблемно-независимый метод ускорения сходимости метода Зейделя при решении широкого класса линейных и нелинейных краевых задач до скорости, близкой к оптимальной. Объем требуемой вычислительной работы составит  $O(N \log N)$  арифметических операций, что несколько выше аналогичного показателя для КММ. Однако по суммарным усилиям (затраты на оптимизацию алгоритма и решение СЛАУ) УМТ вполне конкурентоспособно с КММ.

Хотя УМТ является односеточным алгоритмом, из соображений наглядности часто используют традиционную “многосеточную” терминологию [8]. Вскоре было показано, что УМТ позволяет построить блочно-диагональную предобуславливающую матрицу не только алгебраическим, но и геометрическим способом [11]. Каждый сеточный уровень  $l$ ,  $l = 0, 1, \dots, L^+$ , УМТ состоит из  $3^{dl}$  сеток ( $d = 2, 3$ ), где нуле-

вой уровень  $l = 0$  состоит из самой мелкой сетки, а уровень  $l = L^+$  — из  $3^{dL^+}$  самых грубых сеток. Поэтому количество используемых ВУ должно составить  $p = 3^{dL^+}$ . УМТ позволяет строить предобуславливающую матрицу  $W$  комбинированно: геометрическим методом при  $l \geq l^*$  и алгебраическим методом при  $l < l^*$ . В результате сглаживающие итерации на грубых сетках уровней  $l \geq l^*$  можно выполнять независимо друг от друга (т.е. без обмена данными) и вне зависимости от используемого сглаживателя.

В настоящей статье рассмотрена возможность построения предобуславливающей матрицы  $W$  чисто геометрическим методом и дан сравнительный анализ комбинированного и чисто геометрического способа построения предобуславливающей матрицы  $W$ .

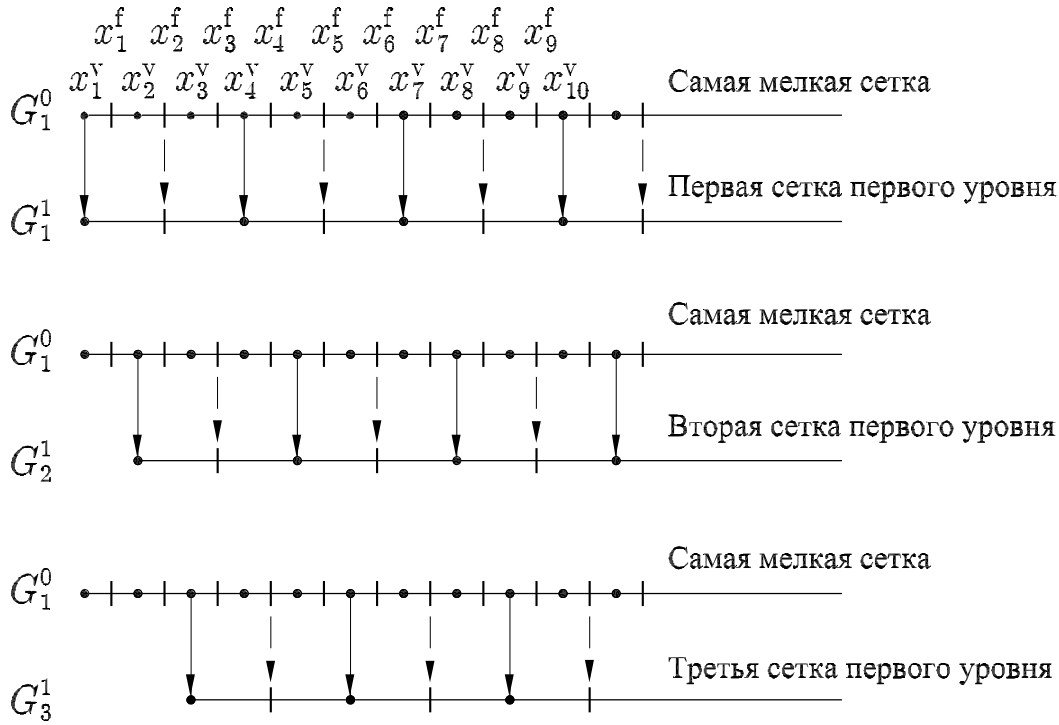


Рис. 1. Построение грубых сеток в универсальной многосеточной технологии

**1. Комбинированное построение предобуславливающей матрицы.** Напомним основные положения УМТ. Самая мелкая сетка  $G_1^0$  состоит из двух множеств точек  $G^v(0;1)$  и  $G^f(0;1)$ , которые, если  $G_1^0$  является равномерной, на единичном отрезке заданы соотношениями

$$G^v(0;1) = \{x_i^v \mid x_i^v = h(i-1), \quad i = 1, 2, \dots, N^0 + 1, \quad h = 1/N^0\},$$

$$G^f(0;1) = \{x_i^f \mid x_i^f = (x_i^v + x_{i+1}^v)/2, \quad i = 1, 2, \dots, N^0\}.$$

Построение грубых сеток в УМТ осуществим посредством удаления двух точек из множеств  $G^v(0;1)$  и  $G^f(0;1)$  самой мелкой сетки  $G_1^0$ , как показано на рис. 1. Непосредственно из построения следуют основные свойства грубых сеток в УМТ:

- 1) грубые сетки  $G_1^1$ ,  $G_2^1$  и  $G_3^1$  не имеют общих точек:  $G_n^1 \cap G_m^1 = \emptyset$ ,  $n \neq m$ ;
- 2) мелкая сетка  $G_1^0$  представима в виде объединения грубых сеток  $G_1^1$ ,  $G_2^1$  и  $G_3^1$ :  $G_1^0 = \bigcup_{k=1}^3 G_k^1$ ;
- 3) все сетки геометрически подобны, однако шаг грубых сеток  $G_1^1$ ,  $G_2^1$  и  $G_3^1$  в три раза больше, чем шаг сетки  $G_1^0$ ;
- 4) вне зависимости от способа определения сеточных функций на самой мелкой сетке каждый контрольный объем на сетках  $G_1^1$ ,  $G_2^1$  и  $G_3^1$  является объединением трех контрольных объемов на сетке  $G_1^0$ .

Далее построение еще более грубых сеток осуществляется рекуррентным образом: каждая сетка  $G_i^l$ ,  $i = 1, \dots, 3^l$ , уровня  $l$  рассматривается как самая мелкая сетка для трех грубых сеток  $G_j^{l+1}$ ,  $j = 1, \dots, 3^{l+1}$ ,

следующего уровня  $l + 1$ . Девять еще более грубых сеток, полученных из трех сеток первого уровня, образуют второй сеточный уровень, и так далее, как показано на рис. 2. Построение грубых сеток завершается, когда на грубых сетках останется всего несколько точек  $x^v$  и  $x^f$ . В дальнейшем совокупность самой мелкой и всех грубых сеток будет называться *многосеточной структурой*.

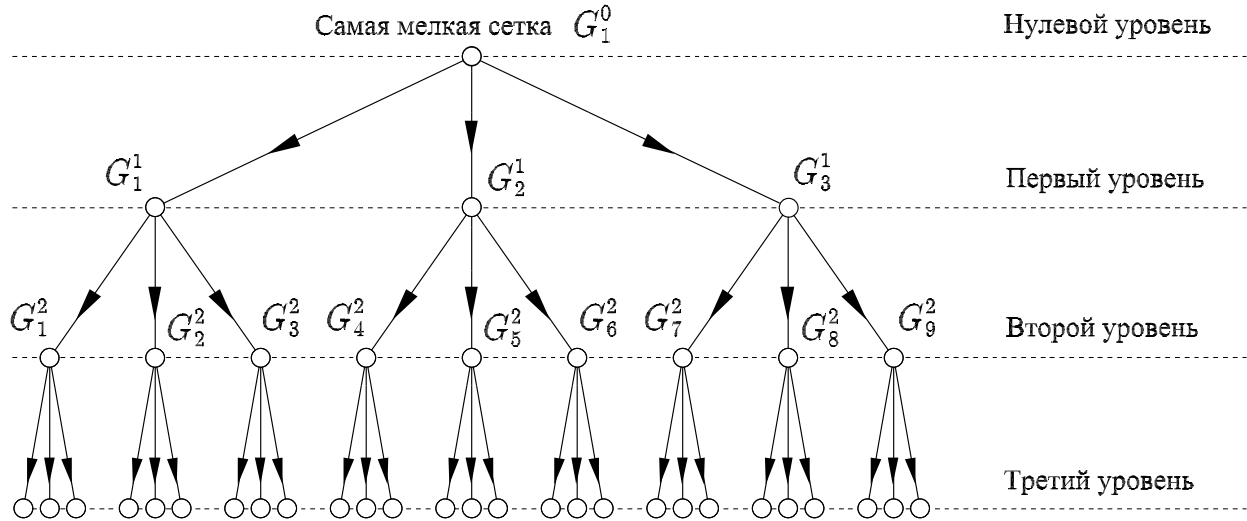


Рис. 2. Многосеточная структура

На самом деле грубые сетки в УМТ в явном виде не строят и с ними не связаны сеточные функции. Фактически, аппроксимация краевых задач на многосеточной структуре приводит к СЛАУ вида

$$W_l c_l = \mathcal{R}_{0 \rightarrow l} r_0, \quad (8)$$

где  $W_l$  — блочно-диагональная матрица вида (3),  $\mathcal{R}_{0 \rightarrow l}$  — проблемно-независимый оператор, проецирующий невязку  $r_0$  с самой мелкой сетки (нулевой уровень) на сетки уровня  $l$ , а  $c_l$  — поправка, на самой мелкой сетке равная разности приближений к решению  $c_0 = \phi^{(q+1)} - \phi^{(q)}$ ,  $q$  — номер многосеточной итерации. СЛАУ (8) сходна со СЛАУ (2), порядок матриц коэффициентов одинаков, и они совпадают на самой мелкой сетке ( $\mathcal{R}_{0 \rightarrow 0} = I$ ). Количество блоков на главной диагонали матрицы  $W_l$  составит  $3^{ld}$ , где  $d = 2, 3$ , поэтому количество используемых ВУ должно быть  $p = 3^{dl^*}$  для равномерной балансировки их загрузки. Параметр  $l^*$  получил название глубины распараллеливания УМТ [8] и указывает на номер сеточного уровня, начиная с которого матрицу коэффициентов для параллельной УМТ строят геометрическим методом. Случай  $l^* = 0$  соответствует последовательному алгоритму. Сглаживание на уровнях  $l \geq l^*$  состоит из параллельного решения независимых задач приблизительно одинакового порядка. При этом осуществляется два обмена данными: перед сглаживанием (раздача заданий) и после сглаживания (сбор поправок). На уровнях  $l < l^*$  предобуславливающую матрицу можно построить алгебраическим методом, как это показано во введении.

Получение оценок мер параллелизма основано на следующих допущениях.

**Допущение 1.** На всех сетках использована одна и та же сглаживающая процедура и выполнено одинаковое количество сглаживающих итераций. Время исполнения сглаживающих итераций пропорционально количеству узлов сетки.

**Допущение 2.** На уровнях  $l \geq l^*$  УМТ обладает полным параллелизмом.

Поскольку при комбинированном построении матрицы  $W_l$  снижение эффективности параллелизма происходит на уровнях с мелкими сетками  $l < l^*$ , необходимо выразить эффективность параллельной УМТ через эффективность параллельной сглаживающей процедуры.

**Определение 5.** Ускорением ( $\mathcal{S}_l$ ) и эффективностью ( $\mathcal{E}_l$ ) параллельного сглаживания на сетках уровня  $l$  по отношению к последовательному сглаживанию на тех же сетках называется величина

$$\mathcal{S}_l = p \mathcal{E}_l = \frac{T_l(1)}{T_l(p)}, \quad (9)$$

где  $T_l(1)$  — время выполнения последовательного сглаживания (и оператора перехода) на одном ВУ, а  $T_l(p)$  — время выполнения параллельного сглаживания (и оператора перехода) на системе из  $p$  ВУ.

В простейшем случае параллелизма первой глубины ( $l^* = 1 \Rightarrow p = 3^d$ ,  $d = 2, 3$ ) с учетом принятых допущений из определений 1–5 непосредственно следует оценка

$$\bar{S} = 3^d \bar{\mathcal{E}} < 3^d \frac{1 + q^* L^+}{1/\mathcal{E}_0 + q^* L^+}, \quad (10)$$

т.е. эффективность параллелизма первой глубины критически зависит от эффективности параллельного сглаживания на самой мелкой сетке  $\mathcal{E}_0$ . Здесь  $q^*$  — дополнительные многосеточные итерации на уровнях с грубыми сетками  $l \geq l^*$ . При этом  $\bar{\mathcal{E}} < \bar{\mathcal{E}}_{\max} = \mathcal{E}_0 \frac{1 + q^* L^+}{1 + q^* L^+ \mathcal{E}_0}$ .

Отсюда нетрудно получить  $\frac{\bar{\mathcal{E}}_{\max}}{\mathcal{E}_0} = \frac{1 + q^* L^+}{1 + q^* L^+ \mathcal{E}_0} > 1$ , т.е. эффективность параллельной УМТ ожидается выше эффективности параллельных сглаживающих итераций на самой мелкой сетке:  $\bar{\mathcal{E}}_{\max} > \mathcal{E}_0$ . Увеличение количества узлов самой мелкой сетки приводит к повышению эффективности параллелизма:  $L^+ \rightarrow +\infty \Rightarrow \bar{\mathcal{E}}_{\max} \rightarrow 1$ .

Аналогично могут быть получены оценки ускорения  $\tilde{S}$  и эффективности  $\tilde{\mathcal{E}}$  параллельной УМТ по отношению к V-циклу:

$$\tilde{S} = 3^d \tilde{\mathcal{E}} < \frac{3^d}{1 - 2^{-d}} \frac{1}{1/\mathcal{E}_0 + q^* L^+}. \quad (11)$$

Поскольку УМТ, в отличие от КММ, не обладает оптимальной скоростью сходимости, то ускорение  $\tilde{S}$  и эффективность  $\tilde{\mathcal{E}}$  сравнительно невелики, причем  $\tilde{\mathcal{E}} \rightarrow 0$  при  $L^+ \rightarrow +\infty$ .

В [8] представлены результаты решения первой краевой задачи для трехмерного уравнения Пуассона в единичном кубе на вычислительной сетке, состоящей из  $245^3 = 14\,706\,125$  узлов ( $L^+ = 4$ ). Распараллеливание многосеточных итераций УМТ осуществлено при помощи технологии OpenMP с привлечением 27 ядер ( $k = 1$ ,  $d = 3$ ,  $p = 3^{kd} = 27$ ). Вычисления производились на системе с общей памятью и состоящей из 4 ВУ AMD Opteron 6176 с объемом RAM 128 Gb. На каждой сетке выполнено четыре сглаживающие итерации, на сетках уровней  $l$  ( $k \leq l \leq L^+$ ) выполнено две многосеточные итерации  $q^* = 2$ . Согласно результатам вычислительного эксперимента, эффективность параллельной сглаживающей процедуры на самой мелкой сетке и на сетках уровней  $l$  ( $k \leq l \leq L^+$ ) составила  $\mathcal{E}_0 = 0.89$  и  $\bar{\mathcal{E}}_* = 0.95$  соответственно. Эффективность параллельной УМТ составила 0.92, в то время как, согласно оценке (10), имеем  $\bar{S} = 26.6$  и  $\bar{\mathcal{E}} = \bar{S} 3^{-d} = 0.98$ . С другой стороны, если сравнивать с последовательным V-циклом при одинаковом количестве многосеточных итераций, то эффективность параллельной УМТ составит 0.112, в то время как, согласно оценке (11),  $\tilde{\mathcal{E}} = 0.125$ . Таким образом, время решения модельной краевой задачи для уравнения Пуассона при помощи параллельной УМТ с привлечением 27 ядер оказывается приблизительно в три раза меньше, чем при помощи последовательного V-цикла.

**2. Геометрическое построение предобуславливающей матрицы.** Неоспоримые преимущества построения предобуславливателя  $W$  геометрическими методами можно использовать в другом подходе к построению параллельной УМТ, основанном на редукции к независимым задачам. Положим, что краевая задача решена на грубых сетках  $G_1^1$ ,  $G_2^1$  и  $G_3^1$  и разностные решения  $u_h$  сходятся к решению  $u$  задачи со вторым порядком, т.е.  $\|u - u_h\| \leq C(3h)^2 = 9Ch^2$ .

Таким образом, решение вместо одной разностной задачи на сетке  $G_1^0$  трех независимых задач на грубых сетках  $G_1^1$ ,  $G_2^1$  и  $G_3^1$  приводит к потере одной значащей цифры. Нетрудно видеть, что решение девяти независимых задач на сетках второго уровня приведет к потере еще одной значащей цифры и т.д. Таким образом, возможна редукция исходной разностной задачи к совокупности  $3md$ ,  $m \geq 1$ ,  $d = 2, 3$ , независимых задач меньшего размера. С одной стороны, эта редукция позволяет практически полностью распараллеливать вычисления, причем независимо от решаемых задач. С другой стороны, появляется возможность последовательно решать совокупность задач меньшего размера, даже если исходная задача не размещается в памяти компьютера. Потерю точности при редукции исходной разностной задачи можно компенсировать применением более точных аппроксимаций на грубых сетках.

В качестве примера редукции исходной разностной задачи к совокупности независимых задач меньшей размерности рассмотрим краевую задачу для уравнения Пуассона в единичном трехмерном кубе. Положим, что точное решение имеет вид  $u(x, y, z) = \sin(2\pi kx) \sin(2\pi ky) \sin(2\pi kz)$ , которое однозначно определяет правую часть и однородные граничные условия Дирихле. Параметр  $k$  предназначен для иллюстрации влияния погрешности аппроксимации производных на точность численного решения.

Для численного решения первой краевой задачи для уравнения Пуассона построена равномерная сетка  $451 \times 451 \times 451$ , которая порождает пятиуровневую многосеточную структуру. Для аппроксимации

уравнения Пуассона использована схема шестого порядка аппроксимации, основанная на аппроксимациях Паде. Однако в вычислительном эксперименте вместо разностной краевой задачи на сетке  $451 \times 451 \times 451$  решены 729 разностных задач на сетках  $\sim 50 \times 50 \times 50$ . Поскольку аналитическое решение краевой задачи известно, то ошибку численного решения определим как  $E = \max_{ijk} |u(x_i, y_j, z_k) - u_{ijk}^h|$ , где  $u(x_i, y_j, z_k)$  и  $u_{ijk}^h$  — точное и численное решения соответственно. В качестве сглаживателя использован метод Зейделя с блочным упорядочением неизвестных, на каждой сетке выполнено три сглаживающие итерации, всего выполнено двадцать многосеточных итераций. Коррекция решения проводилась после пяти многосеточных итераций.

Результаты вычислительного эксперимента показаны на рис. 3. При больших значениях параметра  $k$  наблюдается рост погрешности численного решения, связанный с увеличением абсолютных величин частных производных, входящих в главный член погрешности аппроксимации. Редукция приводит к уменьшению времени счета приблизительно в

$\frac{L^+ + 1}{L^+ + 1 - \kappa}$  раз, где  $\kappa$  есть номер сеточного уровня с самыми мелкими сетками, используемый для отыскания поправки в многосеточных итерациях. Оценка минимальной эффективности параллелизма в данном случае основана на предположении, что время выполнения сглаживающих итераций пропорционально количеству узлов. Поскольку общее количество узлов сеток одного уровня есть  $(M + 1)^d$ ,  $d = 2, 3$ , то время выполнения сглаживающих итераций в последовательном алгоритме есть  $T(1) = \alpha(M + 1)^d$ , где  $\alpha$  — коэффициент пропорциональности. Уровень  $l^*$  состоит из  $3^{dl^*}$  сеток, имеющих разное количество узлов, что является причиной уменьшения эффективности параллелизма. Одна из сеток уровня  $l^*$  имеет максимальное количество узлов, которое можно оценить как

$$\approx \left( [3^{-\kappa}(M + 1)] + 1 \right)^d < 3^{-\kappa d} (M + 1 + 2 \cdot 3^{\kappa}).$$

Поэтому время выполнения  $3^{\kappa d}$  независимых задач на  $p = 3^{\kappa d}$  ВУ будет различным. Максимальное время выполнения сглаживающих итераций в параллельной УМТ ожидается на той сетке уровня  $l^*$ , которая состоит из наибольшего количества узлов, и составит  $T_{\max}(p) = \alpha 3^{-\kappa d} (M + 1 + 2 \cdot 3^{\kappa})$ .

Отсюда нетрудно получить оценку минимальной эффективности параллелизма, основанного на редукции к  $3^{\kappa d}$  независимым задачам:  $\bar{\mathcal{E}}_{\min} = \frac{1}{p} \frac{T(1)}{T_{\max}(p)} = \left( 1 + 2 \frac{3^{\kappa}}{M + 1} \right)^d$ .

В рассмотренном случае  $\kappa = 2$ ,  $M = 450$ ,  $d = 3$  следует ожидать, что  $\bar{\mathcal{E}} > \bar{\mathcal{E}}_{\min} = 90\%$ .

**Заключение.** Для структурированных вычислительных сеток возможно построить метод численного решения широкого класса прикладных краевых задач, который будет высокоэффективен не только в последовательном, но и в многопроцессорном исполнении. Использование топологии вычислительной сетки позволяет строить предобуславливатель геометрическими методами, которые существенно превосходят алгебраические методы по возможности эффективного распараллеливания вычислений.

Рассмотренные выше исследовательские работы проводятся при финансовой поддержке государства в лице РНФ по соглашению № 15-11-30012 от 08.07.2015 по теме “Суперкомпьютерное моделирование физико-химических процессов в высокоскоростном прямоточном воздушно-реактивном двигателе гиперзвукового летательного аппарата на твердых топливах”.

Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции “Параллельные вычислительные технологии” (ПаВТ-2016; <http://agora.guru.ru/pavt2016>).

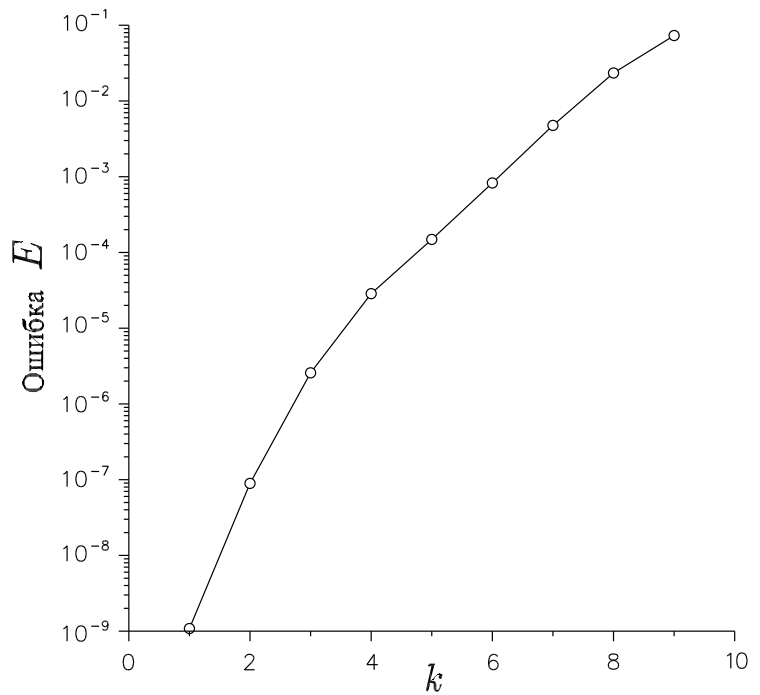


Рис. 3. Ошибка численного решения при различных значениях  $k$

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М: Мир, 1991.
2. Федоренко Р.П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // ЖВМ и МФ. 1961. 1, № 5. 922–927.
3. Федоренко Р.П. О скорости сходимости одного итерационного процесса // ЖВМ и МФ. 1964. 4, № 3. 559–564.
4. Бажвалов Н.С. О сходимости одного релаксационного метода при естественных ограничениях на эллиптический оператор // ЖВМ и МФ. 1966. 6, № 5. 861–885.
5. Hackbusch W. Multi-grid methods and applications. Berlin: Springer, 1985.
6. Ольшанский М.А. Лекции и упражнения по многосеточным методам. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005.
7. Trottenberg U., Oosterlee C.W., Schüller A. Multigrid. San-Diego: Academic Press, 2001.
8. Мартыненко С.И. Многосеточная технология: теория и приложения. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2015.
9. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений. Часть I. Основные элементы алгоритма. Препринт № 30 ИПМ РАН им. М.В. Келдыша. М.: ИПМ РАН, 2012.
10. Мартыненко С.И. Универсальная многосеточная технология для численного решения дифференциальных уравнений в частных производных на структурированных сетках // Вычислительные методы и программирование. 2000. 1, раздел 1. 83–102.
11. Мартыненко С.И. Распараллеливание универсальной многосеточной технологии // Вычислительные методы и программирование. 2003. 4, раздел 1. 45–51.

Поступила в редакцию  
17.02.2016

### New Approaches to the Development of Highly Efficient Parallel Algorithms for Numerical Solution of Boundary Value Problems on Structured Grids

V. M. Volokhov<sup>1</sup>, S. I. Martynenko<sup>2</sup>, P. D. Toktaliev<sup>3</sup>,  
L. S. Yanovskiy<sup>4</sup>, and A. V. Volokhov<sup>5</sup>

<sup>1</sup> *Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;  
prospekt Semenova 1, Chernogolovka, Moscow region, 142432, Russia; Dr. Sci., Professor,  
Head of Section, e-mail: vvm@icp.ac.ru*

<sup>2</sup> *Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;  
prospekt Semenova 1, Chernogolovka, Moscow region, 142432, Russia; Engineer,  
e-mail: Martynenko@icp.ac.ru*

<sup>3</sup> *Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;  
prospekt Semenova 1, Chernogolovka, Moscow region, 142432, Russia; Engineer,  
e-mail: Toktaliev@icp.ac.ru*

<sup>4</sup> *Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;  
prospekt Semenova 1, Chernogolovka, Moscow region, 142432, Russia; Dr. Sci., Professor,  
Head of Section, e-mail: Yanovskiy@ciam.ru*

<sup>5</sup> *Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;  
prospekt Semenova 1, Chernogolovka, Moscow region, 142432, Russia; Scientist, e-mail: vav@icp.ac.ru*

Received February 17, 2016

**Abstract:** New approaches to the development of highly efficient parallel algorithms for numerical solution of boundary value problems are considered. The previously proposed robust multigrid technique (a single grid version of the Seidel method for solving a large class of applied problems with close-to-optimal computational efforts) is taken as a basic algorithm. Two approaches for the parallelization of computations based on combined and purely geometric preconditioning are studied. Advantages of these approaches compared to traditional methods of constructing parallel algorithms are shown. Several estimates for the parallelism efficiency are proposed.

**Keywords:** parallel computing, boundary value problems, multigrid methods.



## References

1. J. M. Ortega, *Introduction to Parallel and Vector Solution of Linear Systems* (Plenum, New York, 1988; Mir, Moscow, 1991).
2. R. P. Fedorenko, "A Relaxation Method for Solving Elliptic Difference Equations," *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **1** (5), 922–927 (1961) [USSR Comput. Math. Math. Phys. **1** (4), 1092–1096 (1962)].
3. R. P. Fedorenko, "The Speed of Convergence of One Iterative Process," *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **4** (3), 559–564 (1964) [USSR Comput. Math. Math. Phys. **4** (3), 227–235 (1964)].
4. N. S. Bakhvalov, "On the Convergence of a Relaxation Method with Natural Constraints on the Elliptic Operator," *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **6** (5), 861–885 (1966) [USSR Comput. Math. Math. Phys. **6** (5), 101–135 (1966)].
5. W. Hackbusch, *Multi-Grid Methods and Applications* (Springer, Berlin, 1985).
6. M. A. Ol'shanskii, *Lectures and Exercises on Multigrid Methods* (Fizmatlit, Moscow, 2005) [in Russian].
7. U. Trottenberg, C. W. Oosterlee, and A. Schüller, *Multigrid* (Academic, San-Diego, 2001).
8. S. I. Martynenko, *Multigrid Technology: Theory and Applications* (Fizmatlit, Moscow, 2015) [in Russian].
9. V. T. Zhukov, N. D. Novikova, and O. B. Feodoritova, *Parallel Multigrid Method for Elliptic Difference Equations. Part I. Main Elements of the Algorithm*, Preprint No. 30 (Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow, 2003) [in Russian].
10. S. I. Martynenko, "Robust Multigrid Technique for Solving Partial Differential Equations on Structured Grids," *Vychisl. Metody Programm.* **1**, 83–102 (2000).
11. S. I. Martynenko, "Parallelization of Robust Multigrid Technique," *Vychisl. Metody Programm.* **4**, 45–51 (2003).