

热传导方程基于界面修正的 迭代并行计算方法^{*1)}

袁光伟 杭旭登

(北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室 北京 100088)

摘 要

在许多实际计算中,由于对时间步长稳定性的要求,辐射热传导方程的计算通常采用隐式格式.隐式格式难以直接在并行机上实施,显式差分格式尽管易于在并行机上实施,但它的稳定性条件苛刻.在计算问题规模相当大时,例如需要具有数百、数千甚至上万台处理器的大型并行计算机进行计算时,数据的强相关与全局通讯等问题成为制约实现高性能计算的突出的瓶颈问题.因此,改造现有的隐式格式,研究适应于大型并行计算机的并行计算方法是当前大型科学与工程计算中迫切需要解决的具有挑战性的问题.本文简要介绍基于界面修正的迭代并行计算格式的构造及基本性质.所提出的并行格式的构造方法是将预测-校正技术应用于分区子区域的内边界,且与子区域内部的迭代求解相结合,讨论了这些并行格式的稳定性、收敛性与并行度等性质.

关键词: 热传导方程, 并行差分方法, 迭代法, 界面修正

PARALLEL ITERATIVE METHODS FOR HEAT CONDUCT EQUATIONS BASED ON INTERFACE CORRECTION

Yuan Guangwei Hang Xudeng

(Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational
Mathematics, Beijing, 100088)

Abstract

In practical simulation, due to the requirement to the time step length, implicit schemes are often chosen for radiation heat conduct equation. Implicit schemes are hard to parallelize, while explicit schemes are easy to implement on parallel computer in spite of its strict stability constraints. When the problem requires hundreds, thousands even tens of thousands of CPUs to compute together, the strong coupling and the global communication become the bottleneck of high performance computing. It has become a challenging problem in large scale scientific and engineering computation to reformulate exist implicit schemes and develop

* 2004年7月12日收到.

1) 国家重点基础研究发展计划(973计划)(2005CB321703)和国家自然科学基金(10476002,60533020)资助.

parallel computational methods for large scale parallel computers. In this paper, the construction and basic properties of iterative parallel schemes are introduced. The proposed parallel schemes apply the predication and correction techniques to the inner interface of subdomains. The techniques are combined to the iterative solution procedure of the subdomain problem. The stability, convergence and parallelism are studied.

Key words: Heat equation, parallel difference scheme, iterative methods, interface correction

§1. 引 言

在求解大型科学与工程计算中出现的偏微分方程初边值问题时, 并行差分格式的构造应满足如下几个要求:

- (一) (稳定性) 格式具有无条件稳定性, 至少对步长的限制条件相当宽松;
- (二) (收敛性) 格式的数值解是高精度的, 能给出与纯显式或纯隐式相同精度的计算结果, 格式的截断误差小, 相容性条件限制比较宽松;
- (三) (并行性) 具有高并行度, 能较自由地分割求解区域, 便于实现负载均衡, 并且所要求的通讯是局部的, 尽量减少并行开销;
- (四) (适应性) 适合于将已有的串行程序并行化, 可以有效利用现有的、由隐式格式编制的、经过长时间考验的应用程序, 能节省人工编程的努力和时间;
- (五) (简单性) 便于求解辐射流体力学问题、以及辐射流体力学中子输运方程耦合问题, 这要求格式设计简单, 最好是两层差分格式, 易于实施;
- (六) (经济性) 子区域上形成的代数方程组阶数不高, 条件数小, 可以使用已有的高效的代数方程组解法器.

对抛物型方程并行差分方法已有许多研究工作, 构造了许多各具特点的并行差分格式. 从本文所列的参考文献可以看出, 2000 年前所研究的两层并行差分格式都是条件稳定的, 对于无条件稳定的三层交替格式也有许多研究. 2000 年以来研究构造了几类设计简单的无条件稳定的具有一阶精度的并行格式. 因此, 可见以往所构造的并行差分格式至少不满足上述要求中的某一个. 例如, 在时空方向采用交替技术的许多显隐交替并行格式 ([1]—[14]) 难以满足 (四) 和 (五). 在 [9]—[12] 中构造了相当一般的交替并行格式, 它们除了包含原有的交替格式作为特例外, 而且包含了许多新的并行格式, 它们也满足 (四) 和 (五), 因为这些格式可以在所有时间层的所有空间子区域中均使用隐式格式, 不需在任一个子区域中在奇偶时间层交替使用显式和隐式格式, 这些格式在子区域内界面使用 Saul'yev 非对称格式, 且要求子区域界面的位置在奇偶时间层不同 (见 [41]). 要求在任一个子区域中不需使用显格式, 这一点不仅仅是出于稳定性的考虑, 更为重要的是, 在对许多应用程序并行化时, 这可以极大地减少新程序和考核程序的工作量. 虽然许多两层的并行差分格式步长限制条件有所放宽, 例如, 见 [15]—[29], 但是它们不具有无条件稳定性, 不满足 (一). 有的并行差分格式虽然是无条件稳定的 ([30]—[37]), 但其数值解仅为二阶精度, 不满足 (二). 我们注意到, 几乎所有的并行差分格式都满足要求 (三) 和 (六). 在许多实际计算中, 特别需要构造既是无条件稳定

的、精度较高的、又易于在并行机上实施的简单实用的差分格式, 即应该满足上述所有的六个要求.

所有求解偏微分方程的并行计算格式的构造思想均基于“分而治之”的原则, 即把一个问题分裂成若干个较小规模的子问题, 然后独立地并行求解这些子问题. 由此给出的并行格式将数据整体强相关的问题分解为数据局部相关的子问题进行求解, 具有比较理想的并行度. 正是由于这种分解引起了步长稳定性限制、或者离散解收敛阶降低引起精度损失、或者引起了新的计算复杂性等问题. 这些问题的根源之一是仅仅考虑了“分”的方面, 将一个全局依赖和全局影响的问题“分”成了局部依赖和局部影响的问题. 在某种程度上这改变了原来数学与物理问题的性质, 其数值计算解不可避免地出现上述不理想的情形, 所以不仅要考虑如何“分”, 更应重视如何“治”, 或者说更应重视如何“合”. 这里提出的迭代并行格式就是基于加强“治”或“合”方面的考虑而提出的. 为了实现整体最优的目标, 我们认为除了“分而治之”外, 还应补充一个“界面修正”的原则. 一般来说, “分而治之”中的“之”是指所分解的子问题, 其中的“治”主要是指如何求解这些子问题. “界面修正”的关键是, 强调如何在所分解的各个子问题的定义区域之间的界面处进行修正和调整. 特别是在子区域问题的迭代求解过程中根据求解的需要随时进行某种合理高效的修正. 通过“界面修正”, 在保持较高并行度的基础上, 不仅改进界面值的精度, 使得整体精度提高, 而且适当恢复了实际问题中数据强相关的本性、全局依赖和全局影响的本性, 即实现了比较理想的“合”, 从而可以同时实现无条件稳定性和二阶精度.

对二阶椭圆型方程的区域分解方法已有大量研究, 例如广义子结构或非重叠区域分解方法. 特别是, 在 [42] 中应用一个基于梯度型迭代方法的优化策略, 定义了子区域问题之间的耦合条件, 即为一类界面修正方法, 从而将各个子区域问题的解集成为整个问题的解.

本文提出的基于界面修正的迭代并行计算格式, 其构造途径是基于预测校正的思想方法与并行计算格式设计的有机结合. 在非线性偏微分方程数值求解中预测校正方法是一个十分重要的方法, 例如, 求解双曲守恒律方程的 Mac Cormack 格式, Richtmyer 二步法等. 应用预测校正格式求解非线性抛物型方程组时可以避免直接求解非线性代数方程组, 且可得到二阶精度. 在显隐交替并行格式^{[1]-[14]}以及基于逐点显式预估逐点 Jacobi 迭代型的隐式修正的并行格式^[29]的构造思想中, 我们看出使用预测校正方法的影子, 但这种整体预估、整体校正的方法, 使得所导致的计算格式与算法或者变得比较复杂, 或者变成条件稳定. 我们使用的界面修正属于局部预估、局部校正, 避免了这些问题. 三层交替格式可以认为是一类分数步长法, 它们在奇偶时间层分别进行预估与校正步. 这里所构造的并行格式仅限于在内界面处在同一个时间层使用预估与校正.

另外, 这里构造的并行计算格式还将界面修正与迭代方法有机结合. 在偏微分方程数值求解中, 迭代方法是经常使用的方法. 由于子区域上的定解问题与原来整个区域上的问题性质相同, 所以仍然需要采用迭代方法进行求解. 在迭代过程中, 如果不断修正界面值, 那么可以期望不仅界面值得到改进, 更重要的是子区域内部的迭代收敛加速, 于是内部值和整个数值解的精度能够更快地得到更大的改进. 本文的数值结果将说明所构造的格式实现了这一期望.

为叙述简单起见, 考虑如下抛物型方程初边值问题的并行差分方法

$$U_t = U_{xx}, \quad (x, t) \in Q_T, \quad (1.1)$$

$$U(0, t) = U(1, t) = 0, \quad t \in [0, T], \quad (1.2)$$

$$U(x, 0) = U_0(x), \quad x \in [0, 1], \quad (1.3)$$

其中 $Q_T = [0, 1] \times [0, T]$, $T > 0$, $U_0(x)$ 是已知函数, $U_0(0) = U_0(1) = 0$. 本文的讨论均适用于多维定解问题.

记空间步长为 h , 时间步长为 τ . 用平行线 $x = x_j = jh (j = 0, 1, \dots, J)$ 和 $t = t^n = n\tau (n = 0, 1, \dots, N)$ 剖分区域 Q_T , 其中 $Jh = 1$, $N\tau = T$, J 和 N 是正整数. 引入记号 $r = \frac{\tau}{h^2}$, $\delta u_j^n = \frac{1}{h} (u_{j+1}^n - u_j^n)$, $\delta^2 u_j^n = \frac{1}{h} (\delta u_j^n - \delta u_{j-1}^n)$, $\Delta_\tau u_j^{n+1} = \frac{1}{\tau} (u_j^{n+1} - u_j^n)$.

为明确起见, 我们叙述如下定义:

定义. 一个差分格式称为是无条件稳定的和收敛的, 如果对任何固定的网格比 $r = \frac{\tau}{h^2}$, 它是稳定的和收敛的.

本文内容如下: 第二节介绍基于界面修正的迭代并行方法的一般步骤; 第三节具体介绍三类基于界面修正的迭代并行格式; 第四节、第五节分别给出基于界面修正的迭代并行格式的数值试验结果以及有关结论, 特别是说明了所构造的基于界面修正的迭代并行格式完全实现了上述六个目标.

§2. 基于界面修正的迭代并行方法的一般步骤

与整个空间区域上的定解问题相比, 分块并行求解的子区域上的定解问题是一个在方程形式、定解条件和问题类型均相类似的问题, 仍为一个非线性定解问题, 只是每个子区域计算问题的规模变小或计算区域变得比较规则. 对子区域上的非线性问题, 依然需要采用非线性迭代与线性迭代进行求解. 为保证能有效地进行迭代求解以及二阶收敛性, 应将并行格式与迭代方法有机结合起来. 尤其是在分块子区域界面上的精确计算, 对得到整个区域上高精度的数值解是十分重要的. 在 [38] 中提出了求解抛物型方程的具有并行本性的迭代方法, 即给出了下面叙述的迭代并行求解方法的一般步骤. 所给出的求解偏微分方程的基于界面修正的迭代并行方法, 是在以往的并行差分格式的基础上进行了适当修改, 在求解子区域上的定解问题时, 在每一个迭代步或间隔几个迭代步就在子区域内界面处进行隐式修正, 可以仅仅在第一个 (初始) 迭代步求解时所需边界条件使用子区域内界面处的显式格式的解, 在随后的迭代步中改用子区域内界面处的隐式修正格式的解.

对线性抛物型方程组, 基于界面修正的迭代并行求解方法的一般步骤如下:

第 (1) 步. 给定问题的离散初始值 (第 n 时间层的值) 和边界值;

第 (2) 步. 将物理空间区域剖分成若干不重叠的块;

第 (3) 步. 在分块子区域的内边界上, 采用某种显式格式计算出 (第 $n+1$ 时间层的值) 格式的解, 作为在内边界处的预估值;

第 (4) 步. 利用分块子区域的边界值, 采用隐式格式并行求解各个子区域上的解, 这里的隐式格式通常需要进行迭代求解, 可在每一迭代步或几次迭代步结束时, 转入 (5);

第 (5) 步. 利用已计算出的分块子区域内的 (近似) 解, 在分块子区域内边界处利用隐式格式计算出内边界处的校正值;

第 (6) 步. 若第 $n + 1$ 时间层的数值解满足精度要求, 则转入第 (1) 步; 否则, 转入 (4).

对非线性抛物型方程组, 基于界面修正的迭代并行求解方法的步骤与上面类似, (1)(2)(3) 步与上面相同, 不同之处如下:

第 (4) 步. 利用在分块子区域的内边界上采用的显式格式得到的预估值作为内边界条件, 对各个子块区域上的隐式格式构造非线性迭代. 例如简单迭代, Newton 迭代等, 即进行某种线性化, 形成一个线性代数方程组, 再利用线性代数方程组的某种迭代方法进行迭代求解. 在每一非线性迭代步或线性迭代步结束时, 转入下一步 (5);

第 (5) 步. 利用已计算出的分块子区域内的解, 在分块子区域内边界处使用隐式格式求解在内边界处的校正值时, 求解的是一个非线性方程, 也要采用某种有效的迭代方法进行求解;

第 (6) 步. 若第 $n + 1$ 时间层的数值解满足精度要求, 则转入第 (1) 步; 否则, 转入第 (4) 步.

如果在第 (4) 步结束时, 所得到的第 $n + 1$ 时间层的数值解已满足精度要求, 那么可以不作界面修正, 直接转入第 (1) 步.

下面称 (4) 中的迭代为内迭代, 将 (6) 转入 (4) 的过程称为外迭代.

上面的第 (3) 步是在内边界处的预估步, 通常有两种方式: 一是由某种显式格式计算得到界面 (或界面附近) 处的第 $n + 1$ 时间层的预估值, 所用格式可以是纯显式, Du-Fort Frankel 格式, 分组显式格式 (即前向 Saul'yev 非对称格式) 或其它类型的显式格式, 得到的预估值可以作为子区域上定解问题的 Dirichlet, Neumann 或 Robin 边界条件; 第二种预估方式是简单地取内界面第 n 时间层的值作为第 $n + 1$ 时间层分块子区域的 Dirichlet 边界条件, 或内界面附近第 n 时间层的值的某种组合作为第 $n + 1$ 时间层分块子区域的 Neumann 或 Robin 边界条件, 而不是采用显式格式预估计算. 初步的数值结果表明, 采用前一种的方法能得到较高的精度, 而后一种方法能保证稳定性.

从上面构造的并行迭代方法可看出, 显式格式只在界面预估步 (第 (3) 步) 中出现, 在第 (4) 步分块计算中仅在第一个 (初始) 迭代步求解时使用该显式格式的解, 在随后的每一迭代步中所需的子区域边界值均可以由在界面处隐式修正步 (第 (5) 步) 中的隐式格式的解提供. 这样构造的迭代并行方法的稳定性和收敛性与纯隐式格式相似, 尤其是稳定性和收敛性比上节提到的那些并行格式更好, 而且并行度高, 易于并行实施. 特别是易于将现有的使用纯隐式格式编制的应用程序进行并行化. 对多维问题, 上面第 (5) 步中的隐式格式的解可采用多种途径求得. 一种是将其看作粗网格上隐式方程组求解. 另一种是采用多步法, 例如对二维问题, 可先隐式校正内边界线上的值 (假定内边界的交点处的值已知), 再隐式校正内边界的交点处的值.

对其它类型的偏微分方程定解问题的数值求解, 上面的思想也可以应用于构造相应的并行迭代差分格式. 例如, 可以将界面修正的方法应用于构造求解粒子输运方程离散纵标方程基于空间变量区域分解的源迭代并行计算方法.

§3. 三类基于界面修正的迭代并行格式

根据不同的显式预估方式和界面修正步骤,可以得到如下三类性质不同的迭代并行格式:

第一类. 在第 (3) 步界面采用纯显式格式或 Saul'yev 非对称格式进行预估计算, 经过内迭代和界面隐式格式修正 (第 (4)—(5) 步), 无需继续作外迭代, 即可得到近似二阶精度的数值解. 若继续作外迭代, 精度会有改善, 稳定性限制条件会更宽松. 数值结果表明该类方法具有无条件稳定性, 但对此尚未得到严格的理论证明. 这里所指的采用 Saul'yev 非对称格式预估, 是指在界面处使用分组显式格式.

第二类. 与第一类格式相似, 在第 (3) 步界面采用某种能实现无条件稳定的显式格式进行预估, 经过内迭代和界面隐式格式修正 (第 (4)—(5) 步), 若不继续作外迭代, 则只能得到一阶精度. 若继续作数次外迭代, 可以得到高于一阶精度的数值解. 该类方法的一个主要优点是, 对该类方法可直接使用离散极值原理或离散能量估计方法, 证明它们具有无条件稳定性.

例如, 对定解问题 (1.1)—(1.3), 构造如下基于块 Jacobi 型迭代的并行格式, 其中在第 (3) 步预估步, 考虑第二种预估方式中的取 Dirichlet 边界条件的情形, 即在内边界处取前一时间层的值作为当前时间层子区域迭代计算在初始迭代步的所需的 Dirichlet 边界条件

$$\frac{u_k^{n+1(s+1)} - u_k^n}{\tau} = \frac{1}{h^2} (u_{k+1}^{n+1(s)} - 2u_k^{n+1(s+1)} + u_{k-1}^{n+1(s)}), \quad k \in \text{子区域内界面}, \quad (3.1)$$

$$\frac{u_j^{n+1(s+1)} - u_j^n}{\tau} = \frac{1}{h^2} (u_{j+1}^{n+1(s+1)} - 2u_j^{n+1(s+1)} + u_{j-1}^{n+1(s+1)}), \quad j \in \text{子区域内部}, \quad (3.2)$$

$$u_j^0 = U_0(x_j), \quad 0 \leq j \leq J, \quad (3.3)$$

其中 s 为外迭代次数. 我们有如下结论成立:

定理. 格式 (3.1)—(3.3) 是无条件稳定的, 即对任意固定的网格比 $\frac{\tau}{h^2}$, 成立

$$\max_{0 \leq j \leq J, 0 \leq n \leq N} |u_j^{n+1(s)}| \leq \max_{0 \leq j \leq J} |U_0(x_j)|, \quad s = 0, 1, \dots$$

第三类. 与第一类格式相似, 不同的是在第 (3) 步中内界面处采用 Du-Fort Frankel 三层显式格式进行计算^{[39]—[40]}, 经过内迭代 (第 (4) 步), 不需继续作界面隐式格式修正和外迭代, 即可得到二阶精度的数值解, 已证明该类方法满足无条件稳定性的必要条件. 若继续作界面隐式格式修正和外迭代, 精度有进一步的改善. 除了在第 (3) 步中内界面处采用 Du-Fort Frankel 三层显式格式这一点外, 该类方法满足第一节中所述的六条性质.

由于希望所构造的迭代并行格式具有无条件稳定性, 因此一些简单但条件稳定的并行格式在此不再详细讨论. 例如第一类格式在第 (3) 步界面采用 Saul'yev 非对称格式进行计算, 且不进行界面修正, 那么所得到的并行格式只是条件稳定的, 时间步长可以放大为显式格式步长的 8 倍^[22]. 又例如, 在第 (3) 步预估步, 采用第二种预估方式中的 Neumann 或 Robin 边界条件, 即在内边界处取前一时间层的值, 构造当前时间层子区域迭代计算所需的 Neumann 或 Robin 边界条件, 初步的数值结果说明, 由此得到的基于界面修正的迭代并行格式具有二阶精度, 但它们只是条件稳定的. 再例如, 在 [29] 中 Rodrigue 和 Wolitzer 提出

基于逐点显式预估, 逐点 Jacobi 迭代型的隐式修正的并行格式, 该格式仅仅是条件稳定的. 而这里构造的迭代并行格式作为易于在并行机上实施的并行格式, 只需先在子区域分界面处进行显式预估, 再在子区域内部采用隐式计算, 然后在子区域分界面处进行隐式修正, 这样得到的并行格式明显比 Rodrigue 和 Wolitzer 提出的格式在稳定性方面好得多. 无论如何, 在我们提出的一般步骤中, 可以给出一些新的方法, 它们不只是原有的一些方法的有效组合、推广和改进, 很重要的是它们使得新的并行格式满足第一节中所述的四条性质.

迭代并行格式的一个重要的性能问题是迭代的收敛速度问题. 由于子区域上的问题是采用迭代格式进行迭代求解, 并在子区域之间的界面处采用迭代的方法进行修正, 因此迭代的收敛速度除了依赖有效的预估方法外, 在界面处采用有效的修正方法也是很重要的. 通常是采用全隐式差分格式进行修正, 但数值试验表明, 这种修正方式往往导致迭代收敛的速度很慢, 影响了整体的差分格式的效率 and 精度. 我们采用了渐进修正的方法, 即在不同的修正步, 采用不同的修正格式. 我们考虑采用加权的统一差分格式进行修正. 在一维情形的子区域界面处的隐式修正格式取为如下形式或其它加权形式, 在多维情形可以类似选取.

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} = \alpha_k \left(a_{i+1/2}^{n+1} \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}}{h^2} - a_{i-1/2}^{n+1} \frac{u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{h^2} \right) + (1-\alpha_k) \left(a_{i+1/2}^n \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{h^2} - a_{i-1/2}^n \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{h^2} \right),$$

其中系数 $\alpha_k = (k-1)/k$, k 是进行修正的次数, 当 k 为 1 时退化为经典显式差分格式. 这样的取法使得这个修正过程是一个渐进的过程, 最终收敛于全隐式差分格式. 数值试验表明, 这种渐进的修正方法很有效, 可以保证差分格式很快收敛.

§4. 数值例子

例 1. 考虑二维抛物型方程的定解问题

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(b \frac{\partial u}{\partial y} \right) + f, x, y \in \Omega, t \in [0, T], \\ u(x, y, 0) &= g, x, y \in \Omega, u(x, y, t) = 5, x, y \in \partial\Omega, t \in [0, T], \\ a &= b = 1/2, f = 16\pi^2 \sin(4\pi x) \sin(4\pi y), \\ g &= \sin(\pi x) \sin(\pi y) + \sin(4\pi x) \sin(4\pi y) + 5, \end{aligned}$$

其精确解为

$$u = \exp(-\pi^2 t) \sin(\pi x) \sin(\pi y) + \sin(4\pi x) \sin(4\pi y) + 5.$$

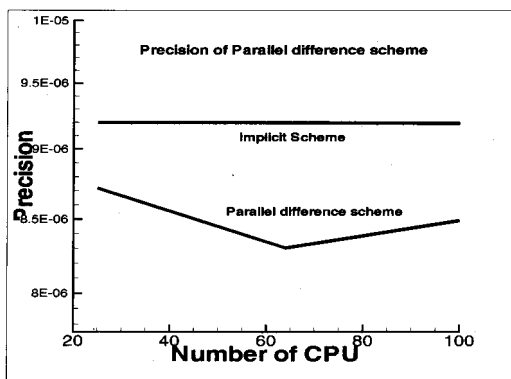
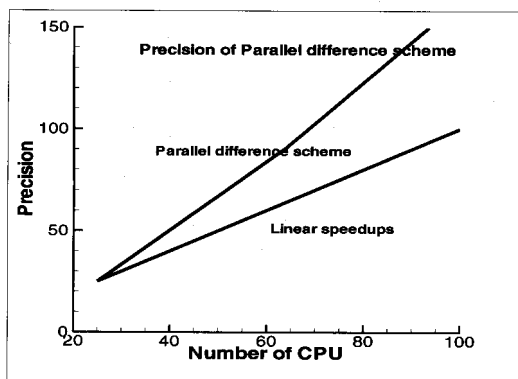
采用上节引入的第一类并行格式, 以下数值结果给出在不同网格比和不同网格规模情形与隐式格式解的精度, 并给出加速比、界面处平均修正次数以及内迭代次数的比较.

在表 1 中, nx 表示 x 方向的网格点数, ny 表示 y 方向的网格点数, $r = \tau/h^2$ 表示时间与空间方向的网格比, $tnnd$ 表示最终计算的时间. CPU 表示处理机个数, E_∞ 为误差最大模, T 为总的计算时间, SU 相对加速比, M 修正次数 (外迭代次数).

数值试验 1. $nx = ny = 1000, r = 10, tnnd = 0.005$

表 1

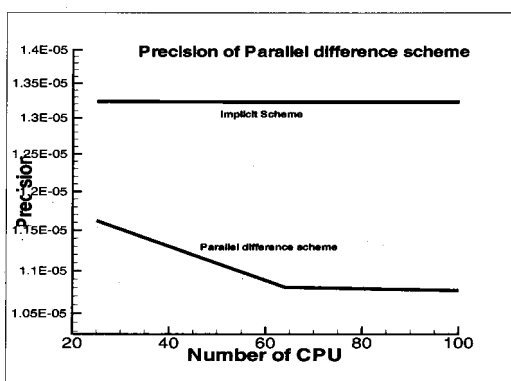
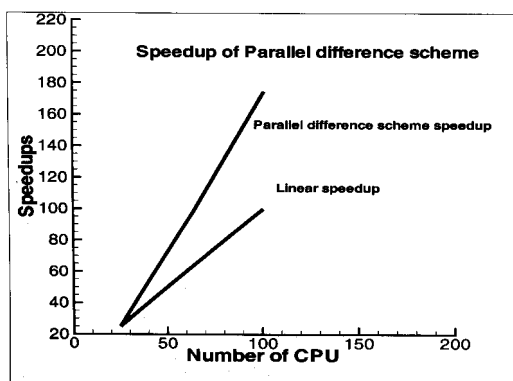
处理机个数	25	64	100
并行差分格式误差	8.7196E-06	8.3045E-06	8.4922E-06
隐式差分格式误差	9.1994E-06	9.1992E-06	9.1935E-06
并行迭代时间	789.304	217.871	121.1725
相对加速比	25	90.57	162.845
平均修正次数	3.13	3.13	3.13
子区域上的迭代次数	9	9	7



数值试验 2. $nx = ny = 1000, r = 30, tnnd = 0.005$

表 2

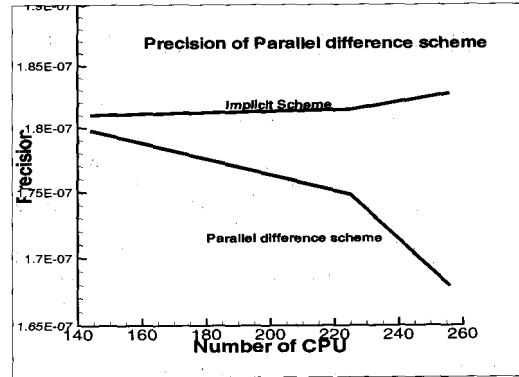
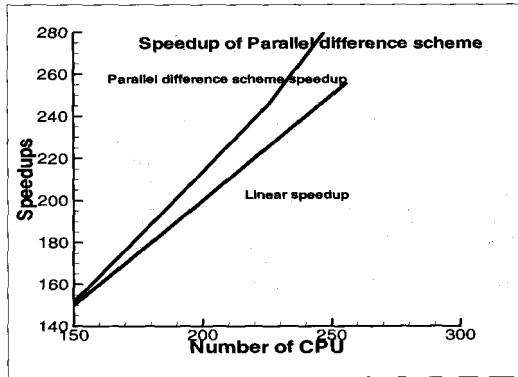
处理机个数	25	64	100
并行差分格式误差	1.1621E-05	1.0807E-05	1.0767E-05
隐式差分格式误差	1.3236E-05	1.3229E-05	1.3228E-05
并行迭代时间	497.6498	125.860	71.208
相对加速比	25	98.84985	174.71675
平均修正次数	4.4	4.4	4.4
子区域上的迭代次数	15	13	13



数值试验 3. $nx = ny = 3000, r = 30, tnnd = 0.0005$

表 3

处理机个数	144	225	256
并行差分格式误差	1.7981E-07	1.7481E-07	1.6787E-07
隐式差分格式误差	1.8104E-07	1.8146E-07	1.8274E-07
并行迭代时间	543.0919	319.63035	266.12768
相对加速比	144	244.67	293.86
平均修正次数	4.54	4.54	4.54
子区域上的迭代次数	13	11	11



例 2. 继续考虑上例中的二维抛物型方程的定解问题, 对上节引入的三类基于界面修正的迭代并行格式, 下面分别给出在不作外迭代与作 6 次外迭代的情形数值结果.

数值试验 4. 取 $nx = ny = 1000, r = 20, tnnd = 0.05$.

(I) 对第一类基于界面修正的迭代并行格式, 不作外迭代, 数值结果如下:

CPU	IMPLICIT	2 × 1	2 × 2	4 × 2	4 × 4	8 × 4
E_{∞}	3.72E-5	3.69E-5	3.82E-5	3.79E-5	3.76E-5	3.69E-5
T	47775.78	25440.36	13878.04	6415.96	2762.57	1236.74
SU	-	2	3.663	7.9303	18.418	41.141
$E_{\infty}/(\tau+h^2)$	1.7714	1.7571	1.819	1.8048	1.7905	1.7571

作 6 次外迭代的数值结果如下:

CPU	IMPLICIT	2 × 1	2 × 2	4 × 2	4 × 4	8 × 4
E_{∞}	3.72E-5	2.72E-5	2.37E-5	2.12E-5	2.77E-5	2.69E-5
T	47775.78	27108.72	15394.71	7621.74	3462.32	1510.79
SU	-	2	3.5218	7.1135	15.659	35.887
M	0	6	6	6	6	6
$E_{\infty}/(\tau+h^2)$	1.7714	1.2952	1.1286	1.0095	1.319	1.281

(II) 对第二类基于界面修正的迭代并行格式, 不作外迭代, 数值结果如下:

CPU	IMPLICIT	2 × 1	2 × 2	4 × 2	4 × 4	8 × 4
E_{∞}	3.72E-5	8.5E-4	1.02E-3	1.04E-3	1.09E-3	2.1E-3
T	47775.78	27533.54	14372.34	6773.49	3137.32	1437.66
SU	-	2	3.8315	8.1298	17.552	38.303
$E_{\infty}/(\tau+h)$	0.036471	0.83333	1	1.0196	1.0686	2.0588

作 6 次外迭代的数值结果如下.

CPU	IMPLICIT	2×1	2×2	4×2	4×4	8×4
E_{∞}	3.72E-5	2.60E-4	5.98E-4	5.93E-4	5.98E-4	6.20E-4
T	47775.78	32687.63	17021.84	8128.78	4437.32	1773.51
SU	-	2	3.8407	8.0424	14.733	36.862
M	0	6	6	6	6	6
$E_{\infty}/(\tau+h^2)$	1.7714	12.381	28.476	28.238	28.476	29.524

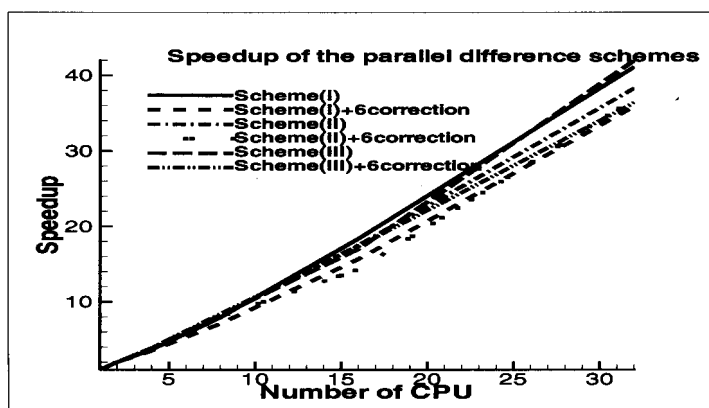
(III) 对第三类基于界面修正的迭代并行格式, 不作外迭代, 数值结果如下.

CPU	IMPLICIT	2×1	2×2	4×2	4×4	8×4
E_{∞}	3.72E-5	3.68E-5	5.64E-4	5.65E-4	7.2E-4	7.3E-4
T	47775.78	14124.95	7379.18	3415.96	1661.04	673.22
SU	-	2	3.8283	8.27	17.007	41.962
$E_{\infty}/(\tau+h)$	0.036471	1.7524	26.857	26.905	34.286	34.762

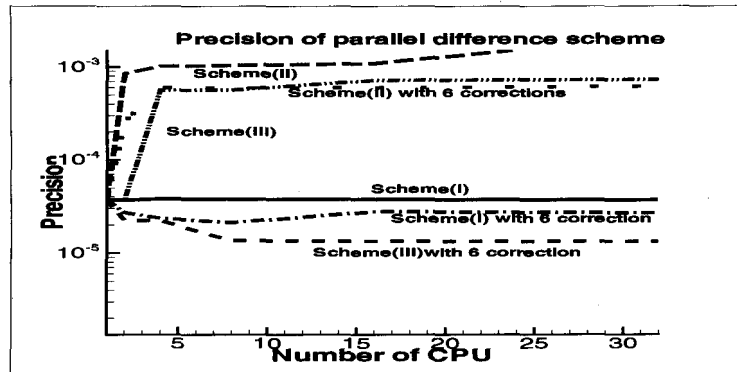
作 6 次外迭代的数值结果如下.

CPU	IMPLICIT	2×1	2×2	4×2	4×4	8×4
E_{∞}	3.72E-5	2.25E-5	2.23E-5	1.36E-5	1.34E-5	1.33E-5
T	47775.78	21059.15	10861.14	5003.79	2423.36	1157.46
SU	-	2	3.879	8.4173	17.38	36.389
M	0	6	6	6	6	6
$E_{\infty}/(\tau+h^2)$	1.7714	1.0714	1.0619	0.64762	0.6381	0.6226

下图表示迭代并行格式 (I)-(III) 在不作外迭代与作 6 次外迭代的情形的加速比.



下图表示迭代并行格式 (I)-(III) 在不作外迭代与作 6 次外迭代的情形的精度.



§5. 总 结

本文针对数值求解抛物型方程的并行计算格式的构造, 考察了所使用的“分而治之”策略, 并引入一个补充的策略“界面修正”. 我们认为其中“分”的收益是获得了相当高的并行度, 但“分”带来的代价包括: 引入了步长稳定性限制和计算复杂性, 并引起收敛阶降低. 因此, 我们引入如下补充的策略: “界面修正”, 即“合”. “合”的代价, 或者说“界面修正”的代价是: 增加了通信和计算量, 或引入了新的复杂性. 而“合”带来的收益包括: 改进界面值的精度, 使整体精度提高, 且在一个时间层内、在迭代过程中, 适当恢复了数据强相关、全局依赖和全局影响的本性 (这是物理要求, 也是数值计算的要求). 这就使得实现无条件稳定性成为可能. 在保持较高并行度且保持简单性的情形, “合”的代价远小于“分”带来的收益. 对于本文所构造的基于界面修正的迭代并行格式, 界面修正所增加的通信和计算量均很少, 且引入的复杂性也很低, 相比之下, 所增加的精度、并行度与收敛速度却相当明显.

数值试验表明, 基于界面修正的迭代并行格式具有的共同特点是: (i) 稳定性限制条件相当宽松 (显示出无条件稳定性); (ii) 二阶精度, 且精度比纯隐式格式要高 (显示出误差相消); (iii) 并行度高、可扩展性好, 出现线性甚至超线性加速比. 出现超线性加速比的原因包括: 一是这里描述的迭代并行格式中, 增加的内边界处隐式修正步 (第 (5) 步) 所需的通讯开销和计算开销均比较少, 并行格式仅使用局部通讯, 格式的加速比即为线性加速比; 二是并行格式在每个隐式子区域上形成的代数方程组的阶数比原来全区域上隐式格式形成的代数方程组的阶数低, 子区域上的代数方程组的系数矩阵条件数要好得多. 在子区域上所需迭代次数较少, 总计算量减少, 从而求解速度增加, 这对加速比也有一定贡献, 因此我们构造的基于界面修正的迭代并行格式实质上还是加速迭代收敛格式.

需要指出的是, 在所构造的这些基于界面修正的迭代并行格式中, 有一部分并行格式无需作外迭代. 是否需要作外迭代主要取决于在子区域边界处的处理, 特别是在界面显式预估步是否引入了较严格的步长限制性条件 (例如第一类格式); 或者界面预估值是否尚未达到精度要求 (例如第二类格式). 许多数值结果表明, 进行外迭代使得在整个区域上的求解能显著地放宽步长限制性条件并提高精度. 不同的外迭代次数和内迭代中的界面修正对精度、并行度有一定的影响. 第二类并行格式不作外迭代, 只能达到一阶精度, 如作外迭代, 可达到高于一阶的精度.

三类迭代并行格式 (I)—(III) 的并行度均比较接近. 在稳定性方面, 格式 (II) 最好, 其次是 (III). 在精度方面, 基于界面修正的格式 (III) 最好, 其次是 (I), 它们甚至比隐式格式要好. 总之, 本文所讨论的基于界面修正的迭代并行格式不仅保持了隐式格式的优点, 而且满足第一节中提出的六个要求.

参 考 文 献

- [1] D.J. Evans, Alternating group explicit method for the diffusion equations, *Appl. Math. Modeling*, 19 (1985), 201–206.
- [2] D.J. Evans and A.R.B. Abdulah, A new explicit method for diffusion–convection equation, *Comp. & Maths. with Appls.*, 11 (1985), 145–154.
- [3] Zhang Baolin and Li Wenzhi, On Alternating Segment Crank–Nicolson scheme, *Parallel Computing*, 20 (1994), 897–902.
- [4] Chen Jing and Zhang Baolin, Variable coefficient ASE–I and ASC–N method and their stability, *Intern. J. Computing Math.*, 54 (1994), 215–229.
- [5] Zhang Baolin and Li Wenzhi, AGE method with variable coefficient for parallel computing, *Parallel Algorithms & Applications*, 5 (1995), 219–228.
- [6] Zhang Baolin and Su Xiumin, Alternating Segment Crank–Nicolson scheme, *Comp. Phys.*, 12 (1995), 115–120.
- [7] Zhang Baolin; Difference Graphs of Block ADI Method, *SIAM J. Numer. Anal.*, 38:3(2000), 742–752.
- [8] Han Zhen, Fu Hongyuan and Shen Longjun, Pure alternating segment explicit–implicit method for the diffusion equations, *Intern. J. Computer Math.*, 51 (1993), 8–15.
- [9] Yuan Guangwei, Shen Longjun, Zhou Yulin, Unconditional Stability of Alternating Difference Schemes with Intrinsic Parallelism for Two Dimensional Parabolic Systems, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 15(1999), 625–636.
- [10] Yuan Guangwei, Shen Longjun and Zhu Shaohong, Unconditional Stability of Parallel Difference Schemes with Variable Time Steplengths for Heat Equations, *International Journal of Computer Mathematics*, Vol. 75(2000), 315–322.
- [11] Yuan Guangwei, Shen Longjun, Zhou Yulin, Unconditional Stability of Parallel Alternating Difference Schemes for Semilinear Parabolic Systems, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 117, Nos. 2–3, 25 January 2001, 267–283.
- [12] Yuan Guangwei, Shen Longjun, Zhou Yulin, Unconditional Stable Difference Schemes with Intrinsic Parallelism for Parabolic Systems, *Annual Report of LCP*, 1997, 404–418.
- [13] B. L. Zhang, Z. S. Wan, New Techniques in Designing Finite Difference Domain Decomposition Algorithm for the Heat Equations, *Comp. & Math. Appl.*, 2002.
- [14] Z. S. Wan, B. L. Zhang, G. N. Chen, Design and Analysis of Finite Difference Domain Decomposition Algorithm for the Two-dimensional Heat Equations, *Proceeding of 2002 5th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing*, IEEE Computer Society, 174–178.
- [15] P.G. Eltgoth and M.K. Seager, The sub-implicit method: New multiprocessor algorithms for old implicit codes, *Parallel Computing*, 8 (1988), 155–163.
- [16] C.N. Dawson, Q. Du and T.F. Dupont, A finite difference domain decomposition algorithm for numerical solution of the Heat equation, *Math. Comp.*, 57 (1991), 63–71.

- [17] C. N. Dawson and T. F. Dupont, Explicit/implicit conservative domain decomposition procedures for parabolic problems based on block-centered finite differences, *SIAM J. Numer. Anal.*, 31 (1994), 1045–1061.
- [18] Q. Du, M. Mo and Z. N. Wu, Efficient Parallel Algorithms for Parabolic Problems, *SIAM J. Numer. Anal.*, 39:5(2001), 1469–1487.
- [19] I. Boglaev, An Implicit–Explicit Domain Decomposition Algorithm for a Singularly Perturbed Parabolic Problem, *Computers and Mathematics with Applications*, 38 (1999), 41–53.
- [20] D. Y. Li and S. Q. Dong, Segment explicit–implicit schemes for a parabolic equation with discontinuous coefficients, *Math. Numer. Sinica*, 19(1997).
- [21] Zhu Shaohong, Yuan Guangwei and Sun Weiwei, Convergence and Stability of Explicit/Implicit Schemes for Parabolic Equations with Discontinuous Coefficients, *Int. J. Numerical Analysis & Modeling*, 1 (2004), 131–146.
- [22] Yuan Guangwei, Zhu Shaohong and Shen Longjun, Domain Decomposition Algorithm Based on Saul’yev Schemes for the Heat Equation, Preprint.
- [23] Zhou Yulin, Finite difference method with intrinsic parallelism for quasilinear parabolic systems, *Beijing Math.*, 2:1 (1996), 1–19.
- [24] Zhou Yulin, General finite difference method with intrinsic parallelism for nonlinear parabolic systems, *Beijing Math.*, 2:1 (1996), 20–38.
- [25] Zhou Yulin, Yuan Guangwei, General difference schemes with intrinsic parallelism for nonlinear parabolic systems, *Science in China (ser. A)*, 40:4(1997), 357–365.
- [26] Zhou Yulin, Shen Longjun, Yuan Guangwei, Some practical difference schemes with intrinsic parallelism for nonlinear parabolic systems, *Chinese J. Numer. Math. and Appl.*, 19:3(1997), 46–57.
- [27] Zhou Yulin, Yuan Guangwei, General Difference Schemes with Intrinsic Parallelism for Semilinear Parabolic Systems of Divergence Type, *J. C. M.*, 17:4(1999).
- [28] Zhou Yulin, Yuan Guangwei, Difference Method of General Schemes with Intrinsic Parallelism for One–Dimensional Quasilinear Parabolic Systems with Bounded Coefficients, *J. P. D. E.*, 12:3(1999), 213–228.
- [29] G.Rodrigue, K.Wolitzer. Expanding stability regions of explicit advective-diffusive finite difference method by Jacobi preconditioning. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. 11(1995). 319-353
- [30] 袁光伟, 沈隆钧, 抛物型方程实用的隐式区域分解方法 (I), *Annual Report of LCP*, 2000.
- [31] 袁光伟, 沈隆钧, 抛物型方程实用的隐式区域分解方法 (II), *Annual Report of LCP*, 2000.
- [32] Yuan Guangwei, Implicit Differences Domain Decomposition Procedures for Parabolic Problem, *International Congress of Mathematicians 2002 Beijing, Abstracts of Short Communications and Poster Sessions*, Higher Education Press, 356–357.
- [33] Yuan Guangwei, Shen Longjun, Zhou Yulin, Parallel Differences Schemes for Parabolic Problem, *Proceeding of 2002 5th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing*, IEEE Computer Society, 238–242.
- [34] Zhou Yulin, Shen Longjun, Yuan Guangwei, The Unconditional Stable and Convergent Difference Methods with Intrinsic Parallelism for Quasilinear Parabolic Systems, *Science in China (A)*, 33:4(2003), 310–324. (In Chinese).
- [35] Yuan Guangwei, Shen Longjun, The Unconditional Stable Difference Methods with Intrinsic Parallelism for Two Dimensional Semilinear Parabolic Systems, *J. C. M.*, 21:1(2003), 63–70.
- [36] Shen Longjun, Yuan Guangwei, The Unconditional Convergence Difference Methods with Intrinsic Parallelism for Quasilinear Parabolic Systems Two Dimensions, *J. C. M.*, 21:1(2003), 41–52.

-
- [37] Zhou Yulin, Shen Longjun and Yuan Guangwei, Unconditional Stable Difference Methods with Intrinsic Parallelism for Semilinear Parabolic Systems of Divergence Type, accepted by Chinese Annals of Mathematics, 2003.
- [38] 袁光伟, 沈隆钧, 周毓麟, 非线性抛物型方程组具有并行本性的迭代方法, 中物院科技年报, 原子能出版社, 376, 2002 年.
- [39] Kelly Black, Polynomial Collocation Using a Domain Decomposition Solution to Parabolic PDE's via the Penalty Method and Explicit/Implicit Time Marching, Journal of Scientific Computing, 7:4 (1992), 313-337.
- [40] Yuan Guangwei, Zuo Fengli, Parallel Differences Schemes for Heat Conduction Equation, International Journal of Computer Mathematics, 80:8(2003), 95-99.
- [41] Yuan Guangwei, Hang Xudeng, Shen Longjun and Zhou Yulin, Domain Decomposition Procedures Based on Saul'yev Schemes for Parabolic Equations, Preprint, 2004.
- [42] Du Qiang and M. D. Gunzburger, A Gradient Method Approach to Optimization-Based Multidisciplinary Simulations and Nonoverlapping Domain Decomposition Algorithms, SIAM J. Numer. Anal., 37:5(2000), 1513-1541.
- [43] Yuan Guangwei and Hang Xudeng, The Parallel Iterative Difference Schemes Based on Interface Correction for Parabolic Equations, ICCP6-CCP2003, Beijing.