Параллельный многосеточный метод для уравнений анизотропной диффузии

В.Т. Жуков, Н.Д. Новикова, О.Б. Феодоритова

Современные проблемы прикладной математики и информатики

Дубна, 22-27 августа 2012 г.

План

Цель - изложение алгоритма ультрапараллельного многосеточного кода для анизотропных задач на основе применения эффективных чебышевских итераций для сглаживания и решения грубосеточных уравнений.

- Введение
- Применения и варианты многосеточного метода
- Постановка модельной задачи
- Основные элементы метода
- Явно-итерационные чебышевские сглаживатели
- Примеры
- Литература, наш опыт

Введение: об изобретении мультигрида

Радий Петрович Федоренко: “Публикация (1961 г.) связана с попыткой применения численных методов для прогноза погоды, предпринятая тоже по инициативе Гельфанда (решение двумерных уравнений газовой динамики на поверхности сферы с учётом силы Кориолиса). При численном интегрировании этих уравнений на каждом шаге надо решать уравнение Пуассона, и именно на это уходит большая часть машинного времени. К счастью, я в то время не был знаком с наиболее эффективными итерационными методами и начал со "школьного"метода простой итерации, который сходится, но очень медленно, и скорость сходимости резко снижается при уменьшении шага сетки. Но мы уже имели опыт анализа возникающих трудностей - надо просмотреть изменение чисел в процессе работы алгоритма, и попытаться понять, что мешает его работе (вопрос только в том, какие числа смотреть и как смотреть, в этом должны помочь теория и интуиция). Увидев, что невязка быстро становится гладкой функцией и после этого очень медленно убывает, нетрудно было догадаться, что нужно решать уравнение для корректирующей функции на сетке с крупным шагом ”.

Применения и варианты

Приложения

- Дифференциальные уравнения эллиптического типа
- Параболические уравнения – неявная дискретизация
- Уравнения Навье-Стокс и Эйлера
- и т.д.
- Системы алгебраических уравнений несеточного происхождения

Варианты метода для сеточных аппроксимаций УРЧП

- Геометрический многосеточнный метод
- p–мультигрид для конечно-элементных схем высокого порядка
- Алгебраический мультигрид

Модель: краевая задача для эллиптического уравнения

$$div(\kappa \; grad \; u) - a_0 \cdot u = -f, \qquad x \in \Omega \subset R^3$$

$$\kappa = \kappa(x) > 0, \quad a_0(x) \geq 0, \quad \Omega = \{(x^1, x^2, x^3): \; l_\alpha^- \leq x^\alpha \leq l_\alpha^+\}.$$

$-\kappa \dfrac{\partial u}{\partial n} = \sigma(u - u_\Gamma) + \gamma, \; x \in \Gamma, \; n$ –внешн. нормаль

Для вырожденной задачи Неймана ($a_0 = 0, \; -\kappa \frac{\partial u}{\partial n} = \gamma$):

$$\int_\Gamma \gamma(x) ds \; = \; \int_\Omega f(x) dv.$$

Дискретизация – стандартная 7-точечная, или другая, в том числе и на неструктурированных сетках.
Сетки: декартовы, сильная анизотропия:

- $h_{max}/h_{min} \simeq 100 - 1000$
- $\kappa(x) = diag\{a_1, a_2, a_3\}, \quad a_1 \gg a_2 \gg a_3 > 0$

Разностная эллиптическая задача

Система алгебраических уравнений

$$A_h u_h = f_h,$$

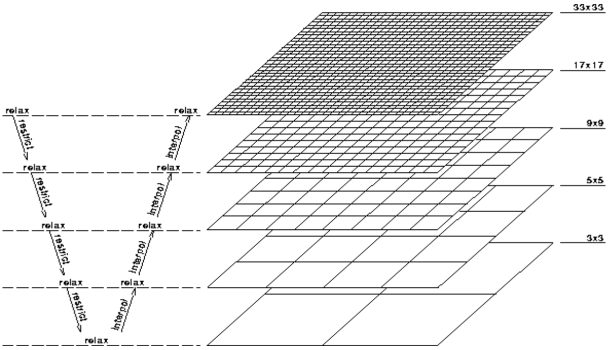
A_h– симметричная неотрицательно-определенная разреженная $N \times N$ матрица.

- Размер системы (число узлов сетки) $N \simeq 10^9 - 10^{10}$.
- Многократное решение => нужно быстродействие $\gtrsim 10^{-7}$ сек. на узел сетки => нужен ультапараллелельный код для суперкомпьютера с сотней тысяч процессоров.
- Мультигрид может обеспечить такую эффективность.

Мотивация (почему многосеточный метод?)

Алгоритмическая масштабируемость ($O(N)$ операций) + реализация на принципах логической простоты => параллельная масштабируемость

Многосеточный метод



Многосеточный метод

$$Q = S_p \cdot (I - P \cdot A_H^{-1} \cdot R \cdot A_h) \cdot S_p$$

Основные элементы в двухсеточном представлении

Сетки:	G_h, G_H
Операторы:	
P	– интерполирования с грубой сетки на подрбную,
R	– проектирования с подробной сетки на грубую
$\mathbf{P} = \mathbf{R}^*$	– **сопряженность, важно!**
A_H	– редискретизация на грубой сетке
$\mathbf{S_p}$	– сглаживатель, p – число сглаживающих шагов

Операторы многосеточного метода

- Оператор интерполирования.
  Пусть (x_1^H, y, z), (x_2^H, y, z) – два соседних узла грубой сетки, лежащие на одной линии. Между ними лежит m узлов $h-$сетки: (x_1^h, y, z), ... , (x_m^h, y, z).

  Тогда $u(x_k^h, y, z) = (1 - d) \cdot U_H(x_1^H, y, z) + d \cdot U_H(x_2^H, y, z)$,

  $d = (x_k^h - x_1^H)/(x_2^H - x_1^H), \quad k = 1, ..., m.$
- Оператор проектирования.
  Применение R к сеточной функции $u_h(x)$:
  $U_H(x) = \frac{1}{4} \cdot [u_h(x - h^x) + 2u_h(x) + u_h(x + h^x)]$.
  Обобщается для $2D$ и $3D$.
- Сглаживатель S_p – явные итерации.
  Алгоритмическая реализация проста: новое итерационной приближение y^j находится явным образом

  $$y^j = y^{j-1} - \omega_j(A_h \cdot y^{j-1} - f_h), \quad j = 1, ..., p,$$

  где y^0 – заданное начальное приближение.

Общая схема мультигрида: $\mathbf{A_h u = f_h}$, $h \leftrightarrow H$

Построен набор сеток; переход $h \longleftrightarrow H \sim 2h \div 4h$.
Операторы: интерполяция $\mathbf{P}$, сборка $\mathbf{R}$, сглаживатель $\mathbf{S_p}$,
$\mathbf{A_H}$ – редискретизация.
На $h-$сетке задана итерация $\mathbf{u_m}$: переход к $\mathbf{u_{m+1}}$ – 3 этапа.

1. Сглаживание до коррекции: $\mathbf{\overline{u}_m = S_p\ u_m}$, $\mu_1 \geq \mathbf{0}$.
2. Грубосеточная коррекция.
   По $\mathbf{\overline{g_h} = b_h - A_h\overline{u}_m}$ находим невязку $\mathbf{\overline{g}_H = R\ \overline{g}}$ на $H-$ сетке;
   решаем уравнение $\mathbf{A_H}\overline{\delta}_\mathbf{H} = \mathbf{\overline{g}_H}$ для поправки $\overline{\delta}_H$.
   Находим поправку $\overline{\delta_\mathbf{h}} = \mathbf{P}\overline{\delta}_\mathbf{H}$ и коррекцию: $\mathbf{\widetilde{u}_m = \overline{u}_m} + \overline{\delta_\mathbf{h}}$.
3. Сглаживание после коррекции: $\mathbf{u_{m+1} = S_p\ \widetilde{u}_m}$, $\mu_2 \geq \mathbf{0}$.
   Итог: $\mathbf{u_0} \to \ \mathbf{u_m = Q^m u_0 + (I - Q^m)A_h^{-1}b_h}$,

(h, H) представление:

$$\mathbf{Q = S_p\ (I - PA_H^{-1}R\ A_h)\ S_p}\ .$$

Операторы межсеточных переходов: проектирование R, интерполирование P.

Эти операторы должны удовлетворять условию:

- $m_P + m_R > d$

  m_P – порядок оператора P
  (def: если P точен на многочленах до порядка k, тогда $m_P = k + 1$)

  m_R – порядок оператора R (de: $m_R = m_{R^*}$)

  d – порядок дифференциального оператора (=2)

- Невязка должна быть ортогональна постоянной $c \equiv 1$ на каждом сеточном уровне в случае вырожденной задачи Неймана($a = 0$, $-\kappa \frac{\partial u}{\partial n} = \gamma$,)

  $(f_{h_i} - A_{h_i} u_{h_i}, c) = 0, \quad c \equiv 1, \quad i$ - номер сеточного уровня

Оператор интерполирования P :	– трилинейная интерполяция, $m_P = 2$
Оператор проектирования R :	$R = P^*, \quad m_R = 2$

Стандартное сглаживание

Точечная или групповая релаксация,т.е. точечный и блочный методы Гаусса-Зейделя.
Перенумерация неизвестных:
- черно-белое $3D$ упорядочивание для точечной релаксации,
- черно-белое $2D$ упорядочивание линий для линейной релаксации,
- черно-белое $1D$ упорядочивание плоскостей для (x, y)–релаксации.
Расчет неизвестных в группах:
- для линейной релаксации – прогонкой,
- для (x, y)–релаксации для каждой плоскости нужно решать систему $2D$ уравнений.
- Для анизотропного общего $3D$ случая нужно реализовать релаксацию по плоскостям (x, y), (y, z) и (x, z) попеременно.

Нужно перекрашивание неизвестных на этапах пред- и пост-сглаживания для сохранения симметричности итерирующего опратора.
Не подходит для эффективной параллельной реализации

Явно-итерационные чебышевские сглаживатели

Первый: $S_p = S_p(A_h) \equiv F_p(A_h)$ – многочлен Чебышева 1 рода
Строится на основе стандартного многочлена

$T_p(x) = \cos(p\ \arccos x),\ |x| \le 1; \qquad T_p(x) = \cosh(p\ \mathrm{Acosh} x),\ |x| > 1,$
наименее уклоняющегося от нуля на $[-1; 1]$.

Для отрезка $[a; b]$ – замена переменных $x = 0.5 \cdot (a + b) - (a - b) \cdot t$.
Предположение: спектр A_h лежит на $[\lambda_{min},\ \lambda_{max}]$ и его можно разделить на две части:
$[\lambda_{min};\ \lambda^*_{min})$ – низкочастотную,
$[\lambda^*_{min};\ \lambda^*_{max}]$ – высокочастотную.
Границы спектра – свои для каждого сеточного уровня.
Тем самым все собственные функции разделяются на гладкие и негладкие моды.
Тогда эффективный сглаживатель – операторный многочлен $F_p(A_h)$,
$F_p(\lambda)$ – многочлен Чебышева на $[\lambda^*_{min};\ \lambda_{max}]$, $F_p(0) = 1$.
$\max |\ F_p(\lambda)\ |$ на $[\lambda^*_{min};\ \lambda_{max}]$ зависит от p.
На низкочастотной части: $|\ F_p(\lambda)\ | < 1$.
Нужна оценка λ^*_{min}. В простейшем случае $\lambda^*_{min} = \lambda_{max}/6$

Второй сглаживатель – дробно-рациональная функция

Оператор сглаживания ЛИ-М: $LIM(p) = LIM(p, \lambda^*_{min}, \lambda_{max})$

$$S_\nu = (I - G_p^2)(I + \tau A_h)^{-1},$$

где $\nu = 2p - 1$.
Здесь $G_p(\lambda)$ – полином Чебышева 1 рода, наименее укл. от нуля на отрезке $[\lambda_0;\ \lambda_{max}]$:

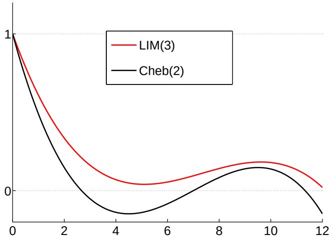
$$\lambda_0 = \lambda_{max}\frac{z_1 - 1}{z_1 + 1} \ \in\ [-\frac{1}{\tau};\ 0],\ \tau = \frac{1}{\lambda_\infty}\left(\left\lceil\frac{16p^2}{\pi^2}\right\rceil - 1\right) \quad \text{и} \quad z_1 = \cos\frac{\pi}{2p}\ ,$$

нормировка: $G_p(-\frac{1}{\tau}) = 1$. На отрезке $[0;\ \lambda_{max}]$:

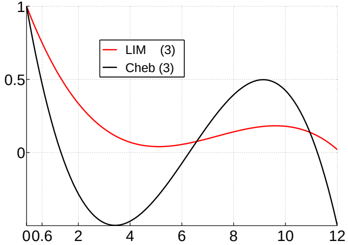
$$|G_p(\lambda)| \le 1, \quad |S_\nu(\lambda)| \le 1, \quad |G_p(\lambda)| \le 1,$$

причем $G_p(0) = 0$.

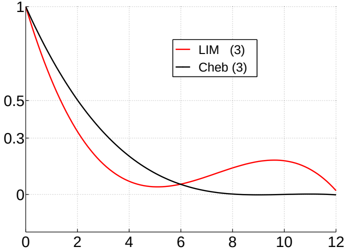
Сравнение чебышевских сглаживтелей: полиномиального и дробно-рацонального ЛИ-М.



$$\lambda^*_{min} = \lambda_{max}/6$$



$$\lambda^*_{min} = \lambda_{max}/20$$



Примеры расчетов

$A_1 u_{xx} + A_2 u_{yy} + A_3 u_{zz} = f(x,y,z) \quad (x,y,z) \in [0,1]^3,$

Условия Дирихле, сетка: 128^3, число сеточных уровней: 5

Относительная точность: $tol = 10^{-7}$

Характеристики сходимости. Чебышевский и ЛИ-М сглаживатели

Случай	A_1	A_2	A_3	Чебышевский сглаживатель			ЛИ-М		
				m	$\sum p$	ρ	m	$\sum p$	ρ или ρ^*
1	1	1	1	9	36	0.176	9	54	0.157
2	100	1	1	10	200	0.193	6	252	0.110
3	100	100	1	11	286	0.238	5	290	0.151
4	10000	100	1	10	1020	0.223	3	702	0.003^*

m – число многосеточных итераций

$\sum p$ – полное число пред- и пост- сглаживающих шагов

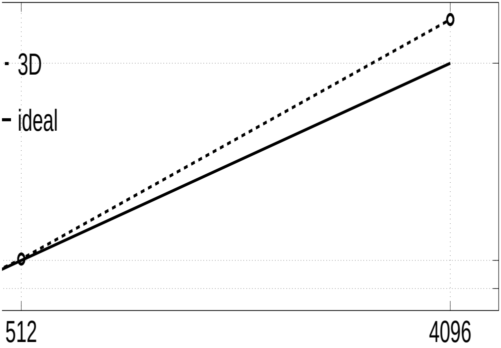
ρ – оценка скорости сходимости

Модельная задача 2: уравнение Пуассона на анизотропных сетках.

4 уровня, $tol = 10^{-6}$, Чеб. сглаживатель с адаптацией и без

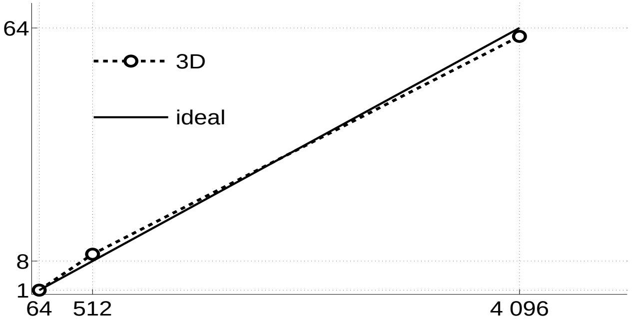
Сетка,	аспектное отношение	Чеб. сглаживатель			Адапт. чеб. сглаживатель		
		m	Σp	время сек.	m	Σp	время сек.
32^3	80	10	1040	0.45	7	464	0.23
64^3	160	8	1696	6.0	6	756	6.8
128^3	320	9	3834	120	8	2118	175
256^3	640	10	8560	2215	8	3630	1007

Практическая масштабируемость, 64 процессоров К-100



Расчет на сетках 128^3, 256^3, 512^3, 1024^3, 2048^3.
Единицу масштаба по оси абсцисс – размер первой сетки: 128^3;
Единица времени по оси ординат – время расчета на первой сетке.

Масштабируемость в сильном смысле: $\dfrac{t_{64}}{t_M}$, Сетка 1024^3



Виртуальная топология процессоров: $3D$, MPI, "Ломоносов"

Скорость счета $\approx 10^{-9}$ сек. на узел для 4096 процессоров

t_{64} – время счета на 64 процессорах

t_M – время счета на M процессорах

Масштабируемость: Blue Gene Intrepid № 38 Top500

Число ядер	сетка	время счета,сек.	время счета на узел,сек.
8192	512^3	2.27	1.6e-8
131072	1024^3	3.79	3.5e-9

Литература

Федоренко Р. П. “Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений”, Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1:5 (1961), с. 922–927.

Федоренко Р.П. Итерационные методы решения разностных эллиптических уравнений // Успехи математических наук, 1973, т. XXVIII, вып. 2(170), с.129-195.

Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. - М.:Издательство МФТИ, 1994, 528 с.

Trottenberg U., Oosterlee C.W., Schuller A. Multigrid. 2001. ACADEMIC PRESS.

Василевский Ю.В., М.А. Ольшанский. Краткий курс по многосеточным методам и методам декомпозиции области. -М.: МАКС ПРЕСС, 2007,100 с.

Наш опыт

Жуков В.Т., Феодоритова О.Б. Многосеточный метод решения эллиптических уравнений с использованием чебышевских итераций. – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 1996, препринт № 16, 20 с.

Жуков В. Т., Феодоритова О. Б., Янг Д. П. "Итерационные алгоритмы для схем конечных элементов высокого порядка", Матем. моделирование, т.16, №7, 2004, 117–128.

Жуков В.Т., Феодоритова О.Б. Многосеточный метод для конечно-элементных дискретизаций уравнений аэродинамики Математическое моделирование, 2011, т. 23, № 1, с. 115-131.

Жуков В. Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О. Б. Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений. Часть I. Основные элементы алгоритма. – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2012, препринт № 30, 32 с.