Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук

На правах рукописи

Auto

Терехов Андрей Валерьевич

Спектрально-разностные алгоритмы для моделирования волновых полей и их реализация на суперЭВМ

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени доктора физико-математических наук

Новосибирск – 2019

Оглавление

Введен	ие		6
Глава 🛾	1. Pa	ссматриваемые математические модели, постановка	
зада	чи и о	бзор существующих подходов	17
1.1.	Пряма	ая задача расчёта динамики волнового поля в контексте	
	метода	а глубинного сейсмического зондирования	17
1.2.	Обрат	ная задача восстановления изображений земных недр на	
	основе	е процедуры волновой миграции сейсмических данных	23
Глава 2	2. Вы	числение коэффициентов разложения ряда Лагерра	35
2.1.	Постал	новка задачи и обзор существующих подходов	35
2.2.	Метод	ы разложения функции в ряд Лагерра	40
	2.2.1.	Первая вспомогательная задача	40
	2.2.2.	Исключение фиктивной периодичности на основе равен-	
		ства Парсеваля	43
	2.2.3.	Вторая вспомогательная задача. Операции "сдвиг" и "со-	
		пряжение"	45
	2.2.4.	Исключение фиктивной периодичности на основе опера-	
		ции "сопряжения"	47
	2.2.5.	Общий метод разложения функции в ряд Лагерра	51
	2.2.6.	Алгоритмы устойчивого вычисления функций Лагерра .	52
	2.2.7.	Экономичный алгоритм для длительных интервалов ап-	
		проксимации	54
2.3.	Числе	нные расчёты	57
2.4.	Вывод	(Ы	66
Глава 3	3. Пр	ямые высокомасштабируемые параллельные алгорит-	

мы для решения систем линейных алгебраических уравнений

на	на суперЭВМ				
3.	1.	Постановка задачи и обзор существующих подходов 68			
3.	2.	лельные алгоритмы для решения систем линейных алгеб-			
		раических уравнений с трёхдиагональными матрицами			
		3.2.1.	Основные формулы	7	
		3.2.2.	Разделение системы линейных алгебраических уравнений		
			на независимые подсистемы	4	
		3.2.3.	Исследование устойчивости процесса разделения 8	5	
		3.2.4.	Оценки вычислительной сложности	7	
		3.2.5.	Реализация процесса разделения на суперЭВМ 9	0	
		3.2.6.	Решение систем линейных алгебраических уравнений с		
			тёплицевыми матрицами	3	
3.	3.	Параллельные алгоритмы для решения систем линейных алгеб-			
	раических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами .				
3.	4.	Численные расчёты			
3.	5.	Выводы			
Глор	1	Ста			
глав	sa 4	. Ulle	сктрально-разностные алгоритмы для моделирования	0	
ai 4	кус [.] 1	Тическ	их и упругих волновых полеи на суперЭБМ 11	9	
4.	1.	модел	ирование динамики акустических и упругих волновых полеи 11	9	
		4.1.1.	Спектрально-разностный метод для уравнения акустики 11	9	
		4.1.2.	Спектрально-разностный метод для уравнений упругости 12	0	
		4.1.3.	Аппроксимация криволинейных границ	4	
		4.1.4.	Поглощающие граничные условия	8	
		4.1.5.	Алгебраический вариант метода декомпозиции областей		
			для моделирования динамики акустических волн 13	4	
		4.1.6.	Алгебраический вариант метода декомпозиции областей		
			для моделирования динамики упругих волн 14	0	
4.	2.	Численные расчёты			

Глава 🗄	5. Сп	ектрально-разностные алгоритмы экстраполяции вол-		
HOB	ого пој	ия в глубину на основе решения одностороннего вол-		
нов	ого ура	авнения		
5.1.	Спект	рально-разностный метод для решения одностороннего вол-		
	нового уравнения			
	5.1.1.	Преобразование Лагерра для одностороннего волнового		
		уравнения		
	5.1.2.	Конечно-разностная аппроксимация пространственных про-		
		изводных		
	5.1.3.	Решение систем линейных алгебраических уравнений 178		
	5.1.4.	Повышение порядка аппроксимации на основе метода Ричард-		
		сона		
5.2.	Числе	нные расчёты		
	5.2.1.	Волновое поле от точечного источника		
	5.2.2.	Миграционные преобразования временных разрезов 188		
	5.2.3.	Оценка производительности параллельных процедур экс-		
		траполяции волнового поля		
5.3.	Решен	ие одностороннего волнового уравнения на основе много-		
	шагов	ых схем Адамса		
	5.3.1.	Исследование устойчивости спектрально-разностного ме-		
		тода для модельного уравнения переноса		
	5.3.2.	Сплайн-стабилизация многошаговых схем для модельно-		
		го уравнения переноса		
	5.3.3.	Сплайн-стабилизация многошаговых схем для односто-		
		роннего волнового уравнения		
	5.3.4.	Алгоритм для решения 3D одностороннего волнового урав-		
		нения		

5.4.	Численные расчёты				
	5.4.1.	Решение модельной задачи для транспортного уравнения 214			
	5.4.2. $2D/3D$ волновое поле от точеного источника				
	5.4.3.	Миграционные преобразования $2D/3D$ временных разрезов 223			
5.5.	Выводі	ы			
Заключение					
Список литературы					
Приложение А. Описание программного комплекса Horizon $2D/3D267$					
Прилох	кение	Б. Акты о внедрении научных и практических ре-			
зультатов диссертации					

Введение

Актуальность темы исследования. Спектрально-разностные алгоритмы, построенные на основе комбинации метода конечных-разностей и интегральных преобразований, были предложены академиком Б.Г. Михайленко в 80-х годах для численного моделирования волновых процессов в задачах сейсмики. Спектрально-разностные методы нашли широкое применение для расчёта динамики волновых полей (акустического, упругого, электромагнитного и др.), используются для решения обратных задач с целью восстановления параметров физической среды по регистрируемым данным, а также для построения изображений земных недр посредством таких вычислительных процедур, как волновая миграция сейсмических данных. Постоянный рост числа процессоров, объединённых в рамках одной вычислительной системы, предоставляет новые возможности для решения задач математического моделирования, однако, наличие больших вычислительных ресурсов может не приводить к желаемому сокращению времени расчётов. Как показывают исследования последних трёх десятков лет, автоматизированная адаптация последовательных вычислительных алгоритмов не только для различных архитектур суперЭВМ, но даже для различного числа процессоров является труднорешаемой задачей. Таким образом, разработка и усовершенствование параллельных вычислительных алгоритмов, нацеленных на обработку больших объёмов данных, является актуальной научно-практической задачей, решение которой позволит более эффективно проводить расчёты с использованием современных суперЭВМ, объединяющих тысячи процессоров.

Для реализации спектрально-разностных методов в качестве интегрального преобразования могут быть выбраны как преобразование Фурье, так и интегральные преобразования на основе других систем ортогональных функций: Чебышева, Лагерра, Эрмита и т.д. Несмотря на многочисленные достоинства, существенный недостаток методов, включающих Фурье преобразова-

ние, заключается в том, что системы линейных алгебраических уравнений, возникающие после дискретизации пространственных производных, как правило, являются плохо обусловленными. Применение параллельных алгоритмов вычислительной линейной алгебры для решения таких систем требует интенсивных межпроцессорных взаимодействий, что ограничивает эффективность спектрального-разностного метода Фурье для суперкомпьютеров. Следовательно, представляет интерес создание спектрально-разностных алгоритмов на основе интегральных преобразований, приводящих к хорошо обусловленным системам линейных алгебраических уравнений, которые могут быть эффективно решены с использованием суперЭВМ. В рамках диссертационного исследования рассмотрены спектрально-разностные алгоритмы, включающие интегральное преобразование Лагерра по времени. Данный тип преобразования рассматривался для решения различных проблем вычислительной математики: моделирование акустических и упругих волновых полей (Б.Г. Михайленко, Р.С. Хапко, Г.В. Решетова, И.П. Гаврилюк), численные методы обращения преобразования Лапласа (М.М. Кабардов, В. М. Рябов, Ј. Abate, W.T. Weeks), задачи квантовой механики и спектроскопии (F. Comte), решение интегральных уравнений (J. Keilson, U. Sumita), при реализации неотражающих граничных условий и др. Таким образом, разработка новых параллельных вариантов спектральноразностных методов, а также методов вычислительной математики, необходимых для их реализации (процедур вычисления интегральных преобразований, решения систем линейных алгебраических уравнений и др.), позволит расширить класс решаемых на суперЭВМ задач.

Цели и задачи диссертационной работы: Разработать новые спектрально-разностные методы для математического моделирования акустических и упругих волновых полей на суперЭВМ для исследования структуры земной коры, разработать соответствующие программные комплексы для проведения расчётов на высокопроизводительных вычислительных системах, провести математическое моделирование для различных акустических и упругих скорост-

ных моделей сред в рамках задачи глубинного сейсмического зондирования и задачи волновой миграции сейсмограмм для построения изображений земных недр.

Для достижения поставленных целей необходимо было решить следующие **задачи**:

- 1. Для моделирования динамики акустических и упругих волновых полей в рамках метода глубинного сейсмического зондирования разработать параллельные спектрально-разностные алгоритмы для решения волновых уравнений на современных суперЭВМ.
- На основе решения одностороннего волнового уравнения для экстраполяции волнового поля с поверхности в глубину разработать устойчивые спектрально-разностные методы высоких порядков точности с последующей их реализацией на суперЭВМ.
- 3. Разработать высокомасштабируемые параллельные методы решения систем линейных алгебраических уравнений для реализации спектральноразностных алгоритмов на многопроцессорных вычислительных системах.
- Разработать устойчивые методы расчёта значений несобственных интегралов от быстро осциллирующих функций для вычисления коэффициентов разложения ряда Лагерра.
- 5. Разработать экономичные алгоритмы для выполнения преобразования Лагерра для аппроксимации функций на больших интервалах.
- Создать комплекс параллельных программ для математического моделирования акустических и упругих волновых полей в рамках решения задачи глубинного сейсмического зондирования.
- 7. На основе процедуры волновой миграции сейсмических данных создать комплекс параллельных программ для построения 2D/3D изображений

земных недр.

Научная новизна.

- Разработаны новые параллельные спектрально-разностные алгоритмы расчёта акустических и упругих волновых полей для высококонтрастных скоростных моделей с рельефной поверхностью для решения задачи глубинного сейсмического зондирования. Проведено численное моделирование полных волновых полей для Юга Байкальской рифтовой зоны и сопредельных областей с целью уточнения скоростных моделей земной коры.
- 2. Разработан и исследован новый спектрально-разностный алгоритм волновой миграции для построения изображений земных недр на основе решения одностороннего волнового уравнения. В отличие от существующих спектрально-разностных алгоритмов предлагаемый подход не требует решения плохо обусловленных знаконеопределенных систем линейных алгебраических уравнений.
- 3. Построены новые устойчивые спектрально-разностные методы решения одностороннего волнового уравнения для экстраполяции волнового поля с поверхности в глубину. Для этого были разработаны новые вспомогательные алгоритмы, позволяющие стабилизировать как неустойчивость решения одностороннего волнового уравнения, так и неустойчивость разностных схем высоких порядков точности.
- 4. Предложен новый численный метод интегрирования быстро осциллирующих функций для вычисления коэффициентов разложения ряда Лагерра.
- 5. Разработан новый экономичный алгоритм расчёта интегрального преобразования Лагерра для аппроксимации функций на больших интервалах.
- 6. Предложены новые высокомасштабируемые параллельные прямые методы для решения систем линейных алгебраических уравнений с трёхдиа-

гональными, блочно-трёхдиагональными и тёплицевыми матрицами для суперЭВМ, объединяющих десятки тысяч процессоров.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическая значимость диссертационной работы определяется необходимостью создания и обоснования новых численных методов для проведения научно-прикладных расчётов с использованием современных суперЭВМ. Практическая значимость диссертационной работы определяется возможностью использования разработанных параллельных алгоритмов и программ для моделирования динамики волновых полей в контексте решения прямых и обратных задач вычислительной сейсморазведки. Разработанные в диссертации параллельные методы решения систем линейных алгебраических уравнений могут быть использованы для реализации многочисленных процедур математического моделирования. Практическая значимость работы подтверждается тремя актами апробации и внедрения результатов диссертационного исследования.

Проводимые в диссертации исследования являются частью планов научноисследовательских работ ИВМиМГ СО РАН, а их выполнение было поддержано Российским фондом фундаментальных исследований и Министерством науки и высшего образования Российской Федерации. Исследования поддерживались следующими проектами: грант Президента Российской Федерации на 2017-2018 годы "Разработка методов построения изображения земных недр на основе миграционных преобразований в задачах сейсмической разведки", грант Российского фонда фундаментальных исследований 2014-2015 годы "Разработка спектрально-разностного параллельного алгоритма для моделирования динамики распространения сейсмических волн в верхней части разреза", грант Российского фонда фундаментальных исследований 2018-2019 "Разработка математических методов и комплексов программ для построения изображений земных недр с использованием суперЭВМ", грант Российского фонда фундаментальных исследований 2015-2017 "Создание геоинформационной технологии исследования

и верификации скоростных моделей земной коры с применением математического моделирования и методов активной сейсмологии", грант Российского фонда фундаментальных исследований 2014-2016 "Численное моделирование взаимодействия сейсмических и акустических волн в неоднородной модели Земля- Атмосфера с учётом стратификации ветра", стипендия Президента Российской Федерации 2013-2015 годы "Разработка численных алгоритмов для решения систем линейных алгебраических уравнений больших размерностей в задачах моделирования упругих волновых полей на многопроцессорных вычислительных системах".

Методология и методы исследования. В диссертации применяются: методы вычислительной линейной алгебры; теория классических ортогональных многочленов; конечно-разностные, конечно-элементные, конечно-объёмные и спектрально-разностные методы аппроксимации дифференциальных уравнений в частных производных; спектральные методы исследования устойчивости разностных уравнений; алгоритмы сплайн интерполяции; технологии параллельного программирования MPI и OpenMP; алгоритмы и методы цифровой обработки данных сейсморазведки.

Основные положения, выносимые на защиту, соответствуют пунктам 1,3,4,6,7 паспорта специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»:

- 1. Разработка и исследование параллельных спектрально-разностных методов моделирования акустических и упругих волновых полей для решения задачи глубинного сейсмического зондирования.
- 2. Разработка и исследование спектрально-разностных алгоритмов экстраполяции волнового поля с поверхности в глубину на основе решения одностороннего волнового уравнения с целью построения изображений земных недр в рамках процедуры волновой миграции сейсмических данных.
- 3. Разработка устойчивых и экономичных методов вычисления значений ин-

тегралов от быстро осциллирующих функций для решения задачи о разложении функции в ряд Лагерра.

- 4. Разработка и исследование высокомасштабируемых параллельных методов решения систем линейных алгебраических уравнений для реализации спектрально-разностных алгоритмов на основе преобразования Лагерра.
- 5. Разработка комплексов программ для моделирования акустических и упругих волновых полей для решения прямых и обратных задач сейсмики на суперЭВМ.

Степень достоверности и апробация результатов. Основные результаты диссертационного исследования обсуждались на семинарах в Институте ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Институте вычислительных технологий СО РАН, Федеральный исследовательский центр Красноярский научный центр СО РАН, Институте нефтегазовой геологии и геофизики им. А. А. Трофимука СО РАН, а также на следующих международных и всероссийских конференциях: Восьмая международная конференция по открытым системам для удержания плазмы (Новосибирск, 2010), Международная конференция "Parallel Computing Technologies", (Переславль-Залесский, 2007), Конференция молодых учёных Института Ядерной Физики им. Будкера СО РАН (Новосибирск, 2008, 2010); конференция молодых учёных ИВМиМГ СО РАН (Новосибирск, 2010), Международная конференция "7th International Conference on Open Magnetic Systems for Plasma Confinement" (Республика Корея, 2008), Международная суперкомпьютерная конференцию с элементами научной школы для молодежи "Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее" (Абрау-Дюрсо, 2011), Международная конференция "36th European Physical Society Conference on Plasma Physics" (София, Болгария, 2009), Международная конференция "Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики" (Новосибирск, 2014), Международная конференция "Актуальные проблемы вычислительной

и прикладной математики 2015", посвящённая 90-летию со дня рождения академика Г.И. Марчука (Новосибирск, 2015), Международная конференция по вычислительной и прикладной математике в рамках "Марчуковских научных чтений" (Новосибирск, 2017), Международная конференция по вычислительной математике и математической геофизике, посвящённая 90-летию со дня рождения академика А.С. Алексеева (Новосибирск, 2018).

За работу "Высокомасштабируемые параллельные алгоритмы для решения систем линейных алгебраических уравнений", выполненную в рамках данного диссертационного исследования, в 2014 году соискателю к.ф.-м.н. Терехову Андрею Валерьевичу была присуждена медаль Российской академии наук с премией для молодых учёных в области информатики, вычислительной техники и автоматизации (постановление президиума РАН номер 25 от 18.02.2014).

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 14 научных работах [16, 55, 75, 133, 181, 227–233, 236, 237]. Из них 13 статей в журналах из перечня ВАК [16, 75, 133, 181, 227–233, 236, 237], в том числе 11 статей [133, 181, 227–233, 236, 237] в журналах, зарегистрированных в системе Web of Science. Оформлено свидетельство о государственной регистрации программ [71].

В опубликованных работах отражено основное содержание, результаты и выводы диссертационного исследования. Конфликт интересов с соавторами отсутствует. Личный вклад автора заключается в формулировке постановок задач, в выборе методов для их решения, в разработке и обосновании численных методов и алгоритмов, составлении и тестировании компьютерных программ, проведении численных расчётов.

Личный вклад автора. Все выносимые на защиту результаты принадлежат лично автору.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы и приложений. Диссертация изложена на 274 страницах, включает библиографический список из 256 наименований работ, содержит 94 рисунка и 16 таблиц. Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в диссертационной работе, формулируются: цель, задачи, научная новизна, практическая значимость представляемой работы и основные положения, выносимые на защиту. Приводится краткое изложение результатов диссертационного исследования.

В первой главе диссертации рассмотрены математические модели на основе волновых уравнений акустики и упругости, а также одностороннего волнового уравнения в задачах вычислительной сейсмики, в частности, в рамках метода глубинного сейсмического зондирования и волновой миграции сейсмограмм для построения изображений земных недр. Делается обзор существующих численных методов для решения поставленных задач, обсуждаются достоинства и недостатки существующих подходов.

Вторая глава диссертационного исследования посвящена разработке новых численных методов расчёта интегрального преобразования Лагерра для их последующей реализации в контексте спектрально-разностных алгоритмов моделирования акустических и упругих волновых полей. Проблема вычисления интегрального преобразования Лагерра принадлежит к классу задач, известному как вычисление интегралов от быстро осциллирующих функций. Так как надёжные и быстрые методы расчёта преобразования Лагерра для аппроксимации временных рядов с постоянным шагом по времени на сегодняшний день отсутствуют, поэтому разработка таких устойчивых и экономичных процедур необходима в рамках реализации спектрально-разностных алгоритмов. В первом разделе проведён обзор и анализ существующих подходов к решению этой задачи.

Третья глава посвящена разработке параллельных методов решения систем линейных алгебраических уравнений с трёхдиагональными, блочно-трёхдиагональными и тёплицевыми матрицами на суперЭВМ в контексте спектральноразностных алгоритмов. Одним из ключевых и вычислительно-затратных этапов реализации спектрально-разностных методов является решение систем ли-

нейных алгебраических уравнений больши́х размерностей. Разработка параллельных процедур для рассматриваемого класса матриц позволит эффективно реализовывать на суперЭВМ спектрально-разностные методы на основе преобразования Лагерра. В первом разделе сделан обзор и анализ существующих подходов.

Четвёртая глава посвящена разработке спектрально-разностных параллельных алгоритмов для моделирования акустических и упругих волновых полей в рамках решения задачи глубинного сейсмического зондирования. Для моделей сред с криволинейными границами и сильными перепадами скоростей, на основе интегрального преобразования Лагерра реализован метод для расчёта волновых полей и сейсмограмм для больших удалений приёмников от источника. Рассмотрены различные способы аппроксимации осложнённого рельефа, предложена новая реализация поглощающих граничных условий. В контексте спектрально-разностных процедур рассмотрены прямые и итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений, включающие алгоритм дихотомии, разработанный в третьей главе. Проведено численное моделирование полных волновых полей для Юга Байкальской рифтовой зоны и сопредельных областей с целью уточнения скоростных моделей земной коры, полученных в эксперименте BEST (Baikal Explosion Seismic Transect).

Пятая глава диссертации посвящена задаче экстраполяции волнового поля с поверхности в глубину на основе решения одностороннего волнового уравнения посредством спектрально-разностного метода Лагерра. Предложены новые устойчивые спектрально-разностные алгоритмы высокого порядка точности, стабилизированные посредством специально разработанных процедур на основе сплайн-фильтрации. В рамках процедуры волновой миграции сейсмограмм были исследованы точность, устойчивость и производительность предлагаемых спектрально-разностных алгоритмов для решения одностороннего волнового уравнения как для двумерной, так и трёхмерной геометрии. Произведена обработка реальных сейсмограмм для районов Восточной и Западной Сибири

алгоритмами волновой миграции, реализованных на основе спектрально-разностных методов решения одностороннего волнового уравнения. Показано, что получаемые глубинные изображения обладают повышенной разрешающей способностью и меньшим числом артефактов, что позволяет с высокой степенью достоверности проводить их геологический анализ.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации, предложены направления дальнейших исследований.

Глава 1

Рассматриваемые математические модели, постановка задачи и обзор существующих подходов

1.1. Прямая задача расчёта динамики волнового поля в контексте метода глубинного сейсмического зондирования

Постоянный рост числа процессоров, объединённых в рамках одной супер-ЭВМ, предоставляет новые возможности для решения вычислительно сложных прикладных задач. К их числу, несомненно, относятся и задачи сейсмического моделирования [38, 40, 253], решение которых обусловлено необходимостью изучения волновых полей в условиях, приближённых к геологической реальности. Во многих практически важных случаях требуется рассчитать процесс распространения акустических или упругих волн в земной коре. Акустическое приближение для описания волновых процессов имеет вид [76]

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nabla \cdot (\kappa \nabla u) + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x_0}) f(t), \ \mathbf{x} \in \Omega,$$

$$u(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0,$$

(1.1)

где $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, n=2 или 3, t > 0 – время, $u = u(\mathbf{x}, t)$ – давление, ρ – плотность среды, κ – объёмный модуль упругости, $\sqrt{\kappa/\rho}$ – скорость звука, f(t) – импульс источника, $\delta(\mathbf{x})$ – функция Дирака. В рамках упругой модели уравнения движения определяются как

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} = \nabla \cdot (\mathcal{C} : \nabla \mathbf{U}) + \mathbf{F}, \ \mathbf{x} \in \Omega,$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0,$$

(1.2)

где $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, n=2 или 3, t > 0 – время, $\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ – вектор перемещений, \mathcal{C} – тензор упругости, ρ – плотность среды, \mathbf{F} – источник возбуждения упругих волн. В обоих случаях задачи дополняются необходимыми краевыми условиями.

Математические модели (1.1), (1.2) используются в вычислительной сейсморазведке при реализации алгоритмов волновой миграции (Дж. Клаербоут, E. Baysal, D. Kosloff, J.Sherwood), для исследования корректности скоростной модели среды (А.С. Алексеев, Б.Г. Михайленко, J. Virieux), в контексте алгоритмов полного обращения волнового поля (обзорная статья J. Virieux, S. Operto), а также для пересчёта волнового поля с дневной поверхности на какой-либо уровень приведения [7, 8, 10, 36, 40, 88, 245, 253]. Одним из примеров, когда требуется решать прямую задачу сейсмики с целью оценки корректности теоретической скоростной модели среды, является метод глубинного сейсмического зондирования (ГСЗ), предложенный академиком Г.А. Гамбурцевым в 40-х годах для изучения строения земной коры и верхней мантии [19]. Метод основан на регистрации волнового поля от некоторого источника до удалений в 300 -400 км при обычном ГСЗ (рис. 1.1 и 1.2) и до удалений в 3000 км при сверхдлинных профилях. Математическое моделирование необходимо для сопоставления расчётных волновых полей с наблюдаемыми при обработке и интерпретации сейсморазведочных материалов, для оптимизации параметров обработки и повышения достоверности геологической интерпретации. При этом требуется, чтобы вычислительная модель с хорошей точностью воспроизводила пространственные масштабы порядка нескольких тысяч длин волн. Естественно, что наиболее строгий подход основан на численном решении трёхмерных волновых уравнений с учётом вариации скоростных, плотностных, а также поглощающих свойств среды, однако, даже при современном развитии многопроцессорной вычислительной техники, моделирование полной волновой картины для трёхмерной геометрии в рамках метода ГСЗ является чрезвычайно затратным в силу значительных удалений приёмников от источника. Корректно спрогнозировать трёхмерную скоростную модель среды для таких расстояний по регистрируе-

мым данным для одного профиля не представляется возможным, поэтому результатом интерпретации волнового поля в методе ГСЗ, как правило, являются двумерные функции распределения скоростей сейсмических волн. Следует отметить, что в двумерном случае объём вычислений, необходимый для решения прямых задач расчёта динамики волнового поля в методе ГСЗ, сопоставим с объёмом вычислений для трёхмерных задач с гораздо меньшими удалениями.



Рис. 1.1. Карта профилей экспериментов. Эксперимент BEST [194] – слева, эксперименты PASSCAL и MOBAL – справа. Сплошная линия – 500 км профиль вибро-ГСЗ, Байкал – Улан-Батор

Большой вклад в развитие теории методов математического моделирования для сейсмических исследований внесли работы под руководством А.С. Алексеева, Б.Г. Михайленко, А.Н. Коновалова, С.К. Годунова, Н.Н. Яненко, И.Б. Петрова, Б.Е. Победри, Г.И.Петрашеня, Ј. Vireux, Дж. Клаербоута. Разработаны и обоснованы различные классы численных алгоритмов: методы конечных элементов, -разностей, -объёмов, интегральных уравнений, спектральные и псевдоспектральные алгоритмы, сеточно-характеристический метод, которые в зависимости от постановки задачи (краевых условий, геометрии границы, скоростной модели среды, и т.д.) позволяют получать решения с необходимой точностью [43, 44, 63–65, 216, 244]. Для аппроксимации криволинейной геометрии дневной поверхности в рамках сеточного подхода также предложены различные численные алгоритмы: методы декомпозиции областей, метод отображений, метод конечных элементов [48, 136, 137, 153, 191, 207, 225, 234].



Рис. 1.2. Скоростная модель земной коры Байкальского региона по результатам эксперимента BEST [193]

При выборе вычислительного метода для решения конкретной задачи необходимо найти баланс между точностью аппроксимации уравнений и граничных условий; для рассматриваемой модели среды требуется обеспечить устойчивость расчёта, особенно для сред с сильно меняющимися коэффициентами и криволинейными границами. При использовании явных схем проблема устойчивости расчёта наиболее сильно проявляется в задачах, включающих моделирование процесса распространения сейсмических волн в верхней части разреза (ВЧР) (комплекс осадочных пород, слагающий разрез от земной поверхности до первого опорного сейсмического горизонта) [79], так как в этом случае накладываются жёсткие ограничения на шаг по времени [115]. Это обусловлено тем, что для ВЧР характерна сильная неоднородность геологического разреза ввиду наличия зоны малых скоростей, вечной мерзлоты, трапповых покровов, осложнённого рельефа т.д. Факторы влияния ВЧР на регистрируемое поле многообразны: сложные изменения времени пробега в поверхностных слоях падающей и отражённой волн, поглощение и рассеяние энергии, формирование поверхностных помех, влияние на поле кратных волн [10]. С вычислительной точки зрения из-за резкой изменчивости скоростной модели среды требуется решать дифференциальные уравнения в частных производных с сильно меняющимися коэффициентами, а в случае учёта осложнённого рельефа задача должна рассматриваться в областях с криволинейными границами, что значительно усложняет технологию расчёта волновых полей и повышает требования к вычислительным ресурсам. Для таких сред, где скорости распространения волн для разных подобластей рассчитываемой модели могут различаться по порядку величины, Б.Г. Михайленко был предложен спектрально-разностный алгоритм на основе интегрального преобразования Лагерра по времени [188]. Интегральное преобразование Лагерра было рассмотрено в различных областях математического моделирования: для решения уравнений акустики и упругости (Б.Г. Михайленко, Г.В. Решетова, Р.С. Хапко, Х.Х. Имомназаров, А.А. Михайлов) [35, 57, 188], уравнений Максвелла и теплопроводности (Б.Г. Михайленко, А.Ф. Мастрюков, И.П. Гаврилюк, D. Colton, J. Wimp) [18, 105, 110, 189], для решения обратных задач [185]. Пошаговый вариант метода Лагерра был предложен Г.В. Демидовым, В.Н. Мартыновым и позволяет исключить вычисление коэффициентов ряда Лагерра высоких порядков [26, 27]. Стоит отметить, что вычислительные процедуры на основе преобразования Лагерра и функций Лагерра используются в различных областях математического моделирования. На основе преобразования Лагерра М.М. Кабардовым, В.М. Рябовым, W.T. Weeks, J. Abate, J. Strain разработаны численные методы обращения преобразования Лапласа [37, 83, 217, 249], а Е.Е. Тыртышников и Н. Weber предложили методы для вычисления интеграла Фурье [78, 248]. В рамках решения обратной задачи J.A. Jo предложил метод анализа данных флуоресценции с временным разрешением для диагностики атеросклеротических повреждений [160]. Функции Лагерра

могут быть использованы при решении краевых задач для реализации краевых условий на бесконечности [99].

В рамках спектрально-разностного подхода на основе преобразования Лагерра расчёты для больших профилей в присутствии ВЧР не проводились. В этом случае необходимо решать плохо обусловленные системы линейных алгебраических уравнений больших размерностей с применением суперЭВМ. Для сокращения времени счёта при решении систем линейных алгебраических уравнений в последние три десятилетия были предложены параллельные алгоритмы на основе специальных параллельных предобусловливающих процедур: различные варианты *lu*-разложения, декомпозиция области на основе метода Шварца или дополнения Шу́ра, методы CG, GMRES, BiCGstab, различные варианты метода исключения Гаусса [14, 72, 72, 114, 120, 125, 198, 202, 215, 224]. Однако, если рассматривать существующие параллельные алгоритмы не абстрактно, а в контексте решения прикладных задач, то оказывается, что большинство из них не обеспечивают теоретической заявленной производительности из-за интенсивных межпроцессорных взаимодействий. Например, метод сопряжённых градиентов, модифицированный для возможности параллельного исполнения, становится крайне неустойчивыми [202], тогда как методы декомпозиции областей, даже с применением процедуры предобусловливания, обладают низкой скоростью сходимости при большом числе процессоров [120, 121, 214, 224]. Прямые алгоритмы, являющиеся вариантами метода исключения Гаусса (метод циклической редукции и др.), эффективны только для небольшого числа процессоров [89]. Общая тенденция состоит в том, что чем больше процессоров задействовано в рамках одного расчёта, тем меньшей эффективности использования вычислительных ресурсов удаётся достичь. Таким образом, класс надежных параллельных алгоритмов решения систем линейных алгебраических уравнений существенно меньше, чем последовательных. Принимая во внимание постоянный рост числа процессоров, объединённых в рамках одной вычислительной системы, разработка параллельных численных методов для решения систем ли-

нейных алгебраических уравнений в рамках развития спектрально-разностного подхода, является также актуальной задачей.

1.2. Обратная задача восстановления изображений земных недр на основе процедуры волновой миграции сейсмических данных

Помимо решения прямой задачи расчёта волнового поля, обратные задачи восстановления изображений земных недр по сейсмическим данным являются первостепенными задачами вычислительной сейсморазведки, так как сейсмическое изображение геологического объекта является основным результатом обработки данных полевых наблюдений [10]. Для этого на сегодняшний день существует несколько подходов, например, метод полного волнового обращения, который теоретически позволяет восстановить функции κ и ρ для модели (1.1) [245]. Однако задача в такой постановке является математически некорректной [36], что в общем случае, даже при наличии больших вычислительных ресурсов, делает ее трудно разрешимой для реальных наблюдений. Исходя из этого, на практике рассматривается более устойчивая и менее вычислительно затратная процедура, известная как волновая миграция [10]. Термин "миграция" относится к методу обработки, используемому для преобразования зарегистрированных сейсмических данных из области (x, y, t) в изображение среды (x, y, z), для чего необходимо решить задачу обращённого продолжения волнового поля от места регистрации сигнала на поверхности к месту возникновения отраженных и дифрагированных волн. После применения процедуры миграции получают изображение, на котором положение и рефлективность отражающих границ в среде показаны правильно, тогда как целью метода полного волнового обращения (инверсии) является изображение пространственных параметров среды (функций скорости, плотности среды и т.д.).

Теоретической основой для волновой миграции является волновое уравнение

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla^2 u = 0, \tag{1.3}$$

приближённо описывающее распространение продольных волн в идеально упругой однородной изотропной среде, где u = u(x, z, t) – неизвестная функция, c– скорость распространения волн. Для реализации процедур волновой миграции существует несколько методов, которые не являются взаимозаменяемыми и применяются исходя из условий сейсмических наблюдений и геологических особенностей исследуемой области земной коры. В зависимости от выбора представления решения уравнения (1.3) основные алгоритмы волновой миграции делятся на три больших класса [40, 212, 253].

Миграция на основе упрощённой формы интеграла Кирхгофа [10]

$$P_{out}(x, y, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int dx \left[\frac{\cos \theta}{r^2} P_{in}(x_{in}, y, z = 0, t - r/v) + \frac{\cos \theta}{vr} \frac{\partial}{\partial t} P(x_{in}, y, z = 0, t - r/v) \right],$$

где P_{out} – выходное мигрированное поле, P_{in} – входное поле в пределах апертуры наблюдения, r – расстояние от точки на поверхности наблюдения до внутренней точки среды, v – скорость.

Миграция, известная как "reverse time migration", основана непосредственно на решении уравнения (1.3) и была предложена Е. Baysal, D. Kosloff и J. Sherwood в 1983 году [88]. Однако данная процедура была не востребована на протяжении двух десятилетий до тех пор, пока возросшая вычислительная мощность суперкомпьютеров не сделала возможным практическую реализацию данного метода [211].

В рамках диссертационного исследования рассматриваются математические модели восстановления глубинных изображений на основе третьего класса методов, включающих решение одностороннего волнового уравнения [40], которое описывает распространение волн только в положительном или отрицательном выбранном направлении (рис. 1.3) и может быть получено из уравнения (1.3) следующим образом.

Считая, что z – это направление экстраполяции волнового поля и c=const, в результате подстановки решения в виде плоской волны $\exp(-i\omega t + ik_x x + ik_y y + ik_z z)$ в уравнение (1.3) получается следующее дисперсионное соотношение

$$\left(-\frac{\omega^2}{c^2} + k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)\tilde{u} = 0$$

Выражая из него k_z и принимая во внимание $ik_z \rightleftharpoons \partial/\partial z$, получаем одностороннее волновое уравнение для восходящих или нисходящих волн (в зависимости от знака)

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} = \pm i \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{c^2}{\omega^2} (k_x^2 + k_y^2)} \tilde{u}.$$
(1.4)

Впервые идея данного приближения была сформулирована в работе М.А. Леонтовича и В.А. Фока в 40-х годах в рамках модели распространения электромагнитных волн в ионизированных слоях атмосферы Земли [49]. Математические модели на основе уравнения (1.4) рассматриваются в задачах сейсморазведки [86, 109, 253], для моделирования процесса распространения звуковых волн в океане (F.D. Tappert, M.D. Collins) [111, 173, 223], а также для построения численных процедур неотражающих граничных условий (E.L. Lindman, В. Engquist, А. Majda, О.Н. Соболева и Б.Г. Михайленко) [58, 124, 178, 239] и многих других.

В диссертационном исследовании математическая модель на основе одностороннего волнового уравнения для экстраполяции волнового поля с наблюдаемой поверхности в глубину рассмотрена в рамках процедур, называемых волновая миграция до суммирования и волновая миграция после суммирования [10, 40]. Первая математическая модель миграции после суммирования на основе решения одностороннего волнового уравнения была предложена Дж. Клаербоутом в рамках модели "взрывающихся границ" [109]. По сравнению с миграцией до суммирования такой подход не требует расчёта волновых полей



Рис. 1.3. Мгновенный 2D снимок волнового поля от точечного источника в момент времени t = 5 с. для Паде-аппроксимации одностороннего волнового уравнения

для каждого источника и соответствующих ему приёмников, поэтому более экономичен, но менее точен (рис. 1.4.а). Продолжение поля вниз делается путём экстраполяции поля от поверхности на опускающиеся с некоторым шагом уровни. С приближением линии приемников к источникам колебаний форма зарегистрированных на поверхности гипербол претерпевает изменения – они постепенно сжимаются к своим вершинам. Когда положение приемников совпадает с положением соответствующего источника, каждая из гипербол сжимается в точку, тем самым формируется глубинное изображение исследуемой области земной коры. Миграция до суммирования [10, 40] сейсмограмм представляет собой двухшаговый процесс, в рамках которого волновое поле от источников и приемников продолжается вниз ко всем глубинным уровням в среде, а затем на каждой глубине поля объединяются, чтобы создать глубинное изображение (рис. 1.4.б). Численная реализация алгоритмов экстраполяции основана на многочисленных методах решения одностороннего волнового уравнения (1.4). Причина широкого набора алгоритмов миграции состоит в том, что ни один из них полностью не отвечает таким важным критериям, как сохранение всех наклонов отражающих границ, сложным скоростным изменениям, пониженному

уровню шумов, оставаясь в то же время вычислительно экономичным. Любой метод миграции должен включать экстраполяцию, способную учитывать сильные горизонтальные изменения скоростей и большие наклоны.



Рис. 1.4. Сравнение качества двух способов миграции на основе решения одностороннего волнового уравнения для модели среды, включающей синклиналь; а) миграция нулевых удалений (после суммирования), б) миграция до суммирования

Для решения одностороннего волнового уравнения можно использовать как конечно-разностные, так и конечно-элементные методы [40, 155, 172]. Для того чтобы перевести уравнение (1.4) в пространственную область, недостаточно заменить $-k_x^2 \rightleftharpoons \partial^2/\partial x^2$ и $-k_y^2 \rightleftharpoons \partial^2/\partial y^2$, так как нет чёткого понятия для корня квадратного дифференциального оператора. Квадратный корень приобретает смысл лишь в том случае, когда он приближен некоторым многочленом или отношением многочленов. Такое приближение может быть построено на основе рядов Тейлора, Чебышева и других [147], однако наиболее эффективный подход базируется на основе Паде-аппроксимации [40, 147, 155, 201]. В этом случае квадратный корень приближается следующим образом

$$\sqrt{1 - \frac{c^2}{\omega^2} \left(k_x^2 + k_y^2\right)} \approx \left[1 - \sum_{s=1}^n \frac{\beta_s c^2 (k_x^2 + k_y^2)}{\omega^2 - \gamma_s c^2 (k_x^2 + k_y^2)}\right],\tag{1.5}$$

где коэффициенты γ_s, β_s выбираются такими (см. табл. 1.1), чтобы оптимизировать точность расчёта волнового поля для требуемых углов распространения [147, 174]. Откуда получаем аппроксимацию одностороннего волнового уравнения

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} = -i\frac{\omega}{c} \left[1 - \sum_{s=1}^{n} \frac{\beta_s c^2 (k_x^2 + k_y^2)}{\omega^2 - \gamma_s c^2 (k_x^2 + k_y^2)} \right] \tilde{u}.$$
(1.6)

В случае, когда коэффициенты γ_s , β_s вещественные, то для волн с углами распространения близких к $\pi/2$ от оси z аргумент квадратного корня становится меньше нуля, и левая часть уравнения (1.5) принимает комплексные значения, тогда как правая часть остаётся всегда вещественной, что приводит к росту амплитуд неоднородных волн, которые должны были затухать экспоненциально. Более того, знаменатель (1.5) может принимать сколь угодно близкие к нулю значения, обуславливая неустойчивость расчётов. Для стабилизации вещественной Паде-аппроксимации предложено несколько подходов [100, 175, 206], позволяющих подавлять неустойчивые компоненты волнового поля посредством различных алгоритмов фильтрации, которые, однако, не универсальны. Ограничить рост неустойчивых мод можно, задавая коэффициенты γ_s , β_s комплексными [182, 190, 250, 252] и тем самым улучшая согласованность правой и левой частей (1.5). В частности, F. A. Milinazzo с соавторами показал [190], что можно использовать комплексные значения коэффициентов $\tilde{\gamma}_s, \tilde{\beta}_s$, выраженные через вещественные γ_s, β_s следующим образом

$$\tilde{\beta}_s = \frac{\beta_s \exp\left(-\mathrm{i}\theta/2\right)}{[1 + \gamma_s(\exp(-\mathrm{i}\theta) - 1)]^2}, \quad \tilde{\gamma}_s = \frac{\gamma_s \exp\left(-\mathrm{i}\theta\right)}{1 + \gamma_s(\exp(-\mathrm{i}\theta) - 1)}$$

Здесь угол поворота $\theta \in [0, \pi/4]$ – это параметр, влияющий на степень затухания паразитных гармоник. По сравнению с вещественными коэффициентами дисперсионного соотношения (рис. 1.5а,б), комплексные коэффициенты (рис. 1.5в,г) позволяют подавить неустойчивость рациональной аппроксимации одностороннего волнового уравнения посредством ведения искусственной диссипации, ограничивающей развитие неустойчивости для быстро затухающих волн. Однако наличие больших градиентов у функции скоростной модели среды, применение методов расщепления Г.И. Марчука [52], а также моделирование высокочастотных волновых полей может приводить к неустойчивости расчёта. Это объясняется тем, что оптимальные значения коэффициентов γ_s, β_s подбираются на основе принципа "замороженных коэффициентов" для однородной среды, тогда как расчёты проводятся для неоднородных скоростных моделей с применением разностных аппроксимаций. В [87] показано, что наличие больших градиентов функции скорости может приводить к неустойчивому решению. Также при одинаковом числе слагаемых ряда (1.5) точность комплексной Паде-аппроксимации меньше, чем вещественной.

Как было сказано выше, уравнение (1.6) после выполнения обратного преобразования Фурье для *x*, *y*-координат может быть решено методом конечных разностей, что позволяет учесть горизонтальную неоднородность среды. Однако метод конечных разностей при больших шагах сетки существенно искажает дисперсионное соотношение, тем самым добавляя в решение значительное число нефизических артефактов. Стандартный способ уменьшения численной дисперсии состоит в использовании разностных схем высокого порядка точности. К сожалению, односторонние разностные аппроксимации при экстраполяции волнового поля в глубину становятся неустойчивыми. При выводе уравнения

(1.4) предполагалось, что скоростная модель среды является однородной, тем не менее для неоднородных сред рассматриваемая модель также даёт вполне удовлетворительные результаты, правильно сохраняя кинематику волн, но не их амплитуды. Для многих задач такая приближённая модель является допустимой, тогда как более корректный учёт амплитуд, как показал N. Bleistein, значительно увеличивает вычислительные затраты [256]. Другая трудность заключается в том, что для сокращения времени счёта при решении уравнения (1.6), как правило, используется циклический метод расщепления Г.И. Марчука [52]. Операторы, на которые производится расщепление, для неоднородной скоростной модели c = c(x, y, z) не являются попарно перестановочными, поэтому такой подход обеспечивает только первый порядок точности относительно шага по глубине h_z . Для достижения второго порядка точности процедура расщепления должна быть специальным образом симметризована [51, 52], что увеличивает вычислительные затраты вдвое. Другие подходы к сокращению численной дисперсии и вычислительных артефактов при применении методов конечно-разностной аппроксимации состоят в использовании процедур фильтрации в спектральной области [100], либо нелинейных процедур [134], построенных на идеях, заимствованных из TVD-схем для решения гиперболических уравнений.

Для того чтобы уменьшить численную дисперсию при решении одностороннего волнового уравнения, J. Gazdag и P. Sguazzero, D. Ristow и T. Ruhl предложили на основе Фурье преобразования спектральные методы [139, 140, 206], которые приближённо учитывают горизонтальные неоднородности скоростной модели среды. Данные алгоритмы были разработаны взамен метода конечных разностей, так как при решении одностороннего волнового уравнения данный метод не обеспечивает необходимой точности расчётов и вычислительно неустойчив. Однако такие методы как Fourier Finite Difference (FFD) и Phase Shift Plus Interpolation (PSPI) для неоднородной скоростной модели не позволяют рассчитать решение одностороннего волнового уравнения, а являют-

Порядок(2n)	α_{max}	γ_s	eta_s
2	65°	0.47824060	0.376369527
4	80°	0.040315157	0.873991642
		0.475289566	0.222691983
6	87°	0.004210420	0.972926132
		0.081312882	0.0744418059
		0.41423605	0.150843924
8	90°	0.000523275	0.994065088
		0.014853510	0.919432661
		0.117592008	0.614520676
		0.367013245	0.105756624
10	90°	0.000153427	0.997370236
		0.004172967	0.964827992
		0.033860918	0.824918565
		0.143798076	0.483340757
		0.318013812	0.073588213

Таблица 1.1. Коэффициенты Паде-аппроксимации (1.5) для одностороннего волнового уравнения

ся, скорее, некоторыми экстраполяционными процедурами. Это связано с тем, что для PSPI метода решение получается, как комбинация нескольких решений для однородных моделей с различными скоростями. Для двухскоростной модели среды вычисления можно проводить по следующей схеме.

Сначала решается уравнение для линзового слагаемого

$$u^*(x, y, z + \Delta z, \omega) = u(x, y, z, \omega) \exp\left(i\frac{\omega}{v(x, y, z)}\Delta z\right),$$

а затем для дифракционных слагаемых

$$u_1(x, y, z + \Delta z, \omega) = u^*(x, y, z + \Delta z, \omega) \exp\left(i\left[k_z - \frac{\omega}{v_1}\right]\Delta z\right) = A_1 \exp(i\theta_1),$$

$$u_2(x, y, z + \Delta z, \omega) = u^*(x, y, z + \Delta z, \omega) \exp\left(i\left[k_z - \frac{\omega}{v_2}\right]\Delta z\right) = A_2 \exp(i\theta_2),$$

$$v_1 = \min(v(x, y, z)), \ v_2 = \max(v(x, y, z)).$$

Далее, на основе интерполяции значений для амплитуд и фаз окончательный



Рис. 1.5. Паде-аппроксимация дисперсионного соотношение для различного числа слагаемых ряда (1.5);

результат записывается в виде

$$u(x, y, z + \Delta z, \omega) = A \exp(i\theta),$$
$$A = \frac{A_1(v_2 - v) + A_2(v_2 - v)}{v_2 - v_1}, \quad \theta = \frac{\theta_1(v_2 - v) + \theta_2(v_2 - v)}{v_2 - v_1}.$$

Очевидно, что такое представление решения не удовлетворяет одностороннему волновому уравнению, однако, преимуществом рассмотренного подхода является его быстродействие, так как в качестве основной вычислительной операции используется быстрое преобразование Фурье.

В рамках FFD метода оператор квадратного корня (1.5) представляется в виде суммы двух корней, один из которых соответствует однородной среде с некоторой усреднённой по горизонтали скоростью, а другой оператор представляет собой поправку с переменной скоростью. В рамках процедуры расщепления Г.И. Марчука первый оператор обращается аналитическими методами, а решение для поправки определяется конечно-разностным методом второго порядка точности. Несмотря на то что такая замена не является математический эквивалентной исходной задаче и проявляет свойство неустойчивости для высококонтрастных сред, такой подход позволяет значительно снизить вычислительные затраты. С другой стороны, невозможность оценить уровень численных ошибок на последовательности вложенных сеток является существенным недостатком FFD алгоритма.

Следует учитывать, что рассмотренные алгоритмы основаны на приближённых математических преобразованиях, что оказывает сложно предсказуемое влияние на точность решения. Несмотря на это, для реальных практических задач наиболее распространены приближённые методы, позволяющие проводить расчёты при достаточно крупных шагах сетки. В этом случае численные артефакты существенно меньше, чем артефакты метода конечных разностей второго порядка точности. С другой стороны, преимущество конечно-разностной аппроксимации состоит в том, что она обладает сходимостью и пространственно локализована, что позволяет оценивать качество полученных решений на последовательности сгущающихся сеток и исключает эффект Гиббса.

Другой фундаментальной проблемой вычислительных процедур для одностороннего волнового уравнения является решение плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений, возникающих после разностной аппрок-

симации в пространственно-частотной области [126, 159]. Решение таких систем не может быть гарантированно рассчитано посредством итерационных алгоритмов [31, 126], тогда как применение прямых методов является неэффективным подходом вследствие очень высоких вычислительных затрат [159]. Различные варианты метода покоординатного расщепления вида

$$\sqrt{1 - \frac{c^2}{\omega^2} (k_x^2 + k_y^2)} \approx \sqrt{1 - \frac{c^2}{\omega^2} k_x^2} + \sqrt{1 - \frac{c^2}{\omega^2} k_y^2}$$

вносят существенные ошибки типа фиктивной анизотропии и требуют обязательного использования специальных алгоритмов коррекции [175].

Для преодоления этих трудностей для коэффициентов $\gamma_s, \beta_s \in \mathbb{R}$ в диссертации на основе интегрального преобразования Лагерра построен эффективный спектрально-разностный метод, не требующий решения систем линейных алгебраических уравнений с неэрмитовыми знаконеопределёнными матрицами. В противоположность Фурье преобразованию, после преобразования Лагерра матрица системы линейных алгебраических уравнений вещественна и хорошо обусловлена. Коэффициенты разложения ряда Лагерра имеют рекуррентную зависимость, поэтому для их вычисления требуется решать системы линейных алгебраических уравнений с одной и той же матрицей и различными правыми частями. Это может быть сделано посредством разработанных в диссертации прямых и итерационных параллельных процедур на основе алгоритма дихотомии. Также в диссертации решена задача обеспечения вычислительной устойчивости и экономичности разрабатываемых спектрально-разностных методов и непосредственно самой модели одностороннего волнового уравнения (1.6). Решение всего спектра проблем позволяет на основе математического моделирования выполнять расчёты глубинных изображений с более высоким пространственным разрешением для реальных данных сейсморазведки, что повышает точность геологического прогноза.

Глава 2

Вычисление коэффициентов разложения ряда Лагерра

2.1. Постановка задачи и обзор существующих подходов

Для эффективной реализации спектрально-разностных алгоритмов необходимо иметь в своём распоряжении устойчивые и экономичные численные процедуры для выполнения интегрального или дискретного преобразования.

Введем в рассмотрение функции Лагерра [73]

$$l_n(t) = e^{-t/2} L_n(t), \quad t \ge 0,$$

где $L_n(t)$ – полином Лагерра порядка n, задаваемый формулой Родрига

$$L_n(t) = \frac{e^t}{n!} \frac{d^n}{dt^n} \left(t^n e^{-t} \right) = \frac{1}{n!} \left(\frac{d}{dt} - 1 \right)^n t^n.$$

Будем использовать обозначение $L_2[0,\infty)$ для пространства интегрируемых с квадратом функций $f:[0,\infty)\to\mathbb{R}$

$$L_2[0,\infty) = \left\{ f: \int_0^\infty |f(t)|^2 dt \le \infty \right\}.$$

Функции Лагерра образуют полную ортонормированную систему функций в $L_2[0,\infty)$:

$$\int_{0}^{\infty} l_m(t)l_n(t)dt = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n, \end{cases}$$

что гарантирует для любой функции $f(t) \in L_2[0,\infty)$ справедливость следующего представления:

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{\bar{a}_m\} = \sum_{m=0}^{\infty} \bar{a}_m l_m(\eta t), \qquad (2.1a)$$

$$\mathcal{L}\lbrace f(t)\rbrace = \bar{a}_m = \int_0^\infty f(t)l_m(\eta t)dt, \qquad (2.1b)$$

где η – это параметр масштабирования функций Лагерра, позволяющий контролировать скорость сходимости ряда (2.1a).

Интегральное преобразование Лагерра рассмотрено в различных областях математического моделирования: для решения уравнений акустики и упругости (Б.Г. Михайленко, Г.В. Решетова, Р.С. Хапко, Г.В. Демидов, В.Н. Мартынов, Х.Х. Имомназаров) [26, 27, 35, 57, 188], уравнений Максвелла и теплопроводности (Б.Г. Михайленко, А.Ф. Мастрюков, И.П. Гаврилюк, D. Colton, J. Wimp) [18, 105, 110, 189], для решения обратных задач [185], а также при решении задач спектроскопии [160]. Как показано в пятой главе диссертации, преобразование Лагерра оказалось чрезвычайно эффективным при построении устойчивого алгоритма продолжения волнового поля в рамках решения задачи экстраполяции волнового поля с поверхности в глубину. На основе преобразования Лагерра М.М. Кабардовым, В.М. Рябовым, W.T. Weeks, J. Abate, J. Strain разработаны численные методы обращения преобразований Лапласа [37, 83, 217, 249], а Е.Е. Тыртышников и Н. Weber предложили методы для вычисления интеграла Фурье [78, 248].

Несмотря на то что значения функции Лагерра $l_n(t)$ для больши́х значений *n* ограничены сверху в силу справедливости асимптотического представления [73]

$$l_n(t) = \frac{1}{\pi^{1/2} (nt)^{1/4}} \left(\cos(2\sqrt{nt} - \pi/4) \right) + O\left(\frac{1}{n^{3/4}}\right), \quad t \in [a, b], \quad 0 < a < b < \infty,$$
(2.2)

одна из проблем численной реализации преобразования (2.1b) состоит в том, что при вычислении функций Лагерра для t > 1 значения многочленов Лагерра $L_n(t)$ быстро возрастают с ростом n, что приводит к ошибке типа "overflow", тогда как при вычислении множителя $\exp(-t/2)$ может возникнуть ошибка типа "underflow". Для небольших значений n и t можно проводить вычисления функций Лагерра по формуле

$$l_n(t) = \left[e^{-t/4} \tilde{L}_n(t) \right] e^{-t/4}.$$
 (2.3)
То есть, сначала необходимо вычислить выражение в квадратных скобках, используя рекуррентную формулу второго порядка [73]

$$(n+1)\tilde{L}_{n+1}(t) = (2n+1-t)\tilde{L}_n(t) - n\tilde{L}_{n-1}(t), \quad n \ge 1,$$

$$\tilde{L}_1(t) = (1-t)e^{-t/4}, \quad \tilde{L}_0(t) = e^{-t/4},$$
(2.4)

а затем, умножая результат на второй экспоненциальный множитель, вычислить значения функций Лагерра. Если расчёты проводить для 128-битной вещественной машинной точности, то такой способ исключает ситуации типа "overflow" и "underflow" для значений n, не превышающих порядка нескольких тысяч, и для t < 20, $\eta < 1200$. Из-за того, что арифметика повышенной точности, как правило, реализуется на программном, а не на аппаратном уровне, использование повышенной точности значительно снижает производительность вычислений, поэтому с целью экономии времени счёта 128-битную арифметику следует применять только для расчёта функций Лагерра, тогда как суммирование при аппроксимации интеграла (2.1b) можно проводить, используя стандартную 64-битную точность.

Из представления (2.2) следует, что функции Лагерра *n*-го порядка на интервале 0 < t < 4n осциллируют [226], причём наиболее сильно вблизи нуля (см. рис. 2.1). Таким образом, возникает проблема выбора метода интегрирования быстро осциллирующих функций. Для преодоления этой трудности в работе [179] J.R. Litko предложил алгоритм вычисления значения интеграла (2.1b) на основе квадратур высокого порядка точности, позволяющий вычислять коэффициенты разложения ряда Лагерра для значений *n*, не превышающих нескольких сотен. Однако следует учитывать, что квадратуры высоких порядков определены для неравномерной сетки, и это может стать препятствием к их использованию, если аппроксимируемая функция задана в виде временного ряда с постоянным временным шагом. Для аналитических функций J. Abate предложил подход на основе преобразования Лапласа [83]

$$\bar{a}_n = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_r} \left[\frac{\hat{f}((1+z)/2(1-z))}{1-z} \right] z^{-(n+1)} dz.$$

Здесь выражение в квадратных скобках – это генерирующая функция Лагерра, которая является аналитической в круге C_r радиуса r с центром в начале координат, $\hat{f}(s)$ – это преобразование Лапласа для функции f(t). Мнимая единица обозначена как $i = \sqrt{-1}$. При вычислении интеграла по контуру необходимость предварительного выполнения преобразования Лапласа для разлагаемой в ряд Лагерра функции усложняет реализацию данного алгоритма.



Рис. 2.1. Графики функций Лагерра различных порядков для параметра преобразования $\eta=600$

Другой метод вычисления коэффициентов разложения был предложен H. Webe

и задаётся интегралом вида [248]

$$\bar{a}_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\frac{1}{2} \left(1 + \mathrm{i} \operatorname{ctg} \frac{z}{2} \right) f\left(\frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{z}{2} \right) \right] e^{-\mathrm{i} n z} dz.$$

Однако при решении прикладных задач исходные данные могут быть заданы в виде временных рядов, не обладающих высокой гладкостью, что требует разработки дополнительных процедур для этого случая.

Исключительная экономичность и устойчивость алгоритма быстрого преобразования Фурье [20, 29, 113] обусловили его широкое применение во многих областях вычислительной математики, тогда как сопоставимый по эффективности алгоритм для преобразования Лагерра пока не разработан. Общие подходы для выполнения быстрых полиномиальных преобразований тщательно исследовались I. Gohberg, V. Olshevsky и V. Pan, однако ценность таких методов имеет скорее теоретическое, чем практическое значение из-за использования численно неустойчивых, но экономичных процедур умножения матриц типа Вандермонда на вектор [142, 143, 192]. Как показано А. Бородиным, быстрое умножение вектора на матрицу Вандермонда может быть реализовано на основе экономичной операции рекурсивного полиномиального деления, которая, к сожалению, сильно неустойчива. Умножение транспонированной матрицы Вандермонда на вектор может быть "быстро" вычислено из решения системы линейных алгебраических уравнений с матрицей Вандермонда [142, 143, 192]. В силу численной неустойчивости такой подход не является практически реализуемый на вычислительных система с конечной точностью. В работе [138] W. Gautschi оценил число обусловленности для матриц типа Вандермонда и показал, что для многочленов Лагерра число обусловленности будет наибольшим в сравнении с другими классическими ортогональными многочленами, поэтому проблема устойчивости быстрых алгоритмов для преобразования Лагерра является, пожалуй, одной из самых трудно решаемых. Быстрые преобразования для многочленов Лежандра разработаны В. Рохлиным и N. Hale, A. Townsend и J. Boyd предложили быстрое преобразование на не регулярных сетках для многочленов Чебышева, а G. Leibon с соавторами построил быстрый алгоритм для преобразования Эрмита [85, 128, 146]. А. Bostan с соавторами разработал экономичные алгоритмы перехода от одного ортогонального полиномиального базиса, задаваемого трёхчленным рекуррентным соотношением, к другому [98]. В работе [197] В. Рохлин с соавторами предложил алгоритм для выполнения быстрых полиномиальных преобразований, основанный на приближённой факторизации матриц Вандермонда. В ряде случаев авторам удалось снизить вычислительные затраты до уровня, сопоставимого с быстрым преобразованием Фурье, однако для различных ортогональных многочленов и длин интервалов разложения вычислительная сложность может варьироваться. Также алгоритм становится эффективным по сравнению с прямым методом умножения матрицы на вектор, когда число определяемых коэффициентов разложения будет порядка нескольких тысяч. Таким образом, ввиду отсутствия экономичных методов вычисления интегрального преобразования Лагерра для аппроксимации временных рядов во второй главе диссертации разработаны новые численные методы и процедуры вычисления интегралов от быстро осциллирующих функций.

2.2. Методы разложения функции в ряд Лагерра

2.2.1. Первая вспомогательная задача

Рассмотрим начально-краевую задачу для одномерного транспортного урав-

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad t > 0, \quad -\infty < x < +\infty, \\ v(x,0) = f(x). \end{cases}$$
(2.5)

После преобразования Лагерра по времени задача (2.5) может быть записана в виде [188]

$$\left(\frac{\eta}{2} - \partial_x\right)\bar{v}_m = -\Phi(\bar{v}_m),\tag{2.6}$$

где

$$\Phi(\bar{v}_m) = -\sqrt{\eta}f + \eta \sum_{j=0}^{m-1} \bar{v}_j.$$

Принимая во внимание

$$\Phi(\bar{v}_m) = \eta \bar{v}_{m-1} + \Phi(\bar{v}_{m-1}),$$

запишем уравнение (2.6) в форме

$$\left(\frac{\eta}{2} - \partial_x\right)\bar{v}_0 - \sqrt{\eta}f = 0, \qquad (2.7a)$$

$$\left(\left(\frac{\eta}{2} - \partial_x\right)\bar{v}_m = \left(-\frac{\eta}{2} - \partial_x\right)\bar{v}_{m-1}, \ m = 1, 2, \dots$$
(2.7b)

Тогда, выполняя преобразование Фурье для переменной x, получаем

$$\begin{cases} \left(\frac{\eta}{2} - ik\right)\bar{V}_0(k) - \sqrt{\eta}\tilde{f}(k) = 0, \\ \left(\frac{\eta}{2} - ik\right)\bar{V}_m(k) = \left(-\frac{\eta}{2} - ik\right)\bar{V}_{m-1}(k), \ m = 1, 2, \dots, \end{cases}$$

где k – это пространственная частота. Выражая искомую функцию, имеем

$$\bar{V}_m(k) = \sqrt{\eta}\tilde{f}(k)\left(-\frac{\eta}{2} - ik\right)^m / \left(\frac{\eta}{2} - ik\right)^{m+1}.$$
(2.9)

Снова рассмотрим задачу (2.5), но теперь с периодическими граничными условиями вида $\bar{v}(0,t) = \bar{v}(T,t)$, где величина T определяет границу интервала аппроксимации функции $f(t), t \in [0,T]$. В этом случае решение транспортного уравнения выражается через суммирование решений вида (2.9) для дискретного пабора частот $k_j = 2\pi j/T, j = 0, 1, ..., N_x$:

$$\bar{v}_m(p) \approx \sum_{j=0}^{N_x} \tilde{V}_m(k_j) \exp\left(i\frac{2\pi jp}{T}\right).$$
(2.10)

Подчиняясь решению (2.10) для транспортного уравнения, функция f(t), заданная в качестве начального условия, будет двигаться в направлении x = 0. Записывая решение транспортного уравнения в точке x=0, получаем, что искомые коэффициенты разложения (2.1b) для функции f(t) могут быть вычислены как $\bar{a}_m = \bar{v}_m(0)$. Несмотря на то что расчёт коэффициентов разложения по формулам (2.9), (2.10) требует $O(nN_x)$ арифметических действий, то есть алгоритм не принадлежит к классу "быстрых" методов, предлагаемый способ реализации преобразования Лагерра имеет несколько существенных преимуществ по сравнению с непосредственным вычислением значений несобственных интегралов от быстро осциллирующих функции (2.1b). Во-первых, в силу определения модуля комплексного числа имеет место тождество

$$\left|\left(-\frac{\eta}{2}-\mathrm{i}k\right)/\left(\frac{\eta}{2}-\mathrm{i}k\right)\right|\equiv 1,$$

гарантирующее устойчивость расчёта и невозникновение ситуаций типа "overflow" и "underflow" для любых T и n, что является проблемой при вычислении значений функций Лагерра на основе формулы (2.1b). Во-вторых, как показано далее, расчёты на основе формул (2.9) и (2.10) могут быть выполнены с одинарной 32-битной вещественной точностью, что увеличивает производительность вычислений за счёт более высокой степени их векторизации. В противоположность этому, значительный разброс значений функции Лагерра требует реализации 64 и 128-битной точности для вычисления (2.1b). В-третьих, несмотря на сильные осцилляций функций Лагерра вблизи начала координат (рис. 2.1), спектральный подход не требует использования неравномерных сеток или квадратур высокого порядка, чтобы сохранять заданную точность на всем интервале аппроксимации. Задание количества гармоник N_x ряда Фурье вместо шага сетки с практической точки зрения намного удобнее, так как границы спектра аппроксимируемой функции, как правило, заранее известны, либо могут быть экономично определены.

Недостаток рассматриваемой вычислительной модели состоит в том, что такой способ расчёта добавляет фиктивную периодичность вида f(t) = f(t + bT), где b – это любое целое неотрицательное число. Для исключения нежелательной периодичности два принципиально различных подхода предложены далее.

2.2.2. Исключение фиктивной периодичности на основе равенства Парсеваля

Рассмотрим первый подход, позволяющий исключить фиктивную периодичность, которая возникает при вычислении коэффициентов разложения ряда Лагерра на основе формулы (2.10). На рис. 2.26 приведены коэффициенты разложения ряда Лагерра для функции f(t) (рис. 2.2а), задаваемой формулой

$$f(t) = \exp\left[-\frac{(2\pi f_0(t-t_0))^2}{g^2}\right]\sin(2\pi f_0(t-t_0)), \qquad (2.11)$$

где $t_0 = 0.5, g = 4, f_0 = 30$. Из рис. 2.26 видно, чтобы исключить нежелательную периодичность, достаточно увеличить расчётный интервал с [0, T] до [0, 3T], считая, что для $\forall t > T, f(t) \equiv 0$. Затем, после вычисления коэффициентов разложения, отбросить коэффициенты с номерами $m > m_0 \approx 400$. В расчётах для меньших интервалов аппроксимации, например [0, T] или [0, 2T], невозможно отделить фиктивные периоды функции в спектральной области, так как резкий обрыв ряда приведет к осцилляциям на всем интервале аппроксимации. Для того чтобы автоматически определить число удерживаемых коэффициен-



Рис. 2.2. а) График функции (2.11) и её аппроксимации по формуле (2.10) для интервалов различной длины, б) спектр Лагерра

тов разложения, воспользуемся соотношением Парсеваля

$$\int_{0}^{\infty} v^2(t) dt = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\bar{v}_m \right)^2,$$

на основании которого максимальное число коэффициентов ряда Лагерра m_0 будем определять из условия

$$\arg\min_{m_0} \left| \int_0^T v^2(t) dt - \sum_{m=0}^{m_0} \left(\bar{v}_m \right)^2 \right|.$$
 (2.12)

Теперь сформулируем первый алгоритм разложения функции f(t) в ряд Лагерра.

Алгоритм 2.1. Для аппроксимации рядом Лагерра функции f(t) на интервале $t \in [0, T]$ следует выполнить:

- 1. На основе быстрого алгоритма дискретного преобразования Фурье вычислить $\tilde{f} = FFT(f)$.
- 2. На основе формулы (2.10) и равенства $\bar{a}_m = \bar{v}_m(0)$ вычислить коэффициенты разложения ряда (2.1а).
- 3. На основе формулы (2.12) оставить только первых *m*₀ коэффициентов ряда (2.1а).

Рассмотренный апостериорный способ исключения фиктивной периодичности неудобен с практической точки зрения, так как спектры для негладких функций могу быть достаточно протяженными, что является препятствием для отделения первого периода аппроксимируемой функции от последующих фиктивных периодов в спектральной области. Аппроксимируя функции различной гладкости, не совсем очевидно, во сколько раз необходимо увеличивать интервал аппроксимации, чтобы гарантированно исключить фиктивную периодичность. При этом выбор длины интервала аппроксимации "с запасом" ведет к существенному росту вычислительных затрат. Для решения обозначенных проблем разработана альтернативная процедура исключения фиктивной периодичности, не требующая апостериорного анализа спектра Лагерра.

2.2.3. Вторая вспомогательная задача. Операции "сдвиг" и "сопряжение"

Разработаем две вспомогательные операции для модификации коэффициентов разложения ряда Лагерра, которые назовем "сдвиг" и "сопряжение". Это позволит предложить альтернативный алгоритм для исключения фиктивной периодичности, а также экономичный метод в случае разложения функции в ряд для больших интервалов аппроксимации. Рассмотрим аналитическое решение для следующей начально-краевой задачи

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \ x \in [0, \infty), \\ v(0, t) = f(t), v(x, 0) = 0, \\ f(0) = 0. \end{cases}$$
(2.13)

Для того чтобы решение задачи (2.7) удовлетворяло граничным условиям (2.13), для вычисления коэффициентов разложения $\bar{v}_m(x)$ будем искать решение в виде ряда Лагерра

$$\bar{v}_m(x) = \sum_{j=0}^{\infty} W_{m,j} l_j(\kappa x), \quad m = 0, 1, 2...,$$
(2.14)

где значение параметра преобразования
 κ строго положительно. Отсюда получаем

$$(\eta + \kappa) W_{m,0} = (-\eta + \kappa) W_{m-1,0} + 2\sqrt{\kappa} \left(\bar{f}_m - \bar{f}_{m-1}\right), \qquad (2.15a)$$

$$\left((\eta + \kappa) W_{m,j} + 2\Upsilon(W_{m,j}) = (-\eta + \kappa) W_{m-1,j} + 2\Upsilon(W_{m-1,j}),$$
(2.15b)

где

$$\Upsilon(W_{m,j}) = \kappa \sum_{i=0}^{j-1} W_{m,i} = \kappa W_{m,j-1} + \Upsilon(W_{m,j-1}), \qquad (2.16)$$

и $W_{m,j} \equiv 0, \ \bar{f}_m \equiv 0, \quad \forall \ m < 0.$

Принимая во внимание (2.16), уравнение (2.15b) преобразуем к виду

$$(\eta + \kappa) W_{m,j} + (\eta - \kappa) W_{m-1,j} = (\eta - \kappa) W_{m,j-1} + (\eta + \kappa) W_{m-1,j-1}.$$

Выбирая $\kappa = \eta$, имеем

$$\begin{cases} W_{m,0} = \kappa^{-1/2} \left(\bar{f}_m - \bar{f}_{m-1} \right), & m = 0, 1, ..., \\ W_{m,j} = W_{m-1,j-1}, & m = 0, 1, ...; & j = 1, 2, ... \end{cases}$$
(2.17)

Учитывая формулы (2.1а), (2.14) и (2.17), окончательное решение (2.13) во временной области запишем в виде

$$v(x,t) = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{m} W_{m-j,0} l_j(\kappa x) \right) l_m(\eta t).$$
 (2.18)

Изменив порядок суммирования, можно также записать

$$v(x,t) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\sum_{m=0}^{\infty} W_{m,0} l_{m+j}(\eta t) \right) l_j(\kappa x).$$

$$(2.19)$$

Из вида формул (2.18) и (2.19) следует, что выражения в скобках являются коэффициентами ряда Лагерра. Тогда, принимая во внимание соотношения (2.17), введем в рассмотрение два преобразования с параметром $\tau \ge 0$

$$\mathbb{S}\{\bar{a}_{m};\tau\} = \frac{1}{\sqrt{\eta}} \sum_{j=0}^{m} \left(\bar{a}_{m-j} - \bar{a}_{m-j-1}\right) l_{j}(\eta\tau) , \qquad (2.20a)$$

$$\mathbb{Q}\left\{\bar{a}_{j};\tau\right\} = \frac{1}{\sqrt{\eta}} \sum_{m=0}^{\infty} \left(\bar{a}_{m} - \bar{a}_{m-1}\right) l_{m+j}(\eta\tau), \quad \bar{a}_{-1} \equiv 0.$$
(2.20b)

Из рис. 2.3 для формулы (2.20а) видно, что коэффициенты разложения $\bar{g}_m =$ = $\mathbb{S} \{ \bar{f}_m; \tau \}$ соответствуют функции $g(t) = f(t - \tau)$, где для t < 0, $f(t) \equiv 0$. Из рис. 2.4 для формулы (2.20b) видно, что коэффициенты разложения $\bar{h}_m =$ = $\mathbb{Q} \{ \bar{f}_m; \tau \}$ аппроксимируют функцию $h(t) = f(\tau - t)$, где для t < 0, $f(t) \equiv 0$. Тогда преобразование $\mathbb{S} \{ \cdot; \tau \}$ будем называть "сдвигом". Преобразование $\mathbb{Q} \{ \cdot; \tau \}$ будем называть "сопряжением" для интервала $[0, \tau]$, так как преобразование $\mathbb{Q} \{ \cdot; \tau \}$ является своего рода аналогом комплексного сопряжения для коэффициентов тригонометрического ряда Фурье. Для реализации формул (2.20а) и (2.20b) требуется порядка $O(n \log n)$ операций, если для вычисления линейных свертки (2.20a) и корреляции (2.20b) использовать алгоритмы на основе быстрого преобразования Фурье [29]. Также операция "сдвига", но не "сопряжения", для рядов Лагерра рассматривалась в работах [162, 168].



Рис. 2.3. а) График функции (2.11) и б) спектр Лагерра для различных значений параметра τ оператора сдвига $\mathbb{S}\{\bar{f}_m; \tau\}$



Рис. 2.4. а) График функции (2.11) и б) спектр Лагерра для различных значений параметра τ оператора сопряжения $\mathbb{Q}\{\bar{f}_m; \tau\}$

2.2.4. Исключение фиктивной периодичности на основе операции "сопряжения"

Для исключения фиктивной периодичности аппроксимируемой функции в параграфе 2.2.2 была рассмотрена процедура, которая на основе анализа спектра ряда Лагерра ограничивает число коэффициентов разложения, чтобы отделить первый период аппроксимируемой функции от всех последующих фиктивных периодов. В этом параграфе предложен ещё один алгоритм, позволяющий исключить периодичность с меньшими вычислительными затратами без дополнительного увеличения интервала аппроксимации. Рассмотрим процедуру, которая для заданного параметра $\tau > 0$ преобразовывает коэффициенты ряда Лагерра таким образом, чтобы ряд, аппроксимирующий функцию f(t), стал приближать функцию $r(t) = H(-t+\tau)f(t)$, где H(t) функция Хевисайда, что эквивалентно равенству нулю значений ряда $\forall t > \tau > 0$. Этого можно достичь путём последовательного применения двух операций сопряжения вида $\mathbb{Q}^2 \{\cdot; \tau\} \equiv \mathbb{Q} \{\mathbb{Q} \{\cdot; \tau\}; \tau\}$ к ряду Лагерра. Из рис. 2.5а видно,



Рис. 2.5. а) График функции (2.11) "до" и "после" применения оператора $\mathbb{Q}^2 \{ \bar{f}_m; 1/2 \}$, б) спектр Лагерра

что после применения операции $\mathbb{Q}^2 \{\bar{f}_m; 1/2\}$ значения ряда становятся равными нулю $\forall t > 1/2$. Локальная гладкость функции r(t) в окрестности точки t=1/2уменьшается, что приводит к увеличению ширины спектра (рис. 2.56). Однако, если дополнительных разрывов функции и её производных в точке $t = \tau$ не образуется (рис. 2.6а), то ширина спектра не увеличивается (рис. 2.66). В итоге можно предварительно рассчитать коэффициенты разложения с использованием формулы (2.10), а затем применить операцию $\mathbb{Q}^2 \{\cdot; T\}$ для исключения фиктивной периодичности. Применение операции \mathbb{Q}^2 потребует порядка $O(n \log n)$ арифметических действий, что значительно меньше, чем вычислительные затраты для формулы (2.10), поэтому общие затраты предлагаемого подхода возрастут незначительно. Для того чтобы избежать дополнительных разрывов и снижения гладкости аппроксимируемой функции и, как следствие, увеличения протяженности спектра Лагерра, разлагаемую в ряд функцию предваритель-



Рис. 2.6. а) График функции (2.11) "до" и "после" применения оператора $\mathbb{Q}^2 \{ \bar{f}_m; 0.7 \}$, б) спектр Лагерра

но следует локально умножить на экспоненциально затухающий множитель на правой границе интервала аппроксимации.

При решении практических задач возникает необходимость выполнить интегральное преобразования для множества независимых временных рядов. В этом случае процедуру исключения периодичности можно реализовать более экономично. Для этого перепишем формулу (2.10) в матричном виде

$$\begin{pmatrix} \bar{a}_{0} \\ \bar{a}_{1} \\ \dots \\ \bar{a}_{n-1} \\ \bar{a}_{n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(-ik_{0}+\eta/2)} & \frac{1}{(-ik_{1}+\eta/2)} & \dots & \frac{1}{(-ik_{N_{x}}+\eta/2)} \\ \frac{(-ik_{0}-\eta/2)}{(-ik_{0}+\eta/2)^{2}} & \frac{(-ik_{1}-\eta/2)}{(-ik_{1}+\eta/2)^{2}} & \dots & \frac{(-ik_{N_{x}}-\eta/2)}{(-ik_{N_{x}}+\eta/2)^{2}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{(-ik_{0}-\eta/2)^{n}}{(-ik_{0}+\eta/2)^{n+1}} & \frac{(-ik_{1}-\eta/2)^{n}}{(-ik_{1}+\eta/2)^{n+1}} & \dots & \frac{(-ik_{N_{x}}-\eta/2)^{n}}{(-ik_{N_{x}}+\eta/2)^{n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{f}_{0} \\ \tilde{f}_{1} \\ \dots \\ \tilde{f}_{N_{x}} \end{pmatrix} = M\tilde{F}.$$

$$(2.21)$$

Введем в рассмотрение новую матрицу \check{M} , столбцы которой получены из столбцов матрицы M посредством применения к ним операций $\mathbb{Q}^2 \{\cdot; T\}$. Вместо того, чтобы применять операцию $\mathbb{Q}^2 \{\cdot; T\}$ к уже рассчитанным коэффициентам \bar{a}_n , можно заранее рассчитать матрицу \check{M} и вычислять коэффициенты разложения уже без фиктивной периодичности. Этот прием следует использовать, если число столбцов матрицы M значительно меньше количества функций, которые необходимо аппроксимировать. Теперь сформулируем алгоритмы для аппроксимации функции $f(t), t \in [0, T]$ рядом Лагерра, где для исключения фиктивной периодичности используется оператор $\mathbb{Q}^2 \{\cdot; T\}$.

Алгоритм 2.2. Для аппроксимации рядом Лагерра функции f(t) на интервале $t \in [0, T]$ следует выполнить:

1. Подготовительный этап:

1.1 Сформировать матрицу M вида (2.21).

1.2 Рассчитать модифицированную матрицу \check{M} , выполнив преобразование $\mathbb{Q}^2 \{\cdot; T\}$ для каждого столбца матрицы M.

2. Для каждой аппроксимируемой функции f(t):

2.1 На основе быстрого алгоритма дискретного преобразования Фурье вычислить $\tilde{f} = FFT(f)$.

2.2 Вычислить коэффициенты ряда Лагерра как

$$(\bar{a}_0, \bar{a}_1, ..., \bar{a}_n)^T = \hat{M} \times \left(\tilde{f}_0, \tilde{f}_1, ..., \tilde{f}_{N_x}\right)^T.$$

Если число аппроксимируемых функций будет меньше, чем число столбцов матрицы M, тогда эффективнее использовать следующий алгоритм без вычисления матрицы \check{M} .

Алгоритм 2.3. Для аппроксимации рядом Лагерра функции f(t) на интервале $t \in [0, T]$ следует выполнить:

- 1. На основе быстрого алгоритма дискретного преобразования Фурье вычислить $\tilde{f} = FFT(f)$.
- 2. Вычислить коэффициенты ряда Лагерра как

$$(\bar{a}_0, \bar{a}_1, ..., \bar{a}_n)^T = M \times \left(\tilde{f}_0, \tilde{f}_1, ..., \tilde{f}_{N_x}\right)^T.$$

3. Выполнить преобразование $\mathbb{Q}^2 \{ \bar{a}_n; T \}$ для исключения фиктивной периодичности.

2.2.5. Общий метод разложения функции в ряд Лагерра

Алгоритмы 2.1, 2.2 и 2.3 применимы, когда аппроксимируемая рядом Лагерра функция может быть представлена в том числе и рядом Фурье. Для того чтобы значения коэффициентов ряда Лагерра убывали достаточно быстро необходимо, чтобы разлагаемая функция экспоненциально стремилась к нулю в окрестности правой границы интервала аппроксимации [99]. Этого можно достичь, локально на правой границе интервала аппроксимации умножив функцию на $\exp(-\mu t)$, $\mu > 0$. С другой стороны, в силу периодичности тригонометрической интерполяции необходимо, чтобы выполнялось условие f(0) = f(T) = 0, тем самым накладываются ограничения на вид аппроксимируемой функции. Например, если применить рассмотренные выше алгоритмы к функции, представленной на рис. 2.7а, то возникнут осцилляции на обоих границах интервала разложения, как показано на рис. 2.76. Потери точности можно избежать, если проводить вычисления по следующей схеме.

Во-первых, необходимо сдвинуть исходную функцию вправо на величину Δt . Далее, на промежутке $t \in [0, \Delta t]$ добавляется некоторая гладкая функция, которая принимает нулевое значение для t = 0, как показано на рис. 2.7в, где на промежутке $t \in [0, \Delta t]$ была задана масштабированная четверть периода функции $\cos^2(t)$. Если модифицированная функция будет раскладываться в ряд Лагерра на основе алгоритма 2.2 или 2.3, то вместо операции $\mathbb{Q}^2 \{\bar{a}_m; T\}$ следует использовать операцию $\mathbb{Q} \{\mathbb{Q} \{\bar{a}_m; T + \Delta t\}; T\}$. Это позволит исключить как фиктивную периодичность, так и вспомогательный интервал $t \in [0, \Delta t]$. Если планируется использовать алгоритм 2.1, который не требует применения операции $\mathbb{Q}^2 \{\bar{a}_m; T\}$, то дополнительный интервал $[0, \Delta t]$ следует исключить путём расчёта коэффициентов разложения по формуле (2.10), однако вместо $\bar{a}_m = \bar{v}_m(0)$ следует положить $\bar{a}_m = \bar{v}_m(-\Delta t)$.



Рис. 2.7. а) Аппроксимируемая рядом Лагерра функция; б) некорректная аппроксимация исходной функции рядом Лагерра, где артефакты указаны стрелками; в) вспомогательная функция, включающей дополнительный интервал; г) корректная аппроксимация исходной функции рядом Лагерра после исключения вспомогательного интервала

2.2.6. Алгоритмы устойчивого вычисления функций Лагерра

Рассмотрим проблему вычисления функций Лагерра при реализации операций $\mathbb{S}\{\cdot;\tau\}$ и $\mathbb{Q}\{\cdot;\tau\}$. Если аргумент функций $l_m(\eta\tau)$ для (2.20a), (2.20b) будет слишком большим, то как было сказано во введении, возникает ошибка типа "overflow" при вычислении функции $L_n(\eta\tau)$ или ошибка типа "underflow" при вычислении множителя $\exp(-\eta\tau/2)$. Реализация 128-битной арифметики не позволяет полностью исключить ошибок такого рода для больши́х значений аргумента или порядка функции Лагерра, поэтому рассмотрим более надежный и универсальный подход.

Из соотношения $l_m(\eta t_0) = \int_0^\infty \delta(t-t_0) l_m(\eta t) dt$, где $\delta(t)$ – Дельта-функция, следует, что коэффициенты $\bar{a}_k = l_m(0) = 1$ ряда Лагерра (2.1а) соответствуют $\delta(0)$. Тогда можно вычислить функции Лагерра для любых значений аргумента посредством серии сдвигов вида

$$\{l_m(t_0)\} = \mathbb{S}\{\dots \mathbb{S}\{\mathbb{S}\{l_m(0); \tau_1\}; \tau_2\} \dots; \tau_p\}, \quad t_0 = \sum_{i=1}^p \tau_i.$$
(2.22)

Максимальное значение параметра сдвига au_i для 64-битной арифметики огра-

ничено возможностью представления величины $\exp(-\eta \tau_i/4)$ для вещественных чисел. В соответствии со стандартом IEEE, описывающий представление вещественных чисел с 64-битной точностью, выбирая $\eta \tau_i \leq 4 \left| \ln(2.225 \times 10^{-308}) \right| \approx$ ≈ 2600 , можно вычислить $l_n(\eta \tau_i)$ с помощью (2.3) без возникновения ситуаций типа "underflow"и "overflow". Для того чтобы сократить общее число сдвигов



Рис. 2.8. а) Зависимость значений функций Лагерра от порядка *m* для фиксированного аргумента; б) разность значений функции Лагерра, вычисленных посредством формулы (2.23) для 64-битной арифметики и формулы (2.3) для 128-битной арифметики

и, как следствие, вычислительные затраты, имеет смысл выполнять сдвиги рекуррентным образом

$$\{l_m(2^p\eta\tau)\} = \mathbb{S}\left\{\mathbb{S}\left\{\mathbb{S}\left\{\mathbb{S}\left\{\mathbb{S}\left\{\mathbb{S}\left\{l_m(\eta\tau);\tau\right\};2\tau\right\},4\tau\right\}...;2^{p-1}\tau\right\}\right\}\right\}.$$
 (2.23)

По сравнению с формулой (2.22) экономия вычислений достигается за счёт того, что значения функций Лагерра, полученные на предыдущем шаге, используются в формуле (2.20а), чтобы осуществить сдвиг на текущем шаге реализации формулы (2.23). Таким образом, величина сдвига на каждом шаге удваивается, что уменьшает общее число сдвигов, каждый из которых требует $O(n \log n)$ операций. Отметим, что для первого сдвига всегда требуется вычислить значения $l_m(\eta\tau)$ по формулам (2.3), (2.4).

На рис. 2.8а приведен результат расчёта значений функций $l_m(2200 \times 16)$ на основе формулы (2.23). Абсолютная разница значений для формулы (2.23) для

64-битной арифметики и формул (2.3), (2.4) для 128-битной арифметики, показана на рис. 2.86. Видно, что оба подхода дают практически одинаковые результаты. Таким образом, рассмотренный алгоритм позволяет отказаться от использования арифметики повышенной точности, сохранив возможность устойчиво вычислять значения функций Лагерра любого разумного порядка и любых значений аргумента. Более того, тестовые расчёты показали, что по сравнению с 128-битной арифметикой, предложенный способ вычислений требует в несколько раз меньшего времени счёта, если используется 32-битная арифметика для организации процедуры сдвига.

2.2.7. Экономичный алгоритм для длительных интервалов аппроксимации

Для разложения функции в ряд Лагерра на основе формулы (2.10) требуется порядка $O(nN_x)$ арифметических действий, где n – число членов разложения ряда Лагерра, а N_x – число гармоник вспомогательного ряда Фурье. Аппроксимация функции для длительных интервалов требует задания больши́х значений n и N_x , что делает преобразование Лагерра неэкономичным. С целью снизить время вычислений при выполнении преобразования Лагерра, разработаем алгоритм типа "разделяй и властвуй". Общая идея такого подхода состоит в том, что на первом шаге исходная задача разделяется на независимые подзадачи, для решения которых требуются значительно меньшие вычислительные затраты. На втором шаге происходит сборка решения исходной задачи из решений подзадач.

Алгоритм 2.4. Для аппроксимации рядом Лагерра функции f(t) на интервале $t \in [0, T]$ следует выполнить:

1. Произвести декомпозицию интервала аппроксимации $t \in [0, T]$ на $p = 2^s$ перекрывающихся подынтервалов длиной $\Delta t_i = \beta_i - \alpha_i$ (рис. 2.9). При этом

на границах подынтервала в буферных зонах функция должна плавно стремиться к нулю так, чтобы сумма двух локальных функций оставалась равной значению аппроксимируемой функции.

- 2. Локальная функция $f_i(t)$, заданная на подынтервале с номером i, раскладывается в ряд Лагерра на вспомогательном интервале $[0, \Delta t_i]$ посредством алгоритма 2.1, 2.2 или 2.3.
- 3. Сдвинуть локальные функции, перейдя от интервала $[0, \Delta t_i]$ к подынтервалу $[\alpha_i, \beta_i]$. Это делается посредством серии сдвигов функции $f_i(t)$ в соответствии со схемой, представленной на рис. 2.10, на которой рассмотрен пример для четырёх подынтервалов. Процесс сборки состоит из $\log_2 p$ шагов, где р – число подынтервалов, следовательно, для рассматриваемого примера потребуется два шага. На первом шаге последовательность коэффициентов рядов Лагерра для локальных функций $f_2(t)$ и $f_4(t)$ дополняются нулями, чтобы число коэффициентов разложения удвоилось. Затем расширенные ряды сдвигаются посредством процедур $\mathbb{S}\left\{\bar{a}_{n/2};\alpha_2\right\}$, $\mathbb{S}\left\{\bar{a}_{n/2}; \alpha_4 - \alpha_3\right\}$. После этого соответствующие коэффициенты первого и второго, третьего и четвёртого рядов попарно складываются. В итоге получаются два интервала большей длины. Далее, на втором шаге аналогичный процесс применяется для нового второго ряда, после сдвига которого $\mathbb{S}\left\{\bar{a}_{n};\alpha_{3}\right\}$ коэффициенты разложения первого и второго рядов складываются. Таким образом, все локальные функции будут перемещены на исходные позиции относительно переменной t, a полученный ряд будет аппроксимировать исходную функцию f(t) с некоторой точностью.

Замечание. Для выполнение одного сдвига $\mathbb{S}\{\bar{a}_n; \tau\}$ посредством быстрого преобразования Фурье требуется $O(n \log n)$ арифметических действий. Из рис. 2.3 видно, что сдвиг функции вправо увеличивает число коэффициентов ряда Лагерра, необходимых для аппроксимации сдвинутой функции с прежней точностью. Для расчётной схемы на рис. 2.10 каждый сдвиг будет удваивать минимально необходимое число слагаемых ряда Лагерра. Поэтому перед операцией сдвига требуется предварительно дополнять нулями последовательность коэффициентов ряда Лагерра. После выполнения операции сдвига нулевые значения добавленных коэффициентов разложения станут ненулевыми.



Рис. 2.9. Декомпозиции исходного интервала аппроксимации на четыре перекрывающихся подынтервала



Рис. 2.10. Расчёт аппроксимации для функции f(t) на основе предварительно вычисленных локальных аппроксимаций для функций $f_i(t)$

Для больши́х значений n и N_x алгоритм 2.4 будет иметь вычислительную сложность порядка $O(nN_x/p+n\log_2 n\log_2 p)$ против $O(nN_x)$, где p – количество подынтервалов. Первое слагаемое – это затраты для аппроксимации локальных функций $f_i(t)$, $t \in [0, \Delta t_i]$, а второе слагаемое – это затраты для выполнения серии операций сдвига для преобразования локальных коэффициентов разложения в коэффициенты разложения для исходной функции f(t). Однако у этого алгоритма присутствует недостаток, а именно: число коэффициентов ряда Лагерра для аппроксимации локальных функций $f_i(t)$ на подынтервалах $[0, \Delta t_i]$ зависит не только от длины подынтервала, но и от гладкости функции $f_i(t)$. При решении практических задач гладкость аппроксимируемой функции может быть низкой, сходимость ряда может быть невысокой. Это приводит к тому, что при одинаковой точности суммарное число коэффициентов разложения для локальных задач для алгоритма 2.4 будет больше, чем число коэффициентов разложения при использовании алгоритма 2.1, 2.2 или 2.3. Таким образом, разбиение потребует дополнительных вычислительных затрат, реальный объём которых можно выяснить в рамках вычислительных экспериментов.

2.3. Численные расчёты

Для оценки точности аппроксимации и производительности предлагаемых методов проведем серию вычислительных экспериментов для аппроксимации функций различной гладкости и интервалов различной длины. Численные процедуры для вычисления коэффициентов Лагерра реализованы с одинарной и двойной точностью. Алгоритмы 2.2 и 2.3 дают одинаковые результаты расчёта коэффициентов ряда Лагерра, поэтому отдельное тестирование алгоритма 2.3 не рассматривается.

Процедуры обращения преобразования Лагерра

Рассмотрим задачу вычисления обратного преобразование Лагерра (2.1а). В отличии от прямого преобразования, при суммировании ряда остаётся только проблема вычисления значений функций Лагерра высоких порядков для больши́х значений аргумента, которая может быть решена несколькими способами. Если проводить расчёты со 128-битной вещественной точностью посредством формулы (2.3), то можно вычислять функции Лагерра высоких порядков для достаточно больших значений аргумента без возникновения ошибок типа "overflow" и "underflow". Другой способ состоит в применении асимптотических разложений [141, 226] для вычисления значений многочленов Лагерра $L_n(\eta t)$, откуда, умножая на ехр ($-\eta t/2$), получаем значение функций Лагерра.

Если функция, аппроксимируемая рядом Лагерра, может быть представима рядом Фурье, то можно перейти от коэффициентов Лагерра к коэффициентам Фурье по следующей формуле

$$(\tilde{f}_0, \tilde{f}_1, ..., \tilde{f}_{N_x})^T = M^T (\bar{a}_0, \bar{a}_1, ..., \bar{a}_n)^T,$$

где \tilde{M} – это модифицированная матрица вида (2.21). В этом случае основная проблема заключается в появлении разрывов функции на границах интервала аппроксимации $t \in [0, T]$.

И наконец, можно применить устойчивый способ вычисления функций Лагерра по формулам (2.22) или (2.23), рассмотренный в параграфе 2.2.5. Как уже было сказано выше, несмотря на необходимость выполнения быстрого преобразования Фурье для вычисления линейной свертки, такой способ организации вычислений требует меньшее время счёта, по сравнению с применением 128-битной арифметики и формулы (2.3).

Разложение в ряд Лагерра гладкой функции

В качестве первого теста рассмотрим на интервале $t \in [0, 1]$ аппроксимацию функции f(t) вида (2.11) с параметрами $f_0 = 30$, g = 4, $t_0 = 0.5$. Шаг дискретизации функции составлял ht = 0.002. Будем оценивать погрешность аппроксимации по формуле

$$\epsilon = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{s} \left(f(t_i) - \sum_{j=1}^{n} \bar{a}_j l_n(\eta t_j) \right)^2}{\sum_{i=1}^{s} f^2(t_i)}},$$

где $f(t_i)$ – разлагаемая в ряд Лагерра функция, которая задана на множестве значений $t_i \in [0, T], i = 1, 2, ...s, t_1 = 0, t_s = T.$

На рис. 2.11 приведена зависимость величины погрешности от числа коэффициентов разложения ряда Лагерра для различных значений параметра масштабирования $\eta \in [50, 1600]$. Расчёты проводились как с двойной вещественной точностью рис. 2.11а,в, так и одинарной рис. 2.116,г. Для исключения фиктивной периодичности в рамках алгоритма 2.1 исходный интервал аппроксимации был увеличен до $t \in [0, 2]$, где $f(t) \equiv 0$ для $t \in [1, 2]$. Из рис. 2.11а видно, что погрешность порядка $\epsilon = 10^{-14}$ была достигнута при использовании алгоритма 2.1 для параметров $\eta = 1600$ и $n = 380 \div 920$, а также для $\eta = 800$ и $n = 420 \div 440$. С увеличением числа коэффициентов разложения для n > 920и $\eta = 1600$ и для n > 440 и $\eta = 800$ наблюдается резкое снижение точности аппроксимации, что обусловлено проявлением фиктивной периодичности и резким обрывом значений коэффициентов ряда. Как показано на рис. 2.12, чем меньше заданное значение параметра η , тем более протяженным становится спектр. В этом случае пересечение спектров двух периодов функции наступает при меньших значениях n, и, начиная с некоторого номера $n > n_0(\eta)$, ряд Лагерра не сходится к аппроксимируемой функции.

В противоположность алгоритму 2.1, применение алгоритма 2.2 (рис. 2.11в,г) не потребовало дополнительного увеличения интервала аппроксимации. Уровень точности алгоритма 2.2 одинаковый как для двойной, так и одинарной вещественной арифметики и составляет порядка $\epsilon = 10^{-7}$, не снижаясь до $\epsilon = 10^{-14}$ как для алгоритма 2.1. Это объясняется тем, что при реализации формулы (2.20b) последовательность $l_m(\eta t_0)$, m=0, 1, 2... является коэффициентами разложения для дельта-функции $\delta(t_0)$, для которой, как показано на рис. 2.8, спектр Лагерра является бесконечно протяженным и медленно затухающим, поэтому конечное число членов разложения является источником дополнительной погрешности. Однако поведение погрешности для алгоритма 2.2 носит более регулярный характер, так как фиктивной периодичности и резкого обрыва спектра при таком способе расчёта не наблюдается.

Рассмотрим аппроксимацию функции, представленной на рис. 2.7, для которой $f(0) \neq 0$. Для такой функции было проведено сравнение точности алгоритмов 2.1 и 2.2 с непосредственным вычислением интеграла (2.1b) методом прямоугольников (рис. 3.6б). Из-за того, что метод прямоугольников имеет первый порядок точности, шаг интегрирования был выбран в 4×10^5 раз меньшим, чем шаг дискретизации для алгоритмов 2.1 и 2.2. Такой подробный шаг требуется, чтобы обеспечить высокую точность расчётов коэффициентов Лагерра для ме-



Рис. 2.11. Зависимость погрешности аппроксимации для функции вида (2.11) от количества слагаемых ряда Лагерра для различных значений параметра преобразования $\eta = 50, 100, ..., 1600$. а) алгоритм 2.1 с 64-битной точностью, б) алгоритм 2.1 с 32-битной точностью, в) алгоритм 2.2 с 64-битной точностью, г) алгоритм 2.2 с 32-битной точностью



Рис. 2.12. Спектр Лагерра для различных значений параметра преобразования $\eta = 50, 100, ..., 1600$ для функции (2.11) для а) алгоритма 2.1 и б) алгоритма 2.2



Рис. 2.13. Зависимость погрешности аппроксимации от количества слагаемых ряда Лагерра для функции, представленной на рис. 2.7; расчёты проводились посредством алгоритмов 2.1 и 2.2 для а) 32-битная точность, б) 64-битная точность

тода первого порядка точности. Для возможности численного интегрирования быстро осциллирующих функций с более крупным шагом необходимо использовать квадратуры очень высокого порядка точности. В работе [179] предлагалось использовать квадратуры 256 порядка точности для вычисления коэффициентов разложения ряда Лагерра для n = 128. Однако при решении практических задач требуется аппроксимировать негладкие функции, что ставит под сомнение правомерность применения высокоточных квадратур, для которых оценка погрешности подразумевает наличие производных высоких порядков разлагаемой в ряд функции.

Проводя расчёты с одинарной вещественной точностью, можно сократить время счёта посредством более высокой степени векторизации вычислений. В этом случае погрешность алгоритма 2.1 для $\eta = 800,1600$ увеличивается с $\epsilon =$ $= 10^{-14}$ до 10^{-7} , т.е. до уровня одинарной машинной точности, а погрешность алгоритма 2.2 остаётся на уровне порядка $\epsilon = 10^{-7}$. Важно, что устойчивость всех предложенных алгоритмов сохраняется. Отметим, что машинная точность вычислений для негладких функций может и не достигаться, что исключает необходимость применения двойной вещественной точности. Для того чтобы это продемонстрировать, в следующем тесте рассмотрена аппроксимация временного ряда из набора тестовых сейсмограмм для скоростной модели среды "Sigsbee" [218].

Разложение в ряд Лагерра негладкой функции

В рамках первого теста была рассмотрена аппроксимация гладкой функции на интервале [0, 1]. Теперь протестируем разработанные алгоритмы для негладкой функции (см. рис. 2.14а), заданной на интервале [0, 12] с шагом дискретизации $h_t = 0.008$. Эта функция соответствует первой сейсмической трассе из тестового набора сейсмограмм для скоростной модели "Sigsbee" [218]. Сейсмограммы для модели "Sigsbee" имеют одинарную вещественную точность, поэтому рассмотрим реализацию алгоритмов 2.1 и 2.2 только с одинарной точностью.



Рис. 2.14. а) Первая трасса из сейсмограммы для скоростной модели "Sigsbee". б) Зависимость величины погрешности аппроксимации от количества слагаемых ряда Лагерра для различных алгоритмов и значений параметра трансформации $\eta = 900$ и 1800 для первой трассы из сейсмограммы для скоростной модели "Sigsbee"

Для расчётов посредством алгоритма 2.2 интервал аппроксимации принудительно не увеличивался, тогда как для алгоритма 2.1 интервал аппроксимации был увеличен в три раза до [0, 36] посредством добавления нулевых значений. Из рис. 2.146 видно, что алгоритм 2.2 приблизительно на порядок точнее алгоритма 2.1. Также алгоритм 2.2 демонстрирует более регулярное поведение погрешности, что в значительной степени упрощает процесс подбора оптимального числа коэффициентов ряда Лагерра. Меньшая точность алгоритма 2.1 обусловлена, во-первых, протяженным спектром Лагерра для негладкой функции, что не позволяет отделить друг от друга спектры для разных периодов и исключить влияние фиктивной периодичности. Во-вторых, увеличение в три раза интервала аппроксимации также увеличивает число слагаемых ряда (2.10), что является источником дополнительно погрешности из-за увеличения общего количества операций.

Также было проведено сравнение точности расчёта коэффициентов разложения между предлагаемыми алгоритмами и вычислением интеграла (2.1b) посредством метода прямоугольников с шагом интегрирования $ht = 8 \times 10^{-7}$. Как видно из рис. 2.146, несмотря на значительно меньший шаг дискретизации функции, точность вычисления метода прямоугольников значительно меньше, чем для алгоритмов 2.1 и 2.2, при том что объём вычислений на несколько порядков больше. Из формулы (2.2) и рис. 2.1 следует, что с ростом *п* частота осцилляций функций $l_n(\eta t)$ также увеличивается, поэтому для расчёта каждого последующего коэффициента разложения требуется либо уменьшать шаг дискретизации подынтегральной функции, либо увеличивать порядок квадратурной формулы. Однако при решении практических задач следует учитывать, что ограниченная гладкость аппроксимируемых функции может не позволить реализовать максимальный порядок точности квадратурной формулы. Кроме того, дополнительные трудности высокоточных квадратур связаны с необходимостью вычислять значение подынтегральной функции на неравномерной сетке, тогда как аппроксимируемая дискретная функция, как правило, задана для равноотстоящих значений аргумента. Подводя итог, можно сказать, что использование одинарной точности для алгоритмов 2.1 и 2.2 является достаточным, так как наблюдаемый уровень погрешности является приемлемым при решении практических задач. Применение двойной точности может уменьшит погрешность, однако только при аппроксимации очень гладких функций.

	$n = 4096, \ t \in [0, 12]$							$n = 8192, t \in [0, 12]$						
р	ϵ	Prec.	Step 1	Step 2	Total	Rel.	ϵ	Prec.	Step 1	Step 2	Total	Rel.		
1	1.7E-3	1.8	29.0	-	29.0	-	2.5E-6	3.9	52.0	-	52.0	-		
2	2.9E-3	0.3	15.6	0.9	16.5	1.7	1.5E-5	1.1	27.6	2.1	29.7	1.7		
3	5.5E-3	5.7E-2	8.3	3.6	11.9	2.4	9.4E-5	0.2	15.1	9	24.1	2.1		
8	7.8E-3	1.2E-2	5.3	7.8	13.1	2.2	1.2E-4	3.9E-2	8.7	17	25.7	2.0		
16	2.2E-2	8.9E-2	3.5	15.5	19.1	1.5	2.1E-4	9.1E-3	5.7	34	39.7	1.3		

Таблица 2.1. Оценки времени счёта и точности алгоритма 2.4. Зависимость от числа вспомогательных интервалов p: (ϵ) точности аппроксимации; (*Prec.*) времени подготовительных вычислений, необходимое для расчёта локальной матрицы \tilde{M} ; (*Step 1*) времени расчёта локальной аппроксимации; (*Step 2*) времени вычисления последовательности сдвигов для конструирования глобальной аппроксимации; (*Total*) общего времени счёта алгоритма 2.4; (*Rel.*) отношения времени счёта для алгоритма 2.2 ко времени счёта алгоритма 2.4

		n =	32768, 1	$t \in [0, 60]$	$n = 65536, \ t \in [0, 120]$							
р	ϵ	Prec.	Step 1	Step 2	Total	Rel.	ϵ	Prec.	Step 1	Step 2	Total	Rel.
1	5.3E-6	77	877	-	877	-	3.4E-6	359	3455	-	3455	-
2	8.1E-6	19	449	25	474	1.8	4.6E-6	78.7	1754	58	1792	1.9
3	6.1E-5	4.8	231	44	275	3.1	9.7E-6	19.4	826	107	933	3.7
8	6.5E-5	1.2	124	63	187	4.6	6.6E-5	4.8	463	144	607	5.7
16	5.8E-5	2.5	79	80	159	5.5	6.8E-5	1.2	242	180	422	8.2
32	1.9E-4	4.2E-2	52	91	143	6.1	6.9E-5	2.6E-1	158	212	370	9.3
64	5.8E-4	9.6E-3	25	100	125	7.0	1.2E-4	4.2E-2	105	239	344	10
128	3.9E-3	1.7E-3	17	112	129	6.8	5.8E-4	9.6E-3	50	265	315	11

Таблица 2.2. Оценки времени счёта и точности алгоритма 2.4. Зависимость от числа вспомогательных интервалов p: (ϵ) точности аппроксимации; (*Prec.*) времени подготовительных вычислений, необходимое для расчёта локальной матрицы \tilde{M} ; (*Step 1*) времени расчёта локальной аппроксимации; (*Step 2*) времени вычисления последовательности сдвигов для конструирования глобальной аппроксимации; (*Total*) общего времени счёта алгоритма 2.4; (*Rel.*) отношения времени счёта для алгоритма 2.2 ко времени счёта алгоритма 2.4

В рамках тестирования алгоритма 2.4, в табл. 2.1 и 2.2 приведены времена счёта и оценки точности в случае аппроксимации всех 152684 сейсмических трасс для модели "Sigsbee". Для интервала [0, 12] число коэффициентов ряда Лагерра составляло n = 4096 и 8192, а для интервалов [0, 60] и [0, 120] число коэффициентов ряда было задано n = 32768 и 65536, соответственно. Исходные сейсмические трассы для модели "Sigsbee" определены для $t \in [0, 12]$. Для того чтобы получить временные ряды для интервалов [0, 60] и [0, 120], исходная трасса была последовательно дополнена четырьмя или одиннадцатью идентичными копиями исходного сигнала. Из представленных данных видно, что несмотря на то что алгоритм 2.4 не принадлежит к классу быстрых алгоритмов, тем не менее он позволяет несколько сократить время вычислений, особенно для больших временных интервалов. Также отметим, что при использовании алгоритма 2.4 время подготовительных вычислений, необходимых для модификации матрицы М в рамках реализации алгоритма 2.2, существенно сокращается, так как для аппроксимации локальных функций требуется матрица меньшего порядка. Тем не менее, из табл. 2.1 и 2.2 видно, что точность аппроксимации ϵ падает с ростом числа вспомогательных интервалов. Это обусловлено, во-первых, наличием вспомогательных буферов, в которых умножение на экспоненциально убывающий множитель выполняется с целью, чтобы спектр Лагерра локальной функции не был бесконечным из-за возникновения разрыва значений функции на границах подынтервалов. Также на каждом подынтервале локальная функция аппроксимируется рядом Лагерра с числом коэффициентов n/p, где *p* – число подынтервалов. Однако *n/p* коэффициентов разложения может быть недостаточно, чтобы аппроксимировать негладкую локальную функцию, что приводит к потере точности аппроксимации. Тем не менее, если требуется аппроксимировать временной ряд с точностью порядка $\epsilon = 10^{-3} \div 10^{-5}$, что является достаточным для практических расчётов, то алгоритм 2.4 может быть рекомендован к использованию.

Для умножения матрицы \tilde{M} на вектор использовалась численная процедура из библиотеки BLAS MKL. Учитывая высокую степень оптимизации BLAS процедур для конкретной модели процессора, вычисление коэффициентов Ла-

герра может быть выполнено очень быстро. Тогда как оптимизация алгоритма быстрого Фурье преобразования является более сложной задачей, что уменьшает степень векторизации вычислений на втором этапе алгоритма 2.4, и, как следствие, величина ускорения алгоритма 2.4 также уменьшается. Если для умножения матрицы вместо библиотеки BLAS использовалась бы внутренняя Фортран-процедура, такая как "matmul", то коэффициент ускорения алгоритма 2.4 был бы существенно большим, так как вычислительные затраты функции "matmul" в несколько раз больше по сравнению с процедурой из библиотеки BLAS MKL.

2.4. Выводы

Во второй главе разработаны новые алгоритмы для вычисления интегрального преобразования Лагерра на основе решения одномерно транспортного уравнения. Основная идея предлагаемого подхода состоит в том, что вычисление значений несобственных интегралов для быстро осциллирующих функции заменяется на решение методом разделения переменных начально-краевой задачи для транспортного уравнения. Такой подход позволил успешно преодолеть обозначенные проблемы, связанные с численным выполнением преобразования Лагерра. Реализация предлагаемой вычислительной модели была бы невозможна без разработки вспомогательных процедур, позволяющих исключить фиктивную периодичность, возникающую из-за периодических граничных условий вследствие использования преобразования Фурье. Одна корректирующая процедура построена на основе решения транспортного уравнения, тогда как другая основана на апостериорном анализе энергии спектра Лагерра. Тестовые расчёты показали, что первый способ исключения периодичности более надежен, точнее и экономичнее, так как не требует увеличения интервала аппроксимации. Несмотря на то что предлагаемые алгоритмы не относятся к классу быстрых алгоритмов, число арифметических операций было значительно сокращено, так

как нет необходимости проводить расчёты с малыми шагами сетки или реализовывать квадратурные формулы высоких порядков точности для расчёта быстро осциллирующих несобственных интегралов. Дополнительно на основе решения транспортного уравнения была рассмотрена идея, позволяющая сократить вычислительные затраты при выполнении преобразования Лагерра для длительных интервалов аппроксимации. Тестовые расчёты подтвердили, что все разработанные алгоритмы могут быть реализованы как с одинарной, так и с двойной вещественной точностью без потери численной устойчивости, тем самым обеспечивается эффективное использование ресурсов как СРU, так и GPU. Таким образом, в случае аппроксимации рядом Лагерра большого набора функций, например, при решении задач сейсморазведки, предложенные алгоритмы позволяют сэкономить значительное время счёта, что делает предлагаемый подход востребованным как с методической, так и с прикладной точек зрения.

Глава З

Прямые высокомасштабируемые параллельные алгоритмы для решения систем линейных алгебраических уравнений на суперЭВМ

3.1. Постановка задачи и обзор существующих подходов

Одним из ключевых и вычислительно-затратных этапов реализации спектрально-разностных алгоритмов является решение систем линейных алгебраических уравнений больши́х размерностей. Необходимость использования современных суперЭВМ, объединяющих десятки и сотни тысяч процессоров, существенно усложняет поставленную в диссертации задачу, поэтому в этой главе предложены новые высокомасштабируемые параллельные алгоритмы для решения систем линейных алгебраических уравнений с трёхдиагональными, блочнотрёхдиагональными и тёплицевыми матрицами. Разработка параллельных процедур для данного класса матриц позволит эффективно реализовывать на суперЭВМ спектрально-разностные методы на основе преобразования Лагерра. Известно, что проблема решения систем линейных алгебраических уравнений является одной из наиболее распространённых задач вычислительной математики – это обусловливает актуальность такого рода исследований для многих областей математического моделирования.

Трёхдиагональные системы линейных алгебраических уравнений

$$b_1 x_1 + c_1 x_2 = f_1,$$

$$a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = f_i, \quad 1 \le i \le m - 1,$$

$$a_m x_{m-1} + b_m x_m = f_m,$$

(3.1)

или в векторном виде

$$A\mathbf{X} = \mathbf{F},\tag{3.2}$$

где $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_m)^{\mathrm{T}}$ – вектор неизвестных, $\mathbf{F} = (f_1, f_2, \dots, f_m)^{\mathrm{T}}$ – вектор правой части, $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ – трёхдиагональная матрица:

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{m-1} & b_{m-1} & c_{m-1} \\ 0 & & & a_m & b_m \end{pmatrix} = \operatorname{tridiag}\{\dots, a_i, b_i, c_i, \dots\},$$

возникают при аппроксимации краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, а также при реализации численных методов для решения уравнений в частных производных. Такие методы, как метод разделения переменных, предложенный Р. Хокни, неявный метод переменных направлений, предложенный Д. Писменом и Х. Рэчфордом, многосеточный метод Р.П. Федоренко, и многие другие алгоритмы, используемые при решении эллиптических уравнений, требуют обращения трёхдиагональных матриц [32, 51, 53, 70, 80, 81]. Необходимость решения систем линейных алгебраических уравнений с трёхдиагональными матрицами возникает также в задачах построения сплайнов [12, 51, 62], при анализе временных рядов [39], при решении задач математической физики методом дробных шагов [81] и многих других. Для решения трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений могут быть использованы различные варианты метода исключения Гаусса, так называемые алгоритмы прогонки [23, 33, 42, 62, 70], которые были предложены в начале 50-х годов независимо несколькими авторами, в том числе советскими учеными И.М. Гельфандом, О.В. Локуциевским, В.С. Владимировым и А.С. Кронродом. В работе [22] С.К. Годуновым был предложен метод ортогональной прогонки, где в отличие от указанных выше алгоритмов матрица системы уравнений представляется не в виде произведения нижней и верхней треугольных матриц, а как произведения ортогональной и треугольной матриц. Экономичность, эффективность и простота реализации алгоритмов прогонки

сделало их стандартом де-факто при реализации многих численных методов. Таким образом, в связи с постоянным развитием вычислительной техники существует необходимость в разработке параллельных вариантов метода прогонки и его модификаций, которые были бы эффективны для современных многопроцессорных вычислительных систем.

Наиболее простой модификацией классического метода прогонки, которая позволяет незначительно сократить время счёта, является метод встречных прогонок [33, 70]. Причина, по которой этот алгоритм не получил широкого распространения в расчётах на многопроцессорных вычислительных системах состоит в том, что метод встречных прогонок эффективен только при использовании нескольких процессоров. В работах В.П. Ильина [34], Д.Л. Головашкина и Л.В. Логановой [24, 50] исследуется вопрос о повышении эффективности параллельной реализации метода встречных прогонок посредством функциональной декомпозиции. В результате вычислительных экспериментов для четырёх и шести процессоров показано [24, 50], что максимальная величина ускорения не превышает четырёх. Имея в своём распоряжении суперЭВМ, объединяющие сотни тысяч процессоров, очевидно, что такой уровень масштабируемости является недостаточным. Сравнимый уровень производительности был продемонстрирован в работах Г. А. Тарнавского с соавторами [17, 74] и Д.В. Кныш [41]. Таким образом, одна из трудностей, возникающих при конструировании параллельного варианта метода прогонки, состоит в том, что в силу малого числа арифметических действий параллельный алгоритм весьма чувствителен ко времени межпроцессорных обменов. Необходимо требовать, чтобы алгоритм решения трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений был бы экономичным не только по числу арифметических операций, но и по объёму коммуникационных взаимодействий.

В работе [204] А. Povitsky предложил и исследовал асинхронный алгоритм для решения многомерных задач математического моделирования, где основной вычислительной макро-операцией является метод прогонки. Для повышения эффективности распараллеливания предлагается использовать алгоритм планирования с целью балансировки вычислительных операций и межпроцессорных обменов, а также гибридное параллельное программирование в стандартах OpenMP, MPI [215]. Однако тот факт, что исходными данными для алгоритма планирования являются как параметры задачи, так и технические параметры суперкомпьютера, затрудняет его практическое применение. В [205] D. T. Nguyen и J. Qin рассмотрели параллельный вариант *lu*-разложения для трёхдиагональных матриц. Для системы линейных алгебраических уравнений, включающей сто миллионов неизвестных, при использовании ста двадцати восьми процессоров величина ускорения составила порядка ста. Данные расчёты представляют в большей степени теоретический интерес, чем практический, в силу меньших размерностей трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при решении реальных прикладных задач, для которых эффективность параллельного варианта *lu*-разложения будет небольшой, так как коммуникационные затраты значительно превышают вычислительные.

В работах [45, 60] А.Н. Коноваловым и Н.Н. Яненко с соавторами предложен другой подход к распараллеливанию прогонки, который в дальнейшем исследован А.Н. Коноваловым, Е.Н. Акимовой и Н.А. Пинкиной [1, 5, 11, 42] . В основе алгоритма лежит принцип суперпозиции, согласно которому общее решение линейной неоднородной задачи есть сумма общего решения однородной задачи и частного решения неоднородной задачи. В современной классификации данный алгоритм относится к методам типа "разделяй и властвуй" [180]. По числу операций рассматриваемый параллельный алгоритм весьма экономичен, так как его арифметические затраты не более чем в два с половиной раза превосходят затраты классического варианта метода прогонки. В случае, если порядок системы линейных алгебраических уравнений значительно больше числа используемых процессоров, данный алгоритм может быть эффективно применен. В. Э. Витковским и М. П. Федоруком показано, что в расчётах с большим

числом процессоров отмечается снижение производительности такого метода, что обусловлено затратами на межпроцессорные взаимодействия, возникающие на этапе решения вспомогательной редуцированной системы [13]. Несмотря на то что такой алгоритм позволяет равномерно распределить вычислительную нагрузку между процессорами, производительность метода в значительной степени определяется эффективностью алгоритма для решения редуцированной системы. На момент разработки данного метода число процессоров, объединённых в рамках одной вычислительной системы, не превышало восьми, поэтому коммуникационные затраты по сравнению с вычислительными были незначительны. Введение в эксплуатацию многопроцессорных вычислительных систем, состоящих из десятков тысяч процессоров, ограничило эффективность рассмотренного подхода. Это объясняется тем, что при увеличении числа процессоров затраты на межпроцессорные обмены возрастают, тогда как число операций из расчёта на один процессор – убывают. Экспериментальные расчёты показали [13], что применение алгоритма [60, 246] позволяет сократить время вычислений от тридцати до сорока раз при использовании ста процессоров, однако дальнейшее увеличение числа процессоров к сокращению времени счёта не приводит.

Другой распространённый алгоритм для решения трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений, обладающий внутренним параллелизмом, является метод циклической редукции [33, 156, 177], который был предложен R. W. Hockney и C. R. Jesshope для решения специальных блочно-трёхдиагональных систем [156]. D. Heller в [150] показал, что при определённых предположениях внедиагональные элементы в процессе редукции убывают по абсолютной величине относительно внедиагональных элементов с квадратичной скоростью. Это позволяет завершить процесс исключения неизвестных до того, как будут выполнены все шаги редукции и, как следствие, повысить эффективность распараллеливания за счёт сокращения времени межпроцессорных взаимодействий. В работах [171] было отмечено, что циклическая редукция представляет собой вариант Гауссова исключения.
При параллельной реализации метода циклической редукции на супер-ЭВМ, объединяющих значительное число процессоров, как правило, не удаётся достичь высокой эффективности использования вычислительных ресурсов. Это связано с тем, что вычислительный процесс редукции требует жёсткой синхронизации вычислений и, как следствие, высоких коммуникационных затрат. Снижение эффективности метода циклической редукции наблюдается в расчётах с использованием даже незначительного числа процессоров. Это связано с тем, что на заключительных шагах прямого хода редукции и на первых шагах обратного, большая часть вычислительных ресурсов простаивает, ожидая результатов вычислений от других процессоров. Для повышения производительности как параллельного варианта циклической редукции, так и алгоритмов типа "разделяй и властвуй", в работе [251] рассмотрен алгоритм параллельной прогонки на основе комбинации метода циклической редукции и алгоритма [45, 60]. Суть усовершенствования состоит в том, что редуцированная система решается не с помощью "классического" метода прогонки, как в первоначальном варианте, а посредством алгоритма циклической редукции.

В работах [219–221] рассмотрены параллельный метод прогонки для систем с выраженным диагональным преобладанием и гибридный двухуровневый метод, которые обладают более высокой масштабируемостью относительно числа процессоров, чем рассмотренные выше алгоритмы. Идея этих методов основана на том, что наличие диагонального преобладания у матрицы системы линейных алгебраических уравнений позволяет существенно сократить количество межпроцессорных взаимодействий, в тоже время следует учитывать тот факт, что точность решения систем линейных алгебраических уравнений будет зависеть от числа задействованных процессоров. Гибридный двухуровневый метод был построен на основе комбинации алгоритма, учитывающего диагональное преобладание, и метода [60, 246]. Идея состоит в том, что исходная система уравнений разбивается на макро-подсистемы, где число таких подсистем определяется требуемой точностью расчётов. Затем каждая макро-подси-

стема решается параллельно посредством менее эффективного с точки зрения масштабируемости, но более точного алгоритма. Такая комбинация двух алгоритмов обеспечивает более высокий уровень масштабируемости по сравнению с рассмотренными выше методами, однако, существенным недостатком данного подхода является зависимость точности получаемого решения от числа процессоров. В работе [221] показано, что если размерность макро-подсистем не превышает шестидесяти четырёх, то точность решения будет на уровне машинной точности. К сожалению, наличие корреляций между производительностью, требуемой точностью и числом используемых процессоров делает такой алгоритм непривлекательным при проведении практических расчётов, так как корректность результатов в общем случае не гарантируется.

Для решения практических задач часто требуется обращать тёплицевы трёхдиагональные матрицы [33, 77]. Для этого случая J.M. McNally, X.-H. Sun, M.P. Bekakos и другие предложили ряд параллельных алгоритмов [90, 164, 187, 203, 220, 251], где учёт специальной структуры тёплицевой матрицы позволяет сократить число арифметических операций, однако не объём коммуникационных взаимодействий, что негативно сказывается на общей производительности метода.

В [117, 196, 208] исследованы параллельные алгоритмы для решения систем линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами на основе итерационных методов. В [196, 208] предлагается использовать методы подпространства Крылова [31], где для увеличения скорости сходимости итерационного процесса используется процедура предобусловливания. Принимая во внимание структуру блочно-трёхдиагональных матриц, предобусловливатель строится таким образом, чтобы он был эффективно обратим на многопроцессорной вычислительной системе. В [117] предложен параллельный вариант метода верхней релаксации. Такой алгоритм не требует коммуникационных затрат для вычисления итерационных параметров, которые задаются явно на основе априорной информации о границах спектра матрицы системы ли-

нейных алгебраических уравнений и должны быть предварительно вычислены с хорошей точностью, так как от этого зависит величина скорости сходимости итерационного процесса [70].

В [2, 84] Е.Н. Акимовой рассмотрен параллельный алгоритм, который является обобщением алгоритма для трёхдиагональных матриц [60]. Как и для случая трёхдиагональных матриц, исходная система линейных уравнений редуцируется к системе меньшего порядка, что позволяет равномерно распределить вычислительную нагрузку между процессорами. Однако в случае большого числа процессоров решение редуцированной системы линейных алгебраических уравнений является сопоставимой по сложности задачей с исходной системой линейных алгебраических уравнений. В [108] аналогичный подход применен для циркулярных блочно-трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений. Другой класс параллельных алгоритмов основан на методе циклической редукции [150], где основная проблема состоит в том, что в случае большого числа процессоров значительная вычислительных ресурсов в конце прямого хода и начале обратного хода редукции будет незагруженной. Также для этого метода, как и для других вариантов метода исключения Гаусса, требуется интенсивная синхронизация вычислительного процесса. Современная реализация метода циклической редукции рассмотрена в работе [89], где с целью повышения эффективности вычислительного процесса авторы предлагают решать систему уравнений не для одной, а для множества правых частей. Предварительная факторизация матрицы проводится однократно, а затем результаты предвычислений используются для многократного решения уравнений с одной и той же матрицей и различными правыми частями. Для рассмотренных основных подходов к решению блочно-трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений эффективность распараллеливания существенно зависит от размера блоков матрицы системы линейных алгебраических уравнений. Чем меньше размерность блока, тем меньшее число процессоров может быть эффективно использовано в расчётах, так как коммуникационный затраты становятся

доминирующими над вычислительными.

3.2. Параллельные алгоритмы для решения систем линейных алгебраических уравнений с трёхдиагональными матрицами

Введём в рассмотрение следующую декомпозицию данных между процессорами, исключающую дублирование данных задачи.

1. Полагая число процессоров равным p, разобьем векторы **F** и **X** на подвекторы \mathbf{Q}_i , \mathbf{U}_i следующим образом:

$$\mathbf{F} = (\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, ..., \mathbf{Q}_p)^{\mathrm{T}} = (f_1, f_2, ..., f_{size\{\mathbf{F}\}-1}, f_{size\{\mathbf{F}\}})^{\mathrm{T}},$$
$$\mathbf{X} = (\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, ..., \mathbf{U}_p)^{\mathrm{T}} = (x_1, x_2, ..., x_{size\{\mathbf{X}\}-1}, x_{size\{\mathbf{X}\}})^{\mathrm{T}},$$

где размерность вектора \mathbf{V} обозначена как $size\{\mathbf{V}\}$.

2. Определим размерности подвекторов \mathbf{Q}_i и \mathbf{U}_i условиями

 $size{\mathbf{Q}_i} = size{\mathbf{U}_i} \ge 2, \quad i = 1, ..., p,$

$$\sum_{i=1}^{p} size\{\mathbf{Q}_i\} = \sum_{i=1}^{p} size\{\mathbf{U}_i\} = size\{\mathbf{F}\} = size\{\mathbf{X}\} = m.$$

3. Будем считать, что процессору с номером i принадлежит пара подвекторов $\mathbf{Q}_i, \mathbf{U}_i$, а строка матрицы A с номером j расположена на том же процессоре, что и пара элементов (x_j, f_j) .

Дополнительно обозначим первый и последние элементы некоторого вектора V как $first\{V\}$ и $last\{V\}$. Примем за $\{A\}_l^t$ матрицу, получающуюся из матрицы A посредством отбрасывания всех строк и столбцов с номерами, меньшими l или большими t. Примем за $\{V\}_l^t$ подвектор, получающийся из вектора V посредством отбрасывания элементов с номерами меньшими l или большими t. Будем обозначать *i*-ю строку матрицы A через $A_{i.}$, а *j*-й столбец – через $A_{.j.}$ Обозначим $\mathbf{e}^{\mathrm{L}} = (0, ..., 0, 0, 1)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{e}^{\mathrm{R}} = (1, 0, 0, ..., 0)^{\mathrm{T}}$.

3.2.1. Основные формулы

Если трёхдиагональная система линейных алгебраических уравнений (3.2) разделена на подсистемы вида

$$\{A\}_{k_{1,i}+1}^{k_{2,i}-1} \{\mathbf{U}_{i}\}_{k_{1,i}+1}^{k_{2,i}-1} = \{\mathbf{Q}_{i}\}_{k_{1,i}+1}^{k_{2,i}-1} - \mathbf{e}^{\mathbf{R}}a_{k_{1}}first\{\mathbf{U}_{i}\} - \mathbf{e}^{\mathbf{L}}c_{k_{2}-1}last\{\mathbf{U}_{i}\}, i = 1, ..., p, (\mathbf{X})_{k_{1,i}} = first\{\mathbf{U}_{i}\}, \quad (\mathbf{X})_{k_{2,i}} = last\{\mathbf{U}_{i}\},$$

$$(3.3)$$

и известны значения элементов $first\{\mathbf{U}_i\}$ и $last\{\mathbf{U}_i\}$ (рис. 3.1), тогда подсистемы (3.3) могут быть решены независимо, что следует из самой структуры трёхдиагональной матрицы.



Рис. 3.1. Компоненты из вектора решения, которые разделяют исходную систему линейных алгебраических уравнений на независимые подсистемы меньших размерностей

Выполнив декомпозицию исходной системы (3.2) на подсистемы вида (3.3) и найдя решения в граничных элементах $first{\mathbf{U}_i}$, $last{\mathbf{U}_i}$, можно вычислить **X**, решив подсистемы (3.3) независимо. Это позволяет перейти от решения задачи (3.2) к p независимым подзадачам вида (3.3), если известны значения элементов $first{\mathbf{U}_i}$ и $last{\mathbf{U}_i}$, поэтому необходимо разработать экономичный способ вычисления значений $first{\mathbf{U}_i}$ и $last{\mathbf{U}_i}$ элементов. Для этого рассмотрим краевую задачу вида

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} = -\rho(x), \quad \varphi(x_0) = 0, \quad \varphi(x_1) = 0, \quad (3.4)$$

решение которой может быть представлено в интегральной форме через функцию Грина [59]

$$\varphi(x) = \int_{x_0}^{x_1} G(x,s)\rho(s) \mathrm{d}s. \tag{3.5}$$

Разделим отрезок (x_0, x_1) тремя точками $\{x_{1/4}, x_{1/2}, x_{3/4}\}$ и выберем правую часть (3.4) в следующем виде:

$$\rho(x) = \begin{cases}
0, & x_0 \le x < x_{1/4}, \\
k(x), & x_{1/4} \le x \le x_{1/2}, \\
0, & x_{1/2} < x \le x_1.
\end{cases}$$
(3.6)

Согласно (3.5), решение в точках $\{x_{1/4}, x_{1/2}, x_{3/4}\}$ представимо как



Рис. 3.2. Декомпозиция правой части

$$\varphi(x_{1/4}) = \int_{x_{1/4}}^{x_{1/2}} G(x_{1/4}, s)k(s)ds, \quad \varphi(x_{1/2}) = \int_{x_{1/4}}^{x_{1/2}} G(x_{1/2}, s)k(s)ds,$$

$$\varphi(x_{3/4}) = \int_{x_{1/4}}^{x_{1/2}} G(x_{3/4}, s)k(s)ds.$$
(3.7)

Другой способ, позволяющий найти решение уравнения (3.4) в точке $x_{3/4}$ без вычисления интеграла вида (3.5), состоит в следующем: так как точка $x_{3/4}$ принадлежит отрезку $(x_{1/2}, x_1)$, следовательно, решение в ней должно удовлетворять краевой задаче

$$\frac{\mathrm{d}^2 \tilde{\varphi}}{\mathrm{d}x^2} = 0, \quad \tilde{\varphi}(x_{1/2}) = \int_{x_{1/4}}^{x_{1/2}} G(x_{1/2}, s) k(s) \mathrm{d}s, \qquad \tilde{\varphi}(x_1) = 0$$

решение которой имеет вид $\tilde{\varphi}(x) = \varphi(x_{1/2}) \frac{x - x_1}{x_{1/2} - x_1}$. Следовательно, решение уравнения (3.4) с правой частью (3.6) в точках $\{x_{1/4}, x_{1/2}, x_{3/4}\}$ может быть записано как

$$\varphi(x_{1/4}) = \int_{x_{1/4}}^{x_{1/2}} G(x_{1/4}, s)k(s)ds, \quad \varphi(x_{1/2}) = \int_{x_{1/4}}^{x_{1/2}} G(x_{1/2}, s)k(s)ds,$$

$$\varphi(x_{3/4}) = \varphi(x_{1/2})\frac{x_{3/4} - x_1}{x_{1/2} - x_1}.$$
(3.8)

Сравнение формул (3.7) с (3.8) относительно трудоемкости вычислений показывает явное преимущество последних, поскольку требуется вычислить меньшее количество интегралов вида (3.5).

Теорема 3.1. Пусть необходимо определить решение краевой задачи (3.4) в точках $\{x_i \mid x_0 < x_i < x_N, x_i < x_{i+1}, i = 1, ..., N - 1\}$, тогда справедливо следующее тождество

$$\varphi(x_i) = \sum_{j=1}^{i} \alpha_j^R \frac{x_i - x_N}{x_j - x_N} + \sum_{j=i+1}^{N} \alpha_j^L \frac{x_i - x_0}{x_j - x_0}, \quad i = 1, ..., N - 1,$$
$$\alpha_i^R = \int_{x_{i-1}}^{x_i} G(x_i, s) \rho(s) ds, \quad i = 1, ..., N - 1,$$

$$\alpha_i^L = \int_{x_{i-1}}^{x_i} G(x_{i-1}, s) \rho(s) \mathrm{d}s, \ i = 2, ..., N.$$

Вернёмся к рассмотрению уравнения (3.2), для которого значение k-ой компоненты из вектора решения **X** может быть найдено, как

$$\left(\mathbf{X}\right)_{k} = \mathbf{G}_{k}^{\mathrm{T}} \mathbf{F}.$$
(3.9)

Тогда вектор \mathbf{G}_k является решением следующей системы уравнений

$$A^{\mathrm{T}}\mathbf{G}_k = \mathbf{e}_k,$$

где **e**_k – орт-вектор. Сформулируем алгоритм вычисления произвольной компоненты из вектора решения для задачи (3.2).

Алгоритм 3.1. Для того чтобы вычислить M различных компонент из вектора решения $(\mathbf{X})_{k_i}, i = 1, ..., M$ из уравнения (3.2), следует:

1. Вычислить вектор $\mathbf{G}_{k_i}, i = 1, ..., M$, решив уравнение $A^{\mathrm{T}}\mathbf{G}_{k_i} = \mathbf{e}_{k_i}$.

2. Определить $(\mathbf{X})_{k_i}$ как $(\mathbf{X})_{k_i} = \mathbf{G}_{k_i}^{\mathrm{T}} \mathbf{F}, \quad i = 1, ..., M.$

Таким образом, алгоритм 3.1 позволяет найти отдельную компоненту из вектора решения, и для различных индексов k_i значения $(\mathbf{X})_{k_i}$ могут быть вычислены независимо. Вектор \mathbf{G}_{k_i} не зависит от правой части системы линейных алгебраических уравнений, поэтому он может быть вычислен один раз для множества различных правых частей уравнения (3.2). В соответствии с (3.3) требуется вычислить значения элементов $first{\mathbf{U}_i}$, $last{\mathbf{U}_i}$ для всех процессоров. Заданная выше спецификация декомпозиции данных, предполагает, что на одном процессоре расположен подвектор \mathbf{U}_i и подвектор \mathbf{Q}_i , следовательно, каждый процессор будет вычислять два элемента ($first{\mathbf{U}_i}$, $last{\mathbf{U}_i}$) из вектора решения. При параллельной реализации алгоритма 3.1 согласно (3.9) каждому процессору потребуется выполнить порядка $O(size{\mathbf{X}})$ операций вне зависимости от числа задействованных вычислительных ресурсов. Модифицируем алгоритм 3.1 таким образом, чтобы количество операций для одного процессора было $O(size{\mathbf{U}_i})$.

Теорема 3.2. Для системы линейных алгебраических уравнений вида (3.2) множество компонент из вектора решений

$$\Omega = \left\{ \left(\mathbf{X} \right)_{n_i} | 1 < n_i < m, \ n_i < n_{i+1}, \ i = 1, ..., p \le m \right\}$$
(3.10)

может быть вычислено как

$$\left(\mathbf{X}\right)_{n_{i}} = \sum_{j=1}^{i} \beta_{n_{j}}^{\mathrm{R}} \left(\mathbf{Z}_{n_{j}}^{\mathrm{R}}\right)_{n_{i}} + \sum_{j=i+1}^{p+1} \beta_{n_{j}}^{\mathrm{L}} \left(\mathbf{Z}_{n_{j-1}}^{\mathrm{L}}\right)_{n_{i}}, \qquad (3.11)$$

где

$$B_{n_j}^{\mathrm{L}} \mathbf{Z}_{n_j}^{\mathrm{L}} = \mathbf{e}^{\mathrm{L}}, \quad B_{n_j}^{\mathrm{R}} \mathbf{Z}_{n_j}^{\mathrm{R}} = \mathbf{e}^{\mathrm{R}}, \qquad (3.12)$$

$$B_{n_j}^{\rm L} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{n_j-1} & b_{n_j-1} & c_{n_j-1} \\ 0 & & & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$B_{n_j}^{\rm R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & & 0 \\ a_{n_j+1} & b_{n_j+1} & c_{n_j+1} & & & \\ & a_{n_j+2} & b_{n_j+2} & c_{n_j+2} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{m-1} & b_{m-1} & c_{m-1} \\ 0 & & & & a_m & b_m \end{pmatrix}$$

Векторы $\mathbf{Z}_{n_i}^{\mathrm{R,L}}$ вычисляются однократно для множества различных правых частей **F**. Величины $\beta_{n_i}^{\mathrm{R,L}}$ вычисляются по формулам

$$\beta_{n_{i}}^{\mathrm{L}} = \sum_{j=n_{i-1}}^{n_{i}} \left(\mathbf{G}_{n_{i-1}} \right)_{j} \left(\mathbf{F} \right)_{j}, \quad \beta_{n_{i}}^{\mathrm{R}} = \sum_{j=n_{i-1}}^{n_{i}} \left(\mathbf{G}_{n_{i}} \right)_{j} \left(\mathbf{F} \right)_{j}, \quad (3.13)$$

$$A^{\mathrm{T}}\mathbf{G}_{k_i} = \mathbf{e}_{k_i}.\tag{3.14}$$

Доказательство. Пусть

$$\mathbf{X} = \sum_{j=1}^{p} \mathbf{X}_{j}, \qquad \mathbf{F} = \sum_{j=1}^{p} \mathbf{F}_{j}, \qquad (3.15)$$
$$A\mathbf{X}_{j} = \mathbf{F}_{j},$$

 $\mathbf{X}, \mathbf{X}_j, \mathbf{F}, \mathbf{F}_j \in \mathbb{R}^m$. Элементы вектора \mathbf{F}_j определим следующим образом:

$$(\mathbf{F}_{j})_{i} = \begin{cases} 0, & i < n_{j-1}, \\ (\mathbf{F})_{i}, & n_{j-1} \leq i < n_{j}, \\ 0, & i \geq n_{j}. \end{cases}$$
(3.16)

Тогда решения $(\mathbf{X}_j)_{n_j-1}, \ (\mathbf{X}_j)_{n_j}$ однозначно определяются выражениями

$$\left(\mathbf{X}_{j}\right)_{n_{j-1}} = \mathbf{G}_{n_{j-1}}^{T} \mathbf{F}_{j} = \beta_{n_{j}}^{\mathrm{L}}, \quad \left(\mathbf{X}_{j}\right)_{n_{j}} = \mathbf{G}_{n_{j}}^{T} \mathbf{F}_{j} = \beta_{n_{j}}^{\mathrm{R}}.$$
(3.17)

Определим $\left(\mathbf{X}_{j}\right)_{n_{k}}$ для $1 \leq k \leq j-2$ как

$$B_{n_j}^{\rm L} \mathbf{X}_j^{\rm L} = \beta_{n_j}^{\rm L} \mathbf{e}^{\rm L}, \quad \mathbf{X}_j^{\rm L} = \left(x_{jn_1}^{\rm L}, ..., x_{jn_2}^{\rm L}, ..., x_{jn_{j-2}}^{\rm L}, ..., x_{jn_{j-1}}^{\rm L} \right)^{\rm T}, \tag{3.18}$$

а для $j+1 \leq k \leq p$ – как

$$B_{n_j}^{\rm R} \mathbf{X}_j^{\rm R} = \beta_{n_j}^{\rm R} \mathbf{e}^{\rm R}, \quad \mathbf{X}_j^{\rm R} = \left(x_{jn_j}^{\rm R}, ..., x_{jn_{j+1}}^{\rm R}, ..., x_{jn_{p-1}}^{\rm R}, ..., x_{jn_p}^{\rm R} \right)^{\rm T}.$$
 (3.19)

Обозначая

$$\mathbf{Z}_{n_{i}}^{R} = \left(B_{n_{i}}^{R}\right)^{-1} \mathbf{e}^{R}, \quad \mathbf{Z}_{n_{i-1}}^{L} = \left(B_{n_{i-1}}^{L}\right)^{-1} \mathbf{e}^{L}, \quad (3.20)$$

приходим к общей формуле для вычисления $(\mathbf{X}_j)_{n_i}, i = 1, ..., p$:

$$\left(\mathbf{X}_{j}\right)_{n_{i}} = \begin{cases} \beta_{n_{j}}^{\mathrm{L}} \left(\mathbf{Z}_{n_{j}}^{\mathrm{L}}\right)_{n_{i}}, & i \leq j, \\ \beta_{n_{j}}^{\mathrm{R}} \left(\mathbf{Z}_{n_{j}}^{\mathrm{R}}\right)_{n_{i}}, & i > j. \end{cases}$$
(3.21)

Подставляя (3.21) в (3.15), приходим к выражению (3.11). Теорема доказана.

Теперь сформулируем алгоритм для вычисления отдельных компонент из вектора решений задачи (3.2).

Алгоритм 3.2. Для того чтобы вычислить M различных компонент вектора решения $(\mathbf{X})_{k_i}$, i = 1, ..., M для уравнения (3.2), следует:

1. Первый шаг.

1.1 Вычислить $\mathbf{G}_{k_i}, i = 1, ..., M$ из решения уравнения (3.14).

1.2 Вычислить $\mathbf{Z}_{k_i}^{\mathrm{R,L}}$ i = 1, ..., M из (3.12).

2. Второй шаг.

2.1 Вычислить $\beta_{k_i}^{\mathrm{R,L}}$ i = 1, ..., M на основе (3.13).

2.2 Вычислить $(\mathbf{X})_{k_i}$ i = 1, ..., M на основе (3.11).

Число арифметических действий из расчёта на один процессор для первого шага составит $24size{\mathbf{X}}M$, а для второго шага будет $(12size{\mathbf{X}}+M^2)/p$, соответственно. Перейдем к анализу эффективности рассмотренных алгоритмов, не принимая во внимание затраты на коммуникационные взаимодействия. Для этого введем в рассмотрение коэффициент ускорения (S_p) и оценку эффективности (F_p) : $S_p = T_1/T_p$, $F_p = S_p/p$, где T_1 – количество операций для решения уравнения (3.2) последовательным вариантом алгоритмом прогонки, а T_p – алгоритмом 3.2. Полагая $T_1 = 8m$, где m – число неизвестных, а $T_p = (12m + 2p^2)/p$, получаем $S = \frac{8mp}{12m+p^2}$. Из чего следует, что величина ускорения сначала монотонно возрастает с увеличение числа процессоров, а затем, начиная с некоторого $p > p_0$, монотонно убывает стремясь к нулю. Минимальное время решения задачи достигается при числе процессоров равном $p_0 = \max_p \left(\frac{8mp}{12m+p^2}\right) = \sqrt{6m}$, при этом величина ускорения будет $S_{\max} = \frac{\sqrt{6m}}{3}$. Таким образом, эффективность параллельного алгоритма 3.2 при максимально возможном ускорении составляет $\approx 30\%$. Остальные 70% вычислений приходятся на дополнительные операции для обеспечения параллелизма. Из (3.11) и (3.13) следует, что объём этих дополнительных вычислений имеет порядок $O(p^2)$, где p – число процессоров. В предлагаемом алгоритме, как и в алгоритме [60], время вычисления $first{\mathbf{U}_i}$ и $last{\mathbf{U}_i}$ элементов имеет линейную зависимость от числа процессоров. В алгоритме [60, 61] для вычисления $first\{\mathbf{U}_i\}$ и $last\{\mathbf{U}_i\}$ элементов необходимо решить трёхдиагональную систему линейных алгебраических уравнений с числом неизвестных равных числу процессоров. Авторы предлагают вычислять решение посредством последовательного варианта алгоритма прогонки, поэтому число дополнительных операций будет порядка O(p). Для повышения эффективности алгоритма 3.2 поставим задачу сократить число арифметических действий при реализации формулы (3.11).

3.2.2. Разделение системы линейных алгебраических уравнений на независимые подсистемы

Пусть необходимо вычислить компоненты вектора решения из (3.10). Полагая $p = 2^{p_0} - 1 \le m, \ p_0 > 0$, введем в рассмотрение множества

$$\Omega_{i} = \left\{ \left(\mathbf{X} \right)_{n_{j}} \left| \left(\mathbf{X} \right)_{n_{j}} \in \Omega, \ j = 2^{\lfloor \log_{2} p \rfloor + 1 - i} k, \ k = 1, ..., 2^{i} - 1 \right\} \setminus \left(\bigcup_{j=1}^{i-1} \Omega_{j} \right), \right.$$

где $i = 1, ..., \lfloor \log_2(p) \rfloor + 1$. При этом $\Omega = \bigcup_{i=1}^{\lfloor \log_2(p) \rfloor + 1} \Omega_i, \quad \Omega_i \bigcap \Omega_j = \{\emptyset\}, \ i \neq j.$

Теорема 3.3. Если компоненты вектора решения из множества $\Omega_j, \ j \ge 1$ и величины $\beta_{n_i}^{\text{R,L}}, \ \mathbf{Z}_{n_i}^{\text{R,L}}, \ i = 1, ..., p$ вычислены. Тогда для $\text{всех}(\mathbf{X})_{n_k} \in \Omega_w, \ j < < w \le \lfloor \log_2(p) \rfloor + 1$ справедлива формула

$$(\mathbf{X})_{n_{i}} = \sum_{j=k_{1}+1}^{i} \beta_{n_{j}}^{\mathrm{R}} \left(\mathbf{Z}_{n_{j}}^{\mathrm{R}} \right)_{n_{i}} + \sum_{j=i+1}^{k_{2}} \beta_{n_{j}}^{\mathrm{L}} \left(\mathbf{Z}_{n_{j-1}}^{\mathrm{L}} \right)_{n_{i}} + \delta_{k_{1}} + \delta_{k_{2}},$$
(3.22)
$$\delta_{k_{1}} = \begin{cases} 0, & k_{1} = 0, \\ (\mathbf{X})_{k_{1}} \left(\mathbf{Z}_{k_{1}}^{\mathrm{R}} \right)_{n_{i}} - (\mathbf{G}_{k_{1}+1})_{k_{1}} \left(\mathbf{F} \right)_{k_{1}} \left(\mathbf{Z}_{k_{1}+1}^{\mathrm{R}} \right)_{n_{i}}, \quad k_{1} > 0, \\ \delta_{k_{2}} = \begin{cases} 0, & k_{2} = p + 1, \\ (\mathbf{X})_{k_{2}} \left(\mathbf{Z}_{k_{2}}^{\mathrm{L}} \right)_{n_{i}}, \quad k_{2}$$

где k_1, k_2 определяются следующим образом

$$k_1 = \max_{t, t < i, (\mathbf{X})_{n_t} \in \left(\bigcup_{s=1}^j \Omega_s\right)} (0, n_t), \qquad k_2 = \min_{t, t > i, (\mathbf{X})_{n_t} \in \left(\bigcup_{s=1}^j \Omega_s\right)} (n_t, p+1).$$

Данное представление решения справедливо в силу того, что вычисленные компоненты из множества Ω_j разделяют систему уравнений независимые подсистемы. Решение каждой из подсистем может быть выражено как сумма общего решения однородного уравнения и частного неоднородного [21]. Сформулируем экономичный параллельный алгоритм для вычисления отдельных компонент из вектора решений.

Алгоритм 3.3. Алгоритм дихотомии. Для того чтобы вычислить M различных компонент вектора решения $(\mathbf{X})_{k_i}$, i = 1, ..., M для уравнения (3.2), необходимо выполнить:

1. Первый шаг

1.1 Найти $\mathbf{G}_{k_i}, i = 1, ..., M$ из решения уравнения (3.14).

1.2 Найти $\mathbf{Z}_{k_i}^{\mathrm{R,L}}, i = 1, ..., M$ из (3.12).

2. Второй шаг

2.1 Определить
 $\beta_{k_i}^{\rm R,L},\;i=1,...,M$ согласно (3.13) .

2.2 Вычислить в порядке возрастания индекса $j = 1, ..., \lfloor \log_2(p) \rfloor + 1$ компоненты вектора решений $(\mathbf{X})_{k_i}, \in \Omega_j$, используя (3.22).

3.2.3. Исследование устойчивости процесса разделения

Рассмотрим вопрос накопления вычислительной погрешности алгоритма дихотомии.

Теорема 3.4. Пусть матрица А имеет диагональное преобладание

$$|b_i| \ge |a_i| + |c_i|, \quad i = 2, ..., m - 1,$$
(3.23)

$$|b_1| \ge |c_1|, \quad |b_m| \ge |a_m|,$$
 (3.24)

причём хотя бы для одного из неравенств (3.23) или (3.24) выполняется строгое неравенство, тогда алгоритм дихотомии будет вычислительно устойчив.

Доказательство. Если матрица A имеет диагональное преобладание, то матрицы $B_k^{\text{R},\text{L}}$ также будут иметь диагональное преобладание. Следуя алгоритму прогонки, решение системы $B_k^{\text{R}} \mathbf{Z}_k^{\text{R}} = \mathbf{e}^{\text{R}}$ может быть записано в виде $(\mathbf{Z}_k^{\text{R}}) = \prod_{i=k}^{i+1} \alpha_i, i=1,...,k-1$. Из условий (3.23) и (3.24) следует неравенство $|\alpha_i| \leq 1$

для прогоночных коэффициентов, и справедлива следующая оценка $|(\mathbf{Z}_{k}^{\mathrm{R}})_{i}| = |\prod_{i=k}^{i+1} \alpha_{i}| \leq 1$. Аналогично образом доказывается, что $|(\mathbf{Z}^{\mathrm{L}})_{i}| \leq 1$. Тогда из формулы (3.22) следует устойчивость алгоритма дихотомии.

Алгоритм дихотомии не накладывает никаких ограничений на способ расчёта векторов $\mathbf{Z}_{k}^{\mathrm{R,L}}$. Предполагается, что алгоритм для расчёта вспомогательных векторов $\mathbf{Z}_{k}^{\mathrm{R,L}}$ в случае выполнения условия (3.23), (3.24) будет устойчив и обеспечивает требуемую точность. Для системы линейных алгебраических уравнений размерности от двух до тридцати двух тысяч с тёплицевой матрицей tridiag{..., 1, -2, 1, ...} и правой части вида $\mathbf{F} = (-1, 0, 0, ..., -1)^{\mathrm{T}}$ проведены вычислительные эксперименты с целью определения зависимости точности получаемого решения от размерности системы линейных алгебраических уравнений и числа процессоров. На рис. 3.3 приведена зависимость величины абсолютной погрешности || $\tilde{\mathbf{X}} - \mathbf{X} \parallel_{C}$ от размерности системы линейных алгебраических уравнений, где $\tilde{\mathbf{X}}$ – численное решение.



(а) Для расчётов с одинарной точностью

(б) Для расчётов с двойной точностью

Рис. 3.3. Зависимость абсолютной погрешности от размерности системы линейных алгебраических уравнений

Видно, что с ростом размерности системы линейных алгебраических уравнений абсолютная погрешность увеличивается, что согласуется с результатами, полученными в [30, 33]. В результате сравнения решений, полученных на основе предлагаемого алгоритма с решением, вычисленного с использованием последовательного варианта метода прогонки, установлено, что разница между решениями находится на уровне ошибок округления. Таким образом, предлагаемый алгоритм не увеличивает погрешность вычислений, а численная погрешность в большей степени определяется точностью вычисления величин $\mathbf{Z}_{k}^{\mathrm{R,L}}, \mathbf{G}_{k}$, а также точностью решения локальных систем на заключительном шаге.

3.2.4. Оценки вычислительной сложности

Рассмотрим вопрос о вычислительной сложности предлагаемых алгоритмов без учёта затрат, необходимых для реализации межпроцессорных взаимодействий. На каждом уровне процесса разделения трёхдиагональная система линейных алгебраических уравнений, получаемая на предыдущем шаге на основе вычисления решений в $first{\mathbf{U}_i}$, $last{\mathbf{U}_i} - компонентах$ (рис. 3.1), разделяется на три независимых подсистемы меньших размерностей (рис. 3.4).

На первом уровне процесса разделения вычисляются две компоненты из вектора решения

$$(\mathbf{X})_{m_L} \equiv first\{\mathbf{U}_i\}, \quad (\mathbf{X})_{m_R} \equiv last\{\mathbf{U}_i\}, \quad (3.25)$$

расположенные на *i*-ом процессоре. После вычисление этих компонентов исходная система $A\mathbf{X} = \mathbf{F}$ может быть заменена на следующие подзадачи

$$\{A\}_{1}^{m_{L}-1} \{\mathbf{X}\}_{1}^{m_{L}-1} = \{\mathbf{F}\}_{1}^{m_{L}-1} - c_{m_{L}-1}\mathbf{e}^{\mathrm{L}}last\{\mathbf{U}_{i}\}, \qquad (3.26)$$

$$\{A\}_{m_{L}+1}^{m_{R}-1} \begin{pmatrix} x_{m_{L}+1} \\ x_{m_{L}+2} \\ \dots \\ x_{m_{R}-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{m_{L}+1} - a_{m_{L}+1} first\{\mathbf{U}_{i}\} \\ f_{m_{L}+2} \\ \dots \\ f_{m_{L}+2} \\ \dots \\ f_{m_{R}-1} - c_{m_{R}-1} last\{\mathbf{U}_{i}\} \end{pmatrix}, \qquad (3.27)$$

$$\{A\}_{m_{R}+1}^{m} \{\mathbf{X}\}_{m_{R}+1}^{m} = \{\mathbf{F}\}_{m_{R}+1}^{m} - a_{m_{R}+1}\mathbf{e}^{\mathrm{R}}first\{\mathbf{U}_{i}\},$$
(3.28)
$$\mathbf{e}^{\mathrm{R}} = (1, 0, 0, ..., 0)^{\mathrm{T}}, \ \mathbf{e}^{\mathrm{L}} = (0, ..., 0, 0, 1)^{\mathrm{T}}.$$



Рис. 3.4. Разделение трёхдиагональной системы линейных алгебраических уравнений на независимые подсистемы меньших размерностей

Аналогичным образом на втором уровне разделяются подсистемы (3.26) и (3.28). Выполнив $\lceil \log_2 p \rceil$ шагов, исходная система линейных алгебраических уравнений (3.2) будет разделена на независимые подсистемы вида (3.27), которые могут быть решены посредством алгоритма прогонки [33, 70] за O(m/p) арифметических операций.

Процесс вычисления $first{\mathbf{U}_i}$, $last{\mathbf{U}_i}$ компонент состоит из двух этапов: подготовительного, который выполняется один раз для всех правых частей (3.2) и процесса разделения систем, на котором вычисляются решения для каждой правой части.

На подготовительном этапе на i-ом процессоре локально без коммуникационных взаимодействий вычисляются две строки матрицы A^{-1}

$$A^{\mathrm{T}}\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{L}} = \mathbf{e}_{m_{L}}, \quad A^{\mathrm{T}}\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{R}} = \mathbf{e}_{m_{R}}, \tag{3.29}$$

где m_L, m_R определены в (3.25), а \mathbf{e}_k – орт-вектор. Дополнительно на подгото-

вительном этапе вычисляются два вектора

$$\mathbf{Z}_{i}^{\mathrm{L}} = \left(z_{1}^{\mathrm{L}}, z_{2}^{\mathrm{L}}, ..., z_{m_{L}-1}^{\mathrm{L}}, 1\right)^{\mathrm{T}},$$

$$(3.30)$$

$$\mathbf{Z}_{i}^{\mathrm{R}} = \left(1, z_{m_{R}+1}^{\mathrm{R}}, \dots, z_{m-1}^{\mathrm{R}}, z_{m}^{\mathrm{R}}\right)^{\mathrm{T}},$$

где компоненты векторов определяются из решения систем

$$\{A\}_{1}^{m_{L}-1} \left\{\mathbf{Z}^{\mathrm{L}}\right\}_{1}^{m_{L}-1} = -c_{m_{L}-1}\mathbf{e}^{\mathrm{L}}, \qquad (3.31)$$

$$\{A\}_{m_R+1}^m \left\{\mathbf{Z}^{\mathbf{R}}\right\}_{m_R+1}^m = -a_{m_R+1}\mathbf{e}^{\mathbf{R}}.$$
(3.32)

Таким образом, затраты подготовительных вычислений алгоритма дихотомии будут O(m), где m – размерность системы линейных алгебраических уравнений. Откуда следует, что алгоритм дихотомии следует применять для решения нескольких систем линейных алгебраических уравнений с постоянной матрицей и различными правыми частями, так как в этом случае подготовительными вычислениями можно пренебречь.

Как и в алгоритме [60, 186, 246], в основе алгоритма дихотомии лежит принцип суперпозиции [21], согласно которому векторы решений выражаются следующим образом

$$(\mathbf{X})_{k} = \begin{cases} \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{j}^{\mathrm{R}} \left(\mathbf{Z}_{j}^{\mathrm{R}} \right)_{k} + \sum_{j=i}^{p} \beta_{j}^{\mathrm{L}} \left(\mathbf{Z}_{j}^{\mathrm{L}} \right)_{k}, & (\mathbf{X})_{k} = first\{\mathbf{U}_{i}\}, \\ \sum_{j=1}^{i} \beta_{j}^{\mathrm{R}} \left(\mathbf{Z}_{j}^{\mathrm{R}} \right)_{k} + \sum_{j=i+1}^{p} \beta_{j}^{\mathrm{L}} \left(\mathbf{Z}_{j}^{\mathrm{L}} \right)_{k}, & (\mathbf{X})_{k} = last\{\mathbf{U}_{i}\}, \end{cases}$$

$$\beta_{i}^{\mathrm{L}} = \sum_{j=m_{L}}^{m_{R}} \left(\mathbf{F} \right)_{j} \left(\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{L}} \right)_{j}, & \beta_{i}^{\mathrm{R}} = \sum_{j=m_{L}}^{m_{R}} \left(\mathbf{F} \right)_{j} \left(\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{R}} \right)_{j}, \end{cases}$$

$$(3.33)$$

где индексы m_R, m_L определяются локально согласно (3.25). Вычисление сумм на суперкомпьютере [14, 46] может быть реализовано с большей эффективностью, чем алгоритм исключения Гаусса, который требует многочисленных синхронизаций вычислений вследствие фиксированного порядка исключения неизвестных. Алгоритм дихотомии на практике демонстрирует более высокую масштабируемость для задач (3.2), чем алгоритм [60, 186, 246], который требует решения редуцированной системы линейных алгебраических уравнений размерности *p*.

3.2.5. Реализация процесса разделения на суперЭВМ

На рис. 3.5 рассмотрена MPI–реализация формулы (3.33) для разделения системы (3.2). Так как векторы $\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{R,L}}, \mathbf{Z}_{i}^{\mathrm{R,L}}$ уже вычислены на подготовительном



Рис. 3.5. Реализация процесса разделения на основе интерфейся передачи сообщений MPI)

этапе, поэтому на первом шаге процесса разделения каждый процессор вычисляет две локальные величины $\beta_i^{\rm R,L}$, где i – номер процессора. Арифметические затраты на этом шаге для каждого процессора составят $O(size{\mathbf{U}_i})$. В процессе разделения систем величины $\beta_i^{\mathrm{R,L}}$ перевычисляются за число операций порядка O(1).

На первом уровне процесса разделения (рис. 3.5), включающем шаги: 2.1–2.2–2.3, вычисляются две компоненты (3.25) с использованием представления (3.33) следующим образом.

На шаге 2.1 посредством вызова коллективной функций *mpi_Reduce* над коммуникаторами Comm₁, Comm₂ вычисляются величины

$$\xi^{\mathrm{R}} = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{j}^{\mathrm{R}} \left(\mathbf{Z}_{j}^{\mathrm{R}} \right)_{m_{L}}, \quad \xi^{\mathrm{L}} = \sum_{j=i+1}^{p} \beta_{j}^{\mathrm{L}} \left(\mathbf{Z}_{j}^{\mathrm{L}} \right)_{m_{R}}. \tag{3.34}$$

На шаге 2.2 процессор i - 1 посылает процессору i величину ξ^{R} , а процессор i + 1 – величину ξ^{L} . Откуда искомые компоненты, расположенные на i-ом процессоре, могут быть вычислены как

$$(\mathbf{X})_{m_{L}} = \xi^{\mathrm{R}} + \xi^{\mathrm{L}} \frac{(\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{L}})_{m_{R}}}{(\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{R}})_{m_{R}}} + \beta_{i}^{\mathrm{L}}, \quad (\mathbf{X})_{m_{R}} = \xi^{\mathrm{R}} \frac{(\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{R}})_{m_{L}}}{(\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{L}})_{m_{L}}} + \xi^{\mathrm{L}} + \beta_{i}^{\mathrm{R}}.$$

Для того чтобы исключить вычисленные компоненты из системы уравнений, процессор с номером *i* передаёт процессору i - 1 величину $(\mathbf{X})_{m_L}$, а процессору i+1 величину $(\mathbf{X})_{m_R}$, соответственно. На шаге 2.3 модифицируется вектор правой части системы линейных алгебраических уравнений (3.26), (3.27) и (3.28), а на процессорах с номерами i - 1, i + 1 определяются величины

$$\hat{\beta}_{i-1}^{\rm L} = \beta_{i-1}^{\rm L} - c_{m_L-1} \left(\mathbf{X} \right)_{m_L}, \quad \hat{\beta}_{i+1}^{\rm R} = \beta_{i+1}^{\rm R} - a_{m_R-1} \left(\mathbf{X} \right)_{m_R}. \tag{3.35}$$

На следующем уровне процесс разделения применяется к подсистемам (3.26) и (3.28), где вместо β_{i-1}^{L} , β_{i+1}^{R} используются величины $\hat{\beta}_{i-1}^{L}$, $\hat{\beta}_{i+1}^{R}$. Шаги с номерами $s.1, s.2, s.3, (s = 1, 2, ..., \lceil \log_2 p \rceil)$ будут аналогичны шагам 2.1, 2.2, 2.3, однако на *s*-ом уровне разделяются 2^{s-1} независимых систем, полученных на предыдущем шаге.

По сравнению с алгоритмом циклической редукции алгоритм дихотомии позволяет достичь более высокой масштабируемостью в силу меньших времен-

ных затрат, необходимых для синхронизации вычислений и межпроцессорную пересылку данных. Сокращение времени коммуникации возможно благодаря тому, что основная операция алгоритма дихотомии – это операция суммирования над распределёнными данными, которая обладает свойством ассоциативности (несмотря на то что для конечной вещественной арифметики это свойство для операции сложения нарушается, как правило, при реализации параллельных процедур для вычисления сумм порядок суммирования величин не оговаривается и определятся библиотекой MPI). Архитектура современных суперкомпьютеров такова, что время парных взаимодействий для различных процессоров может отличаться на несколько порядков. Ассоциативность вычислений позволяет на программном уровне определить порядок взаимодействий процессоров таким образом, чтобы минимизировать время обменов данными. Сокращение времени межпроцессорных обменов не является достаточным условием эффективности параллельного алгоритма, так как необходимо учитывать наличие синхронизации вычислений. Часто возникает ситуация, когда бо́льшая часть процессоров ожидает результатов вычисления от нескольких, что приводит к снижению общей производительности из-за простоев вычислительных ресурсов. В контексте алгоритма дихотомии проблема минимизации времени синхронизации решена следующим образом. Во-первых, с увеличением номера уровня дихотомии число групп взаимодействующих процессоров увеличивается, однако число процессоров в них уменьшается, а следовательно и время межпроцессорных обменов. Во-вторых, алгоритм дихотомии практически не требует синхронизировать вычисления при переходе с одного уровня дихотомии на другой (особенно на первых уровнях, где число коммуникаций максимально). Для того чтобы начать процесс разделения системы уравнений на s+1 уровне дихотомии, необходимо предварительно модифицировать величины (3.35) на шаге s.3. Однако процессоры, которые не пересчитывают величины $\hat{\beta}_i^{\mathrm{R,L}}$ на шаге s.3, могут начать суммирование ряда (3.34) на шаге (s+1).1, не дожидаясь результата предыдущих шагов. Таким образом, шаги s.2, s.3 и (s+1).1 на большинстве процессоров могут выполняться с высокой степенью параллелизма.

3.2.6. Решение систем линейных алгебраических уравнений с тёплицевыми матрицами

Трёхдиагональные системы линейных алгебраических уравнений с тёплицевыми матрицами [15, 33, 77] вида $T = \text{tridiag}\{..., t_{-1}, t_0, t_1, ...\}$ возникают при реализации многих численных алгоритмов, разработанных для решения уравнений в частных производных: неявный метод переменных направлений, метод разделения переменных, метод циклической редукции, а также в задачах построения сплайнов [12, 25, 62]. На данный момент существуют несколько вариантов алгоритмов параллельной прогонки для тёплицевых матриц [187, 220, 251]. Преимущество алгоритма дихотомии состоит в том, что он не только теоретически, но и на практике позволяет достигать тысячекратной величины ускорения для решения задачи (3.2). В рамках дальнейшего развития данного подхода в диссертации рассмотрен параллельный алгоритм для решения не только серии задач, но и системы линейных алгебраических уравнений с тёплицевыми трёхдиагональными матрицами для одной правой части.

Как было сказано ранее, реализацию процесса дихотомии систем линейных алгебраических уравнений на независимые подсистемы на параллельной вычислительной системе можно рассматривать как решение двух отдельных подзадач. Первая подзадача – это минимизация числа арифметических действий при расчёте вспомогательных векторов $\mathbf{Z}_{i}^{\mathrm{R,L}}$, $\mathbf{G}_{i}^{\mathrm{R,L}}$, а вторая – минимизация времени коммуникаций и синхронизаций при реализация формулы (3.33).

Для того чтобы эффективно решать системы линейных алгебраических уравнений с трёхдиагональными тёплицевыми матрицами для единственной правой части, сократим число арифметических действий на подготовительном этапе алгоритма дихотомии. Очевидно, что модификации второго этапа алгоритма дихотомии не потребуется, так как после вычисления вспомогательных векторов процесс разделения систем одинаков для всех трёхдиагональных мат-

риц.

Пусть необходимо решить систему линейных алгебраических уравнений $T\mathbf{Y} = \mathbf{F}, T \in \mathbb{R}^{m \times m}$, тогда *n*-ая компонента из вектора решения может быть определена как [21, 70]

$$y_n = \sum_{k=1}^{n-1} \frac{(q_1 q_2)^{n-k} (q_2^{m+1-n} - q_1^{m+1-n}) (q_2^k - q_1^k)}{(q_2 - q_1) (q_2^{m+1} - q_1^{m+1})} \cdot \frac{f_k}{t_1} + \sum_{k=n}^{m} \frac{(q_2^{m+1-k} - q_1^{m1-k}) (q_2^n - q_1^n)}{(q_2 - q_1) (q_2^{m+1} - q_1^{m+1})} \cdot \frac{f_k}{t_1},$$
$$q_1 = \frac{-t_0 + \sqrt{t_0^2 - 4t_{-1}t_1}}{2t_1}, \quad q_2 = \frac{-t_0 - \sqrt{t_0^2 - 4t_{-1}t_1}}{2t_1}.$$

Решение не существует лишь в случае, когда $q_1^{m+1} = q_2^{m+1}$, но $q_1 \neq q_2$. Учитывая, что правые части в (3.29) и (3.31), (3.32) содержат единственную ненулевую компоненту, для вычисления одной компоненты из векторов $\mathbf{Z}_i^{\mathrm{R,L}}$, $\mathbf{G}_i^{\mathrm{R,L}}$ потребуется O(1) арифметических действий. Таким образом, на подготовительном этапе как и на этапе разделения системы линейных алгебраических уравнений необходимо будет выполнить порядка $O(m/p + \log_2 p)$ арифметических действий. Это позволяет применить алгоритм дихотомии для однократного обращения тёплицевых трёхдиагональных матриц. Если для некоторой трёхдиагональной матрицы можно экономично вычислять отдельную компоненту из векторов $\mathbf{Z}_i^{\mathrm{R,L}}$, $\mathbf{G}_i^{\mathrm{R,L}}$, то можно эффективно решать как серию, так и одну задачу.

Расчёт векторов G,Z на основе Чебышевских многочленов

Часто при решении первой краевой задачи для уравнения Пуассона необходимо решить серию уравнений вида

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + \lambda_k y_i = -f_i, \ \lambda_k \in R \quad 1 \le i \le m-1, \quad k = 1, ..., M,$$

$$y_0 = \mu_1, \quad y_m = \mu_2.$$
 (3.36)

Рассмотрим экономичный алгоритм для расчёта компонент векторов $\mathbf{Z}_{i}^{\text{R,L}}, \mathbf{G}_{i}^{\text{R,L}}$ для проблемы (3.36), решение которой может быть записано в виде [33, 70]

$$y_n = \frac{U_{m-n-1}(x)}{U_{m-1}(x)} \left[\mu_1 + \sum_{k=1}^{n-1} U_{k-1}(x) f_k \right] + \frac{U_{n-1}(x)}{U_{m-1}(x)} \left[\mu_2 + \sum_{k=n}^{m-1} U_{m-k-1} f_k \right],$$

где $x = 1 - h^2 \lambda/2 \neq \cos \frac{k\pi}{m}$, k = 1, 2, ..., m - 1, а $U_n(x)$ – полином Чебышева второго рода степени n [73]. Принимая во внимание (3.25), компоненты вектора $\mathbf{Z}^{\mathrm{R,L}}$ решения задач (3.32) и (3.31) на m-ом процессоре будут иметь вид

$$z_j^{\mathrm{R}} = \frac{U_{m-j-1}(x)}{U_{m-m_R^{-1}}(x)}, \quad m_R \le j \le N; \quad z_j^{\mathrm{L}} = \frac{U_{j-1}(x)}{U_{m_L^{-1}}(x)}, \quad 1 \le j \le m_L.$$
 (3.37)

Тогда как решение задачи (3.29) для компонент вектора **G**^{R,L} определяется формулами

$$g_{j}^{\mathrm{L}} = \frac{U_{m-j-1}(x)}{U_{m-1}(x)} U_{m_{L}-1}(x), \quad m_{L} \le j \le m_{R}; \quad g_{j}^{\mathrm{R}} = \frac{U_{j-1}(x)}{U_{m-1}(x)} U_{m-m_{R}-1}(x), \quad m_{L} \le j \le m_{R}.$$
(3.38)

Значения полиномов Чебышева $U_n(x), x \in \mathbb{R}$ вне интервала [-1, 1] начинают быстро возрастать с ростом n, поэтому при программной реализации формул (3.37) и (3.38) в случае |x| > 1 возможна ситуация переполнения вещественной переменной. Для преодоления этой трудности поступим следующим образом. Пусть N_0 – степень полинома, выше которого величина $U_n(x), \forall n > N_0, |x| > 1$ вычислена быть не может из-за выхода результата за границу допустимых значений вещественной переменной. Для полинома Чебышева второго рода справедливо представление [73]

$$U_n(x) = \frac{1}{2\sqrt{x^2 - 1}} \left[\left(x + \sqrt{x^2 - 1} \right)^{n+1} - \left(x + \sqrt{x^2 - 1} \right)^{-(n+1)} \right], \quad |x| \ge 1.$$
(3.39)

Тогда $\forall n > N_0$ имеет место соотношение

$$\left(x + \sqrt{x^2 - 1}\right)^{-(n+1)} \ll \left(x + \sqrt{x^2 - 1}\right)^{(n+1)},$$
 (3.40)

откуда $\forall n > N_0$ можем с требуемой точностью можем полагать

$$U_n(x) \simeq \frac{1}{2\sqrt{x^2 - 1}} \left(x + \sqrt{x^2 - 1} \right)^{n+1}.$$
 (3.41)

Подставляя (3.41) в (3.38) и приводя подобные слагаемые, получаем

$$g_j^{\rm L} \simeq \frac{1}{2\sqrt{x^2-1}} \left[\eta^{(m_L-j)} + \eta^{(-2N-j+m_L)} - \eta^{(-2N+m_L+j)} - \eta^{(-m_L-j)} \right], \quad j \ge m_L,$$

$$g_j^{\rm R} \simeq \frac{1}{2\sqrt{x^2 - 1}} \left[\eta^{(j - m_R)} + \eta^{(-2N + j - m_R)} - \eta^{(-2N + m_R + j)} - \eta^{(-j - m_R)} \right], \quad j \le m_R,$$
(3.42)

где $\eta = x + \sqrt{x^2 - 1}$. Так как показатели степеней в (3.42) всегда меньше или равны нулю и |x| > 1, то ситуация переполнения переменных исключается. При решении трёхдиагональных систем размерности меньше N_0 , вычисления компонент вспомогательных векторов следует проводить по формулам (3.37) и (3.38), (3.39), чтобы избежать потери точности из-за возможного нарушения условия (3.40). Для |x| < 1 справедлива оценка $U_n(x) \le n+1$, тогда при условии $x \ne \cos \frac{n\pi}{m}$, n = 1, 2, ..., m - 1 переполнения переменных не возникнет.

Как было показано выше, достаточное условие устойчивости алгоритма дихотомии состоит в наличии диагонального преобладания для матрицы системы линейных алгебраических уравнений

$$|b_i| \ge |a_i| + |c_i|, \quad i = 2, ..., N - 1,$$

 $|b_1| \ge |c_1|, \quad |b_N| \ge |a_N|,$

при этом хотя бы для одного из неравенств выполняется строгое неравенство. Для задачи (3.36) в случае $\lambda \leq 0$ матрица системы линейных алгебраических уравнений имеет строгое диагональное преобладание, что гарантирует устойчивость алгоритма дихотомии. Однако при $\lambda > 0$ диагональное преобладание отсутствует, что может привести к накоплению ошибок округления. Это следует из того, что значения компонент векторов $\mathbf{Z}_m^{\mathrm{R},\mathrm{L}}$ в силу невыполнения принципа максимума могут быть по модулю больше единицы. В этом случае погрешность вычисления $first{\mathbf{U}_i}$, $last{\mathbf{U}_i}$ -компонент, возникшая на s-ом уровне дихотомии, переносится на уровень s+1 в результате использования формулы (3.35), а затем увеличивается из-за умножения на величину $|\mathbf{Z}_m^{\mathrm{R,L}}| \leq \gamma$ в (3.22). Таким образом, если число уровней дихотомии будет большим, и величина γ больше единицы, то потеря точности вероятна. Если принять оценку $\varepsilon_i = \prod_{j=1}^l \left| \left(\mathbf{Z}_{n_j}^{\mathrm{R,L}} \right)_i \right| \varepsilon \leq \gamma^l \varepsilon$ за максимальную величину ошибки расчёта компоненты $(\mathbf{X})_i$, где l – номер шага дихотомии на котором будет вычислена искомая компонента, ε – величина начальной ошибки. Тогда для p = 4096, l = 12при $\gamma \leq 3$ ошибка вычислений в самом неблагоприятном случае возрастёт на



Рис. 3.6. Компоненты вспомогательного вектора $\mathbf{Z}_2^{\mathrm{R}}$ для N = 8192, p = 4 для положительных и отрицательных значений λ для уравнения (3.36)

шесть порядков, что для многих задач допустимо. Таким образом, для $\gamma > 1$ необходимо проводить как априорный, так и апостериорный контроль точности получаемого решения.

3.3. Параллельные алгоритмы для решения систем линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами

При реализации многих численных методов требуется решать системы линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами [70] вида

$$P\mathbf{X} = \begin{pmatrix} C_1 & -B_1 & & 0 \\ -A_2 & C_2 & -B_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -A_{N-1} & C_{N-1} & -B_{N-1} \\ 0 & & & -A_N & C_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{X}}_1 \\ \bar{\mathbf{X}}_2 \\ \dots \\ \bar{\mathbf{X}}_{N-1} \\ \bar{\mathbf{X}}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{F}}_1 \\ \bar{\mathbf{F}}_2 \\ \dots \\ \bar{\mathbf{F}}_{N-1} \\ \bar{\mathbf{F}}_N \end{pmatrix} = \mathbf{F},$$
(3.43)

где $A_j, B_j, C_j \in \mathbb{R}^{M \times M}, \ \bar{\mathbf{X}}_j, \bar{\mathbf{F}}_j \in \mathbb{R}^M$. В рамках диссертационной работы на основе модификации алгоритма дихотомии рассмотрим параллельный алгоритм для решения задачи (3.43).

Разделение системы линейных алгебраических уравнений на независимые подсистемы

Сформулируем элементарный шаг процесса дихотомии для разделения системы (3.43) на две независимые подзадачи посредством вычисления элемента $\bar{\mathbf{X}}_{K}$.

Алгоритм 3.4. Для решения систем линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами необходимо выполнить:

- 1. Вычислить строки матрицы P_{i}^{-1} , с номерами где i = (K-1)M + 1, (K 1)M + 2, ..., KM.
- 2. Вычислить подвектор

$$\bar{\mathbf{X}}_{K} = \left(P_{(K-1)M+1}^{-1} \cdot \mathbf{F}, P_{(K-1)M+2}^{-1} \cdot \mathbf{F}, ..., P_{KM}^{-1} \cdot \mathbf{F} \right)^{\mathrm{T}}.$$

 Перейти от системы (3.43) к двум независимым подсистемам вида путём модификации правой части

$$\{P\}_{1}^{(K-1)M} \{\mathbf{X}\}_{1}^{(K-1)M} = \{\mathbf{F}\}_{1}^{(K-1)M} + \mathbf{e}^{\mathbf{R}} \otimes (B_{K-1}\bar{\mathbf{X}}_{K}), \ K > 1, \quad (3.44a)$$

$$\{P\}_{KM+1}^{NM} \{\mathbf{X}\}_{KM+1}^{NM} = \{\mathbf{F}\}_{KM+1}^{NM} + \mathbf{e}^{\mathbf{L}} \otimes \left(A_{K+1}\bar{\mathbf{X}}_{K}\right), \ K < N.$$
(3.44b)

Далее аналогичная процедура применяется к независимым подзадачам (3.44а) и (3.44b). Таким образом, за $\lceil \log_2 N \rceil$ шагов все компоненты из вектора решения будут вычислены. Строки обратной матрицы в процессе расчёта запоминаются и для каждой правой части не перевычисляются. В итоге алгоритм дихотомии

позволяет вычислить произведение матрицы P^{-1} на вектор правой части за $O(M^2N\log_2 N)$ арифметических действий, тогда как непосредственное умножение потребует $O(M^2N^2)$ операций. Экономия числа арифметических действий достигается за счёт того, что в алгоритме дихотомии при умножении матрицы P^{-1} на вектор используется информация о структуре матрицы P.

На этом рассмотрение вопроса о решении задачи (3.43) посредством алгоритма дихотомии можно было бы завершить, если бы не одна существенная трудность: на подготовительном этапе алгоритма дихотомии требуется выполнить $O(M^3N)$ арифметических действий для вычисления строк матрицы P^{-1} [70]. Такие арифметические затраты для больши́х значение M и N могут стать неприемлемыми. Более того, на каждом процессоре потребуется $3M^2N$ ячеек оперативной памяти для хранения копии матрицы P. Использование суперкомпьютера подразумевает решение систем линейных алгебраических уравнений высоких порядков, поэтому необходимо уменьшить требуемый объём оперативной памяти и минимизировать время подготовительных вычислений, в противном случае алгоритм дихотомии на практике невозможно будет применить.

Оптимизация подготовительных затрат алгоритма дихотомии

В алгоритме 3.4 рассмотрена основная идея разделения систем линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами. Если число процессоров больше порядка матрицы, тогда вводятся вспомогательные величины $\beta^{R,L}$, $\mathbf{Z}^{R,L}$. Однако такой подход для блочных трёхдиагональных систем чрезвычайно затратен, так как его реализация требует решения исходной системы линейных алгебраических уравнений на каждом процессоре. Покажем, как можно преодолеть эту трудность.

В работах [60, 186] на основе принципа суперпозиции предложен параллельный алгоритм для решения трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений. Основная идея состоит в том, что исходная система линейных алгебраических уравнений редуцируется к системе с трёхдиагональной мат-

рицей порядка p, где p – число процессоров. Для того чтобы вычислить матрицу редуцированной системы уравнений, предварительно на каждом процессоре необходимо решить локальные подсистемы уравнений размерности \tilde{N}/p , где \tilde{N} – размерность трёхдиагональной системы линейных алгебраических уравнений. После решения редуцированной системы уравнений все компоненты из вектора решения вычисляются независимо на каждом процессоре. Аналогичный подход для системы линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами рассмотрен в работах [2, 3] и состоит в следующем. Решение исходной системы уравнений выражается через Mp неизвестных компонент (рис. 3.7) из вектора решения

$$\bar{\mathbf{X}}_{i} = \left(\mathbf{U}_{i}^{1}\mathbf{U}_{i}^{2}...\mathbf{U}_{i}^{M}\right)\bar{\mathbf{X}}_{K} + \left(\mathbf{V}_{i}^{1}\mathbf{V}_{i}^{2}...\mathbf{V}_{i}^{M}\right)\bar{\mathbf{X}}_{K+L} + \mathbf{W}_{i} = U_{i}\bar{\mathbf{X}}_{K} + V_{i}\bar{\mathbf{X}}_{K+L} + \mathbf{W}_{i},
K = 1, L + 1, 2L + 1, ..., (p - 1)L + 1; \quad i \in [K, K + L); \quad L = N/p,
\bar{\mathbf{X}}_{N+1} = 0,$$
(3.45)

где матрицы $U_i, V_i \in \mathbb{R}^{M \times M}$ и вектор \mathbf{W}_i определяются из решения подзадач

$$-A_i \mathbf{W}_{i-1} + C_i \mathbf{W}_i - B_i \mathbf{W}_{i+1} = \bar{\mathbf{F}}_i, \quad \mathbf{W}_K = \mathbf{0}, \quad \mathbf{W}_{K+L} = \mathbf{0}, \quad (3.47)$$

где $i = K + 1, ..., K + M - 1, \mathbf{e}_n$ – орт вектор в пространстве \mathbb{R}^{M} .

Из (3.43) и (3.45) получаем, что значения компонент $\mathbf{\bar{X}}_{K}$, K=1, 2L+1, 3L++ 1, ..., (p-1)L+1 могут быть определены из решения системы векторных

Рис. 3.7. Элементы из вектора решения, "разделяющие" исходную систему уравнений на независимые подзадачи

уравнений

$$\begin{cases} -[A_{K}U_{K-1}]\bar{\mathbf{X}}_{K-L} + [C_{K} - A_{K}V_{K-1} - B_{K}U_{K+1}]\bar{\mathbf{X}}_{K} - [B_{K}V_{K+1}]\bar{\mathbf{X}}_{K+L} = \\ =\mathbf{F}_{K} + A_{K}\mathbf{W}_{K-1} + B_{K}\mathbf{W}_{K+1}, \qquad K = 1, L+1, 2L+1..., (p-1)L+1, \\ U_{0} = V_{0} = \mathbf{0}. \end{cases}$$

$$(3.48)$$

Обозначим систему (3.48) как $\tilde{P}\tilde{\mathbf{X}} = \tilde{\mathbf{F}}$. Для решения системы (3.48) алгоритм дихотомии может быть применен более эффективно, чем для решения системы (3.43). Это возможно благодаря тому, что редуцированная система (3.48) имеет размерность Mp, тогда как размерность исходной задачи (3.43) составляет MN, где N > p. В итоге требуется меньше время счёта для подготовительного этана алгоритма дихотомии и меньший объём оперативной памяти ($3M^2N$ против $3M^2p$). В работах [2, 4] показано, что, если матрица системы (3.43) имеет диагональное преобладание, и алгоритм матричной прогонки устойчив, то система (3.48) также имеет диагональное преобладание, что в свою очередь гарантирует устойчивость алгоритма дихотомии. Таким образом, вместо алгоритма 3.4 следует использовать следующий алгоритм.

Алгоритм 3.5. Для решения систем линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами необходимо выполнить:

1. Первый шаг

1.1 На каждом процессоре независимо решить подзадачи (3.46a) и (3.46b).

1.2 Вычислить и передать всем процессорам элементы матрицы \tilde{P} из (3.48).

1.3 На каждом процессоре вычислить необходимые строки матрицы \tilde{P}^{-1} из (3.48).

2. Второй шаг

2.1 На каждом процессоре независимо решить подсистему (3.47).

2.2 Решить систему (3.48) посредством алгоритма дихотомии.

2.3 В соответствии с (3.45) вычислить все компоненты из вектора решения.

На первом шаге алгоритма 3.5 необходимо решить подсистемы (3.46*a*) и (3.46*b*). На этом шаге вычислительные затраты будут порядка $O(M^3 N/p)$ арифметических действий. Для решения системы (3.48) используется алгоритм 3.4, поэтому необходимо вычислить строки матрицы \tilde{P}^{-1} . Для вычисления *i*-ой строки матрицы \tilde{P}^{-1} на каждом процессоре решалась система линейных алгебраических уравнений вида $\tilde{P}^T \mathbf{x} = E_{.i}$, где $E_{.i} - i$ -ый столбец единичной матрицы, следовательно, арифметические затраты будут $O(M^3 N/p)$. Несмотря на то что все процессоры вычисляют различные строки, каждый процессор хранит копию матрицы \tilde{P}^T . Так как элементы матрицы \tilde{P}^T вычисляются через элементы матриц U_i, V_i , расположенные на различных процессорах, то время межпроцессорных взаимодействий типа "all-to-all"для рассылки копии матрицы \tilde{P} будет порядка $T^1_{comm} = \alpha \log_2 p + \frac{p}{p-1} \beta M^2, \, \alpha$ – время ожидания готовности оборудования, β – время передачи данных от одного процессора для другого [152]. Для вычисления строк матрицы \tilde{P}^{-1} может быть использован любой последовательный или параллельный алгоритм, обеспечивающий достаточную точность и экономичность расчёта. В этом случае оценки числа арифметических действий, времени коммуникационных взаимодействий и необходимого объёма оперативной памяти могут быть другими.

На втором шаге алгоритма 3.5 затраты для решения системы (3.47) и реализации (3.45) будут порядка $O(M^2N/p)$. Здесь предполагается, что матрица системы (3.47) предварительно факторизована, а матрицы U_i, V_i были вычислены на первом шаге. Затраты алгоритма 3.4 для решения уравнения (3.48) имеют оценку $O(M^2 \log_2(p))$. Коммуникационные затраты на втором шаге обусловлены реализацией процесса дихотомии и имеют оценку $T_{comm}^2 \approx \alpha \log_2^2(p) + 4M^2 \log_2(p)\beta$.

Необходимый объём оперативной памяти на втором шаге $OM^2N/p+M^2\log_2 p$, тогда как на первом шаге составит $OM^2N/p + M^2p$. Оценку M^2p можно сократить, если на первом шаге не хранить копию матрицы \tilde{P}^T размерности, а для вычисления строк матрицы \tilde{P}^{-1} использовать алгоритм для распределённых данных. Другое решение проблемы сокращения времени подготовительных вычислений состоит в том, что в одном вычислительном узле несколько ядер процессора объедены над общей памятью. Это позволяет хранить только одну копию матрицы \tilde{P}^T на вычислительном узле, что значительно сокращает как требуемый объём оперативной памяти, так и время расчётов, необходимое для подготовительных вычислений.

3.4. Численные расчёты

Известно, что эффективные с теоретической точки зрения параллельные алгоритмы при их реализации на суперкомпьютере могут не обеспечивать ожидаемого сокращения времени счёта. Это связано с тем, что при анализе эффективности конкретного алгоритма теоретические оценки вычислительной и коммуникационной производительности носят скорее качественный, чем количественный характер, тем более в случае алгоритма прогонки, характерной особенностью которого является высокая чувствительность к реализации коммуникационных взаимодействий. Таким образом, численные эксперименты с модельными постановками задач являются важным этапом исследования параллельных алгоритмов.

Рассмотрим краевую задачу для уравнения Пуассона

$$\Delta u = -f(x), \quad x = (x_1, x_2) \in \bar{G}_0 = \{ 0 \le x_\alpha \le l_\alpha, \ \alpha = 1, 2 \}, \quad u|_{\Gamma} = 0.$$

Конечно-разностная аппроксимация второго порядка точности на сетке $\bar{\omega}_h = \{x_{ij} = (ih_1, jh_2) \in \bar{G}, i = 0, ..., N_1, j = 0, ..., N_2\}$ с шагами h_1 и h_2 и границей γ_h имеет вид

$$\frac{y_{i+1,j} - 2y_{i,j} + y_{i-1,j}}{h_1^2} + \frac{y_{i,j+1} - 2y_{i,j} + y_{i,j-1}}{h_2^2} = -f_i, \qquad (3.49)$$

Применим метод разделения переменных к задаче (3.49). Поскольку функция $u_{i,j}$ обращается в нуль при j = 0 и $j = N_2$, а сеточная функция $f_{i,j}$ задана для $1 \le j \le N_2 - 1$, то они могут быть представлены в виде ряда по собственным функциям [70]

$$u_{i,j} = \sum_{\substack{l=1\\N_2-1}}^{N_2-1} \tilde{u}_i(l) \sin\left(\frac{\pi l j}{N_2}\right), \quad 0 \le j \le N_2, \quad 0 \le i \le N_1,$$

$$f_{i,j} = \sum_{\substack{l=1\\l=1}}^{N_2-1} \tilde{f}_i(l) \sin\left(\frac{\pi l j}{N_2}\right), \quad 1 \le j \le N_2 - 1, \quad 1 \le i \le N_1 - 1.$$
(3.50)

разностного оператора Λ_2

$$(\Lambda_1 y) = \frac{y_{i+1,j} - 2y_{i,j} + y_{i-1,j}}{h_1^2}, \quad (\Lambda_2 y) = \frac{y_{i,j+1} - 2y_{i,j} + y_{i,j-1}}{h_2^2}.$$
 (3.51)

Подставив выражения (3.50) в (3.49), находим

$$\sum_{l=1}^{N_2-1} \left\{ h_1^{-2} \left[\tilde{u}_{i+1}(l) - 2\tilde{u}_i(l) + \tilde{u}_{i-1}(l) \right] - 4h_2^{-2}\tilde{u}_i(l) \sin^2 \frac{\pi l}{2N_2} + \tilde{f}_i(l) \right\} \sin \frac{\pi l j}{N_2} = 0.$$

В силу ортогональности собственных функций гармоники $\tilde{u}_i(l), l = 1, ..., N_2 - 1$ могут быть определены из решения следующей системы линейных алгебраических уравнений

$$\tilde{u}_{i+1}(l) - (2+d_l)\,\tilde{u}_i(l) + \tilde{u}_{i-1}(l) = -h_1^2 \tilde{f}_i(l), \quad i = 1, \dots, N_1 - 1,$$

$$\tilde{u}_0(l) = \tilde{u}_{N_1}(l) = 0,$$
(3.52)

где $d_l = 4 \frac{h_1^2}{h_2^2} \sin^2 \frac{\pi l}{2N_2}.$

Суммы (3.50) следует вычислять, используя алгоритм быстрого дискретного преобразования Фурье, а для определения решений из серии уравнений (3.52) – использовать алгоритм дихотомии. Одно из ограничений алгоритма дихотомии заключается в том, что все системы линейных алгебраических уравнений из серии задач (3.52) имеют матрицу вида

$$B_l = (T - d_l I), l = 1, ..., N_2 - 1, (3.53)$$

где $T = \text{tridiag}\{..., 1, -2, 1, ...\}$. Для (3.53) матрицы системы линейных алгебраических уравнений различны для всех правых частей, поэтому в такой постановке задача (3.52) не может быть эффективно решена предложенным алгоритмом. Однако можно распространить алгоритм дихотомии для решения серии уравнений Пуассона с различными правыми частями, в этом случае необходимо решить следующие системы уравнений $B_l u_n(l) = g_n(l), \quad l = 1, ..., N_2 - 1, \quad n =$ = 1, ..., N.

Для решения трёхмерных задач

$$\Delta u = -f(x), \quad x = (x_1, x_2, x_3) \in \overline{G}_0 = \{0 \le x_\alpha \le l_\alpha, \ \alpha = 1, 2, 3\}, \quad u|_{\Gamma} = 0.$$

необходимо обеспечить возможность использования большого числа процессоров для экономичных по числу арифметических действий алгоритмов. С точки зрения декомпозиции данных между процессорами, наилучшим выбором является метод переменных направлений, где на каждом шаге итерационного процесса трёхдиагональные системы линейных алгебраических уравнений должны решаться для всех трёх направлений, что позволяет использовать большое число процессоров в рамках одного расчёта. По сравнению с двумерным случаем трёхмерный вариант метода переменных направлений не является экономичным, так как обладает низкой скоростью сходимости [68]. Следовательно, используя преобразование Фурье, имеет смысл перейти от трёхмерной задачи к решению серии независимых двумерных задач

$$\frac{y(l)_{i+1,j} - 2y(l)_{i,j} + y(l)_{i-1,j}}{h_1^2} + \frac{y(l)_{i,j+1} - 2y(l)_{i,j} + y(l)_{i,j-1}}{h_2^2} - \frac{4}{h_3^2} \sin^2\left(\frac{\pi(l-1)}{2(N_3-1)}\right) y(l)_{i,j} = -f(l)_{i,j},$$
(3.54)

$$i = 2, ..., N_1 - 1, j = 2, ..., N_2 - 1, l = 2, ..., N_3 - 1.$$

Для решения этой задачи можно использовать параллельный вариант метода разделения переменных, рассмотренный выше. Однако такой алгоритм будет существенно ограничивать максимальное число процессоров, так как трёхдиагональные системы линейных алгебраических уравнений решаются только в одном направлении, поэтому эффективной будет только одномерная декомпозиция данных, так как для других направлений необходимо использовать алгоритм быстрого преобразования Фурье. Для того чтобы преодолеть трудности декомпозиции данных и обеспечить экономичность метода по числу операций, для решения задач (3.54) следует использовать двумерный вариант метода переменных направлений.

Для этого представим двумерный разностный оператор Лапласа в виде суммы двух операторов $\Lambda = \Lambda_1 + \Lambda_2$ (3.51). Тогда итерационный процесс метода переменных направлений имеет вид

$$\frac{u^{n+1/2} - u^n}{\tau_n^{(1)}} = \Lambda_1 u^{n+1/2} + \Lambda_2 u^n - f, \qquad (3.55)$$

$$\frac{u^{n+1} - u^{n+1/2}}{\tau_n^{(2)}} = \Lambda_1 u^{n+1/2} + \Lambda_2 u^{n+1} - f.$$
(3.56)

Итерационные параметры $\tau_n^{(1)}$, $\tau_n^{(2)}$ следует выбирать из условия минимума числа итераций [32, 68, 70, 247]. Тогда, чтобы при любом начальном приближении u_0 норма начальной погрешности была уменьшена в $1/\varepsilon$, число итераций n

$$n \ge n_0(\varepsilon) = 0.2 \ln \left(4N/\pi\right) \ln \left(4/\varepsilon\right). \tag{3.57}$$

Учитывая тот факт, что серия систем линейных алгебраических уравнений (3.55) и (3.56) для фиксированного *n* включает постоянную матрицу, получаем, что на подготовительном этапе достаточно решить порядка n_0 трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений.

Экономичность расчётов достигается за счёт того, что при увеличении значения l от 2 до $N_3 - 1$ число обусловленности для уравнения (3.54) уменьшается, как и число итераций метода переменных направлений (рис. 3.12, a). Таким образом, рассматриваемый гибридный параллельный алгоритм сопоставим по эффективности с методом разделения переменных, однако, в отличие от последнего, допускает двумерную декомпозицию данных между процессорами.

Для решения задачи (3.4) на языке Fortran-90 с использованием MPI-технологии были реализованы методы Фурье и переменных направлений. Решение трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений производилось параллельным алгоритмом дихотомии. Аппроксимация уравнения (3.4) проводилась на прямоугольной равномерной сетке с числом узлов $N_1 = N_2 = 2^k$. Для метода переменных направлений величина задаваемой точности ε для (3.57) полагалась равной 10^{-5} .

На рис. 3.8, *а* приведена декомпозиция расчётной области для Фурье-метода. Решение трёхдиагональных систем уравнений выполнялось в направлении k_2 , а Фурье-преобразование в направлении k_1 . Для метода переменных направлений была выбрана декомпозиция типа "решётка" (рис. 3.8, δ), так как здесь требуется решать трёхдиагональных системы линейных алгебраических уравнений как в направлении x, так и в направлении y.

Время счёта оценивалось как среднее время решения одной задачи вида (3.4) из серии, включающей 100 задач $T_{avr} = \frac{\sum_{i=1}^{100} T^i}{100}$, а величина ускорения рас-

считывалась по формуле $S_{avr} = \frac{T_1}{T_{avr}}$, где T^i – время решения задачи (3.4) параллельным алгоритмом, а T_1 – последовательным. Тестовые расчёты были вы-



(а) Для метода разделения переменных

(б) Для метода переменных направлений

Рис. 3.8. Декомпозиция расчётной области

полнены на суперкомпьютере Межведомственного Суперкопьютерного Центра РАН "MBC-100k", построенного на основе четырёхядерных процессоров Intel Xeon, работающих на частоте 3 ГГц и коммуникационной среды Infiniband. Ре-

size	512x512		1024x1024		2048x2048		4096x4096		8192x8192		16384x16384	
NP	T_{avr}	S_{avr}	T_{avr}	S_{avr}								
1	2.6e-02	-	1.1e-01	-	4.9e-01	-	2.11	-	11	-	-	-
64	7.9e-04	33	2e-03	58	6.6e-03	74	3.3e-02	63.9	0.19	58	0.84	63
128	5.9e-04	44	1.3e-03	84	4e-03	122	1.5e-02	140	9.6e-02	115	0.41	129
256	1.2e-03	22	1.2e-03	96	2.8e-03	175	9.4e-03	224	5e-02	220	0.21	252
512	-	-	2.2e-03	52	2.4e-03	204	6.8e-03	310	2.7e-02	407	1.1e-01	482
1024	-	-	-	-	-	-	6.2e-03	340	1.8e-02	611	6.5e-02	817
2048	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4.4e-02	1207

Таблица 3.1. Зависимость времени счёта (T_{avr}) и величины ускорения (S_{avr}) от числа процессоров для метода разделения переменных

зультаты зависимости времени счёта (T_{avr}) и ускорения (S_{avr}) для Фурье метода и метода переменных направлений представлены в таблицах 3.1 и 3.2, а также на рис. 3.9 и 3.11, *a*. Для Фурье метода зависимость величины ускорения от числа процессоров почти линейная, тогда как для метода переменных направлений,
начиная с некоторого числа процессоров, имеет место сверхлинейное ускорение. Это объясняется тем, что при увеличении числа процессоров, объём данных в расчёте на один процессор уменьшается, поэтому они могут быть полностью размещены в более быстродействующей кэш памяти. В случае, когда число узлов по одному направлению превышает число узлов по другому направлению в несколько раз для одного процессора, эффективность параллельного варианта метода разделения переменных варьируется от 80% до 95% (табл. 3.2). С увеличением числа процессоров эффективность распараллеливания, как и ожидалось, снижается, что объясняется дополнительными затратами на организацию параллельных вычислений.

size	512x512			1024x1024			20	48x204	8	4096x4096			
NP	T_{avr}	S_{avr}	Μ	T_{avr}	S_{avr}	М	T_{avr}	S_{avr}	М	T_{avr}	S_{avr}	М	
1	0.9	-	-	8.7	-	-	48.17	-	-	202	-	-	
64	-	-	-	4.6e-02	189	4x16	0.29	166	4x16	2.8	71	1x64	
128	-	-	-	3.7e-02	235	4x32	8.3e-02	580	4x32	1	180	4x32	
256	-	-	-	3.4e-02	255	16x16	5e-02	963	16x16	0.3	721	16x16	
512	-	-	-	3.3e-02	263	16x32	4.6e-02	1047	16x32	9.7 e-02	2082	16x32	
1024	-	-	-	-	-	-	4.7e-02	1024	32x32	6.8e-02	2970	32x32	

Таблица 3.2. Зависимость времени счёта (T_{avr}) и ускорения (S_{avr}) от числа процессоров для метода переменных направлений. (M – число процессоров в направлении k_1 и k_2 , при которых достигается минимальное время счёта)

Таким образом, несмотря на то что теоретические оценки времени счёта для метода циклической редукции и алгоритма дихотомии практически совпадают, последний обладает существенным преимуществом в силу возможности автоматической оптимизации коммуникационных затрат для различных архитектур суперкомпьютеров.



Рис. 3.9. Зависимость коэффициента ускорения для сеток различной подробности



Рис. 3.10. а) Зависимость времени счёта от числа процессоров для метода разделения переменных. б) Зависимость ускорения от числа процессоров для метода разделения переменных

Решение систем линейных алгебраических уравнений с тёплицевыми матрицами

Для оценки эффективности предложенной модификации алгоритма дихотомии в случае тёплицевых матриц, снова рассмотрим краевую задачу (3.4). Результаты численных экспериментов с числом процессоров от 32 до 4096 для $\lambda \in [-1....2^k]$ показали, что значения компонент векторов $\mathbf{Z}_m^{\mathrm{R,L}}$, $\mathbf{G}_m^{\mathrm{R,L}}$, вычисленных по формулам (3.37), (3.42) и по формулам (3.14), (3.31), (3.32) совпадают с машинной точностью. Зависимости от числа процессоров времени подготовительных вычислений, времени процесса дихотомии ($\mathbf{T}_{Step_1}^{General}$, $\mathbf{T}_{Step_1}^{Toeplitz}$, \mathbf{T}_{Step_2}), а также величины ускорения ($\mathbf{S}_{Step_2}, \mathbf{S}_{Step_1+Step_2}^{Toeplitz}$) приведены в табл. 3.3 и 3.4 и на рис. 3.11, а. Из табл. 3.3 и 3.4 видно, что время, необходимое для расчёта векторов $\mathbf{G}_m^{\mathrm{R,L}}, \, \mathbf{Z}_m^{\mathrm{R,L}}$ для матриц общего вида, не зависит от числа процессоров и пропорционально числу неизвестных. Это объясняется тем, что суммарная размерность вспомогательных векторов имеет порядок $O(size\{\mathbf{X}\})$. Таким образом, если для задачи (3.4) не учитывать, что матрицы являются тёплицевыми, то временные затраты на подготовительные вычисления будут порядка $O(N_1N_2)$. Для тёплицевых матриц использование формул (3.37), (3.42), по сравнению с общим случаем (3.14), (3.31), (3.32), позволяет на несколько порядков сократить время расчёта вспомогательных векторов ($\mathbf{T}_{Step_1}^{General}, \mathbf{T}_{Step_1}^{Toeplitz}$). В итоге становится возможным эффективно решать не только серию, но и одну систему уравнений. При решении системы линейных алгебраических уравнений для одной правой части подготовительными вычислениями пренебрегать нельзя, поэтому коэффициент ускорения с учётом этих затрат в 1.5 – 2.5 раза меньше, чем при решении серии задач ($\mathbf{S}_{Step_2}^{General}, \mathbf{S}_{Step_1+Step_2}^{Toeplitz}$).

На рис. 3.11, *а* приведена зависимость коэффициента ускорения от числа процессоров. Видно, что алгоритм дихотомии обеспечивает ускорение близкое к линейному. При большом числе процессоров существенного снижения масштабируемости из-за преобладания межпроцессорных обменов не наблюдается. Это обеспечивается за счёт динамической оптимизации коммуникационных взаимодействий. Действительно, вызывая первый раз функцию MPI_Reduce, можно собрать информацию о времени взаимодействия процессоров, а также об объёме передаваемых данных для каждого коммуникатора. Это позволит при последующих вызовах функции MPI_Reduce оптимизировать процессы обмена данными [94, 127, 213, 242]. Зависимость времени счёта от числа процессоров, в случае использования динамической оптимизации и без неё, представлена на рис. 3.11, *б*. При небольшом числе процессоров *p* < 512 динамическая опти-

$N_1 \times N_2$		8192	2x8192		16384x16384					
$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_1}^{\mathrm{General}}$		≈ 3	.3 sec.		≈ 13 sec.					
NP	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_1}^{\mathrm{Toeplitz}}$	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_2}$	$\mathbf{S}_{\mathrm{Step}_2}$	$\mathbf{S}_{\text{Step}_1+\text{Step}_2}^{\text{Toeplitz}}$	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_1}^{\mathrm{Toeplitz}}$	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_2}$	$\mathbf{S}_{\mathrm{Step}_2}$	$\mathbf{S}_{\text{Step}_1+\text{Step}_2}^{\text{Toeplitz}}$		
32	0.2	3.9e-01	28	19	0.75	1.6	33	23		
64	0.1	1.9e-01	58	38	0.33	0.84	63	45		
128	5.6e-02	1.0e-01	110	71	0.17	0.4	126	93		
256	3.7e-02	4.9e-02	224	127	0.12	0.2	265	166		
512	3.0e-02	2.6e-02	423	196	8.0e-02	0.12	664	265		
1024	2.6e-02	1.6e-02	687	250	6.5e-02	6.5e-02	817	408		
2048	2.6e-02	1.4e-02	785	275	5.8e-02	4.2e-02	1264	<u>531</u>		
4096	2.5e-02	1.6e-02	687	268	5.5e-02	6.0e-02	885	461		

Таблица 3.3. Зависимость времени счёта **T** и величины ускорения **S** от числа процессоров. $\mathbf{T}_{Step1}^{Toeplitz}$, $\mathbf{T}_{Step1}^{General}$ – время подготовительных вычисления для тёплицевых матриц и общего вида, соответственно. \mathbf{T}_{Step2} – время выполнения процесса дихотомии для любой трёхдиагональной матрицы. \mathbf{S}_{Step2} – величина ускорения для одной правой части без учёта подготовительных вычислений, $\mathbf{S}_{Step1+Step2}^{Toeplitz}$ – величина ускорения для одной правой части для тёплицевых матриц

$N_1 \times N_2$		3276	8x32768		65536x65536				
$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_1}^{\mathrm{General}}$		\approx	53 sec.			≈ 2	46 sec.		
NP	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_1}^{\mathrm{Toeplitz}}$	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_2}$	$\mathbf{S}_{\mathrm{Step}_2}$	$\mathbf{S}_{\text{Step}_1+\text{Step}_2}^{\text{Toeplitz}}$	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_1}^{\mathrm{Toeplitz}}$	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_2}$	$\mathbf{S}_{\mathrm{Step}_2}$	$\mathbf{S}_{\text{Step}_1+\text{Step}_2}^{\text{Toeplitz}}$	
128	0.81	1.77	-	-	-	-	-	-	
256	0.41	0.89	254	174	1.62	3.83	-	-	
512	0.24	0.58	390	276	0.84	1.92	510	355	
1024	0.17	0.28	809	503	0.51	1.0	980	653	
2048	0.13	0.15	1510	809	0.36	0.59	1661	1032	
4096	0.12	0.10	2265	1029	0.30	0.35	2801	1508	

Таблица 3.4. Зависимость времени счёта **T** и величины ускорения **S** от числа процессоров. $\mathbf{T}_{Step1}^{Toeplitz}$, $\mathbf{T}_{Step1}^{General}$ – время подготовительных вычисления для тёплицевых матриц и общего вида, соответственно. \mathbf{T}_{Step2} – время выполнения процесса дихотомии для любой трёхдиагональной матрицы. \mathbf{S}_{Step2} – величина ускорения для одной правой части без учёта подготовительных вычислений, $\mathbf{S}_{Step1+Step2}^{Toeplitz}$ – величина ускорения для одной правой части для тёплицевых матриц мизация не оказывает существенного влияния на время счёта, так как в этом случае вычислительные затраты превосходят коммуникационные. Однако при увеличении числа процессоров эффект от оптимизации оказывается более чем значительным.

Решение модельного уравнения Пуассона для 3D области

Для случая решения трёхмерного уравнения Пуассона зависимость времени счёта и величины ускорения от числа процессоров приведены в табл. 3.5 и на рис. 3.12. Как и при решении двумерной задачи, ускорение почти линейно зависит от числа процессоров. Использование экономичной модификации подготовительной процедуры алгоритма дихотомии для тёплицевых трёхдиагональных матриц позволило сократить время подготовительных вычислений с нескольких часов до нескольких долей секунд.

Mesh	512	2^{3}	102	4^{3}	204	8^{3}	409	6^{3}	819	2^{3}
procs.	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_1}^{\mathrm{Toeplitz}}$	$\mathbf{T}_{\mathrm{Step}_2}$								
64	2.1e-2	0.76	6.5e-2	4.8	-	-	_	-	-	-
128	1.9e-2	0.42	5.5e-2	2.5	1.6e-1	31.1	-	-	-	-
256	1.8e-2	0.23	4.6e-2	1.3	1.3e-1	7.7	-	-	-	-
512	1.7e-2	0.14	4.2e-2	0.75	1.1e-1	16.6	-	-	-	-
1024	1.5e-2	0.08	3.8e-2	0.44	9.5e-2	3.8	2.3e-1	24	-	-
2048	1.5e-2	0.06	3.7e-2	0.28	8.7e-2	2.0	2.2e-1	13.3	-	-
4096	1.6e-2	4.6e-2	4.1e-2	0.17	8.6e-2	1.1	2.1e-1	7.1	-	-
8192	1.6e-2	3.9e-2	3.3e-2	0.12	8.5e-2	0.72	2.1e-1	3.71	-	-
16384	1.6e-2	3.3e-2	3.7e-2	9.8e-2	8.3e-2	0.46	1.8e-1	1.76	0.37	23.9

Таблица 3.5. Зависимость времени вычислений **T** от числа процессоров при решении трёхмерного уравнения Пуассона. Здесь $\mathbf{T}_{\text{Step}_1}^{\text{Toeplitz}}$ время подготовительных вычислений для Тёплицевых матриц; $\mathbf{T}_{\text{Step}_2}$ время выполнения процесса дихотомии для матрицы общего вида

Таким образом, высокая масштабируемость алгоритма дихотомии обеспечивается, с одной стороны, за счёт низких затрат на синхронизацию вычислений, а с другой, возможностью сокращения времени передачи данных по-



Рис. 3.11. а) Зависимость величины ускорения от числа процессоров при решении двумерного уравнения Пуассона методом разделения переменных. б) Влияние динамической оптимизации межпроцессорных взаимодействий на время счёта



Рис. 3.12. а) Зависимость числа итераций метода переменных направлений от номера рассчитываемой гармоники при решении задачи (3.54). б) Зависимость величины ускорения от числа процессоров при решении трёхмерного уравнения Пуассона

средством статической и динамической оптимизации коммуникационных взаимодействий, которая основана на анализе MPI-библиотекой времени коммуникационных взаимодействий на этапе исполнения параллельной программы [94, 127, 213, 242].

Решение систем линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами

Рассмотрим задачу решения системы линейных алгебраических уравнений вида (3.43) с размерами блоков M = 60,150 для N от 2048 до 65536. Результаты вычислительных экспериментов приведены в табл. 3.6 и 3.7, а также на рис. 3.13.

$N \times M$	2^{11}	$\times 60$	2^{11} >	× 150	2^{12}	\times 60	2^{12} >	< 150	2^{13}	\times 60	2^{13} >	× 150
NP	Pre	S_{avr}	Pre	$\mathbf{S}_{\mathrm{avr}}$	Pre	$\mathrm{S}_{\mathrm{avr}}$	Pre	$\mathbf{S}_{\mathrm{avr}}$	Pre	$\mathbf{S}_{\mathrm{avr}}$	Pre	$\mathbf{S}_{\mathrm{avr}}$
16	1.8	3e-2	30	0.18	3.5	5.6e-2	56	0.35	7	0.12	115	0.74
32	1	32	17	30	1.9	31	32	31	3.8	32	60	32
64	1.32	177	15	60	2.7	64	22	60	3	64	36	62
128	2	551	19	110	2.1	162	22	116	3	120	30	124
256	3.2	1021	32	240	3.2	896	34.7	255	3.36	480	38	236
512	5.6	979	62	430	5.7	1422	61	430	5.6	1920	65	438
1024	10	1043	124	720	9.9	1337	126	736	9.9	1745	123	845
2048	48.8	436	Θ	Θ	19.44	896	Θ	Θ	47	1920	Θ	Θ

Таблица 3.6. Время подготовительных вычислений (Pre) и величина ускорения (S_{avr}) (для NP=16 указано время в секундах)



Рис. 3.13. Зависимость величины ускорения от числа процессоров для различных значений ${\cal N}$

$N \times M$	2^{14}	\times 60	$2^{14} >$	< 150	2^{15}	\times 60	$2^{15} >$	< 150	2^{16}	\times 60	2^{16} :	× 150
NP	Pre	$\mathbf{S}_{\mathrm{avr}}$	Pre	S_{avr}	Pre	$\mathbf{S}_{\mathrm{avr}}$	Pre	$\mathbf{S}_{\mathrm{avr}}$	Pre	$\mathbf{S}_{\mathbf{avr}}$	Pre	$\mathbf{S}_{\mathrm{avr}}$
16	15	0.23	220	1.4	28	0.45	Θ	Θ	60	0.95	Θ	Θ
32	7.5	30	117	30	15	30	231	1.5	29	32	Θ	Θ
64	4.3	61	64	60	8.75	60	121	64	15	69	235	1.48
128	4.2	115	44	124	5.15	120	72	126	8.5	138	129	126
256	4.1	216	45	235	5	225	60	252	6.9	253	89	236
512	5.6	669	68	439	14.6	423	75	480	7.0	506	89	473
1024	14.4	3066	126	829	25	1331	130	923	10.3	844	136	947
2048	47	3680	Θ	Θ	48	3600	Θ	Θ	48	2303	Θ	Θ

Таблица 3.7. Время подготовительных вычислений (Pre) и величина ускорения (S_{avr}) (для NP=16 указано время в секундах)

Исходя из полученных данных отметим, что во всех тестовых расчётах величина зависимости величины ускорения от числа процессоров была почти линейной. Для матриц с размером блока M = 60, начиная с некоторого $p > p_0$, зависимость величины ускорения от числа процессоров была сверхлинейной. Это объясняется тем, что при увеличении общего числа процессоров объём данных задачи для одного процессора сокращается. Это позволяет более эффективно использовать быстродействующую кэш память. Аналогичный эффект был достигнут при параллельной реализации метода переменных направлений. Время выполнения подготовительного этапа зависит от числа используемых процессоров. При небольшом числе процессоров основные временные затраты приходятся на решение задач (3.46a), (3.46b) и убывают с ростом числа процессоров. Однако, начиная с некоторого $p > p_0$, доминирующими становятся подготовительные затраты алгоритма 3.4, необходимые для последующего решения задачи (3.48). Для матриц с размером блока M = 150 и числа процессоров *p* = 2048 не удалось за приемлемое время выполнить подготовительные вычисления. Это объясняется тем, что матрица редуцированной системы при числе процессоров *p* = 2048 не может быть полностью размещена в оперативной памяти одного вычислительного узла. Использование дисковой памяти значительно снизило производительность. Для параметров M = 150, $N = 2^{16}$, p = 16, 32 и M = 150, $N = 2^{15}$, p = 16 недостаточный объём оперативной памяти из-за малого числа процессоров, не позволил решить задачи (3.46a) и (3.46b) за приемлемое время. При реализации алгоритма дихотомии для блочно-трёхдиагональных матриц следует обращать внимание на доступный объём оперативной памяти, так как большинство прямых методов решения систем линейных алгебраических уравнений требуют бо́льший объём оперативной памяти в сравнении с итерационными методами.

3.5. Выводы

В третьей главе диссертации были разработаны новые алгоритмы для решения систем линейных алгебраических уравнений с трёхдиагональными, блочно-трёхдиагональными и тёплицевыми матрицами. Алгоритм дихотомии построен на основе двухуровневой схемы организации вычислений, которая состоит в том, что сначала требуется провести подготовительные вычисления, а затем с линейным ускорением от числа используемых процессоров решить требуемое количество систем линейных алгебраических уравнений для различных правых частей. Во всех вычислительных экспериментах алгоритм дихотомии продемонстрировал высокую эффективность, в том числе и при использовании тысяч процессоров. Расчёты показали, что динамическая оптимизация на уровне библиотеки передачи сообщений позволяет значительно сократить время межпроцессорных обменов, особенно в расчётах с использованием большого числа процессоров. В главе диссертации показано, что при использовании шестнадцати тысяч процессоров удалось достичь ускорения порядка четырнадцати тысяч раз при решении трёхмерного уравнения Пуассона на основе метода разделения переменных и неявного метода переменных направлений. Таким образом, предложенные алгоритмы решения систем линейных алгебраических

уравнений позволяют достичь высокой скорости счёта в широком диапазоне числа процессоров. Далее различные варианты алгоритма дихотомии использованы для решения систем линейных алгебраических уравнений в контексте параллельной реализации спектрально-разностных методов на основе преобразования Лагерра.

Глава 4

Спектрально-разностные алгоритмы для моделирования акустических и упругих волновых полей на суперЭВМ

4.1. Моделирование динамики акустических и упругих волновых полей

4.1.1. Спектрально-разностный метод для уравнения акустики

В цилиндрической системе координат для полупространства рассмотрим проблему моделирования распространения акустических волн от точечного источника

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nabla \cdot (\kappa \nabla u) + \frac{1}{2\pi} \frac{\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x_0})}{r} f(t), \ \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2,$$

$$u|_{t=0} = \frac{\partial u}{\partial t}\Big|_{t=0} = 0, \qquad \frac{\partial u}{\partial z}\Big|_{z=0,l_2} = \frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r=0} = u|_{r=l_1} = 0,$$
(4.1)

где $\mathbf{x} = (r, z), t$ – время, $u = u(\mathbf{x}, t)$ – звуковое давление, $\rho = \rho(\mathbf{x})$ – плотность среды, $\kappa = \kappa(\mathbf{x})$ – объёмный модуль упругости, $\sqrt{\kappa/\rho}$ – скорость звука. Границы $r = l_1$ и $z = l_2$ выбираются таким образом, чтобы для рассчитываемого момента времени не возникало волн отраженных от них. Будем искать решение задачи (4.1) в виде ряда Фурье по функциям Лагерра (2.1a)

$$u(\mathbf{x},t) = \sum_{m=0}^{\infty} \bar{u}_m(\mathbf{x}) l_m(\eta t).$$
(4.2)

Тогда начально-краевая задача (4.1) сводится к серии краевых задач [188]

$$\nabla \cdot (\kappa \nabla \bar{u}_m) - \rho \frac{\eta^2}{4} \bar{u}_m = -\frac{1}{2\pi} \frac{\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{r} \bar{f}_m + \rho \Phi_2(\bar{u}_k),$$

$$\frac{\partial \bar{u}_m}{\partial r} \Big|_{r=0} = \frac{\partial \bar{u}_m}{\partial z} \Big|_{z=0,l_2} = \bar{u}_m \Big|_{r=l_1} = 0,$$
(4.3)

где $\bar{f}_m = \mathcal{L}\{f(t)\}$ – это коэффициенты ряда Лагерра для функции f(t). Данный метод можно рассматривать как аналог спектрально-разностного метода на основе Фурье-преобразования. Параметр m, определяющий порядок функций Лагерра, в отличие от тригонометрического базиса, присутствует только в правой части. Поставим задаче (4.3) в соответствие разностную задачу, которая определяется схемой второго порядка точности [68]

$$\left(\Lambda_r + \Lambda_z\right)y - \psi y = -\phi,$$

$$\Lambda_r y = \begin{cases} \frac{1}{h_r} a_1 y_r, & i = 1, \\ (a_1 y_{\bar{r}})_r, & 1 < i \le N_1 - 1, \end{cases}, \quad \Lambda_z y = \begin{cases} \frac{1}{h_z} a_2 y_z, & k = 1, \\ (a_2 y_{\bar{z}})_z, & 1 < k \le N_2 - 1, \\ \frac{1}{h_z} a_2 y_{\bar{z}}, & k = N_2, \end{cases}$$

где $a_1(i,k) = \bar{r}_i \kappa (\bar{r}_i, z_k)$, $a_2(i,k) = r_i \kappa (r_i, \bar{z}_k)$, $\psi(i,k) = \rho \frac{\eta^2}{4} r_i(r_i, z_k)$, $\phi(i,j) = \delta(i - i_0, j - j_0) \frac{f_m}{2\pi h_r h_z} + \rho_{i,j} \Phi_2(\breve{y}_{i,j})$, $\mathbf{x}_0 = (i_0 h_r, j_0 h_z)$, $r_i = (i - 0.5) h_r$, $h_r = l_1/N_1$, $z_k = (k - 0.5) h_z$, $h_z = l_2/N_2$ где $\bar{r}_i = r_i + 0.5 h_r$, $\bar{z}_k = z_k + 0.5 h_z$; $y_{\bar{r}}, y_{\bar{z}}$ и y_r, y_z – разностные соотношения по z и по r "назад" и "вперед" [68, 70]. Краевое условие на стороне $r = l_2$ аппроксимируем точно $y_{N_1,k} = 0$, $k = 1, ..., N_2$.

4.1.2. Спектрально-разностный метод для уравнений упругости

Для моделирования распространения упругих волн в неоднородном полупространстве рассмотрим уравнения движения для перемещений в цилиндрической системе координат [38]

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} = (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{U}) + \mu \nabla^2 \mathbf{U} + \nabla \lambda (\nabla \cdot \mathbf{U}) + \nabla \mu \times (\nabla \times \mathbf{U}) + 2 (\nabla \mu \cdot \nabla) \mathbf{U} + \rho \mathbf{F} f(t), \qquad \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2,$$
(4.4)

$$\mathbf{U}|_{t=0} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}\bigg|_{t=0} = 0,$$

где $\mathbf{x} = (r, z), t$ – время, $\mathbf{U} = (u_r(\mathbf{x}, t), u_z(\mathbf{x}, t))^{\mathrm{T}}$ – вектор перемещений, $\lambda = \lambda(\mathbf{x})$ и $\mu = \mu(\mathbf{x})$ – коэффициенты Ламе, $\rho = \rho(\mathbf{x})$ – плотность среды, $\mathbf{F} = (F_r, F_z)^{\mathrm{T}}$ – источник возбуждения упругих волн типа "центр давления"

$$F_r = \frac{1}{2\pi} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left[\frac{\delta(r)}{r} \right] \delta(z-d), \quad F_z = \frac{1}{2\pi} \frac{\delta(r)}{r} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \delta(z-d), \tag{4.5}$$

где $d \ge 0$ – глубина залегания источника. Представим решение задачи (4.4) в виде ряда Фурье по функциям Лагерра

$$u_r(\mathbf{x},t) = \sum_{m=0}^{\infty} \bar{u}_{r,m}(\mathbf{x}) l_m(\eta t), \quad u_z(\mathbf{x},t) = \sum_{m=0}^{\infty} \bar{u}_{z,m}(\mathbf{x}) l_m(\eta t).$$
(4.6)

Для определения коэффициентов разложения $\bar{u}_{r,m}$, $\bar{u}_{z,m}$ в цилиндрической системе координат необходимо решить серию задач вида

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[(2\mu + \lambda) \frac{\partial \bar{u}_{r,m}}{\partial r} + \lambda \left(\frac{\partial \bar{u}_{z,m}}{\partial z} + \frac{\bar{u}_{r,m}}{r} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_{r,m}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_{z,m}}{\partial r} \right) \right] + \frac{2\mu}{r} \left(\frac{\partial \bar{u}_{r,m}}{\partial r} - \frac{\bar{u}_{r,m}}{r} \right) - \rho \frac{\eta^2}{4} \bar{u}_{r,m} = \rho (-F_r \bar{f}_m + \Phi_2(\bar{u}_{r,m})),$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_{r,m}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_{z,m}}{\partial r} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\lambda + 2\mu) \frac{\partial \bar{u}_{z,m}}{\partial z} + \lambda \left(\frac{\partial u_{z,m}}{\partial r} + \frac{\bar{u}_{r,m}}{r} \right) \right] - \rho \frac{\eta^2}{4} \bar{u}_{z,m} = \rho (-F_z \bar{f}_m + \rho \Phi_2(\bar{u}_{z,m})),$$

$$\left\{ \frac{\partial \bar{u}_{z,m}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_{r,m}}{\partial r} \right\} \Big|_{z=0} = \left\{ \lambda \left(\frac{\partial \bar{u}_{z,m}}{\partial r} + \frac{\bar{u}_{z,m}}{r} \right) + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial \bar{u}_{r,m}}{\partial z} \right\} \Big|_{z=0} = 0.$$

Для аппроксимации задачи (4.7) будем использовать стандартную конечно-разностную схему второго порядка точности [69]. Для спектральных алгоритмов скорость сходимости ряда Лагерра будет зависеть от гладкости функции $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ по переменной t [73]. Как было сказано выше, в отличие от преобразования Фурье, после применения преобразования Лагерра необходимо многократно обращать знакоопределенный оператор, который не зависит от номера коэффициента разложения. Таким образом, для рассматриваемого класса спектральных алгоритмов одной из основных вычислительных проблем является решение системы линейных алгебраических уравнений вида $A\mathbf{y}_n = \mathbf{f}_n, n = 1, 2, ...,$ возникающих после аппроксимации на сетке эллиптических уравнений (4.3), (4.7).

Разработке параллельных численных алгоритмов решения разностных уравнений для эллиптических дифференциальных операторов посвящено значительное число исследований [121, 145, 170, 200, 241, 243], однако, данная проблема остаётся весьма актуальной и на сегодняшний день. Это объясняется тем, что постоянный рост числа процессоров, объединённых в рамках одной вычислительной системы, постоянно предъявляет жёсткие требования к масштабируемости параллельных алгоритмов. Известно, что методы эффективные для малого числа процессоров (p < 32), например, алгоритм циклической редукции [70], при большем числе процессоров становятся неэффективными, так как коммуникационные затраты преобладают над вычислительными. Это приводит к необходимости дальнейшего развития параллельных численных алгоритмов, позволяющих использовать современные вычислительные ресурсы с наибольшим коэффициентом эффективности. В работах [28, 70, 92, 112, 130] предложены различные подходы к решению эллиптических уравнений второго порядка с неразделяемыми переменными, где итерационный процесс сводится к многократному обращению оператора Лапласа (так называемые итерации по Дьяконову [28]). Реализация экономичных процедур для обращения оператора Лапласа требует решения трёхдиагональных или блочно-трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений, что на многопроцессорной системе

является нетривиальной задачей. Преодолеть данную трудность можно посредством применения алгоритма дихотомии, разработанного для обращения одной и той же трёхдиагональной или блочно-трёхдиагональной матрицы для многих правых частей. Выбор алгоритма дихотомии обусловлен тем, что для рассматриваемого класса задач он обеспечивает почти линейную зависимость коэффициента ускорения в широком диапазоне числа процессоров. Точность, число арифметических операций и количество коммуникационных взаимодействий алгоритма дихотомии практически эквивалентно методу циклической редукции. Однако при сопоставимых объёмах передаваемых данных реальное время межпроцессорных взаимодействий алгоритма дихотомии существенно меньше. Это объясняется тем, что основная коммуникационная операция алгоритма дихотомии "All-reduce-to-one(+)" обладает свойством ассоциативности, что позволяет значительно сократить время межпроцессорных взаимодействий за счёт их оптимизации [94, 242]. Так как выбор предобусловливающей процедуры оказывает существенно влияние на сходимость итерационных алгоритмов решения систем линейных алгебраических уравнений, потребуем, чтобы процедура обращения предобусловливающего оператора была эффективна при реализации на многопроцессорной вычислительной системе. Так как не все предобусловливающие процедуры могут быть эффективно реализованы с использованием тысяч процессоров, поэтому последнее требование существенно сужает класс возможных предобусловливателей. В третьей главе диссертации на основе алгоритма дихотомии предложена высокопроизводительная параллельная реализация метода разделения переменных и неявного метода переменных направлений для обращения оператора Лапласа. Было показано, что использование алгоритма дихотомии для решения трёхдиагональных систем линейных уравнений обеспечивает линейную зависимость коэффициента ускорения от числа процессоров. Исследуем реализацию такого подхода в контексте предобусловливающей процедуры для решения уравнений (4.3) и (4.7).

Для решения разностной задачи для уравнения (4.3) в качестве предобу-

словливающей выберем матрицу, соответствующую разностному оператору [28]

$$B \equiv \Lambda_r + \Lambda_z - d,$$

$$a_1(i,k) = \bar{r}_i \bar{c}, \quad a_2(i,k) = r_i \bar{c}, \quad d(i,k) = r_i \frac{\eta^2}{4} \overline{\rho}.$$

Для решения разностной задачи для системы уравнений (4.7) предобусловливающий оператор зададим в виде

$$K \equiv \begin{pmatrix} B_1 & 0\\ 0 & B_2 \end{pmatrix},$$
$$B_1 \equiv \Lambda_r + \Lambda_z - d, \quad B_2 \equiv \Lambda_r + \Lambda_z - d,$$
$$a_1(i,k) = \overline{r_i}\overline{(\lambda + 2\mu)}, \quad a_2(i,k) = r_i\overline{\mu}, \quad d(i,k) = r_i\frac{\eta^2}{4}\overline{\rho} + \frac{\overline{(\lambda + 2\mu)}}{r_i},$$
$$a_1(i,k) = \overline{r_i}\overline{\mu}, \quad a_2(i,k) = r_i\overline{(\lambda + 2\mu)}, \quad d(i,k) = r_i\frac{\eta^2}{4}\overline{\rho}.$$

Если контрастность скоростной модели среды небольшая, а число узлов сетки велико, тогда данный класс предобусловливателей позволяет обеспечить высокую скорость сходимости итерационных методов решения систем линейных алгебраических уравнений, и число итераций не будет зависеть от шага сетки [70].

4.1.3. Аппроксимация криволинейных границ

Параллельный вариант спектрально-разностного метода для решения задачи (4.1) был рассмотрен в предыдущем разделе. В качестве предобусловливающего оператора был выбран оператор Лапласа. Это позволило обеспечить высокую скорость сходимости для сред с умеренной контрастностью. Использование алгоритма дихотомии для решения трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений позволило достичь высокой скорости расчётов. Однако, когда модель среды включает зоны больших и относительно малых скоростей, то использование оператора Лапласа в качестве предобусловливающего не обеспечивает высокой скорости сходимости итерационного процесса решения систем линейных алгебраических уравнений. Если для модели среды можно выделить макро-подобласти, где скорости распространения волн постоянны или имеют небольшой разброс, то для этого случая имеет смысл использовать метод декомпозиции областей [48, 51]. Параллельные варианты метода декомпозиции областей предложены достаточно давно [96, 214], в том числе, и для графических ускорителей [199]. В диссертации метод декомпозиции областей на основе дополнения Шу́ра использован для сокращения числа арифметических действий при решении разностных уравнений, при этом число используемых процессоров и число подобластей являются независимыми величинами. Эффективность использования вычислительных ресурсов суперкомпьютера будет полностью обеспечиваться за счёт применения алгоритма дихотомии.

Пример модели среды, для которой целесообразно использовать метод декомпозиции областей для уравнения акустики, представлена на рис. 4.1. Часто при решении прикладных задач геофизики требуется рассчитать волновое поле с криволинейной геометрией свободной поверхности, поэтому рассмотрим модель среды, включающую осложнённый рельеф.



Рис. 4.1. Скоростная модель среды

Для аппроксимации дифференциальных уравнений для областей с криволинейной границей необходимо использовать специальную расчётную сетку.

При использовании метода конечных разностей и прямоугольной сетки для реализации "ступенчатой" аппроксимации криволинейной границы, существенной проблемой является корректная аппроксимация граничных условий на свободной поверхности. Для неструктурированных сеток, как правило, используется метод конечных элементов, для которого граничные условия на свободной поверхности учитываются естественным образом. При этом с точки зрения числа арифметических действий метод конечных элементов является более затратным по сравнению с методом конечных разностей. Применение равномерных сеток позволяет лучше воспроизвести дисперсионные свойства среды, чем при использовании неравномерных сеток, однако для последних возможностью сгущения сетки в области больших градиентов решения позволяет повысить точность расчёта путём незначительного увеличения общего числа узлов сетки. Таким образом, можно долго противопоставлять одни алгоритмы другим, но выделить метод, обладающий абсолютными преимуществами для большинства постановок задач довольно проблематично. Рассмотрим более подробно вопросы аппроксимации криволинейной границы для трёх возможных подходов.

Ступенчатая аппроксимация

Реализация ступенчатой аппроксимации (рис. 4.2а) не требует генерации расчётных сеток, что является существенным преимуществом при проведении расчётов на суперкомпьютерах, так как разработка параллельных алгоритмов генерации сеток является сложной проблемой. Главный недостаток ступенчатой аппроксимации состоит в появлении в расчётной области входящих углов и, как следствие, сингулярности в решении задач (4.3) и (4.7). Это приводит к тому, что точность решения в значительной степени снижается, поэтому при малом числе узлов сетки нефизическая дифракция волн может существенным образом искажать результаты численного моделирования особенно для длительных моментов времени. Для акустического приближения, такой подход является допустимым, однако при решении динамической задачи теории упругости

126

наличие поверхностных волн значительно увеличивает погрешность ступенчатой аппроксимации. Таким образом, в рамках спектрально-разностного подхода актуален вопрос разработки численных процедур для решения задач динамической теории упругости в случае криволинейной границы. Для этого дополнительно к ступенчатой аппроксимации рассмотрим два подхода.



Рис. 4.2. Способы аппроксимации криволинейной границы

Метод скошенных ячеек

Идея метода скошенных ячеек [240] состоит в том, чтобы использовать прямоугольную сетку для всей расчётной области, кроме приграничных ячеек, которые усекаются в местах пересечения с границей (рис. 4.26). Как и для ступенчатой аппроксимации, такой подход не требует генерации расчётной сетки. Тем не менее, следует учитывать, что вблизи криволинейной границы площади ячеек могут быть достаточно малыми, сколь угодно близкими к нулю величинами. Такие ячейки должны быть либо исключены из расчёта, либо объединены с соседними более крупными ячейками. В противном случае, как точность, так и устойчивость численных алгоритмов, особенно при использовании явных, схем – значительно снижается. Если решение представляется в виде ряда Лагерра, то наличие ячеек сетки с относительно малыми площадями существенно увеличивает число обусловленности системы линейных алгебраических уравнений, возникающих после аппроксимации задач (4.3) и (4.7).

Гибридная аппроксимации

Естественным подходом для аппроксимации криволинейной границы является использование треугольной сетки. Однако, как было отмечено выше, генерация сеток при большом числе узлов является вычислительно трудной задачей. В нашем случае специфика решаемой задачи позволяет использовать гибридную сетку, которая является объединением прямоугольной равномерной сетки и треугольной сетки, сгенерированной только вдоль криволинейной границы области (рис. 4.2в). Величина ширины треугольной приграничной сетки выбирается постоянной и как можно меньшей, однако такой, чтобы качество сетки было удовлетворительным [148]. Гибридный подход для моделирования упругих и вязко-упругих волновых полей был рассмотрен в работах [157, 183]. Таким образом, рассмотренные способы аппроксимации геометрии криволинейной границы имеют как достоинства, так и недостатки. В рамках спектральноразностных алгоритмов одна из основных проблем состоит в решении плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений.

4.1.4. Поглощающие граничные условия

Для моделирования динамики акустических и упругих волн в неограниченной области широкое распространение получили граничные условия типа PML [91, 106], позволяющие исключить влияние фиктивных границ. Применение интегрального преобразование Лагерра по времени к PML уравнениям избавляет от необходимости дискретизации во временной области, что улучшает согласованность граничных условий и, как следствие, уменьшает амплитуду фиктивных отражений от слоев PML. Реализация PML поглощающих граничных условий на основе преобразования Лагерра была предложена в работе [67]. Так как для выполнение обратного преобразования Фурье требуется расщеплять исходные уравнения на три составляющие, предложенный подход включает расщепление, не смотря на то что вспомогательные поля затем складываются. Далее показано, как на основе преобразования Лагерра предложить РМL граничные условия без расщепления посредством введения "переменных памяти".

Система уравнений РМL для уравнения акустики может быть записана в виде [91, 106]

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z \end{pmatrix} p - \rho_0 c^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (v_r r) + \sigma_z \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (qr) + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = 0,$$

$$\frac{\partial v_r}{\partial t} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial r} p = 0, \qquad \left(\frac{\partial}{\partial t} + \sigma_z \right) v_z - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial z} p = 0, \qquad \frac{\partial q}{\partial t} = v_r,$$

$$\zeta(z) = \frac{(\nu + 1)c_p}{2L_{\rm PML}} \log \left(\frac{1}{|\chi|} \right) \left[\frac{(z - z_0)}{L_{\rm PML}} \right]^{\nu},$$

$$(4.8)$$

где χ – коэффициент отражения, ν – порядок профиля PML, c_p – скорость среды в прилегающей к PML подобласти, L_{PML} – ширина PML области. Применяя преобразование Лагерра к уравнениям (4.8), получаем следующую систему уравнений

$$\left(\left(1 + \frac{2\delta}{\eta} \right) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\bar{v}_{r,m} r \right) + \frac{\partial \bar{v}_{z,m}}{\partial z} \right) - \frac{1}{\rho_0 c^2} \left(\frac{\eta}{2} + \zeta \right) \bar{p}_m = \\
= \Phi_1(\bar{p}_{m-1}) + \frac{2\zeta}{r\eta} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Phi_1(\bar{q}_{m-1}) \right), \\
\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}_m}{\partial r} - \frac{\eta}{2} \bar{v}_{r,m} = \Phi_1(\bar{v}_{r,m-1}), \quad \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}_m}{\partial z} - \left(\frac{\eta}{2} + \zeta \right) \bar{v}_{z,m} = \Phi_1(\bar{v}_{z,m-1}), \\
\frac{\eta}{2} \bar{q}_m + \Phi_1(\bar{q}_{m-1}) = R_m.$$
(4.9)

Здесь $\bar{v}_{r,m}, \bar{v}_{z,m}, \bar{p}_m, \bar{q}_m$ – коэффициенты разложения в ряд Лагерра для функций $v_r, v_z, p, q.$

Для обеспечения устойчивости в рамках упругой модели, вместо PML граничных условий следует использовать complex frequency shifted-PML [122, 167, 169, 255]. Основная идея CPML граничных условий состоит в том, что координаты r, z определяются как

$$\hat{r} = \int_{0}^{r} s_r(\omega, \dot{r}) d\dot{r}, \quad s_r = c_r + \frac{d_r}{i\omega},$$
$$\hat{z} = \int_{0}^{z} s_z(\omega, \dot{z}) d\dot{z}, \quad s_z = c_z + \frac{d_z}{i\omega + \alpha_z},$$

где ω – временная частота, c_z, c_r, α_z – вспомогательные коэффициенты подавления волн, s_r, s_z – комплексные функции растяжения в направлениях r, z и $i = \sqrt{-1}$. Применяя интегральное преобразование Фурье по времени к уравнению (4.4) и делая замену переменных $r \to \hat{r}, z \to \hat{z}$, получаем систему уравнений

$$-\rho\omega^{2}\tilde{u}_{r} = \frac{1}{\hat{r}}\frac{\partial}{\partial\hat{r}}\left(\hat{r}\left[\left(2\mu+\lambda\right)\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial\hat{r}} + \lambda\frac{\tilde{u}_{r}}{\hat{r}} + \lambda\frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial\hat{z}}\right]\right) + \frac{\partial}{\partial\hat{z}}\left(\mu\left[\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial\hat{z}} + \frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial\hat{r}}\right]\right) - \frac{1}{\hat{r}}\left(\lambda\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial\hat{r}} + \lambda\frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial\hat{z}} + (\lambda+2\mu)\frac{\tilde{u}_{r}}{\hat{r}}\right), - \frac{1}{\hat{r}}\left(\lambda\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial\hat{r}} + \lambda\frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial\hat{z}} + (\lambda+2\mu)\frac{\tilde{u}_{r}}{\hat{r}}\right), -\rho\omega^{2}\tilde{u}_{z} = \frac{1}{\hat{r}}\frac{\partial}{\partial\hat{r}}\left(\hat{r}\mu\left[\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial\hat{z}} + \frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial\hat{r}}\right]\right) + \frac{\partial}{\partial\hat{z}}\left((\lambda+2\mu)\frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial\hat{z}} + \lambda\left[\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial\hat{r}} + \frac{\tilde{u}_{r}}{\hat{r}}\right]\right).$$

$$(4.10)$$

Принимая во внимание

$$\frac{d}{d\hat{r}} = \frac{1}{s_r(\omega, r)} \frac{d}{dr}, \quad \frac{d}{d\hat{z}} = \frac{1}{s_z(\omega, z)} \frac{d}{dz}$$

и полагая

$$\hat{r} = \int_{0}^{r} s_r(\omega, \dot{r}) d\dot{r} = r \left(\check{c}_r + \frac{\check{d}_r}{\mathrm{i}\omega} \right) = rR(\omega, r), \qquad (4.11)$$

перейдем к исходным физическим координатам r, z, дополнительно домножив

уравнения (4.10) на $s_r s_z R$

$$-\rho\omega^{2}\tilde{u}_{r}s_{r}s_{z}R = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\left[\left(2\mu+\lambda\right)R\frac{s_{z}}{s_{r}}\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial r} + \lambda\frac{s_{z}\tilde{u}_{r}}{r} + \lambda R\frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial z}\right]\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\left[R\frac{s_{r}}{s_{z}}\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial z} + R\frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial r}\right]\right) - \frac{1}{r}\left(\lambda s_{z}\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial r} + \lambda s_{r}\frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial z} + \left(\lambda+2\mu\right)\frac{s_{r}s_{z}}{R}\frac{\tilde{u}_{r}}{r}\right), -\rho\omega^{2}\tilde{u}_{z}s_{r}s_{z}R = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\left[R\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial z} + R\frac{s_{z}}{s_{r}}\frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial r}\right]\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\left(\lambda+2\mu\right)R\frac{s_{r}}{s_{z}}\frac{\partial\tilde{u}_{z}}{\partial z} + \lambda\left[R\frac{\partial\tilde{u}_{r}}{\partial r} + \frac{s_{r}\tilde{u}_{r}}{r}\right]\right).$$

$$(4.12)$$

Функция $\hat{r} \equiv \hat{r}(\omega, r)$ входит в уравнения (4.10), поэтому вид функции $s_r(\omega, r)$ был выбран таким, чтобы интеграл (4.11) был рациональной функцией от ω . Тогда, если ввести следующие замены переменных

$$\tilde{T}_1 = -\omega^2 s_r s_z R \tilde{u}_z, \quad \tilde{T}_2 = -\omega^2 s_r s_z R \tilde{u}_r, \quad \tilde{T}_3 = R \frac{s_z}{s_r} \frac{\partial \tilde{u}_z}{\partial r}, \quad \tilde{T}_4 = R \frac{s_z}{s_r} \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial r},$$

$$\tilde{T}_5 = \frac{d_z}{i\omega + \alpha_z} \tilde{u}_r, \qquad \tilde{T}_6 = \frac{1}{i\omega} \tilde{u}_z, \qquad \qquad \tilde{T}_7 = \frac{1}{i\omega} \tilde{u}_r, \qquad (4.13)$$

$$\tilde{T}_8 = R \frac{s_r}{s_z} \frac{\partial \tilde{u}_z}{\partial z}, \qquad \tilde{T}_9 = R \frac{s_r}{s_z} \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial z}, \qquad \tilde{T}_{10} = \frac{s_r s_z}{R} u_r$$

и выполнить обратное преобразование Фурье, а затем применить преобразование Лагерра к (4.12), получаем

$$\rho \bar{T}_{2,k} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left[(2\mu + \lambda) \bar{T}_{4,k} + \lambda \left(c_z \frac{u_r}{r} + \frac{\bar{T}_{5,k}}{r} \right) + \lambda \left(\check{c}_r \frac{\partial \bar{u}_{z,k}}{\partial z} + \check{d}_r \frac{\partial \bar{T}_{6,k}}{\partial z} \right) \right] \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \left[\bar{T}_{9,k} + \left(\check{c}_r \frac{\partial \bar{u}_{z,k}}{\partial r} + \check{d}_r \frac{\partial \bar{T}_{6,k}}{\partial r} \right) \right] \right) - \frac{1}{r} \left(\lambda \left(c_z \frac{\partial \bar{u}_{r,k}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{T}_{5,k}}{\partial r} \right) + \lambda \left(c_r \frac{\partial \bar{u}_{z,k}}{\partial z} + d_r \frac{\partial \bar{T}_{6,k}}{\partial z} \right) + (\lambda + 2\mu) \frac{\bar{T}_{10,k}}{r} \right),$$

$$(4.14)$$

$$\rho \bar{T}_{1,k} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \left[\left(\check{c}_r \frac{\partial \bar{u}_{r,k}}{\partial z} + \check{d}_r \frac{\partial \bar{T}_{7,k}}{\partial z} \right) + \bar{T}_{3,k} \right] \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left((\lambda + 2\mu) \bar{T}_{8,k} + \lambda \left[\left(\check{c}_r \frac{\partial \bar{u}_{r,k}}{\partial r} + \check{d}_r \frac{\partial \bar{T}_{7,k}}{\partial r} \right) + \left(c_r \frac{\bar{u}_{r,k}}{r} + d_r \frac{\bar{T}_{7,k}}{r} \right) \right] \right).$$

Рассмотрим следующую замену переменных

$$\tilde{T}_1 = -\omega^2 s_r s_z R \tilde{u}_z = \frac{\sum_{j=0}^N (\mathrm{i}\omega)^j p_j}{\sum_{j=0}^M (\mathrm{i}\omega)^j q_j} \tilde{u}_z, \quad p_j, q_j \in \mathbb{R}$$

Домножим правую и левую части последнего выражения на знаменатель и выполним обратное преобразование Фурье

$$F^{-1}\left\{\sum_{j=0}^{N}\left(\mathrm{i}\omega\right)^{j}p_{j}\tilde{u}_{z}\right\} = \sum_{j=0}^{N}p_{j}\frac{\partial^{j}u_{z}}{\partial t^{j}} = F^{-1}\left\{\sum_{j=0}^{M}\left(\mathrm{i}\omega\right)^{j}q_{j}\tilde{T}_{1}\right\} = \sum_{j=0}^{M}q_{j}\frac{\partial^{j}T_{1}}{\partial t^{j}}.$$

$$(4.15)$$

После преобразования Лагерра получаем

$$\sum_{j=0}^{N} p_{j}L\left\{\frac{\partial^{j}u_{z}}{\partial t^{j}}\right\} = \sum_{j=0}^{N} \left(\bar{u}_{z,k}p_{j}\beta^{j} + p_{j}\Phi_{j}(\bar{u}_{z,k})\right) = \sum_{j=0}^{M} q_{j}L\left\{\frac{\partial^{j}T_{1}}{\partial t^{j}}\right\} =$$

$$= \sum_{j=0}^{M} \left(\bar{T}_{1,k}q_{j}\beta^{j} + q_{j}\Phi_{j}(\bar{T}_{1,k})\right),$$
(4.16)

где $\beta = \eta/2$. Откуда находим, что

$$\bar{T}_{1,k} = \frac{1}{\sum_{j=0}^{M} q_j \beta^j} \left(\bar{u}_{z,k} \sum_{j=0}^{N} p_j \beta^j + \sum_{j=0}^{N} p_j \Phi_j(\bar{u}_{z,k}) - \sum_{j=0}^{M} q_j \Phi_j(\bar{T}_{1,k}) \right) =$$
$$= \beta^2 s_r(-i\beta) s_z(-i\beta) R(-i\beta) \bar{u}_{z,k} + \frac{1}{\sum_{j=0}^{M} q_j \beta^j} \left(\sum_{j=0}^{N} p_j \Phi_j(\bar{u}_{z,k}) - \sum_{j=0}^{M} q_j \Phi_j(\bar{T}_{1,k}) \right).$$
(4.17)

Заметим, что второе слагаемое в правой части (4.17) есть линейная комбинация известных величин. Применяя аналогичные преобразования к (4.13) и делая

подстановку вспомогательных переменных в (4.14), имеем

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\left[\left(2\mu+\lambda\right)\frac{\breve{s}_{z}\breve{r}}{\breve{s}_{r}}\frac{\partial\bar{u}_{r,m}}{\partial r}+\lambda\frac{\breve{s}_{z}\bar{u}_{r,m}}{r}+\lambda\breve{r}\frac{\partial\bar{u}_{z,m}}{\partial z}\right]\right)+ \\
+\frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\left[\frac{\breve{r}\breve{s}_{r}}{\breve{s}_{z}}\frac{\partial\bar{u}_{r,m}}{\partial z}+\breve{r}\frac{\partial\bar{u}_{z,m}}{\partial r}\right]\right)- \\
-\frac{1}{r}\left(\lambda\breve{s}_{z}\frac{\partial\bar{u}_{r,m}}{\partial r}+\lambda\breve{s}_{r}\frac{\partial\bar{u}_{z,m}}{\partial z}+\left(\lambda+2\mu\right)\frac{\breve{s}_{r}\breve{s}_{z}}{\breve{r}}\frac{\bar{u}_{r,m}}{r}\right)-\rho\beta^{2}\breve{s}_{r}\breve{s}_{z}\breve{r}\bar{u}_{r,m}=\bar{\mathbf{F}}_{r,k},\quad(4.18)$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\left[\breve{r}\frac{\partial\bar{u}_{r,m}}{\partial z}+\frac{\breve{s}_{z}\breve{r}}{\breve{s}_{r}}\frac{\partial\bar{u}_{z,m}}{\partial r}\right]\right)+ \\
+\frac{\partial}{\partial z}\left(\left(\lambda+2\mu\right)\breve{r}\frac{\breve{s}_{r}}{\breve{s}_{z}}\frac{\partial\bar{u}_{z,m}}{\partial z}+\lambda\left[\breve{r}\frac{\partial\bar{u}_{r}}{\partial r}+\frac{\breve{s}_{r}\bar{u}_{r}}{r}\right]\right)-\rho\beta^{2}\breve{s}_{r}\breve{s}_{z}\breve{r}\breve{u}_{z,m}=\bar{\mathbf{F}}_{z,k},$$

где $\check{s}_z = s_z(-i\beta, z), \check{s}_r = s_r(-i\beta, r), \check{r} = R(-i\beta, r).$ Если значения функций s_r, s_z, R положить равными единице, тогда оператор системы уравнений (4.18) совпадает с (4.7). Несмотря на то что число вспомогательных переменных достаточно велико, они присутствуют только в правой части уравнения (4.18), поэтому соответствующая разностная задача может быть экономично решена с помощью алгоритма дихотомии. Для того чтобы получить аналитические выражения для $\bar{F}_{r,k}, \bar{F}_{z,k}$, необходимо для всех вспомогательных переменных (4.13) выполнить последовательность преобразований (4.15)-(4.17) и подставить результат в (4.14). Затем, все слагаемые, включающие функции Φ_j , перенести в правую часть. Например, для вспомогательной переменной $\bar{T}_{1,k}$ в правую часть $\bar{F}_{z,k}$ перейдет последнее слагаемое из (4.17), умноженное на ρ . Остальные слагаемые для правых частей уравнения (4.18) могут быть найдены аналогичным образом.

Для экономичного вычисления $\Phi_1(\bar{X}_n), \Phi_2(\bar{X}_n)$ можно использовать следующие вспомогательные переменные

$$\Phi'(\bar{X}_{n+1}) = \Phi'(\bar{X}_n) + \bar{X}_n, \quad \Phi''(\bar{X}_{n+1}) = \Phi''(\bar{X}_n) + n\bar{X}_n,$$

тогда

$$\Phi_1(\bar{U}_n) \equiv \eta \Phi'(\bar{X}_n), \quad \Phi_2(\bar{X}_n) \equiv \eta^2 \left(n \Phi'(\bar{X}_n) - \Phi''(\bar{X}_n) \right).$$

Вычисление Φ_3 может быть произведено через Φ_1, Φ_2 . Предполагая, что $\frac{d^2g}{dt^2}\Big|_{t=0} = 0$, $\lim_{t\to\infty} \frac{d^2g}{dt^2} = 0$, имеем

$$L\left\{\frac{d^3g}{dt^3}\right\} = L\left\{\frac{d^2h}{dt^2}\right\}, \qquad L\left\{\frac{dg}{dt}\right\} = L\left\{h(t)\right\}$$

Тогда, выполняя преобразование Лагерра, получаем

$$L\left\{\frac{d^{3}g}{dt^{3}}\right\} = \frac{\eta^{2}}{4}\bar{h}_{m} + \Phi_{2}(\bar{h}_{m}) =$$
$$= \frac{\eta^{2}}{4}\left(\frac{\eta}{2}\bar{g}_{m} + \Phi_{1}(\bar{g}_{m})\right) + \Phi_{2}\left(\frac{\eta}{2}\bar{g}_{m} + \Phi_{1}(\bar{g}_{m})\right) = \frac{\eta^{3}}{8}\bar{g}_{m} + \Phi_{3}(\bar{g}_{m}).$$

4.1.5. Алгебраический вариант метода декомпозиции областей для моделирования динамики акустических волн

Несмотря на то что модель среды, представленная на рис. 4.1, является весьма упрощённой, решение этой задачи на суперкомпьютере посредством спектрально-разностных алгоритмов представляет сложную проблему. Это объясняется необходимостью решения плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений с большим числом неизвестных. Для решения таких систем необходимо использовать экономичные методы, которые плохо поддаются параллельной реализации [195]. Как показано далее, применение алгоритма дихотомии позволяет успешно решить эту проблему.

В области $\Omega = \bigcup_{i=0}^{4} \Omega_i$ рис. 4.1 и $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$, когда $i \neq j$, введем в рассмотрение прямоугольную сетку ξ (рис. 4.3). Внутри областей Ω_i , i = 1, 2, 3 на сетке ξ аппроксимируем задачу (4.3); в подобласти Ω_4 аппроксимируем уравнение (4.9) для поглощающих граничных условий РМL.

Для того чтобы уменьшить зависимость числа арифметических действий от контрастности среды, рассмотрим алгебраический метод декомпозиции областей на основе декомпозиции Шу́ра [114]. Для этого пронумеруем узлы сетки в следующем порядке: сначала узлы из $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, \Omega_4$, а за ними узлы, принадлежащие границам $\omega_2, \omega_3, \omega_4$. Тогда разностную задачу для уравнений (4.3) и (4.9) запишем в виде системы линейных алгебраических уравнений

$$\begin{bmatrix} A_{11} & 0 & 0 & 0 & A_{1\Gamma} \\ 0 & A_{22} & 0 & 0 & A_{2\Gamma} \\ 0 & 0 & A_{33} & 0 & A_{3\Gamma} \\ 0 & 0 & 0 & A_{44} & A_{4\Gamma} \\ A_{1\Gamma}^{\mathrm{T}} & A_{2\Gamma}^{\mathrm{T}} & A_{3\Gamma}^{\mathrm{T}} & A_{4\Gamma}^{\mathrm{T}} & A_{\Gamma\Gamma} \end{bmatrix} \begin{cases} \mathbf{x}_{1} \\ \mathbf{x}_{2} \\ \mathbf{x}_{3} \\ \mathbf{x}_{4} \\ \mathbf{x}_{\Gamma} \end{cases} = \begin{cases} \mathbf{f}_{1} \\ \mathbf{f}_{2} \\ \mathbf{f}_{3} \\ \mathbf{f}_{4} \\ \mathbf{f}_{\Gamma} \end{cases},$$

где величина \mathbf{x}_i представляет подвектор неизвестных для внутренних точек по отношение к подобласти Ω_i , и x_{Γ} представляет значение рассчитываемого поля на границах всех подобластей. Матрица A_{jj} соответствует разностной задаче для уравнения (4.3) внутри подобласти Ω_j , j = 1, 2, 3, тогда как матрица A_{44} соответствует разностной задаче для уравнения (4.9) в подобласти Ω_4 . Для того чтобы вычислить компоненты вектора решения, принадлежащие границам $\omega_{1,2,3}$, решим систему линейных алгебраических уравнений вида

$$S\mathbf{x}_{\Gamma} = (A_{\Gamma\Gamma} - \sum_{i=1}^{4} A_{i\Gamma}^{\mathrm{T}} A_{ii}^{-1} A_{i\Gamma}) \mathbf{x}_{\Gamma} = \mathbf{f}_{\Gamma} - \sum_{i=1}^{4} A_{i\Gamma}^{\mathrm{T}} A_{ii}^{-1} \mathbf{f}_{i}, \qquad (4.19)$$

где S – это матрица дополнения Шу́ра [114]. После того, как решение на границах подобластей x_{Γ} будет вычислено, решение во внутренних точках области может быть определено как

$$\mathbf{x}_{i} = A_{ii}^{-1} \left(\mathbf{f}_{i} - A_{i\Gamma} \mathbf{x}_{\Gamma} \right), \ i = 1, 2, 3, 4.$$
(4.20)

Для решения уравнения (4.19) будем использовать метод сопряжённых градиентов, для реализации которого необходимо решить две проблемы. Первая проблема заключается в том, что умножение матрицы S на вектор требует параллельной реализации экономичных методов для многократного обращения матриц A_{ii} . Вторая проблема состоит в том, что матрица S плохо обусловлена, поэтому необходимо использовать процедуру предобусловливания. Рассмотрим процедуру умножения матрицы S из (4.19) на вектор. Очевидно, что основные вычислительные затраты требуются для многократного обращения матриц A_{ii} , i=1,2,3,4. Будем считать, что данные задачи распределены равномерно между p процессорами в соответствии с рис. 4.3. Разностной



Рис. 4.3. Расчётная сетка

задаче для уравнения (4.3) в подобласти Ω_1 соответствует система линейных алгебраических уравнений с матрицей A_{11} . Если скорость звука у свободной поверхности небольшая, то из-за необходимости использования малого шага сетки границу γ можно выравнивать по границам ближайших ячеек. Для реализации рассмотренного подхода в работе использован алгебраический вариант метода фиктивных областей, известный как метод фиктивных компонент, идея которого состоит в следующем [9, 51].

Пусть дана система линейных алгебраических уравнений

$$A_{11}\phi_1 = f_1 \tag{4.21}$$

с матрице
й $A_{11}=A_{11}^T>0,$ тогда рассмотрим расширенную систему уравнений

$$\begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad (4.22)$$

где $A_{22} = A_{22}^T \ge 0$. В этом случае матрица системы (4.22) будет симметричной положительно полуопределённой матрицей, и для любого решения $\phi = (\phi_1, \phi_2)^T$ вектор ϕ_1 является решением системы (4.21). Пусть матрица A_{22} соответствует разностной задаче для уравнения (4.3) в подобласти Ω_0 . Считая, что в подобласти Ω_0 все коэффициенты уравнения (4.3) равны нулю, получаем систему линейных алгебраических уравнений вида

$$\begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$
(4.23)

Пусть матрица C соответствует разностной задаче для оператора $L_h \equiv \Delta_h - d^2$, $d \in \mathbb{R}$ в подобласти $\Omega_0 \cup \Omega_1$. Тогда система (4.23) может быть решена методом GMRES(k) с предобусловливающей матрицей C за число итераций не зависящее от шага сетки [9]. Так как основная макро-операция состоит в обращении оператора L_h в прямоугольной области – это позволяет использовать параллельный вариант метода разделения переменных на основе алгоритма дихотомии для эффективного распараллеливания.

Матрицы A_{22} и A_{33} соответствуют разностной задаче для уравнения (4.3) для подобластей Ω_2 и Ω_3 , соответственно. Для вычисления произведения матриц A_{22}^{-1} и A_{33}^{-1} на вектор можно использовать метод разделения переменных, реализация которого требует порядка $O(N \log N)$ арифметических действий, где N – общее число узлов сетки в подобласти. Однако вычислить произведение матрицы $A_{i\Gamma}^{T}A_{ii}^{-1}A_{i\Gamma}$, i = 2, 3 на вектор можно с существенно меньшими арифметическими затратами. Для разностной задачи $A_{ii}\hat{\mathbf{y}} = A_{i\Gamma}\hat{\mathbf{f}}$, i = 2, 3 сеточная функция $A_{i\Gamma}\hat{\mathbf{f}}$ принимает ненулевые значения только в приграничных узлах подобласти. Для такой правой части вычисление прямого преобразование Фурье потребуется всего O(N) арифметических действий. Для умножения матрицы $A_{i\Gamma}^{\mathrm{T}}$ на вектор достаточно вычислить компоненты из вектора $\hat{\mathbf{y}}$, соответствующие приграничным узлам сетки для подобласти. Обратное преобразование Фурье для определения решения только в приграничных узлах сетки можно выполнить за O(N) арифметических действий. Учитывая, что решение трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений в рамках метода разделения переменных потребует O(N) арифметических действий, получаем, что итоговая оценка числа арифметических операций для умножение матрицы $A_{i\Gamma}^{\mathrm{T}}A_{ii}^{-1}A_{i\Gamma}$ на вектор будет O(N).

Матрица A_{44} соответствует разностной задаче для РМL уравнений (4.9) в подобласти Ω_4 . Ширина РМL слоя, как правило, находится в пределах от двадцати до пятидесяти узлов сетки, тогда как число ячеек в радиальном направлении – значительно больше $N_r \gg N_z$. При соответствующей нумерации неизвестных матрица A_{44} будет ленточной матрицей порядка $3N_zN_r$ с шириной ленты $3N_z$. Так как $N_z \ll N_r$ и, принимая во внимание плохую обусловленность матрицы A_{44} , для умножения матрицы A_{44}^{-1} на вектор следует использовать алгоритм дихотомии для блочно-трёхдиагональных матриц.

Таким образом, все процедуры решения локальных подзадач включают алгоритм дихотомии. Учитывая результаты вычислительных экспериментов из предыдущего параграфа, следует ожидать, что зависимость величины ускорения от числа процессоров для умножения матрицы *S* на вектор будет близка к линейной.

Процедуры предобусловливания

На сегодняшний день разработано много последовательных вариантов предобусловливающих процедур для решения задачи (4.19) [103, 224, 238]. Однако для суперкомпьютеров класс эффективных предобусловливателей существенно меньше. В рамках диссертации предлагается использовать предобусловливатель на основе алгоритма "проб" [104, 224, 238], в рамках которого матрица *S* аппроксимируется матрицей *M* таким образом, чтобы *M* была легко обратима. Для возможности использования алгоритма дихотомии требуется, чтобы предобусловливающая матрица M была ленточной или блочно-трёхдиагональной. Алгоритм "проб" не требует знания элементов матрицы S, так как для вычисления матрицы M достаточно иметь в своём распоряжении только процедуру умножения матрицы S на специальным образом выбранные вектора $\mathbf{p}_l, 1 \leq l \leq 2d + 1$, где d – необходимая ширина ленты предобусловливающей матрицы M. Для случая d = 1 матрица M будет трёхдиагональной, если векторы \mathbf{p}_l выбраны как $\mathbf{p}_1 = (1, 0, 0, 1, 0, 0, 1, ...,)^T$, $\mathbf{p}_2 = (0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, ...,)^T$, $\mathbf{p}_3 = (0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, ...,)^T$. Действительно, вычисляя произведение $M[\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3]$, которое может быть записано в виде

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & & & \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & & \\ & m_{31} & m_{32} & m_{33} & \\ & & m_{41} & m_{42} & m_{43} & \\ & & & & \ddots & \ddots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & 0 \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{34} & m_{32} & m_{33} \\ m_{44} & m_{45} & m_{43} \\ m_{54} & m_{55} & m_{56} \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

все ненулевые элементы матрицы M могут быть однозначно восстановлены по правой части. Рассмотренный подход обладает существенным преимуществом, так как здесь не требуется явного вычисления матрицы дополнения Шу́ра (4.19), а следовательно нет необходимости вычислять обратные матрицы A_{ii}^{-1} в явном виде. Недостаток метода состоит в том, что свойства положительной определённости и симметричности не гарантируются, даже если матрица S обладает такими свойствами. Разработанный в третьей главе алгоритм дихотомии позволяет одинаково эффективно решать не только системы линейных алгебраических уравнений с трёхдиагональными матрицами, но и с блочно-трёхдиагональными или ленточными матрицами. Для конструирования ленточных предобусловливающих матриц следует выбирать бо́льшие значения параметра d. В этом случае число итераций, необходимое для решения системы линейных алгебраических уравнений (4.19), будет уменьшаться, однако вычислительные затраты, необходимые для обращения предобусловливающей матрицы, будут возрастать. В рамках численных расчётов исследована зависимость сходимости и времени счёта от выбора параметра *d*.

4.1.6. Алгебраический вариант метода декомпозиции областей для моделирования динамики упругих волн

Рассмотрим расчётную область (рис. 4.4), которая является объединением трёх подобластей $\Omega = \bigcup_{i=1}^{3} \Omega_i$. Тогда система линейных алгебраических уравнений для разностной задачи для моделирования динамики упругих волн записывается в виде

$$\begin{pmatrix} A_{\Omega_1} & 0 & 0 & A_{\Gamma 1} \\ 0 & A_{\Omega_2} & 0 & A_{\Gamma 2} \\ 0 & 0 & A_{\Omega_3} & A_{\Gamma 3} \\ A_{\Gamma 1}^{\mathrm{T}} & A_{\Gamma 2}^{\mathrm{T}} & A_{\Gamma 2}^{\mathrm{T}} & A_{\Gamma \Gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{\Omega_1} \\ \mathbf{x}_{\Omega_2} \\ \mathbf{x}_{\Omega_3} \\ \mathbf{x}_{\Gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{\Omega_1} \\ \mathbf{f}_{\Omega_2} \\ \mathbf{f}_{\Omega_3} \\ \mathbf{f}_{\Gamma} \end{pmatrix},$$

где \mathbf{x}_{Ω_i} – подвектор неизвестных во внутренней части подобласти Ω_i , и x_{Γ} – вектор неизвестных для всех границ. Матрицы A_{Ω_1} и A_{Ω_2} соответствуют разностной задаче для уравнения (4.7) для внутренних подобластей $\Omega_{1,2}$, а матрица A_{Ω_3} для уравнений РМL (4.18).

Сначала необходимо рассчитать решения на границах $\omega_{2,3}$. Для этого, как и для уравнения акустики, решается система линейных алгебраических уравнений вида

$$S\mathbf{x}_{\Gamma} = \mathbf{f}_{\Gamma} - \sum_{i=1}^{3} A_{\Gamma i}^{\mathrm{T}} A_{\Omega_{i}}^{-1} \mathbf{f}_{\Omega_{i}}, \qquad (4.25)$$

где дополнение Шу́ра определено следующим образом

$$S = A_{\Gamma\Gamma} - \sum_{i=1}^{3} A_{\Gamma i}^{\mathrm{T}} A_{\Omega_{i}}^{-1} A_{\Gamma i}.$$

Несмотря на то что число итераций метода фиктивных компонент (4.23) не зависит от шага сетки, общее число итераций может быть значительным, особенно в



Рис. 4.4. Декомпозиция расчётной области

случае задания на криволинейной границе γ граничных условий типа Дирихле [9]. Также наличие неструктурированных сеток вдоль границы γ приводит к необходимости интерполяции значений сеточной функции с неравномерной сетки на равномерную на этапе обращения L_h , что значительно снижает скорость сходимости итерационного процесса. Для того чтобы снизить число итераций и сохранить возможность использования быстрых алгоритмов для обращения оператора L_h , модифицируем предобусловливающую процедуру.

Рассмотрим подобласти $\Omega_0 \cup \Omega_1 \subset \Omega$, $\xi_1 \cup \xi_2, \xi_3 \cup \xi_4 \subset \Omega_1$ (рис. 4.5) такие, что подобласти ξ_1, ξ_2 имеют равную ширину $d_{\xi_{12}} = const$, а подобласти ξ_3, ξ_4 имеют ширину $d_{\xi_{34}} = const$. Пусть матрицы C_2 и C_3 соответствуют разностным задачам в подобластях $\xi_1 \bigcup \xi_2$ и $\xi_3 \bigcup \xi_4$ для уравнения (4.7). Тогда вместо предобусловливающей процедуры вида $\mathbf{r} = C_1^{-1} \mathbf{z}$ будем использовать следующий алгоритм:

Алгоритм 4.1

1. Представим вектор **z** как $\mathbf{z} = \left(\mathbf{z}_{\Omega_0}, \mathbf{z}_{\xi_1}, \mathbf{z}_{\xi_2}, \mathbf{z}_{\Omega_1 \setminus (\bigcup_{k=1}^4 \xi_k)}, \mathbf{z}_{\xi_3}, \mathbf{z}_{\xi_4}\right)^{\mathrm{T}}$, где подвекторы соответствуют сеточным функциям в подобластях $\Omega_0, \xi_1, \xi_2, \Omega_1 \setminus \left(\bigcup_{k=1}^4 \xi_k\right), \xi_3, \xi_4$. 2. В подобласти $\Omega_0\cup\Omega_1$ решим систему уравнений вида

$$C_{1}\mathbf{t} = \tilde{\mathbf{z}},$$

$$\mathbf{t} = \left(\mathbf{t}_{\Omega_{0}}, \mathbf{t}_{\xi_{1}}, \mathbf{t}_{\xi_{2}}, \mathbf{t}_{\Omega_{1} \setminus (\bigcup_{k=1}^{4} \xi_{k})}, \mathbf{t}_{\xi_{3}}, \mathbf{t}_{\xi_{4}}\right)^{\mathrm{T}},$$

$$\tilde{\mathbf{z}} = \left(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{z}_{\xi_{2}}, \mathbf{z}_{\Omega_{1} \setminus (\bigcup_{k=1}^{4} \xi_{k})}, \mathbf{z}_{\xi_{3}}, \mathbf{0}\right)^{\mathrm{T}}.$$
(4.26)

3. В подобластях $\xi_1 \cup \xi_2$ и $\xi_3 \cup \xi_4$ решим системы уравнений вида

$$C_2 \begin{pmatrix} \mathbf{s}_{\xi_1} \\ \mathbf{s}_{\xi_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{z}_{\xi_1} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad C_3 \begin{pmatrix} \mathbf{w}_{\xi_3} \\ \mathbf{w}_{\xi_4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{z}_{\xi_4} \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

4. Принимая во внимание линейность уравнения (4.7), вычислим

$$\mathbf{r} = \left(\mathbf{0}, \mathbf{s}_{\xi_1} + \mathbf{t}_{\xi_1}, \mathbf{s}_{\xi_2} + \mathbf{t}_{\xi_2}, \mathbf{t}_{\Omega_1 \setminus (\bigcup_{k=1}^4 \xi_k)}, \mathbf{t}_{\xi_3} + \mathbf{w}_{\xi_3}, \mathbf{t}_{\xi_4} + \mathbf{w}_{\xi_4}\right)^{\mathrm{T}}.$$
 (4.28)



Рис. 4.5. Декомпозиция подобласти $\Omega_0 \cup \Omega_1$ для предобусловливающей процедуры

Разделение предобусловливающей процедуры на подзадачи (4.26) и (4.27) необходимо, так как разностные уравнения, включающие аппроксимацию граничных условий на криволинейной границе, не могут быть эффективно решены посредством быстрых методов на основе метода разделения переменных. Для этого с помощью алгоритма дихотомии решаются уравнения (4.27), которые позволяют вычислить приближённое решение вдоль границ γ, ω_2 . Присутствие коэффициента $\rho \eta^2/4$ в (4.7) обусловливает быстрое убывание решения от точечного источника, поэтому для правых частей вида (4.27), подбирая значения $d_{\xi_{12}}, d_{\xi_{34}}$ и задавая на фиктивных границах условия типа свободная поверхность, можно значительно сократить число итераций. Величины $d_{\xi_{12}}, d_{\xi_{34}}$ влияют на скорость сходимости итерационного процесса и на практике варьировались от пятидесяти до ста, что позволяло снизить число итераций в среднем до трёх, четырёх. Если коэффициенты среды в подобласти Ω_1 постоянны, тогда даже при небольших значениях $d_{\xi_{12}}, d_{\xi_{34}}$ решение достигается за одну или две итерации. Это объясняется тем, что уравнение (4.26) предобусловливает систему (4.22) без учета влияния граничных условий, заданных на γ, ω_2 , и достаточно точно аппроксимирует решение внутри подобласти. Для решения (4.26) следует использовать метод разделения переменных на основе комбинации быстрого Фурье преобразования и алгоритма дихотомии.

Как и в случае ступенчатой аппроксимации, для метода скошенных ячеек (рис. 4.26) для предобусловливания следует использовать алгоритм (4.24), где разностные уравнения (4.27) должны строится с учётом геометрии скошенных ячеек. Расчёты с применением гибридной сетки удобно проводить с помощью метода декомпозиции областей. Для этого подобласть с треугольной сеткой отделяется границей φ от основной расчётной области (рис. 4.2в). Ширина подобласти с треугольной сеткой, как правило, не превышает $20h_z \div 40h_z$, что позволяет записать матрицу системы линейных алгебраических уравнений в ленточном формате и использовать алгоритм дихотомии. Решение в подобласти, расположенной под ступенчатой границей φ , рассчитывается как и для ступенчатой аппроксимации.

Решение систем линейных алгебраических уравнений для узлов граничных подобластей

Для эффективной реализации рассмотренных выше вычислительных процедур необходимо использовать алгоритм дихотомии для решения системы линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональными матрицами вида

$$P\mathbf{X} = \mathbf{F},\tag{4.29}$$

где $P = \text{block-tridiag} (-A_i, C_i, -B_i)_{i=1}^N, \quad A_j, B_j, C_j \in \mathbb{R}^{M \times M}.$

Известно [129], что умножение вектора на циркулянтные, тёплицевы, ганкелевы матрицы может быть выполнено за значительно меньшее число арифметических операций, чем матрично-векторное произведение в общем случае. Так как алгоритм дихотомии на подготовительном этапе требует явного вычисления некоторых элементов обратной матрицы, то в процессе исследования было показано, что алгоритм дихотомии можно рассматривать как алгоритм быстрого умножения вектора на матрицу P^{-1} . Учёт структуры матрицы P позволяет вычислить матрично-векторное произведение $\mathbf{X} = P^{-1}\mathbf{F}$ за $O(M^2N\log N)$ операций вместо $O(M^2N^2)$.

Вычисление элементов обратной матрицы на подготовительном этапе алгоритма дихотомии – вычислительно затратная операция, поэтому для случая $N \gg p$, где p – число процессоров, для сокращения арифметических затрат алгоритм дихотомии применяется не к исходной, а к редуцированной системе линейных алгебраических уравнений с блочно-трёхдиагональной матрицей $\tilde{S} \in \mathbb{R}^{Mp \times Mp}$. Запишем задачу (4.29) в виде

$$P\mathbf{X} = \begin{pmatrix} A_{\mathrm{I}1} & & B_{\Gamma 1} \\ A_{\mathrm{I}2} & & B_{\Gamma 2} \\ & A_{\mathrm{I}3} & & B_{\Gamma 3} \\ & & & \ddots & \\ & & & A_{\mathrm{I}3} & B_{\Gamma 3} \\ & & & \ddots & \\ & & & A_{\mathrm{I}p} & B_{\Gamma p} \\ D_{\Gamma 1} & D_{\Gamma 2} & D_{\Gamma 3} & \cdots & D_{\Gamma p} & C_{\Gamma \Gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{\mathrm{I}1} \\ \mathbf{X}_{\mathrm{I}2} \\ \mathbf{X}_{\mathrm{I}3} \\ \cdots \\ \mathbf{X}_{\mathrm{I}p} \\ \mathbf{X}_{\Gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{\mathrm{I}1} \\ \mathbf{F}_{\mathrm{I}2} \\ \mathbf{F}_{\mathrm{I}3} \\ \cdots \\ \mathbf{F}_{\mathrm{I}p} \\ \mathbf{F}_{\Gamma} \end{pmatrix} = \mathbf{F},$$
где для N = Lp подматрицы определены следующим образом:

$$\begin{aligned} A_{\mathrm{Ij}} &= \mathrm{block-tridiag}\left(-A_{k}, C_{k}, -B_{k}\right)_{k=(j-1)L+2}^{jL} \in \mathbb{R}^{\mathrm{M}(\mathrm{L}-1)\times\mathrm{M}(\mathrm{L}-1)}, \\ C_{\Gamma\Gamma} &= \mathrm{block-diag}\left(C_{1}, C_{L+1}, \dots, C_{L(p-1)+1}\right) &\in \mathbb{R}^{\mathrm{Mp}\times\mathrm{Mp}}, \\ B_{\Gamma j} &= \left(\hat{B}_{j}^{\mathrm{T}}, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}, \check{B}_{j}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{\mathrm{M}(\mathrm{L}-1)\times\mathrm{Mp}}, \quad D_{\Gamma j} = \left(\hat{D}_{j}, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}, \check{D}_{j}\right) \in \mathbb{R}^{\mathrm{Mp}\times\mathrm{M}(\mathrm{L}-1)}, \\ \hat{B}_{j} &= -\mathbf{e}_{j}^{\mathrm{T}} \otimes A_{L(j-1)+2}, \quad \check{B}_{j} &= -\mathbf{e}_{j+1}^{\mathrm{T}} \otimes B_{jL}, \qquad \check{B}_{p} = \mathbf{0}, \quad \hat{B}_{j}, \check{B}_{j} \in \mathbb{R}^{\mathrm{M}\times\mathrm{Mp}}, \\ \hat{D}_{j} &= -\mathbf{e}_{j} \otimes B_{L(j-1)+1}, \quad \check{D}_{j} &= -\mathbf{e}_{j+1} \otimes A_{jL+1}, \quad \check{D}_{p} = \mathbf{0}, \quad \hat{D}_{j}, \check{D}_{j} \in \mathbb{R}^{\mathrm{Mp}\times\mathrm{M}}, \end{aligned}$$

$$\mathbf{X}_{\mathrm{Ij}} = \left(\bar{\mathbf{X}}_{L(j-1)+2}, \bar{\mathbf{X}}_{L(j-1)+3}, ..., \bar{\mathbf{X}}_{Lj}\right)^{\mathrm{T}}, \quad \mathbf{X}_{\Gamma} = \left(\bar{\mathbf{X}}_{1}, \bar{\mathbf{X}}_{L+1}, ..., \bar{\mathbf{X}}_{L(p-1)+1}\right)^{\mathrm{T}}.$$

Исключая $\mathbf{X}_{\mathrm{Ij}}, j = 1, 2, ..., p$, получаем

$$\tilde{S}\mathbf{X}_{\Gamma} = \left(C_{\Gamma\Gamma} - \sum_{k=1}^{p} D_{\Gamma k} A_{\mathrm{Ik}}^{-1} B_{\Gamma k}\right) \mathbf{X}_{\Gamma} = \mathbf{F}_{\Gamma} - \sum_{k=1}^{p} D_{\Gamma k} A_{\mathrm{Ik}}^{-1} \mathbf{F}_{\mathrm{Ik}}.$$
(4.30)

После определения \mathbf{X}_{Γ} остальные компоненты вектора решения могут быть вычислены как

$$\mathbf{X}_{\mathrm{Ij}} = A_{\mathrm{Ij}}^{-1} \left(\mathbf{F}_{\mathrm{Ij}} - B_{\Gamma \mathrm{j}} \mathbf{X}_{\Gamma}
ight), \quad$$
для $j = 1, ..., p.$

В рамках реализации спектрально-разностного подхода применение преобразования Лагерра по времени обусловливает наличие диагонального преобладания у матриц A_{Ω_i} . Известно, что для таких матриц элементы обратных матриц экспоненциально затухают при удалении от главной диагонали [119]. В этом случае для вычисления строк обратных матриц на процессоре с номером j для $1 \leq j \leq p$ вместо матрицы \tilde{S} будем использовать подматрицу вида

$$\tilde{S}_{j}(m) \equiv \left\{ \tilde{S} \right\}_{M \max(0, j-m-1)+1}^{M \min(p, j+m)}, \ 0 \le m < p.$$
(4.31)

Возможность такой замены обусловлена тем, что на *j*-ом процессоре для вычисления строк обратной матрицы необходимо решать задачи вида $\tilde{S}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} = \mathbf{e}_k$, k = M(j-1) + 1, ..., Mj. Принимая во внимание диагональное преобладание матрицы \tilde{S} , компоненты вектора решения $\mathbf{b} = (b_1, ..., b_k, ..., b_{Mp})^{\mathrm{T}}$ будут по модулю экспоненциально убывать при "удалении" от компоненты b_k . Тогда полагая, что компоненты b_i равны нулю для $i = 1, 2, ..., M \max(0, j - m - 1), M \min(p, j + + m) + 1, ..., Mp$, получаем матрицу (4.31), где параметр m позволяет контролировать точность приближённого решения. Такой подход позволяет решить проблему временного хранения копии редуцированной матрицы (4.30) на каждом процессоре и сократить число арифметических действий с $O(M^3p)$ до $O(M^3m)$, что делает возможным применения последовательных методов для вычисления элементов обратной матрицы.

4.2. Численные расчёты

Оценка вычислительной производительности

Для оценки производительности разработанных алгоритмов, на языке Fortran с использованием MPI-технологии параллельного программирования были реализованы программные комплексы для решения задач (4.1) и (4.4). Для выполнения быстрого Фурье-преобразования использовалась библиотека FFTW [135]. Для решения трёхдиагональных систем линейных уравнений использовался алгоритм дихотомии. Вычисления проводились на суперкомпьютере "MBC-100k" Межведомственного Суперкомпьютерного Центра РАН и на суперкомпьютере "NKS-30t" Сибирского Суперкомпьютерного Центра СО РАН.

В табл. 4.1 и рис. 4.6 представлены результаты измерений вычислительной производительности для метода сопряжённых градиентов, а в табл. 4.2 и рис. 4.7 для метода GMRES(10). Откуда видно, что при реализации разработанных алгоритмов была достигнута почти линейная зависимость величины ускорения от числа процессоров для сеток различной подробности. В рамках расчётов удалось задействовать значительное число процессоров от 1024 до 8192 с эффективностью от 90% до 50%, соответственно. Демонстрируемый уровень производительности и масштабируемости обеспечивается посредством применения алгоритма дихотомии в контексте параллельной процедуры обращения предобусловливающего оператора. Таким образом, предложенный алгоритм позволяет

size	2048x2048		4096x4096		8192x8192		16384x16384		32768x32768	
NP	Т	\mathbf{S}	Т	\mathbf{S}	Т	\mathbf{S}	Т	\mathbf{S}	Т	\mathbf{S}
256	6.3e-03	<u>142</u>	1.8e-02	284	9.0e-02	254	4.3e-01	253	2.15	172
512	-	-	1.1e-02	465	5.0e-02	448	2.0e-01	544	1.01	463
1024	-	-	1.0e-02	<u>512</u>	2.7e-02	829	1.0e-01	1088	5.4e-01	924
2048	_	-	_	-	2.3e-02	973	7.0e-02	1554	3.2e-01	1560
4096	-	-	-	-	2.0e-02	1120	5.8e-02	<u>1875</u>	2.1e-01	2377

существенно повысить эффективность использования вычислительных ресурсов суперкомпьютера при решении эллиптических уравнений.

Таблица 4.1. Зависимость времени счёта (T) и коэффициента ускорения (S) от числа процессоров для одной итерации метода сопряжённых градиентов

size	2048x2048		4096x4096		8192x8192		16384x16384		32768x32768	
NP	Т	\mathbf{S}	Т	\mathbf{S}	Т	\mathbf{S}	Т	\mathbf{S}	Т	S
256	0.17	200	0.72	312	3.8	245	15.5	258	-	_
512	0.32	106	0.38	591	1.93	484	8.4	476	35	-
1024	-	-	0.35	<u>641</u>	1	934	4.5	890	17.1	1047
2048	-	-	0.5	450	0.8	1168	2.63	1523	9.62	1862
4096	-	-	-	-	0.7	<u>1334</u>	2.2	1821	5.7	3132
8192	-	-	-	-	-	-	-	-	4	4480

Таблица 4.2. Зависимость времени счёта (T) и коэффициента ускорения (S) от числа процессоров для одного цикла GMRES(10)-метода

В [154] рассмотрен параллельный алгоритм для решения динамической задачи теории упругости с возможностью использования до 2^{10} процессоров. При использовании до 2^8 процессоров включительно авторам удалось получить почти линейную зависимость величины ускорения от числа процессоров, однако в интервале от 2^8 до 2^{10} процессоров эффективность алгоритма была ниже. Предлагаемый в диссертации спектрально-разностный алгоритм обеспечивает высокий уровень масштабируемости в интервале от 2^6 до 2^{13} процессоров при существенно более простой программной реализации.



Рис. 4.6. Зависимость времени счёта одной итерации при решении уравнения акустики с использованием метода сопряжённых градиентов

В результате вычислительных экспериментов было установлено, что время исполнения первой итерации для методов сопряжённых градиентов и GMRES(k) в несколько раз больше, чем последующих. Это объясняется тем, что при повторном выполнении основной коммуникационной операции "+" в рамках алгоритма дихотомии, применяется динамическая оптимизация межпроцессорных взаимодействий на уровне функции MPI_Reduce("+"). В силу ассоциативности операции сложения порядок межпроцессорных обменов устанавливается таким образом, чтобы время коммуникационных взаимодействий было по возможности минимальным. Применение алгоритмов динамической оптимизации межпроцессорных взаимодействий обуславливает высокую производительность алгоритма дихотомии и спектрально-разностного метода в целом. Для метода циклической редукции фиксированный порядок исключения неизвестных не позволяет провести оптимизацию межпроцессорных взаимодействий в полной



Рис. 4.7. Зависимость времени счёта одной итерации при решении задачи упругости с использованием метода GMRES(10)

мере, поэтому алгоритм дихотомии демонстрирует существенно более высокую производительность по сравнению с методом циклической редукции. Известно, что эффективность вариационных методов решения систем линейных алгебраических уравнений на суперкомпьютере снижается из-за интенсивных коммуникационных взаимодействий при вычислении $\|\cdot\|$ над распределёнными данными. Для решения этой проблемы предложены различные модификации известных алгоритмов [195]. Сравним оценки времени коммуникационных взаимодействий для вычисления $\|\cdot\|$ при реализации методов сопряжённых градиентов и GMRES(k) и время коммуникаций алгоритма дихотомии:

$$T_p^{\parallel \cdot \parallel, \, all - reduce} = 2\log_2(p)\alpha + \frac{p-1}{p}\left(\gamma + 2\beta\right),$$
$$T_p^{Dichotomy} = \alpha \left[\log_2(p) + 1\right]\log_2(p) + l\left(\log_2(p) - \frac{p-1}{p}\right)\left(\gamma + 2\beta\right).$$

Откуда следует, что для вычислительных систем с низкой величиной латентно-

сти α при условии $l \gg 1$, время межпроцессорных взаимодействий для вычисления $\|\cdot\|$ по сравнению с коммуникационными затратами алгоритма дихотомии будет незначительно. Таким образом, для предлагаемой предобусловливающей процедуры модификаций методов сопряжённых градиентов и GMRES(k) не требуется.

Расчёт динамики акустических волн

Использование сеточных методов при аппроксимации пространственных производных обуславливает численный эффект, называемый численной дисперсией [158]. При моделировании процесса распространения волн для длительных моментов времени данный эффект определяет точность получаемого решения, поэтому с практической точки зрения актуален вопрос о выборе числа узлов сетки на характерную длину волны. Высокая производительность предложенного алгоритма позволяет оценить точность решения для сеток с высокой разрешающей способностью ($h_{r,z} = 1/100\lambda \div 1/150\lambda$).

Из табл. 4.1 и 4.2 следует, что для расчёта акустических волн требуется существенно меньшее время счёта, чем для упругих, поэтому рассмотрим проблему моделирования распространения акустических волн в однородной среде, что позволило исследовать точность решения для сеток с существенно бо́льшим числом узлов и меньших вычислительных затратах. Точечный источник располагался в начале координат, а временная зависимость импульса от времени задавалась в виде где $f_0=30\Gamma$ ц., $t_0=0.2c.$, g=4. Аппроксимация уравнения (4.3) проводилась на равномерной сетке с числом узлов $N_1 = N_2 = 2^k$, $k = \{12, 13, 14, 15\}$, число слагаемых в ряде (4.2) было n = 3000, а параметр разложения полагался следующим $\eta = 400$.

Зависимости амплитуд волнового поля от времени для четырёх приемников, расположенных на свободной поверхности на разном удалении от источника, представлены на рис. 4.8. Видно, что точность получаемого решения для различных моментов времени значительно зависит от числа узлов сетки, приходящихся на характерную длину волны. Если для первых моментов времени для обеспечения приемлемой точности расчётов достаточно использовать сетку с пространственным шагом порядка $h_{r,z} = 1/40\lambda$, где λ – характерная длина волны, то для более длительных временных интервалов необходимо уменьшить шаг сетки, чтобы точность расчётов оставалась на приемлемом уровне.



Рис. 4.8. Решение уравнения акустики для приемника $u(\mathbf{x}_i, t)$, где $\mathbf{x}_i = (\mathbf{R}_i, 0), i = 3, 4$

На рис. 4.9 представлена зависимость точности получаемого решения от положения приемника для сеток различной подробности

$$\epsilon(\mathbf{x}_{i}) = \sqrt{\frac{\int_{0}^{t_{1}} \left[u_{exact}(\mathbf{x}_{i}, t) - u_{h}(\mathbf{x}_{i}, t)\right]^{2} dt}{\int_{0}^{t_{1}} \left[u_{exact}(\mathbf{x}_{i}, t)\right]^{2} dt}}, \ \mathbf{x}_{i} = (ih_{r}, 0), \ i = 1, ..., N_{1},$$

где $u_{exact}(r, 0, t) = \frac{1}{2\pi} \frac{f(t - r/\sqrt{c/\rho})}{r}$ – точное решение, а u_h – численное решение, полученное на сетке с пространственным шагом $h_{r,z} = h$.



Рис. 4.9. Зависимость точности решения от удаления приемника от источника для z=0и различных шагов сетки

При увеличении временного интервала моделирования в m раз, пространственный шаг должен быть уменьшен в $\approx \sqrt{m}$ раз, что согласуется с теоретическими оценками для методов аппроксимации второго порядка точности [158]. Таким образом, для моделирования акустических волн для длительных временных интервалов необходимо использовать сетки с достаточным числом узлов, чтобы численные эффекты, обусловленные дискретностью модели, не являлись доминирующими. При решении рассматриваемых задач могут быть использованы схемы высоких порядков точности [97, 165]. В рамках предлагаемого алгоритма повышение порядка аппроксимации не приводит к потере эффективности параллельной реализации, так как для схем более высокого порядка предобусловливание можно проводить со вторым порядком. В этом случае потребуется большее число итераций для методов сопряжённых градиентов и GMRES(k) для достижения заданной точности, однако характер зависимости величины ускорения от числа процессоров не изменится.

Расчёт динамики упругих волн в присутствии зоны малых скоростей

При тестировании численных алгоритмов определяющее значение имеет выбор модельных задач, которые позволяют оценить реальную точность получаемого решения. Для слоистых сред большое распространение получил матричный метод, предложенный и развитый в работах [149, 163, 166, 235]. Недостаток данного метода состоит в том, что он добавляет в решение помеху. Использование минорных матриц [123] позволило расширить границы применимости матричного метода, однако полностью избавиться от артефактов не удаётся. Для оценки точности предлагаемого параллельного алгоритма используется подход, рассмотренный в [131, 132]. Суть метода заключается в том, что искомая краевая задача второго порядка (в спектральной области) сведена к двум задачам Коши первого порядка, для которых существует устойчивое аналитическое решение. Как следствие, это позволило снять все ограничения на мощности слоев, частоты и системы регистрации. Сравнение результатов моделирования и результатов, полученных с помощью аналитического метода, позволит количественно оценить зависимость точности численного решения от шага пространственной сетки.

Первые результаты расчёта упругих волновых полей были получены достаточно давно [6–8, 56], однако из-за крупного шага пространственной сетки $h=1/5\lambda \div 1/2\lambda$ они носили, скорее, качественный характер. Значительное увеличение производительности компьютеров, а затем и разработка многопроцессорных вычислительных систем позволили повысить точность расчётов. Несмотря на наличие теоретических оценок зависимости точности решения от шага сетки, вопрос о практическом выборе пространственного шага сетки является до сих

153

пор актуальным. На примере решения уравнения акустики было показано, что расчёты для длительных моментов времени схемы второго порядка точности требуют использования достаточно подробных сеток. Так как рассматриваемый параллельный алгоритм обладает высокой производительностью, исследуем вопросы точности для динамической задачи теории упругости (4.4) для сеток $h = h_{r,z} = 1/10\lambda_s$, $1/20\lambda_s$, $1/45\lambda_s$, $1/90\lambda_s$, где $\lambda_s = \min V_s/f_0$. Здесь V_s – скорость распространения S – волн, f_0 – частота источника.

Рассмотрим задачу о распространение упругих волн в тонком слое, мощность которого сопоставима с длиной волны рис. 4.10а. Временная зависимость источника возбуждения волн от времени f(t) определена в (2.11), где $f_0 =$ $= 30, t_0 = 0.2c., g = 4$. Источник расположен на глубине d = 10м. Расчёты проводились для моментов времени $t \in (0, 5]$ секунд. Число членов ряда (4.6) полагалось равным n = 2000 с параметром $\eta = 600$.

Модель среды и мгновенный снимок волнового поля для компоненты $u_z(r, z)$ в момент времени t=3c. представлены на рис. 4.10a. На рис. 4.10б,в и рис. 4.11a,б показана зависимость компоненты u_z от времени для приемника, расположенного на свободной поверхности при r = 1500.

Из рис. 4.106 и рис. 4.11а следует, что сетки с шагами $1/10\lambda_s$, $1/20\lambda_s$ не обеспечивают никакой точности. Таким образом, чтобы обеспечить приемлемый уровень точности для начальных моментов времени рис. 4.10в, необходимо использовать сетку $1/45\lambda_s$ или $1/90\lambda_s$. Для заключительных моментов времени рис. 4.116 требуется проводить расчёты на сетке $1/90\lambda_s$. Результаты по оценке точности решения для динамической задачи теории упругости хорошо согласуются с результатами, полученными для уравнения акустики. Это позволяет утверждать, что основным фактором, определяющим точность решения при моделировании волновых процессов, является число узлов сетки, приходящихся на длину волны. И при моделировании реальных пространственно временных масштабов требуется использовать более подробные сетки.



Рис. 4.10. а) Мгновенный снимок волнового поля для компоненты $u_z(z,r)$ для момента времени t = 3c. Зависимость амплитуды от времени для приемника $u_z(1500,0)$ для расчётов на сетках: б) $N_r \times N_z = 4096 \times 4096$ и 8192 × 8192, в) $N_r \times N_z = 16384 \times 16384$ и 32768 × 32768

Моделирование динамики акустических волн в присутствии криволинейной свободной поверхности

Пусть размер расчётной области равен $L_r = 7$ км, $L_z = 1.5$ км (рис. 4.12 и 4.13). Точечный источник располагался на оси симметрии на глубине пятнадцати метров от свободной поверхности; временная зависимость сигнала источника определяется формулой (2.11) с параметрами $f_0 = 30\Gamma$ ц, $t_0 = 0.2$ с., g = 4. Число слагаемых ряда Лагерра было n = 6000; параметр разложения задан $\eta = 1800$. Для РМL граничных условий были выбраны следующие параметры: $L_{\rm PML} = 30h_z$, $c_p = 4400$ м/с, $\nu = 2$, $\chi = 10^{-6}$.

Матрицы S и M не являются спектрально эквивалентными, поэтому с уменьшением шага сетки число итераций метода сопряжённых градиентов для решения задачи (4.19) будет возрастать [70]. Однако увеличение ширины ленты (параметр d) для предобусловливающей матрицы M позволяет сократить число итераций (табл. 5.1). При уменьшении шага сетки в два раза значение параметра d должно быть увеличено в два раза, чтобы число итераций метода



Рис. 4.11. Зависимость амплитуды от времени для приемника $u_z(1500,0)$ для расчётов на сетках: а) $N_r \times N_z = 4096 \times 4096$ и 8192 × 8192, б) $N_r \times N_z = 16384 \times 16384$ и 32768 × 32768

сопряжённых градиентов не возрастало. Таким образом, предобусловливание на основе алгоритма "проб" позволяет значительно уменьшить время счёта, тогда как алгоритм параллельной прогонки позволяет эффективно решать систему линейных алгебраических уравнений с предобусловливающей матрицей.

Особенность предлагаемого параллельного алгоритма состоит в том, что перед началом решения серии задач (4.3) и (4.9) требуется провести подготовительные вычисления. Время подготовительных вычислений приведено в табл. 4.4 и включает время подготовительных вычислений алгоритма дихотомии для обращения матриц A_{ii} , i = 1, 2, 3, 4, а также затраты для вычисления предобусловливающей матрицы M. Число членов ряда Лагерра для длительных моментов времени составляет несколько тысяч, поэтому временем подготовительных вычислений можно пренебречь в силу их малости по сравнению с общим временем счёта. Меньший коэффициент ускорения (табл. 4.4) по сравнению с решением уравнения Пуассона объясняется необходимостью дополнительных межпроцессорных коммуникаций для метода GMRES(k) для обращения матрицы A_{11} . Более того, многократное обращение предобусловливающего оператора C для относительно небольшой подобласти $\Omega_0 \cup \Omega_1$ приводит к тому, что время коммуникаций по отношению ко времени вычислений увеличивается, из-за чего масштабируемость параллельного алгоритма снижается.

$N_z \times N_r$	3046×16384			607	78×327	68	12134×65536		
d	Gen	Total	Iter	Gen	Total	Iter	Gen	Total	Iter
no prec	-	370	4000	-	1550	5600	-	13900	9710
3	0.75	2.28	10	1	13	6.6	4.51	40	16
5	0.57	2	9	1.6	4.11	5.6	8.3	38	14
7	1.3	1.9	8	2.14	5.61	10	17	36	13
11	1.6	1.2	6	3.43	5	9	17.5	34	11
21	2.8	1.13	5	6.61	4.45	7	33	32	9
51	6.9	0.88	3	16.24	3.6	4	87	27	6
101	-	-	-	34	3.54	3	166	26	4

Таблица 4.3. Gen – время расчёта предобусловливающей матрицы M; Total – время решение одной задачи (4.25) при этом необходимо выполнить Iter итераций; d – ширина ленты предобусловливающей матрицы; число процессоров p = 256

В параграфе 4.1.5 было показано, что умножение матрицы $A_{i\Gamma}^{T}A_{ii}^{-1}A_{i\Gamma}$, i=2,3 на вектор можно осуществить за O(N) операций вместо $O(N \log N)$. Аналогичная ситуация возникает при умножении матрицы $A_{1\Gamma}^{T}A_{1\Gamma}^{-1}A_{1\Gamma}$ на вектор. Это объясняется тем, что при решении задачи $A_{11}\hat{\mathbf{y}} = A_{1\Gamma}\hat{\mathbf{f}}$ требуется существенно меньшее число итераций метода GMRES(k), чем для $A_{11}\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{f}}$. Для решения уравнения с матрицей A_{11} число итераций метода GMRES(k) для правой части $\hat{\mathbf{f}}$ было тринадцать, тогда как для $A_{1\Gamma}\hat{\mathbf{f}}$ требовалась одна итерация. Таким образом, каждая итерация метода сопряжённых градиентов для решения задачи



Рис. 4.12. М
гновенный снимок волнового поля для $t\,{=}\,3{\rm c}.$ для сетки с числом уз
лов ${\rm N_z}\times{\rm N_r}\,{=}\,$ $=\,12134\times65536$

(4.25) требует существенно меньшее число арифметических действий, чем если бы для всей расчётной области в качестве предобусловливающего оператора использовался оператор Лапласа. Более того, в последнем случае число итераций было бы существенно больше из-за высокой контрастности среды.

Моделирование динамики упругих волн в присутствии криволинейной свободной поверхности

Применение алгоритма дихотомии для решения системы линейных алгебраических уравнений обеспечило возможность использования нескольких тысяч процессоров с высокой эффективностью. Расчёт моделей с переменным ре-



Рис. 4.13. М
гновенный снимок волнового поля для $t\,{=}\,3{\rm c}.$ для сетки с числом уз
лов ${\rm N_z}\times{\rm N_r}\,{=}\,$ $=\,12134\times65536$

льефом дневной поверхности для динамической задачи теории упругости с точки зрения параллельной реализации не добавляет дополнительных трудностей, так как основным инструментом для распараллеливания является алгоритм дихотомии. Полученные в предыдущих главах диссертации оценки производительности и масштабируемости параллельных алгоритмов будут справедливыми в рамках данных вычислительных экспериментов, поэтому далее основное внимание уделено вопросам влияния различных способов аппроксимации осложнённого рельефа на точность решения. Для дискретизации уравнения (4.3) использовался метод конечных объёмов второго порядка точности [82, 161]. Для уравнения (4.7) применялся метод конечных элементов с билинейными базисны-

$N \times N$	$3046 \times 16384,$			607	8×32	768,	$12134 \times 65536,$		
$1V_Z \wedge 1V_r$	<i>d</i> =	= 17		d =	33		d =	51	
NP	Р	Т	S	Р	Т	S	Р	Т	S
32	42	9	-	179	38	-	-	-	
64	20	4.5	64	86	17.2	70	-	-	
128	20	2.1	137	60	9	135	379	53	-
256	23	1	288	46	4.5	270	197	27	251
512	34	0.65	443	56	2.1	579	383	13	521
1024	60	0.56	514	83	1.52	800	281	8	848

Таблица 4.4. Р – общее время подготовительных вычислений, Т – время расчёта одного коэффициента разложения ряда Лагерра, S – величина ускорения, d – ширина ленты предобусловливающей матрицы, NP – число процессоров, N_r, N_z – число узлов сетки в направлениях r и z

ми функциями [47]. Ширина подобласти с треугольной сеткой (рис. 4.2в) была $40h_z$. Для генерации треугольной сетки в рамках гибридного подхода использовался пакет "NetGen" [209, 210].

Исследуем влияние различных способов аппроксимаций рельефа дневной поверхности на точность моделирования акустических и упругих волновых полей. Точечный источник был расположен на оси симметрии на глубине 25м от свободной поверхности; временная зависимость сигнала источника была задана как (2.11), где $f_0 = 30\Gamma$ ц., $t_0 = 0.2$ с., g = 4. Для задачи (4.4) источник был задан типа "центр давления" [38]. По сравнению с преобразованием Фурье, для которого базисные функции определены однозначно, параметр η должен быть задан перед применением преобразования Лагерра. Этот параметр выбирался на основе сходимости ряда Лагерра для правой части, так чтобы в среднеквадратичной норме точность разложения составляла порядка $\varepsilon < 10^{-8}$. Число слагаемых ряда (2.1) было n = 4000; параметр разложения был выбран $\eta = 1250$. Вычисления проводились на сетках с числом узлов $N_r \times N_z = 16384 \times 5461$, что соответствовало 64 точек на длину волны. Для РМL поглощающего профиля $d_z(z) = \frac{(\nu+1)c_p}{2L_{\text{PML}}} \log \left(\frac{1}{|\chi|}\right) \left[\frac{(z-z_0)}{L_{\text{PML}}}\right]^{\nu}$ были заданы следующие параметры $L_{\text{PML}} = 30h_z$, $c_p = 500 \text{м/c}, \ \nu = 2 \text{ и } \chi = 10^{-6}, \ \alpha_z = 90, \ c_r = c_z = 7 \ \text{для случая упругих волн ко-}$ эффициент c_p был выбран равным 1000м/с. При решении системы линейных алгебраических уравнений (4.22), (4.25) условие остановки итерационного процесса метода GMRES(5) было выбрано $||Ay - f||/||f|| < 10^{-12}$.

Сравнивая волновые поля на рис. 4.14а и 4.14б, отмечаем, что использование ступенчатой аппроксимации приводит к существенному нефизическому рассеиванию акустических волн от криволинейной границы, тогда как применение метода скошенных ячеек или гибридной сетки позволяет исключить этот нежелательный эффект. Несмотря на то что амплитуда фиктивных отраженных волн значительно меньше, чем амплитуда моделируемой волны, для больших времен моделирования погрешность, обусловленная нефизическим рассеянием, накапливается, что приводит к выраженной ошибке амплитуды волны (рис. 4.14в). Результаты моделирования упругих волновых полей представлены на рис. 4.15. В силу того, что Рэлеевская волна имеет эллиптическую поляризацию, использование ступенчатой аппроксимации порождает более выраженное нефизическое рассеяние, чем для P-,S- волн (рис. 4.15а). Это приводит к тому, что амплитуда Рэлеевской волны при моделировании для длительных времен и расстояний в значительной степени искажается (рис. 4.156 против рис. 4.15г). Использование гибридной сетки позволяет исключить этот нежелательный численный эффект.

Рассмотрим закон сохранения полной механической энергии:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}(t) = \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} \int \rho \mathbf{V}^2 d\Omega + \frac{1}{2} \int \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\Omega \right] = 0,$$

$$(4.32)$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \varepsilon_{kk} + 2\mu \varepsilon_{ij}, \quad \varepsilon_{ij} = 1/2 (\nabla_j \mathbf{U}_i + \nabla_i \mathbf{U}_j),$$

где U, V – векторы перемещения и скорости, σ_{ij} , ε_{ij} – тензоры напряжения и деформации, δ_{ij} – символ Кронекера. Для известных перемещений поле скоростей может быть определено как:

$$\mathbf{V}(\mathbf{x},t) = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(\mathbf{x},t) = \sum_{m=0}^{\infty} \mathbf{U}_m(\mathbf{x}) \frac{d}{dt} (l_m(\eta t)) =$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \mathbf{U}_m(\mathbf{x}) \frac{d}{dt} \left(\exp^{-\frac{\eta t}{2}} L_m(\eta t) \right),$$
(4.33)

где для вычисления производной от многочленов Лагерра следует использовать свойство [118]: $t \frac{d}{dt} L_n(t) = n L_n(t) - n L_{n-1}$. Точность выполнения (4.32) является важной характеристикой алгоритма моделирования динамики упругих волновых полей. В тех случаях, когда решение в аналитическом виде представлено быть не может, степень сохранения полной механической энергии позволяет косвенно оценить корректность алгоритмов и программ. Для модели на рис. 4.15а была вычислена полная механическая энергия для моментов времени $t_0 = 0.5, 2.5$ и 4с. Зависимость величины $\tau_n(t_0) = -\log_{10}\left(|\mathcal{E}(t_0) - \mathcal{E}(0.4)|/\mathcal{E}(0.4)\right)$ от числа слагаемых ряда Лагерра приведена на рис. 4.16. Видно, что энергия сохраняется на уровне от шести до восьми значащих цифр. Несмотря на то что метод конечных элементов позволяет строить консервативные схемы, в данном случае основным источником дисбаланса энергии является погрешность решения систем линейных алгебраических уравнений, а также процедура вычисления скоростей по известным перемещениям (4.33). Таким образом, дискретный аналог уравнения (4.4), построенный на основе метода конечных элементов и преобразования Лагерра по времени, позволяет с высокой степенью точности сохранять полную энергию, при этом значительного роста или нефизической диссипации энергии для длительных моментов времени не наблюдается.

Для подобластей $\xi_1 \cup \xi_2$ и $\xi_3 \cup \xi_4$ для предобусловливающей процедуры (4.26), (4.27), (4.28) было выбрано $d_{\xi_{12}} = d_{\xi_{34}} = 45h_z$, что позволило сократить число итераций при решении уравнения (4.22) с двадцати до одной или двух. Для исследования влияния замены матрицы \tilde{S} на матрицу $\tilde{S}_j(m)$ была проведена оценка времени счёта подготовительного этапа алгоритма дихотомии для 1024 процессоров для матрицы C_2 из (4.27) для $d_{\xi_{12}} = 45h_z$. Время подготовительных вычислений для m = 32, 64, 128, 256 составило t = 5, 10, 20, 40 секунд, соответственно. Для m = 32, 64, 128, 256 требовалось одна или две итерации метода GMRES(k) для решении системы линейных алгебраических уравнений (4.22) с предобусловливающей процедурой (4.26), (4.27), (4.28). Таким образом, выбирая m = 32 для (4.31), можно минимизировать время подготовительных вычислений без снижения скорости сходимости итерационного процесса.



Рис. 4.14. Мгновенный снимок акустического поля в момент времени t = 4.25с. для а) ступенчатой, б) гибридной аппроксимаций, метода скошенных ячеек; в) зависимость амплитуды волнового поля вдоль линии "Slice"

Вычислительные эксперименты показали, что для уравнения акустики реализация метода конечных объёмов для скошенных ячеек (рис. 4.26) и метод конечных элементов для гибридной сетки (рис. 4.2в) обеспечивают одинаковую точность расчётов. Неустойчивость для метода скошенных ячеек не возникало, несмотря на наличие ячеек с малыми площадями. Недостаток метода скошенных ячеек состоит в том, что скошенные ячейки сетки могут иметь произвольную форму. В этом случае сложно построить одновременно устойчивую и достаточно точную аппроксимацию схему для дифференциального оператора Ламе при значениях коэффициента Пуассона близкого к 1/2, поэтому метод скошенных ячеек может быть рекомендован только для решения уравнения акустики,



Рис. 4.15. Мгновенный снимок упругого поля для компоненты u_r для а) ступенчатой и в) гибридной аппроксимации для момента времени t = 4.25с; зависимость амплитуды волнового поля от координаты r вдоль прямой "Slice" для б) ступенчатой и г) гибридной аппроксимации



Рис. 4.16. Зависимость погрешности $\tau_n(t_0)$ для закона сохранения полной механической энергии для различных времен от числа коэффициентов разложения ряда Лагерра для модели на рис. 4.15

а для случая моделирования упругих волн следует применять метод конечных элементов.

Скоростная модель среды "The Canadian foothills"

Рассмотрим в качестве тестовой модели двухслойную среду с переменным рельефом (рис. 4.17), заимствованным из модели "The Canadian Foothills" [144]. Число слагаемых ряда (2.1) было n = 10000; параметр разложения был выбран $\eta = 1800$. Для уравнения акустики расчёты были выполнены для сеток с числом узлов $N_z \times N_r = 2183 \times 16384$, $4366 \times 32768, 8732 \times 65536$, что соответствовало шагу сетки $h_{z,r} = 1/35\lambda_{\min}, 1/70\lambda_{\min}, 1/140\lambda_{\min},$ где $\lambda_{\min} = 50$ м. Для моделирования сейсмических волн число узлов сетки было выбрано $N_z \times N_r =$ $= 4096 \times 32768, 8192 \times 65536, 16384 \times 131072$, что соответствовало шагу сетки $h_{z,r} = 1/45\bar{\lambda}_{\min}, 1/90\bar{\lambda}_{\min}, 1/190\bar{\lambda}_{\min},$ где $\bar{\lambda}_{\min} = 33.3$ м.



Рис. 4.17. Мгновенный снимок волнового поля для момента времени *t*=6с. а), б) для акустики и в), г) для упругости; на б) и г) для *t* = 6с. отображены более слабые головные волны

Результаты расчётов акустических волновых полей с использованием гибридной сетки и метода скошенных ячеек совпадают с высокой точностью. На рис. 4.18 представлена временная зависимость амплитуды волнового поля в пункте приема с координатами (r_0, z_0) = (7000, 2000) для сеток различной подробности. Для моментов времени t > 5c. применение ступенчатой аппрокси-



Рис. 4.18. Зависимость амплитуды от времени для приемника $(r_0, z_0) = (7000, 2000)$ для уравнения а) акустики и б) упругости для сеток различной подробности

мации для моделирования акустических волновых полей обусловливает значительные погрешности амплитуды и кинематики волнового поля. На рис. 4.18 видно, что для рассматриваемого удаления от источника необходимо выбирать сетку с шагом $h_{z,r} = 140 \div 180\lambda_{min}$, что согласуется с оценками, полученными в работе [133]. Число узлов сетки может быть уменьшено за счёт применения конечноэлементных аппроксимаций более высокого порядка точности, чем второй. При этом общая схема расчёта принципиально не изменяется.

Как показали расчёты, чем круче рельеф, тем большее значение величины $d_{\xi_{12}}$ должно задаваться (рис. 4.5), в противном случае для Ω_1 потребуется выполнить большее число итераций в рамках метода фиктивных компонент (4.22). Для того чтобы матрица C_2 из (4.27) имела компактную ленточную структуру нижняя граница подобласти ξ_2 должна задаваться путём переноса точек границы γ вдоль z на расстояние $2d_{\xi_{12}}$. Однако с увеличением крутизны рельефа для одного и того же значения параметра $d_{\xi_{12}}$ минимальное расстояние между любой точкой, принадлежащей границе γ , и любой точкой, принадлежащей нижней границы подобласти ξ_2 , будет уменьшаться, а число итераций для решения задачи (4.22) – увеличиваться. Это объясняется тем, что фиктивное граничное условие свободной поверхности, задаваемое на нижней границе подобласти ξ_2 , будет сильнее влиять на решение внутри подобласти. Если для модели (рис. 4.14) достаточно было выбрать $d_{\xi_{12}} = 30h_z$ для сокращения числа итераций до одной, то для модели "the Canadian Foothils" требуется $d_{\xi_{12}} = 90h_z$, чтобы решение уравнения (4.22) было вычислено за шесть итераций. Отметим, что если в качестве предобусловливающей процедуры использовать только матрицу C_1 без C_2 , C_3 , то число итераций будет на порядок больше. Таким образом, предлагаемый предобусловливающий алгоритм доказал свою эффективность.

Дополнительно для модели среды "the Canadian Foothills" (рис. 4.19) было проведено моделирование акустических волновых полей. Здесь существенной особенностью является неоднородность скоростной модели среды. Применение метода декомпозиции областей позволило выделить макро-подобласти, для которых отношение максимальной и минимальной скорости меньше, чем для всей области. Такой подход сокращает время решения систем линейных алгебраических уравнений, однако по сравнению с предыдущей двухслойной моделью время счёта увеличилось в три раза. Это объясняется тем, что при построении матрицы для решения уравнения (4.26) скорость среды в подобласти выбиралась усреднённой по пространству, что увеличивает число итераций метода GMRES(k) для обращения матриц A_{Ω_i} , i = 1, 2, 3.

Математическое моделирование вибросейсмических волновых полей в Южном Прибайкайле

Для эксперимента BEST математическое моделирование волнового поля осуществлено для модели с пятью слоями в земной коре на упругом полупространстве, моделирующем верхнюю мантию. Рассматривались варианты модели с разными значениями скоростей продольных волн в слое мощностью 10 км в нижней коре на границе с мантией. В первом случае скорость продольных волн



Рис. 4.19. а) Модель среды "the Canadian foothills", б) мгновенный снимок акустического волнового поля в момент времени t = 4.5, в) зависимость амплитуды волнового поля для приемника r = 7000, z = 2000 от времени для гибридной сетки различной подробности

была выбрана Vp=7,25 км/сек, во втором случае скорость продольных волн в этом слое принята Vp=6,65 км/сек, что характерно для континентальной коры Азиатской плиты. Получены теоретические (синтетические) сейсмограммы, выполнен сравнительный анализ сейсмограмм для двух моделей и экспериментальных данных (рис. 4.21–4.24,). Расчёты проводились для области протяжен-



Рис. 4.20. Скоростная модель земной коры Байкальского региона по результатам эксперимента BEST [193]

ностью 500км при глубине 50км число узлов сетки было выбрано 65536 по горизонтали и 6536 по глубине. Число коэффициентов разложения Лагерра было выбрано равным 20000, чтобы аппроксимировать волновое поле для $t \in (0, 70]$ с.



Рис. 4.21. Мгновенный снимок волнового поля для времени t = 16с. и удалений [100, 200]км для акустической модели. На нижнем рисунке амплитуды отображаются со стократной чувствительностью

Математическое моделирование полных волновых полей для двух скоростных моделей земной коры, полученных для юга Байкальской рифтовой зоны в эксперименте BEST позволило получить теоретические сейсмограммы в области 0-500 км от источника. Анализ экспериментальных данных времен первых вступлений в группе P-волн на 500-км профиле Байкал–Улан-Батор показал, что они соответствуют временам вступлений группы P-волн наибольшей ин-



Рис. 4.22. Мгновенный снимок волнового поля для времени t = 28.5с. и удалений [200, 300]км для акустической модели. На нижнем рисунке амплитуды отображаются со стократной чувствительностью

тенсивности для этих экспериментов. Экспериментальные данные не содержат времен вступлений соответствующих волнам со скоростью продольных волн $V_p = 7.25$ км/с связанных со слоем мощностью около 10км в нижней коре, которая присутствует в скоростной модели земной коры по данным эксперимента BEST.

4.3. Выводы

В четвёртой предложен спектрально-разностный метод для моделирования акустических и упругих волновых полей для моделей сред, включающих



Рис. 4.23. Мгновенный снимок волнового поля для времени t = 45.5с. и удалений [300, 400]км для акустической модели. На нижнем рисунке амплитуды отображаются со стократной чувствительностью

криволинейную границу для свободной поверхности. Переход от начально-краевой задачи к серии краевых задач с одним и тем же эллиптическим оператором осуществляется посредством интегрального преобразования Лагерра по времени. Вычисление коэффициентов разложения ряда Лагерра с достаточной точностью обеспечивает устойчивость всего вычислительного процесса. Ядром предлагаемого алгоритма является параллельная процедура решения систем линейных алгебраических уравнений, разработанная на основе быстрых предобусловливающих алгоритмов и алгебраического варианта метода декомпозиции областей. Экономичность предобусловливающей процедуры по числу арифме-



Рис. 4.24. Мгновенный снимок волнового поля для времени t = 62.5с. и удалений [400, 500]км для акустической модели. На нижнем рисунке амплитуды отображаются со стократной чувствительностью

тических действий достигается посредством использования алгоритма быстрого Фурье преобразования и алгоритма дихотомии, предложенного в третьей главе диссертации. Реализованный метод декомпозиции областей позволяет эффективно рассчитывать волновые поля для моделей сред, для которых можно выделить макро-подобласти с небольшими вариациями скоростей, а также эффективно решать разностные уравнения для осложнённого рельефа и PML граничных условий. Основная проблема реализации PML граничных условий в рамках численно-аналитического подхода состоит в решении ленточной системы линейных алгебраических уравнений с шириной ленты порядка ста, для

которой может применён алгоритм дихотомии. Вычислительные эксперименты показали, что временные затраты, необходимые для решения PML уравнений, составляют незначительную часть от общего времени счёта. Применение преобразования Лагерра по времени вместо разностных аппроксимаций улучшает согласованность PML уравнений, поэтому величина амплитуды отраженной фиктивной волны была на уровне ошибок аппроксимации волновых уравнений. В качестве предобусловливающей процедуры для сокращения времени расчётов был использован подход на основе алгоритма "проб", реализация которого в контексте параллельных алгоритмов до настоящего времени сдерживалась необходимостью решения систем линейных алгебраических уравнений с ленточными матрицами. Экономичное обращение таких матриц с использованием многопроцессорных вычислительных систем является нетривиальной задачей. Однако разработка алгоритма дихотомии позволила преодолеть и эту трудность. Таким образом, данный вид предобусловливающей процедуры теперь может быть эффективно применен на современных суперкомпьютерах. Выполненные численные эксперименты с использованием нескольких тысяч процессоров доказали работоспособность и эффективность предлагаемого подхода. Зависимость величины ускорения от числа процессоров была почти линейной.

Вычислительные эксперименты с применением различных способов аппроксимации осложнённого рельефа показали, что ступенчатая аппроксимация порождает сильное нефизическое рассеяние для всех типов волн (P, S, Рэлеевские), как следствие, амплитуды волнового поля для длительных временных интервалов значительно искажаются. Для метода скошенных ячеек и гибридного метода эффект численного рассеивания волн практически исключается, в том числе и для таких сложных сред как "The Canadian foothills". Метод скошенных ячеек и гибридный подход для аппроксимации переменного рельефа при моделировании акустических волновых полей позволяют достичь одинаковой точности расчётов, однако для моделирования упругих волновых полей следует использовать метод конечных элементов с применением гибридной сетки. В этом случае механическая энергия сохраняется с высокой степенью точности. Предложенная предобусловливающая процедура позволяет одинаково быстро решать систему линейных алгебраических уравнений для всех рассмотренных способов аппроксимаций криволинейной границы, поэтому единственное преимущество ступенчатой аппроксимации является более простая программная реализация, что несущественно при выборе метода решения. Таким образом, в дополнение к уже существующим методам моделирования акустических и упругих волновых полей для моделей сред, включающих осложнённый рельеф и высококонтрастные скоростные модели, предложен новый инструмент численного моделирования на основе спектрально-разностного подхода. Данный метод был использован для математического моделирования акустических и упругих волновых полей с целью верификации теоретических скоростных моделей земной коры, полученных для юга Байкальской рифтовой зоны и сопредельных областей Монголии в эксперименте BEST (Baikal Explosion Seismic Transect).

Глава 5

Спектрально-разностные алгоритмы экстраполяции волнового поля в глубину на основе решения одностороннего волнового уравнения

5.1. Спектрально-разностный метод для решения одностороннего волнового уравнения

В первой главе были рассмотрены математические модели для построения изображения земных недр на основе решения одностороннего волнового уравнения, которое описывает распространение волн только в положительном или отрицательном выбранном направлении. Для построения спектрально-разностного алгоритма сначала рассмотрим двумерную постановку задачи:

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} = \pm i \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \left(\frac{ck_x}{\omega}\right)^2} \tilde{u}.$$
(5.1)

Для того чтобы перевести уравнение (5.1) в пространственную область, недостаточно заменить $-k_x^2 \rightleftharpoons \partial^2/\partial x^2$, так как нет чёткого понятия для корня квадратного дифференциального оператора. Квадратный корень приобретает смысл лишь в том случае, когда он приближен некоторым конечным многочленом или отношением многочленов. Такое приближение может быть построено на основе Паде-аппроксимации [40, 147, 155, 201]. В этом случае квадратный корень приближается следующим образом

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} = -i\frac{\omega}{c} \left[1 - \sum_{s=1}^{n} \frac{\beta_s c^2 k_x^2}{\omega^2 - \gamma_s c^2 k_x^2} \right] \tilde{u},\tag{5.2}$$

где коэффициенты $\gamma_s, \beta_s \in \mathbb{R}$ выбираются такими (см. табл. 1.1), чтобы оптимизировать точность расчёта волнового поля для требуемых углов распространения [147, 174].

5.1.1. Преобразование Лагерра для одностороннего волнового уравнения

Рассмотрим уравнение (5.2) для области (*x*, *z*, *t*). Для этого удобно ввести в рассмотрение вспомогательные функции [155, 201] вида

$$\tilde{\psi}_s = \frac{\beta_s c^2 k_x^2}{\omega^2 - \gamma_s c^2 k_x^2} \tilde{u},$$

тогда уравнение (5.2) может быть записано как

$$c\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} + i\omega \tilde{u} - i\omega \sum_{s=1}^{n} \tilde{\psi}_s = 0.$$

Применяя обратное преобразование Фурье по времени и пространству для двух последних уравнений, получаем систему дифференциальных уравнений в частных производных, определяющую процесс экстраполяции волнового поля в глубину

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial z} - \sum_{s=1}^{n} \frac{\partial \psi_s}{\partial t} = 0, \qquad (5.3a)$$

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi_s}{\partial t^2} - \gamma_s\frac{\partial^2\psi_s}{\partial x^2} - \beta_s\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad s = 1, 2, \dots n.$$
(5.3b)

Выполняя преобразование Лагерра по времени для уравнений (5.3a) и (5.3b), получаем следующую задачу для вычисления *m*-ого коэффициента разложения

$$\tilde{\eta}\bar{u}^m + c\frac{\partial\bar{u}^m}{\partial z} = \sum_{s=1}^3 \left(\tilde{\eta}\bar{\psi}_s^m + \Phi_1\left(\bar{\psi}_s^m\right)\right) - \Phi_1\left(\bar{u}^m\right), \quad (5.4a)$$

$$\left(c^2 \gamma_s \frac{\partial^2 \bar{\psi}_s^m}{\partial x^2} - \tilde{\eta}^2 \bar{\psi}_s^m + \beta_s c^2 \frac{\partial^2 \bar{u}^m}{\partial x^2} = \Phi_2(\bar{\psi}_s^m), \quad s = 1, 2, 3, \tag{5.4b}\right)$$

где $\tilde{\eta} = \eta/2$, а индекс *m* обозначает номер слагаемого ряда (2.1), $\Phi_1(\bar{a}_m) = \eta \sum_{j=0}^{m-1} \bar{a}_j$, $\Phi_2(\bar{a}_m) = \eta^2 \sum_{j=0}^{m-1} (m-j) \bar{a}_j$.

После преобразования Лагерра параметром разделения гармоник является степень полинома Лагерра *m*. Это позволяет в области (x, z, m) решать систему линейных алгебраических уравнений с одним и тем же оператором, но для

различных правых частей, тогда как в области (x, z, ω) такое свойство отсутствует. После пространственной аппроксимации уравнений (5.4) необходимость многократного решения системы линейных алгебраических уравнений с одной и той же матрицей и различными правыми частями позволяет построить эффективную вычислительную процедуру для решения разностной задачи.

5.1.2. Конечно-разностная аппроксимация пространственных производных

Для аппроксимации производной в направлении *z* для уравнения (5.4а) будем использовать безусловно устойчивую схему Кранка – Николсон [116] второго порядка точности

$$\begin{cases} c \frac{\bar{u}_{ik+1}^m - \bar{u}_{ik}^m}{h_z} + \tilde{\eta} \frac{\bar{u}_{ik}^m + \bar{u}_{ik+1}^m}{2} - \tilde{\eta} \sum_{s=1}^3 \bar{\psi}_{ik+1/2}^{m,s} = \\ = -\Phi_1 \left(\frac{\bar{u}_{ik}^m + \bar{u}_{ik+1}^m}{2} \right) + \sum_{s=1}^3 \Phi_1 \left(\bar{\psi}_{ik+1/2}^{m,s} \right), \\ c^2 \gamma_s \mathcal{L}_x \bar{\psi}_{ik+1/2}^{m,s} - \tilde{\eta}^2 \bar{\psi}_{ik+1/2}^{m,s} + c^2 \beta_s \mathcal{L}_x \bar{u}_{ik+1}^m = \\ = -c^2 \beta_s \mathcal{L}_x \bar{u}_{ik}^m + \Phi_2 (\bar{\psi}_{ik+1/2}^{m,s}), \quad s = 1, 2, 3, \end{cases}$$
(5.5a)

где разностный оператор \mathcal{L}_x имеет вид

$$\mathcal{L}_{x}f(x) \equiv \frac{1}{h_{x}^{2}} \left[a_{0}f(x) + \sum_{j=1}^{N} a_{j} \left(\left(f(x-jh_{x}) + f(x+jh_{x}) \right) \right) \right] = \frac{\partial^{2}f}{\partial x^{2}}(x) + O(h_{x}^{2N}).$$
(5.6)

Формально наличие сингулярной составляющей в решении [155, 201] не позволяет достичь высокого порядка сходимости для при аппроксимации конечноразностным методов оператора $\partial^2/\partial x^2$, однако практические расчёты показали, что схемы высокого порядка точности позволяют получать решения при существенно меньшем числе узлов сетки, так как точнее воспроизводят закон дисперсии для моделируемой среды. При выводе уравнений (5.3) предполагалось однородность скоростной модели, тем не менее для неоднородных сред рассматриваемая модель также даёт вполне удовлетворительные результаты, правильно сохраняя кинематику волн, но не их амплитуды. Для многих задач такая приближённая модель является допустимой, так как корректный учёт амплитуд значительно увеличивает вычислительные затраты [256].

Принимая во внимание вышесказанное, для аппроксимации $\partial^2/\partial x^2$ имеет смысл использовать метод, сохраняющий дисперсионное соотношение, который был предложен Тамом и Веббом в работе [222]. Основная идея метода состоит в следующем. В соответствии с правилом дифференцирования для Фурье преобразования $k_i \iff -i\partial_i$, где значения оптимизированных коэффициентов a_n из (5.6) определяются как решение задачи минимизации функционала ошибки дисперсии в пространстве волновых чисел

$$\frac{\partial}{\partial a_n} \int_0^{k_c} \left| -k_x^2 + \frac{1}{h_x^2} \left[a_0 + \sum_{j=1}^N a_n \cos(jk_x h_x) \right] \right|^2 w(k_x) dk_x = 0$$

где $w(k_x)$ – некоторая весовая функция, k_c – верхняя граница аппроксимации волнового числа для дисперсионного соотношения. Такой подход и его многочисленные различные модификации [107, 176, 254] позволяют сократить число узлов сетки и сохранить высокую точность расчётов по сравнению с классическими разностными схемами, полученными на основе разложения функции в ряд Тейлора [68].

5.1.3. Решение систем линейных алгебраических уравнений

Решение разностных уравнений является вычислительно затратным этапом предлагаемого спектрально-разностного алгоритма, поэтому применимость всего метода будет зависеть от того, насколько экономично можно решать необходимые системы линейных алгебраических уравнений. Коэффициенты разложения ряда Лагерра (2.1) зависят рекуррентным образом (5.5), поэтому для фиксированного k для различных m требует многократно решать систему линейных алгебраических уравнений с одной и той же вещественной матрицей. Этот факт позволяет использовать методы на основе *lu*-декомпозиции, где факторизация матрицы для всех *m* выполняется однократно. В случае необходимости параллельной реализации, которая рассмотрена далее, имеет смысл применять разработанный в третьей главе диссертации параллельный алгоритм дихотомии для решения систем линейных алгебраических уравнений с блочнотрёхдиагональными матрицами. Для этого разностную задачу (5.5) запишем в виде системы линейных алгебраических уравнений

$$\begin{pmatrix} \gamma_{1}c^{2}\mathcal{L}_{x} - \tilde{\eta}^{2}I & 0 & 0 & 1/2\beta_{1}c^{2}\mathcal{L}_{x} \\ 0 & \gamma_{2}c^{2}\mathcal{L}_{x} - \tilde{\eta}^{2}I & 0 & 1/2\beta_{2}c^{2}\mathcal{L}_{x} \\ 0 & 0 & \gamma_{3}c^{2}\mathcal{L}_{x} - \tilde{\eta}^{2}I & 1/2\beta_{3}c^{2}\mathcal{L}_{x} \\ -2\tilde{\eta}I & -2\tilde{\eta}I & -2\tilde{\eta}I & (2c/h_{z} + \tilde{\eta})I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\Psi}_{k+1/2}^{m,1} \\ \bar{\Psi}_{k+1/2}^{m,2} \\ \bar{\Psi}_{k+1/2}^{m,3} \\ \bar{\Psi}_{k+1/2}^{m,3} \\ \bar{\Psi}_{k+1/2}^{m,3} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -c^{2}\beta_{1}\mathcal{L}_{x}\bar{\mathbf{U}}_{k}^{m}/2 + \Phi_{2}\left(\bar{\mathbf{\Psi}}_{k+1/2}^{m,1}\right) \\ -c^{2}\beta_{2}\mathcal{L}_{x}\bar{\mathbf{U}}_{k}^{m}/2 + \Phi_{2}\left(\bar{\mathbf{\Psi}}_{k+1/2}^{m,2}\right) \\ -c^{2}\beta_{3}\mathcal{L}_{x}\bar{\mathbf{U}}_{k}^{m}/2 + \Phi_{2}\left(\bar{\mathbf{\Psi}}_{k+1/2}^{m,3}\right) \\ (2c/hz - \tilde{\eta})\bar{\mathbf{U}}_{k}^{m} - \Phi_{1}\left(\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^{m} + \bar{\mathbf{U}}_{k}^{m}\right) + 2\sum_{s=1}^{3}\Phi_{1}\left(\bar{\mathbf{\Psi}}_{k+1/2}^{m,s}\right) \end{pmatrix},$$

где I – единичная матрица. Используя дополнение Шу́ра [114], сеточные функции $\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$ могут быть вычислены посредством решения следующей редуцированной системы линейных алгебраических уравнений

$$\left[(2c/h_z + \tilde{\eta}) I + \tilde{\eta} \sum_{s=1}^{3} \beta_s c^2 \mathcal{L}_x \left(\gamma_s c^2 \mathcal{L}_x - \tilde{\eta}^2 I \right)^{-1} \right] \bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$$

$$= (2c/hz - \tilde{\eta}) \bar{\mathbf{U}}_k^m - \Phi_1 \left(\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m + \bar{\mathbf{U}}_k^m \right) + 2 \sum_{s=1}^{3} \Phi_1 \left(\bar{\mathbf{\Psi}}_{k+1/2}^{m,s} \right)$$

$$+ 2\tilde{\eta} \sum_{s=1}^{3} \left(\gamma_s c^2 \mathcal{L}_x - \tilde{\eta}^2 I \right)^{-1} \left(-c^2 \beta_s \mathcal{L}_x \bar{\mathbf{U}}_k^m / 2 + \Phi_2 \left(\bar{\mathbf{\Psi}}_{k+1/2}^{m,s} \right) \right),$$

где функции $ar{oldsymbol{\Psi}}_{k+1}^{m,s}$ определяются как

$$M_{s}\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s} = \tilde{\eta}^{-2} \left(-\beta_{s}c^{2}\mathcal{L}_{x}\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^{m} + \Phi_{2} \left(\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s} \right) \right), \ s = 1, 2, 3, \quad M_{s} = \frac{\gamma_{s}c^{2}}{\tilde{\eta}^{2}}\mathcal{L}_{x} - I.$$
(5.7)

Воспользовавшись свойством матриц [151]

$$(B+I)^{-1}B = I - (B+I)^{-1}, \qquad (5.8)$$

можем упростить

$$\left[\left(2c/h_z + \tilde{\eta} + \tilde{\eta} \sum_{s=1}^3 \frac{\beta_s}{\gamma_s} \right) I + \tilde{\eta} \sum_{s=1}^3 \frac{\beta_s}{\gamma_s} M_s^{-1} \right] \bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m = \bar{\mathbf{F}}_u^m + \sum_{s=1}^3 M_s^{-1} \bar{\mathbf{F}}_{\psi_s}^m,$$
(5.9)

где

$$\bar{\mathbf{F}}_{\psi_s}^m = -\frac{\beta_s}{\gamma_s} \bar{\mathbf{U}}_k^m + \frac{2}{\eta^2} \Phi_2 \left(\bar{\boldsymbol{\Psi}}_{k+1/2}^{m,s} \right).$$

Домножая уравнение (5.9) на матрицу $M_1M_2M_3$ и принимая во внимание свойство перестановочности $M_iM_j = M_jM_i$, получаем основное уравнение для вычисления сеточных функций $\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$

$$\left[M_1 M_2 M_3 \left(2c/h_z + \tilde{\eta} + \tilde{\eta} \sum_{s=1}^3 \frac{\beta_s}{\gamma_s}\right) I + \frac{\tilde{\eta}\beta_1}{\gamma_1} M_2 M_3 + \frac{\tilde{\eta}\beta_2}{\gamma_2} M_1 M_3 + \frac{\tilde{\eta}\beta_3}{\gamma_3} M_1 M_2\right] \bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$$

$$= M_1 M_2 M_3 \bar{\mathbf{F}}_u^m + \tilde{\eta} \left(M_2 M_3 \bar{\mathbf{F}}_{\psi_1}^m + M_1 M_3 \bar{\mathbf{F}}_{\psi_2}^m + M_1 M_2 \bar{\mathbf{F}}_{\psi_3}^m \right).$$
(5.10)

Матрица (5.10) является ленточной и может быть записана явно без вычисления матриц M_s^{-1} , что позволяет применить экономичные алгоритмы решения систем линейных алгебраических уравнений на основе lu-декомпозиции. Таким образом, потребуется вычислить K-1 различных lu-разложений для (5.10), где K – число узлов сетки в направлении z. Заметим также, что в отличие от (5.9) для вычисления вектора правой части (5.10) не требуется обращать матрицы M_s . После того как сеточные функции $\bar{\mathbf{U}}^m$ будут вычислены, прежде чем переходить к вычислению функций $\bar{\mathbf{U}}^{m+1}$, функции $\bar{\Psi}^{m,s}$ должны быть рассчитаны как

$$\bar{\boldsymbol{\Psi}}_{k}^{m,s} = M_{s}^{-1} \left(-\frac{\beta_{s}}{\gamma_{s}} \bar{\mathbf{U}}_{k}^{m} + \frac{1}{\tilde{\eta}^{2}} \Phi_{2} \left(\bar{\boldsymbol{\Psi}}_{k}^{m,s} \right) \right) - \frac{\beta_{s}}{\gamma_{s}} \bar{\mathbf{U}}_{k}^{m}, \quad s = 1, 2, 3.$$
(5.11)

Это уравнение получается после применения свойства (5.8) к (5.7).
5.1.4. Повышение порядка аппроксимации на основе метода Ричардсона

Как показали исследования в четвёртой главе, чтобы обеспечить приемлемую точность расчётов для схем второго порядка точности для реальных пространственно-временных масштабов, требуется несколько десятков узлов сетки на минимальную длину волны. Для сокращения вычислительных затрат повысим точность алгоритма до $O(h_z^4)$ на основе метода Ричардсона [54]. Пусть сеточные функции $\bar{\mathbf{U}}(\omega_1)$, $\bar{\mathbf{U}}(\omega_2)$, определённые на сетках ω_1, ω_2 с шагами h_x, h_z и $h_x, h_z/2$, есть решения задачи (5.5), тогда их линейная комбинация

$$\bar{\mathbf{U}} = \frac{1}{3} \left(4 \bar{\mathbf{U}}(\omega_2) - \bar{\mathbf{U}}(\omega_1) \right)$$
(5.12)

приближает точное решение задачи (5.4) на сетке ω_1 с точностью $O(h_z^4)$.

На практике метод повышения точности Ричардсона используется намного реже, чем разностные схемы высокого порядка точности, однако, предварительные расчёты показали, что многошаговые методы типа Адамса – Мультона и Адамса – Башфорта не обеспечивают устойчивости даже для малых шагов h_z . Неявные методы Рунге – Кутты высокого порядка точности являются неэкономичными, так как требуют многократного вычисления правой части решаемого уравнения. Неустойчивость методов высокого порядка обусловлена наличием сингулярной составляющей в решении. Как показали вычислительные эксперименты, метод Ричардсона позволяет стабилизировать эту неустойчивость.

<u>Алгоритм 5.1</u> экстраполяции волнового поля в глубину четвёртого порядка точности на основе метода Ричардсона с глобальной коррекцией.

Для расчёта сеточных функций $\bar{\mathbf{U}}_{k}^{m}, \bar{\mathbf{\Psi}}_{k}^{m}, k = 1, ..., K$ с точностью $O(h_{x}^{\xi} + h_{z}^{4}),$ где ξ определяется аппроксимацией (5.6), необходимо:

1. На основе кубических сплайнов интерполировать значения функций $\Phi_1(\bar{\Psi}_k^m)$, $\Phi_2(\bar{\Psi}_k^m)$, заданных на сетке ω_1 , в полуцелые узлы k + 1/2 сетки ω_2 .

- 2. На сетке ω_1 , используя уравнение (5.10), вычислить решение $\bar{\mathbf{U}}_k^m(\omega_1)$ для k = 2, 3, ..., K.
- 3. На сетке ω_2 , используя уравнение (5.10), вычислить решение $\bar{\mathbf{U}}_k^m(\omega_2)$ для k = 3/2, 2, 5/2, ..., K.
- 4. На основе метода Ричардсона на сетке ω_1 произвести уточнение

$$\bar{\mathbf{U}}_k^m = \frac{1}{3} \left(4 \bar{\mathbf{U}}_k^m(\omega_2) - \bar{\mathbf{U}}_k^m(\omega_1) \right).$$

- 5. После того как сеточные функции $\bar{\mathbf{U}}_{k}^{m}$ будут вычислены для всех глубин k = 2, ..., K, функции $\bar{\mathbf{\Psi}}_{k}^{m,s}$ могут быть определены из решения уравнений (5.11).
- Перейти к вычислению m + 1, m + 2 и т.д. коэффициентов разложения ряда Лагерра.

Также можно сформулировать второй алгоритм, при котором экстраполированное значение (5.12) вычисляется сразу же после расчёта функции $\bar{\mathbf{U}}_{k}^{m}, \bar{\boldsymbol{\Psi}}_{k}^{m}$.

<u>Алгоритм 5.2</u> экстраполяции волнового поля в глубину четвёртого порядка точности на основе метода Ричардсона с локальной коррекцией.

Для расчёта сеточных функций $\bar{\mathbf{U}}_{k}^{m}, \bar{\mathbf{\Psi}}_{k}^{m}, k = 1, ..., K$ с точностью $O(h_{x}^{\xi} + h_{z}^{4}),$ где ξ определяется аппроксимацией (5.6), необходимо:

- 1. На основе кубических сплайнов интерполировать значения функций $\Phi_1(\bar{\Psi}_k^m)$, $\Phi_2(\bar{\Psi}_k^m)$, заданных на сетке ω_1 , в полуцелые узлы k + 1/2 сетки ω_2 .
- 2. Для k = 2, 3, ..., K

2.1 На сетке ω_1 , используя уравнение (5.10), вычислить решение $\bar{\mathbf{U}}_k^m(\omega_1)$. 2.2 На сетке ω_2 , используя уравнение (5.10), вычислить решение $\bar{\mathbf{U}}_{k+1/2}^m(\omega_2)$. 2.2 На сетке ω_2 , используя уравнение (5.10), вычислить решение $\bar{\mathbf{U}}_k^m(\omega_2)$. 2.3 На основе метода Ричардсона на сетке ω_1 произвести уточнение

$$\bar{\mathbf{U}}_k^m = \frac{1}{3} \left(4 \bar{\mathbf{U}}_k^m(\omega_2) - \bar{\mathbf{U}}_k^m(\omega_1) \right).$$

2.4 Вычислить функции $\bar{\mathbf{\Psi}}_k^{m,s}$, используя $\bar{\mathbf{U}}_k^m$.

 Перейти к вычислению m + 1, m + 2 и т.д. коэффициентов разложения ряда Лагерра.

Если для вычисления решений $\bar{\mathbf{U}}(\omega_1)$ и $\bar{\mathbf{U}}(\omega_2)$ используется численно устойчивый алгоритм (в нашем случае схема Кранка – Николсон), то процедура экстраполяции на основе глобальной коррекции будет также численно устойчивой, тогда как при использовании локальной коррекции в общем случае устойчивость не гарантируется [54].

5.2. Численные расчёты

Рассмотрим набор тестов, позволяющий оценить качество получаемого решения по сравнению с другими известными алгоритмами. Вычислительные процедуры были реализованы на языке Фортран-90 с применением MPI- библиотеки. Расчёты проводились на суперкомпьютере "Ломоносов" Московского Государственного Университета. Суперкомпьютер построен на основе четырёхядерных процессоров Intel Xeon X5570 с частотой 2.93ГГц. Каждый вычислительный узел содержит два процессора и 12 Гб оперативной памяти.

Для всех тестов в качестве параметров γ_s , β_s из (5.2) и (5.3) для n = 3выберем следующие (см. табл. 1.1): $\gamma_1 = 0.972926132$, $\gamma_2 = 0.744418059$, $\gamma_3 = 0.150843924$, $\beta_1 = 0.004210420$, $\beta_2 = 0.081312882$, $\beta_3 = 0.414236605$, для которых показано [253], что такое приближение будет справедливым вплоть до углов 89° градусов. Можно выбирать и большие значения n, тем самым асимптотически приближаясь к $\pi/2$, однако вычислительные затраты будут существенно возрастать. Коэффициенты разностной схемы (5.6) были выбраны следующие [254]: $a_0 = -3.12513824, a_1 = 1.84108651, a_2 = -0.35706478, a_3 = 0.10185626, a_4 = -0.02924772, a_5 = 0.00696837, a_6 = -0.00102952$, обеспечивающие двенадцатый порядок аппроксимации. Расчёты показали, что по сравнению с классическими разностными схемами высокого порядка точности, построенных на основе ряда Тейлора, схемы, сохраняющие дисперсионное соотношение, позволяют сократить количество узлов разностной схемы приблизительно в два раза при сопоставимой точности. Учитывая, что вычислительные затраты lu-разложения для матриц (5.10) и (5.11) пропорциональны третей степени от ширины ленты матрицы, а прямой и обратный ход lu-разложения имеют затраты пропорциональные второй степени, то эффект от применения схем, сохраняющих дисперсионное соотношение, получается значительным. Также это позволяет сократить требования к минимально необходимому объёму оперативной памяти для хранения l и u матриц.

5.2.1. Волновое поле от точечного источника

Исследуем точность предлагаемых методов для однородной скоростной модели среды, где скорость полагалась равной 250м/с; размер расчётной области составил 1.6км×1км; шаги расчётной сетки задавались равными $h_{x,z} = 1$ м и $h_{x,z} = 0.5$ м. Точечный источник располагается по центру на дневной поверхности, форма источника сигнала задавалась формулой (2.11) с параметрами $f_0 = 30\Gamma$ ц, $t_0 = 0.2$ с., g = 4. По сравнению с преобразованием Фурье, для которого базисные функции определены однозначно, параметр η должен быть задан перед применением преобразования Лагерра. Число слагаемых ряда Лагерра выбирались на основе сходимости ряда Лагерра для правой части, так чтобы в среднеквадратичной норме погрешность разложения была порядка $\varepsilon < 10^{-6}$. Число слагаемых ряда (2.1) было n = 2000; параметр разложения был выбран $\eta = 800$.

На рис. 5.1 изображены мгновенные снимки волнового поля от точечно-

го источника для уравнения (5.2), полученные с использованием ($\omega - x$) конечно-разностного алгоритма второго порядка точности с применением расщепления Марчука. Эта процедура реализована в свободно распространяемом пакете "Seismic Unix". Видно, что такой подход не обеспечивает какой-либо точности расчётов из-за многочисленных численных шумов. Переход от сетки с шагом 1м (рис. 5.1а) к сетке с шагом 0.5м (рис. 5.1б) не позволяет повысить точность расчётов до приемлемого уровня.

Принципиально другая ситуация возникает, когда для решения одностороннего волнового уравнения используется разработанный в диссертации спектрально-разностный метод Лагерра (рис. 5.2). Из рис. 5.2а,6 видно, что новый подход исключает появление каких-либо численных шумов, а погрешность аппроксимации проявляется в виде численной дисперсии, которая более выражена для схемы Кранка – Николсон второго порядка точности. Из рис. 5.2в,г видно, что применение метода Ричардсона позволяет существенно улучшить качество решения. Как для схемы второго порядка, так и для четвёртого порядка точности переход к более мелкой сетке позволяет сократить численную дисперсию. Здесь принципиальным моментом является наличие сходимости при уменьшении шага сетки, чего не наблюдается для расчётов ($\omega - x$) методом конечных разностей (рис. 5.1а,6).

Несмотря на отсутствие гладкости в решении из-за наличия сингулярностей, применение метода четвёртого порядка точности позволяет уменьшить численную дисперсию по сравнению со схемой второго порядка точности. Однако следует учитывать, что при одинаковом числе узлов сетки алгоритм на основе метода Ричардсона требует примерно в три раза больше арифметических действий, чем схема Кранка – Николсон. Это обусловлено необходимостью решения уравнений (5.5) на двух сетках с шагами h_z и $h_z/2$. Возникает вопрос: нельзя ли просто увеличить в три раза число узлов сетки и использовать схему второго порядка, чтобы получить результат по точности сопоставимый со схемой четвёртого порядка. На рис. 5.3 приведена зависимость волнового поля от

185



Рис. 5.1. Мгновенный снимок волнового поля в момент времени t=3c, рассчитанный методом конечных разностей в пространстве $(\omega - x)$, для однородной скоростной модели и источника (2.11)

координаты вдоль прямой "Срез" (рис. 5.2). Видно, что когда шаг сетки для метода второго порядка точности в три раза меньше, чем для метода четвёртого порядка (в этом случае вычислительные затраты примерно одинаковы), то метод второго порядка даёт менее точные результаты. Таким образом, имеет смысл применять более сложные и вычислительно затратные процедуры на основе метода Ричардсона. Также видно, что алгоритм 5.2 на основе локального метода Ричардсона привносит дополнительные дисперсионные ошибки, однако лучше сохраняет амплитуды, тем не менее далее мы не будем его использовать, так как для неоднородных сред он проявлял неустойчивость и добавлял в изображение волнового поля более выраженные артефакты, связанные с численной дисперсией.

В рамках реализации метода Ричардсона был рассмотрен вопрос о выборе процедуры интерполяции и её влиянии на точность получаемого решения. При использовании линейной интерполяции алгоритм Лагерра демонстрировал очень сильную анизотропную диссипацию в *z*-направлении такую, что для расстояний в несколько длин волн амплитуда волны стремилась к нулю. Использование параболической или кубической Лагранжевой интерполяции несколько улучшало ситуацию, но сохранение амплитуды волны было хуже, чем для ку-





(a) Метод Лагерра второго порядка точности
 $h_x = h_z = 1 \mathrm{M}$

 (δ) Метод Лагерра второго порядка точности
 $h_x = h_z = 0.5 \mathrm{M}$



(s)Метод Лагерра четвёртого порядка точности (z)Метод Лагерра четвёртого порядка точности $h_x = h_z = 1 {\rm M} \qquad \qquad h_x = h_z = 0.5 {\rm M}$

Рис. 5.2. Мгновенный снимок волнового поля в момент времени t = 3c. для однородной скоростной модели и источника (2.11)

бической сплайн-интерполяции. Применение Лагранжевой интерполяции высоких порядков вызывало неустойчивость расчётов, как и использование сплайнов порядка выше третьего. Таким образом, выбор кубического итерполяционного сплайна можно считать удачным, так как другие алгоритмы интерполирования либо неустойчивы, либо чрезмерно диссипативны. В ходе многочисленных экспериментов для различных скоростных моделей предлагаемый алгоритм оказался численно устойчивым при условии, что $h_z \leq h_x$. Высокой уровень устойчивости предлагаемого метода по сравнению с другими алгоритмами обусловлен тем, что в направлении экстраполяции волнового поля ошибки аппроксимации имеют преимущественно диссипативный характер.



Рис. 5.3. Зависимость волнового поля от координаты вдоль прямой "Срез" (рис. 5.2г) для сеток различной подробности для метода Лагерра

5.2.2. Миграционные преобразования временных разрезов

Скоростная модель, включающая синклиналь

На рис. 5.4а изображена скоростная модель, включающая синклиналь, для которой теоретические сейсмограммы (рис. 5.46) были получены с помощью алгоритма Гауссовых пучков [66, 102], реализованного в пакете "Seismic Unix". Для задания граничного условия на дневной поверхности функция для сейсмограммы нулевых удалений $u(x, z, t)|_{z=0} = g(x, t)$ раскладывалась в ряд (2.1) с параметрами n = 2000 и $\eta = 600$ для $t \in [0, 4]$ с. Расчёты проводились на сетках с шагами $h_{x,z} = 10$ м, 5м и 0.5м. В соответствии с моделью "взрывающихся границ" [40] расчётные скорости задавались равными половине истинных скоростей модели среды.

Как и при расчёте волнового поля от точечного источника, в рамках задачи миграции для ($\omega - x$) метода конечных разностей наблюдается неприемлемый уровень численных шумов (рис. 5.5). В методе FFD уровень шума значительно ниже (рис. 5.6), однако имеются численные артефакты, при том что второй горизонт недостаточно сфокусирован. При переходе от сетки с шагом $h_z = 10$ м (рис. 5.6a) к сетке с шагом $h_z = 5$ м (рис. 5.6б) выраженность артефактов оставалась на прежнем уровне. Таким образом, FFD алгоритм может генерировать артефакты, но не позволяет их апостериорно оценить на последовательности вложенных сеток.

Принципиально другая ситуация наблюдается при использовании алгоритма на основе преобразования Лагерра (рис. 5.7), где видно отсутствие высокочастотных шумов в полученных изображениях. Погрешности разностной аппроксимации для *х*-направления проявляются в виде эффекта численной дисперсии, тогда как для z направления имеет диссипативный характер. Влияние этих погрешностей при переходе на более подробную сетку быстро уменьшается, а наблюдаемая сходимость решения от шага сетки позволяет отделить ошибки аппроксимации от погрешностей исходных данных и неточности самой модели, что при решении практических задач позволяет существенно упростить анализ полученных результатов. Дополнительно для всех трёх алгоритмов были проведены расчёты для более подробной сетки с шагом $h_z = 0.5$ м. Метод конечных разностей оказался неустойчивым для малого шага сетки, а для метода FFD качество изображение осталось прежним, так как по уровню шумов и артефактов было сравнимо с результатами расчётов при шаге стеки в $h_z = 5$ м и $h_z = 3$ м. Для метода Лагерра изображение на рис. 5.7г для $h_z = 0.5$ м визуально неотличимо от изображения, полученного при шаге сетке $h_z = 3$ м (рис. 5.7в). Таким образом, принимая во внимание сходимость алгоритма Лагерра, результат с шагом сетки $h_z = 3$ м можно считать достаточно точным.

Скоростная модель "Sigsbee2A"

Для модели среды "Sigsbee2A" [218] (рис. 5.8а) теоретические сейсмограммы (рис. 5.8б) были рассчитаны с помощью алгоритма взрывающихся границ, реализованного в пакете "Madagascar" [184]. Для задания граничного условия функция для сейсмограммы нулевых удалений $u(x, z, t)|_{z=0} = g(x, t)$ приближалась рядом Лагерра для n = 3500 с параметром $\eta = 300$ для $t \in [0, 12]$ с. Расчёты проводились на сетках с шагами $h_{x,z} = 7.62$ м и $h_x = 7.62$ м, $h_z = 3.81$ м.



Рис. 5.4. a) Скоростная модель среды, включающая синклиналь и б) соответствующая сейсмограмма нулевых удалений



Рис. 5.5. Мгновенный снимок волнового поля для момента времени t=4c., рассчитанный ($\omega - -x$) методом конечных разностей, для скоростной модели и сейсмограммы нулевых удалений на рис. 5.4

Для модели "Sigsbee2A" согласно результатам вычислительных экспериментов конечно-разностный ($\omega - x$) метод оказался неустойчивым. Процедуры дополнительного сглаживания скоростной модели среды не позволили обеспечить устойчивость расчёта, поэтому ($\omega - x$) метод конечных разностей в рамках данного теста был исключен из дальнейшего рассмотрения.

Метод PSPI из пакета Seismic Unix показал неудовлетворительные результаты из-за плохой фокусировки энергии (рис. 5.9а), что не позволило корректно отобразить границы соляного включения (рис. 5.9б). Однако отметим, что



Рис. 5.6. Мгновенный снимок волнового поля для момента времени t = 4с., рассчитанный FFD методом, для скоростной модели и сейсмограммы нулевых удалений рис. 5.4



Рис. 5.7. Мгновенный снимок волнового поля для момента времени t = 4с., рассчитанный методом Лагерра, для скоростной модели и сейсмограммы нулевых удалений на рис. 5.4

точечные дифракторы, расположенные под соленым включением, сфокусированы правильно. Метод FFD по сравнению с PSPI позволил получить более чёткое изображение границ соленого включения (рис. 5.10б), однако изображение дополнительно содержит многочисленные артефакты (рис. 5.10а), которые появились из-за использования приближённых расчётных формул для одностороннего волнового уравнения в рамках метода FFD. К сожалению, как и для предыдущего теста, увеличение разрешающей способности сетки не приводит к повышению точности расчётов.

В отличие от методов FFD и PSPI принципиально другая ситуация возникает при использовании метода Лагерра, где из рис. 5.12 видно, что предлагаемый спектрально-разностный метод Лагерра не содержит дополнительных артефактов, а только те, которые присутствуют для FFD и PSPI алгоритмов одновременно, то есть артефакты, которые присутствуют в исходных данных задачи (сейсмограмме нулевых удалений). Использование метода, сохраняющего дисперсионное соотношение, для определения коэффициентов конечно-разностной аппроксимации $\partial^2/\partial x^2$, позволяет достичь высокой точности расчёта и снизить численную дисперсию для *х*-направления. Для *z*-направлении характерна численная диссипация (рис. 5.12а,б), которая приводит к сглаживанию изображения, однако она может быть уменьшена посредством выбора меньшего шага h_z (рис. 5.12г,д). Четвертый порядок аппроксимации, достигаемый посредством применения метода Ричардсона, позволяет использовать приемлемые шаги для достижения требуемой точности расчётов. Таким образом, погрешности, обусловленные применением алгоритма Лагерра, контролируются выбором шага пространственной сетки. В противоположность этому, выбор вычислительных параметров для методов PSPI и FFD неоднозначен, а уменьшение шага пространственной сетки для этих методов практически не влияет на качество изображения.

В рамках волновой миграции после суммирования применение рассматриваемого метода позволяет получить более чёткое изображение земных недр по сравнению с известными сеточными алгоритмами решения одностороннего волнового уравнения. Предлагаемый метод может быть реализован и для ми-



Рис. 5.8. Исходные данные для модели "Sigsbee2A"



Рис. 5.9. Мгновенный снимок волнового поля для t = 12с для модели и разреза нулевых удалений на рис. 5.8 для PSPI метода для шагов сетки $h_x = h_z = 7.62$ м; стрелки указывают на вычислительные артефакты



Рис. 5.10. Мгновенный снимок волнового поля для t = 12с. для модели и разреза нулевых удалений на рис. 5.8 для FFD метода для шагов сетки $h_x = h_z = 7.62$ м; стрелки указывают на вычислительные артефакты



Рис. 5.11. Мгновенный снимок волнового поля для t = 12с. для модели и разреза нулевых удалений на рис. 5.8 для метода Лагерра для шагов сетки $h_x = h_z = 7.62$ м; стрелки указывают на вычислительные артефакты



Рис. 5.12. М
гновенный снимок волнового поля для t = 12с. для модели и разреза нулевых удалений на рис. 5.8 для метода Лагерра для шагов сетки $h_x = 7.62, h_z = 3.81$ м

грации "до суммирования" с целью получения более детальных изображений. В противоположность численно-аналитическим подходам, для которых требуется выполнять преобразование Фурье как по времени, так и по пространству, использование разностной пространственной аппроксимации позволяет проводить расчёты, во-первых, для неравномерных сеток, а во-вторых, допускает реализацию криволинейной границы для свободной поверхности. Сходимость нового алгоритма от шага сетки даёт возможность оценивать точность решения на последовательности вложенных сеток, тем самым отделяя погрешности аппроксимации от неточностей при задании исходных данных задачи. Для большинства численных методов миграции необходимо предварительно сглаживать скоростную модель среды, чтобы обеспечить устойчивость расчётов. Это вносит искажения в кинематику волновых полей и создаёт проблему выбора процедуры сглаживания. Как показали вычислительные эксперименты, предлагаемый метод Лагерра для решения одностороннего волнового уравнения для рассматриваемых моделей и выбранных вычислительных параметров не требует предварительного сглаживания функции модели среды, что говорит о более высокой степени устойчивости по сравнению с существующими сеточными методами.

5.2.3. Оценка производительности параллельных процедур экстраполяции волнового поля

Возможность эффективного использования современных многопроцессорных вычислительных систем является одним из обязательных требований, предъявляемых при разработке новых численных алгоритмов, поэтому рассмотрим особенности параллельной реализации предлагаемого подхода. В отличие от Фурье преобразования применение преобразования Лагерра не позволяет независимо вычислять функции \mathbf{U}^m для различных m, так как (m+1)-ый коэффициент разложения ряда Лагерра зависит от m-го рекуррентным образом (5.4), следовательно, необходимо проводить распараллеливание алгоритма на этапе решения задачи (5.5). Здесь основные сложности состоят в решении систем линейных алгебраических уравнений вида (5.10) и (5.11), тогда как параллельная операция умножения на матрицы M_1, M_2, M_3 не является коммуникационно затратной. Рассмотрим двумерную декомпозицию данных задачи (рис. 5.13), где вычислительные узлы содержат процессоры, имеющие общий доступ к памяти, позволяющий осуществлять внутриузловые межпроцессорные взаимодействия значительно быстрее, чем коммуникационные взаимодействия между узлами. Для решения систем линейных алгебраических уравнений вида (5.10) и (5.11) с ленточными матрицами в качестве параллельного алгоритма имеет смысл использовать алгоритм дихотомии для трёхдиагональных и блочно трёхдиагональных матриц. Параллельный алгоритм дихотомии позволяет использовать тысячи процессоров, однако его эффективность зависит от числа одновременно решаемых уравнений и размера матрицы системы линейных алгебраических уравнений. Такая зависимость значительно более слабая в сравнении с другими параллельными алгоритмами решения трёхдиагональных и блочно-трёхдиагональных систем линейных алгебраических уравнений. Из-за зависимости решения $\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$ от $\bar{\mathbf{U}}_k^m$ невозможно для всех глубин решать задачи (5.10) и (5.11) параллельно, а следовательно уменьшить коммуникационные затраты за счёт группирования межпроцессорных обменов, поэтому распрараллеливание для *x*-направления следует производить в рамках одного узла, используя преимуцество общей памяти для быстрого обмена данными между процессорами и тем самым снижая долю коммуникационных затрат по отношению к вычислительным.

Для увеличения числа задействованных процессоров в рамках одного расчёта имеет смысл выполнить распараллеливание для *z*-направления. Здесь вычисления можно эффективно осуществлять по принципу конвеера. Как только на узле с номером *q* функции $\bar{\mathbf{U}}^m$, $\bar{\Psi}^m$ будут вычислены, значения этих функций и их вторых производных $\partial^2/\partial z^2$ на нижней границе подобласти передаются на вычислительный узел с номером *q*+1. На узле с номером *q* начинается вычисления функций с номерами *m*+1, а на узле *q*+1 с номерами *m*. Значение второй производной на границе двух подобластей необходимо для задания граничных условий при построении кубического интерполяционного сплайна в рамках метода Ричардсона. Учитывая, что число слагаемых ряда Лагерра значительно превышает число узлов компьютера, то загрузка такого вычислительного конвеера будет высокой, а коммуникационные затраты будут незначительны, так как требуется всего один межузловой обмен для вычисления функций $\bar{\mathbf{U}}^m, \bar{\mathbf{\Psi}}^m$ для одного значения *m*.

Однопроцессорная реализация предлагаемого метода показала, что алгоритм Лагерра требует примерно от пяти до десяти раз большего времени счё-



Рис. 5.13. Декомпозиция данных между процессорами

та, чем PSPI алгоритм, конечно-разностный ($\omega - x$) метод или FFD алгоритм. Затраты алгоритма Лагерра для решения систем линейных алгебраических уравнений с ленточными матрицами являются существенными, однако, возможность применения оптимизированных библиотечных функции для решения систем линейных алгебраических уравнений позволяет повысить производительность метода в целом. Более высокие вычислительные затраты алгоритма Лагерра можно считать вполне оправданными, так как конечно-разностный ($\omega - x$) метод не обеспечивает практически никакой точности и слабо устойчив, а методы FFD и PSPI решают некоторую приближённую задачу, а не исходное одностороннее волновое уравнение, что порождает многочисленные шумы и артефакты волнового поля.



Рис. 5.14. Зависимость величины ускорения от числа процессоров для различных скоростных моделей и сеток

Для тестирования производительности предлагаемого метода была проведена оценка времени счёта для различного числа узлов сетки и количества процессоров. Использование многопроцессорных систем делает абсолютные временные затраты незначительными. При максимальном числе процессоров время счёта для всех тестовых задач не превышало нескольких секунд (табл. 5.1). Зависимость величины ускорения от числа процессоров для всех тестов представлена на рис. 5.14, где виден линейных характер зависимости, а для первого теста достигается сверхлинейное ускорение. Аналогичный эффект сверхлинейного ускорения наблюдался при использовании параллельного алгоритма дихотомии для реализации метода переменных направлений для решения

	Tecт 1	Tect 2	Tect 2	Tecт 2	Тест 3
$N_x \times N_z$	1624×1024	3248×2048	462×300	924×600	6444×4800
Число процессоров					
12	247	1008	44	119	944
24	122	446	21	62	472
48	76	294	14.8	41	313
216	11	46	2.4	6.2	49.6
228	10	43	2.3	5.9	47.3
240	9.7	40	2.2	5.6	44.9

Таблица 5.1. Зависимость времени счёта (секунды) от числа процессоров для сеток различной подробности

двумерного уравнения Пуассона, рассмотренного в третьей главе диссертации. Таким образом, алгоритм дихотомии, реализованный в рамках предлагаемого подхода для решения двумерного одностороннего волнового уравнения, позволяет эффективно использовать значительное число процессоров. Можно заключить, что выбранная декомпозиция данных задачи (рис. 5.13) эффективна, так как многократные обмены для *x*-направления совершаются мгновенно за счёт использования общей памяти в рамках одного вычислительного узла, тогда как более медленные межузловые коммуникационные взаимодействия для *z*-направления выполняются однократно при решении задачи (5.10).

5.3. Решение одностороннего волнового уравнения на основе многошаговых схем Адамса

Как показано в предыдущем параграфе, для обеспечения высокой пространственной точности и устойчивости расчётов в рамках спектрально-разностного метода Лагерра для решения одностороннего волнового уравнения может применяться метод Ричардсона четвёртого порядка точности. Однако такой подход является вычислительно затратным из-за необходимости решения вспомогательной задачи на сетке с удвоенным числом узлов, поэтому далее предложены альтернативные алгоритмы на основе многошаговых схем Адамса. Для обеспечения устойчивости многошаговых схем сначала для одномерного одностороннего волнового уравнения, а затем и для двумерного случая будут разработаны стабилизирующие процедуры на основе сплайн-интерполяции. Это позволит реализовать экономичный метод типа предиктор-корректор, в рамках которого разностная задача для эллиптических уравнений высоких порядков заменяется на серию разностных задач для эллиптических операторов второго порядка, что позволит снизить общие вычислительные затраты спектрально-разностного алгоритма.

5.3.1. Исследование устойчивости спектрально-разностного метода для модельного уравнения переноса

Вопрос устойчивости при построении численного метода решения двумерного одностороннего волнового уравнения является первостепенным, но сначала рассмотрим модельную задачу для одномерного случая:

$$\partial_t v + c \partial_x v = 0, \quad t > 0, \ x \in [0, 1], \tag{5.13}$$

где начальные условия имеют вид $v(x,0) = \varphi(x)$, $(\varphi(0) = \varphi(1))$, а граничные условия зададим периодическими v(0,t) = v(1,t). После преобразования Лагерра уравнение (5.13) принимает вид

$$\left(\frac{\eta}{2} + c\partial_x\right)\bar{v}^m + \Phi_1(\bar{v}^m) = 0, \ m = 0, 1, \dots$$
 (5.14)

Здесь индекс *m* обозначает номер коэффициента ряда Лагерра (2.1). Учитывая, что

$$\Phi_1(\bar{v}^m) = \eta \bar{v}^{m-1} + \Phi_1(\bar{v}^{m-1}), \qquad (5.15)$$

для исследования устойчивости разностных схем перейдем к другой форме уравнения (5.14)

$$\left(\frac{\eta}{2} + c\partial_x\right)\bar{v}^0 + \sqrt{\eta}\varphi(x) = 0, \qquad (5.16a)$$

$$\left(\left(\frac{\eta}{2}+c\partial_x\right)\bar{v}^m = \left(-\frac{\eta}{2}+c\partial_x\right)\bar{v}^{m-1}, \ m = 1, 2, \dots$$
(5.16b)

Для решения этой задачи рассмотрим разностную схему первого порядка точности

$$\frac{c\left(\bar{v}_{j+1}^m - \bar{v}_j^m\right)}{h_x} + \frac{\eta}{2}\bar{v}_j^m = \frac{c\left(\bar{v}_{j+1}^{m-1} - \bar{v}_j^{m-1}\right)}{h_x} - \frac{\eta}{2}\bar{v}_j^{m-1}.$$
(5.17)

Подставляя решение вида $\bar{v}_j^m = \tilde{v}^m \exp(\mathrm{i}k_x j h_x)$ в разностное уравнение (5.17), получаем

$$\tilde{v}^{m} = \frac{\exp(ik_{x}h_{x}) - \beta - 1}{\exp(ik_{x}h_{x}) + \beta - 1}\tilde{v}^{m-1} = G(k_{x})\tilde{v}^{m-1}.$$
(5.18)

Здесь $\beta = \eta h_x/(2c)$, а величина $G = G(k_x)$ является показателем роста или затухания гармоники k_x . Необходимое условие устойчивости в смысле фон Неймана [23] будет выполнено, если $\forall k_x |G(k_x)| \leq 1$. Для (5.18) оценим величину

$$|G(k_x)|^2 = \frac{(\beta + 1 - \cos(k_x h_x))^2 + \sin^2(k_x h_x)}{(\beta - 1 + \cos(k_x h_x))^2 + \sin^2(k_x h_x)} = \frac{A^2}{B^2}.$$

Откуда для c > 0 получаем $A^2 - B^2 = 4\beta (1 - \cos(k_x h_x)) \ge 0$, следовательно, $|G(k_x)|^2 \ge 1$, и схема (5.17) будет неустойчивой.

Рассмотрим другой метод первого порядка точности

$$\frac{c\left(\bar{v}_{j+1}^m - \bar{v}_j^m\right)}{h_x} + \frac{\eta}{2}\bar{v}_{j+1}^m = \frac{c\left(\bar{v}_{j+1}^{m-1} - \bar{v}_j^{m-1}\right)}{h_x} - \frac{\eta}{2}\bar{v}_{j+1}^{m-1}.$$
(5.19)

Приводя схему (5.19) аналогичным образом к виду $\tilde{v}^m = G(k_x)\tilde{v}^{m-1}$, получаем, что для c > 0 величина $A^2 - B^2 = 4\beta (\cos (k_x h_x) - 1) \le 0$, и следовательно $|G(k_x)|^2 \le 1$. Таким образом, схема (5.19) будет неустойчивой для c < 0.

Для схемы Кранка – Николсон второго порядка точности

$$\frac{c\left(\bar{v}_{j+1}^m - \bar{v}_j^m\right)}{h_x} + \frac{\eta}{4}\left(\bar{v}_{j+1}^m + \bar{v}_j^m\right) = \frac{c\left(\bar{v}_{j+1}^{m-1} - \bar{v}_j^{m-1}\right)}{h_x} - \frac{\eta}{4}\left(\bar{v}_{j+1}^{m-1} + \bar{v}_j^{m-1}\right) \quad (5.20)$$

нетрудно получить оценку $|G(k_x)| = 1$, что делает эту схему безусловно устойчивой в случае периодических граничных условий.

Для многошаговых схем высокого порядка точности типа Адамса – Мультона (AM-схема) было проведено аналогичное исследование устойчивости. Для периодических граничных условий для AM-схем третьего, четвёртого и пятого порядков точности величина $|G(k_x)|^2$ оценивается исходя из соотношений

$$A^{2} - B^{2} = 8\beta(\cos(k_{x}h_{x}) - 1)^{2},$$

$$A^{2} - B^{2} = -16\beta(\cos(k_{x}h_{x}) - 1)^{3},$$

$$A^{2} - B^{2} = -16\beta(38\cos(k_{x}h_{x}) - 11)(\cos(k_{x}h_{x}) - 1)^{2}.$$

Откуда следует, что схемы выше второго порядка для c > 0 будут неустойчивыми. При этом схема пятого порядка точности является абсолютно неустойчивой. Спектральный признак фон Неймана является необходимым, но недостаточным условием устойчивости [23], и в случае непериодических граничных условий практические расчёты показали, что для AM-схем с порядком аппроксимации выше второго устойчивость не сохраняется. Для преодоления этих трудностей в диссертации рассмотрены различные способы стабилизации многошаговых AM-схем высокого порядка точности сначала для одномерного уравнения переноса, а затем для двумерного одностороннего волнового уравнения.

5.3.2. Сплайн-стабилизация многошаговых схем для модельного уравнения переноса

Для уравнения (5.13) для c > 0 вместо периодических краевых условий рассмотрим начально-краевые условия вида

$$v(0,t) = f(t), t \ge 0,$$

 $v(x,0) = 0, x \ge 0,$ (5.21)
 $f(0) = 0.$

Разностная аппроксимация для уравнения (5.14) на основе многошагового метода Адамса – Мультона пятого порядка точности будет иметь вид [68]

$$c\frac{\bar{v}_{i+4}^m - \bar{v}_{i+3}^m}{h_x} + \frac{\eta}{1440} \left(251\bar{v}_{i+4}^m + 646\bar{v}_{i+3}^m - 264\bar{v}_{i+2}^m + 106\bar{v}_{i+1}^m - 19\bar{v}_i^m\right)$$

$$= -\frac{1}{720} \left(251\Phi_1\left(\bar{v}_{i+4}^m\right) + 646\Phi_1\left(\bar{v}_{i+3}^m\right) - 264\Phi_1\left(\bar{v}_{i+2}^m\right) + 106\Phi_1\left(\bar{v}_{i+1}^m\right) - 19\Phi_1\left(\bar{v}_i^m\right)\right).$$

(5.22)

Эта схема является неустойчивой согласно спектральному признаку фон Неймана, однако может быть стабилизирована, если проводить расчёты следующим образом.

Алгоритм 5.3 для стабилизации схемы Адамса – Мультона пятого порядка точности на основе сплайн-фильтрации. Для того чтобы вычислить функции \bar{v}^m с пятым порядком точности $O(h_x^5)$ на сетке Ω с шагом h_x , необходимо выполнить:

- 1. Пусть число узлов сетки Ω нечетно. Построить сплайн пятого порядка для функции $\Phi_1(\bar{v}_k^m)$, используя только нечётные узлы сетки.
- 2. Заменить значения функции $\Phi_1(\bar{v}_k^m)$ для чётных k их интерполяционными значениями (сплайн-фильтрация).
- 3. Вычислить значение \bar{v}^m , решив уравнение (5.22).
- Перейти к вычислению последующих коэффициентов разложения ряда Лагерра (m + 1), (m + 2) и так далее.

Такая организация вычислений позволяет стабилизировать численную неустойчивость схемы (5.22) и достичь более высокого порядка аппроксимации по сравнению с методом Ричардсона. Вместо сплайна пятого порядка для стабилизации решения можно использовать другие алгоритмы интерполяции [51, 93]: кубическую сплайн интерполяцию, барицентрическую, Лагранжеву и так далее. Однако многочисленные вычислительные эксперименты не выявили каких-либо преимуществ перед сплайнами, так как процедуры построения сплайнов достаточно экономичны по сравнению с решением эллиптических уравнений в двумерном случае. При этом барицентрическая интерполяция довольно затратная процедура, а Лагранжева и кубическая сплайн интерполяции более диссипативны, чем сплайн пятого порядка. Если не пользоваться сплайнами, то узлы интерполирующего многочлена должны быть симметрично расположены относительно узла, для которого вычисляется интерполяционное значение, в противном случае профиль волны искажается или возникает неустойчивость расчёта.

Можно предложить другой способ стабилизации численной неустойчивости схемы Адамса, не требующий вычисления сплайнов.

<u>Алгоритм 5.4</u>. Стабилизация схемы Адамса – Мультона на основе несогласованной аппроксимации.

1. Принимая во внимание эквивалентность задач (5.14) и (5.16), для вычисления значений сеточных функций $\Phi_1(\bar{v}_i^m)$ вместо (5.15) использовать следующую аппроксимацию

$$\Phi_1\left(\bar{v}_i^m\right) = -\frac{\eta}{2}\bar{v}_i^{m-1} + c\frac{-\bar{v}_{i+2}^{m-1} + 8\bar{v}_{i+1}^{m-1} - 8\bar{v}_{i-1}^{m-1} + \bar{v}_{i-2}^{m-1}}{12h_x} + O\left(h_x^4\right). \quad (5.23)$$

- 2. Решить уравнение (5.14) посредством схемы (5.22).
- Перейти к вычислению последующих коэффициентов разложения ряда Лагерра (m + 1), (m + 2) и так далее.

Несогласованная аппроксимация оператора $\partial/\partial x$ для правой и левой частей (5.14) и (5.16) обуславливает дополнительную нефизическую диссипацию, препятствующую развитию неустойчивости. Однако, если вместо центрированной аппроксимации четвёртого порядка точности в (5.23) использовать аппроксимацию более высокого порядка или нецентрированную схему, то устойчивость теряется. Таким образом, кроме метода Ричардсона, могут быть предложены другие устойчивые алгоритмы высокого порядка точности, однако для вычисления \bar{v}^m функция \bar{v}^{m-1} должна быть известна во всей расчётной области, так как её значения необходимы для реализации стабилизирующих процедур.

5.3.3. Сплайн-стабилизация многошаговых схем для одностороннего волнового уравнения

Многошаговые схемы типа Адамса высоких порядков для решения двумерного одностороннего волнового уравнения представляют значительный интерес, так как в отличие от метода Ричардсона не требуют решать вспомогательную задачу на сетке Ω₂ с удвоенным числом узлов. Для аппроксимации уравнения (5.4) будем использовать схему Адамса – Мультона пятого порядка точности

$$\frac{\bar{u}_{ik+1}^m - \bar{u}_{ik}^m}{h_z} = \frac{1}{720c} \sum_{j=-3}^1 \alpha_j \left(\sum_{s=1}^3 \left(\tilde{\eta} \bar{\psi}_{ik+j}^{m,s} + \Phi_1 \left(\bar{\psi}_{ik+j}^{m,s} \right) \right) - \tilde{\eta} \bar{u}_{ik+j}^m - \Phi_1 \left(\bar{u}_{ik+j}^m \right) \right)$$
(5.24)

где коэффициенты разностной схемы равны $\alpha_{-3} = -19$, $\alpha_{-2} = 106$, $\alpha_{-1} = -264$, $\alpha_0 = 646$, $\alpha_1 = 251$. Для аппроксимации производной $\partial^2/\partial x^2$ снова будем использовать метод (5.6), сохраняющий дисперсионное соотношение с коэффициентами: $a_0 = -3.12513824$, $a_1 = 1.84108651$, $a_2 = -0.35706478$, $a_3 = 0.10185626$, $a_4 = -0.02924772$, $a_5 = 0.00696837$, $a_6 = -0.00102952$, позволяющими достичь двенадцатого порядка аппроксимации.

Решение системы линейных алгебраических уравнений

Запишем разностную задачу (5.24), (5.5b) в виде системы линейных алгебраических уравнений

$$\begin{pmatrix} \gamma_{1}c^{2}\mathcal{L}_{x} - \tilde{\eta}^{2}I & 0 & 0 & \beta_{1}c^{2}\mathcal{L}_{x} \\ 0 & \gamma_{2}c^{2}\mathcal{L}_{x} - \tilde{\eta}^{2}I & 0 & \beta_{2}c^{2}\mathcal{L}_{x} \\ 0 & 0 & \gamma_{3}c^{2}\mathcal{L}_{x} - \tilde{\eta}^{2}I & \beta_{3}c^{2}\mathcal{L}_{x} \\ -251/720\tilde{\eta}I & -251/720\tilde{\eta}I & -251/720\tilde{\eta}I & (c/h_{z} + 251/720\tilde{\eta})I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\Psi}_{k+1}^{m,1} \\ \bar{\Psi}_{k+1}^{m,3} \\ \bar{\Psi}_{k+1}^{m,3} \\ \bar{\Psi}_{k+1}^{m,3} \\ \bar{\Psi}_{k+1}^{m,3} \end{pmatrix} = \\ \begin{pmatrix} \Phi_{2} \left(\bar{\Psi}_{k+1}^{m,1} \right) \\ \Phi_{2} \left(\bar{\Psi}_{k+1}^{m,2} \right) \\ \Phi_{2} \left(\bar{\Psi}_{k+1}^{m,3} \right) \\ \Phi_{2} \left(\bar{\Psi}_{k+1}^{m,3} \right) \\ c/hz\bar{\Psi}_{k}^{m} + 1/720 \left(\sum_{i=-3}^{0} \alpha_{i} \left(\tilde{\eta}\Theta_{k+i}^{m} + \Phi_{1} \left(\bar{\Theta}_{k+i}^{m} \right) \right) + \alpha_{1}\Phi_{1} \left(\bar{\Theta}_{k+1}^{m} \right) \end{pmatrix} \end{pmatrix},$$

где $\bar{\Theta}_k^m = -\bar{\mathbf{U}}_k^m + \sum_{s=1}^3 \bar{\Psi}_k^{m,s}$ и I – единичная матрица. Используя дополнение Шура [114], сеточные функции $\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$ могут быть рассчитаны на основе следующей редуцированной системы линейных алгебраических уравнений

$$\left[\left(c/h_z + \frac{251}{720} \tilde{\eta} \right) I + \frac{251}{720} \tilde{\eta} \sum_{s=1}^3 \beta_s c^2 \mathcal{L}_x \left(\gamma_s c^2 \mathcal{L}_x - \tilde{\eta}^2 I \right)^{-1} \right] \bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m = \bar{\mathbf{F}}_u^m + \sum_{s=1}^3 M_s^{-1} \bar{\mathbf{F}}_{\psi_s}^m,$$

где

$$M_{s} = \frac{\gamma_{s}c^{2}}{\tilde{\eta}^{2}}\mathcal{L}_{x} - I,$$

$$\bar{\mathbf{F}}_{u}^{m} = c/hz\bar{\mathbf{U}}_{k}^{m} + \frac{1}{720}\left(\sum_{i=-3}^{0}\alpha_{i}\left(\tilde{\eta}\bar{\mathbf{\Theta}}_{k+i}^{m} + \Phi_{1}\left(\bar{\mathbf{\Theta}}_{k+i}^{m}\right)\right) + \alpha_{1}\Phi_{1}\left(\bar{\mathbf{\Theta}}_{k+1}^{m}\right)\right),$$

$$\bar{\mathbf{F}}_{\psi_{s}}^{m} = \Phi_{2}\left(\bar{\mathbf{\Psi}}_{k+1}^{m,s}\right)/\tilde{\eta}^{2}.$$

Используя свойство матриц

$$(B+I)^{-1}B = I - (B+I)^{-1}, \qquad (5.25)$$

домножая на матрицу $M_1 M_2 M_3$ и принимая во внимание коммутативность матриц $M_i M_j = M_j M_i$, получаем систему линейных алгебраических уравнений для вычисления функций $\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$

$$\left[M_1 M_2 M_3 \left(c/h_z + \tilde{\eta} + \frac{251}{720} \tilde{\eta} \sum_{s=1}^3 \frac{\beta_s}{\gamma_s} \right) I + \frac{251 \tilde{\eta}}{720} \left(\frac{\beta_1}{\gamma_1} M_2 M_3 + \frac{\beta_2}{\gamma_2} M_1 M_3 + \frac{\beta_3}{\gamma_3} M_1 M_2 \right) \right] \bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m =$$

$$= M_1 M_2 M_3 \bar{\mathbf{F}}_u^m + \tilde{\eta} \left(M_2 M_3 \bar{\mathbf{F}}_{\psi_1}^m + M_1 M_3 \bar{\mathbf{F}}_{\psi_2}^m + M_1 M_2 \bar{\mathbf{F}}_{\psi_3}^m \right).$$
(5.26)

После расчёта сеточных функций $\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$, перед тем как перейти к вычислениям функций $\bar{\mathbf{U}}_{k+2}^m$, функции $\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s}$ должны быть рассчитаны по следующей формуле

$$M_{s}\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s} = \tilde{\eta}^{-2} \left(-\beta_{s}c^{2}\mathcal{L}_{x}\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^{m} + \Phi_{2}\left(\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s}\right) \right), \ s = 1, 2, 3.$$
(5.27)

Используя свойство (5.25), получаем

$$\bar{\boldsymbol{\Psi}}_{k}^{m,s} = M_{s}^{-1} \left(-\frac{\beta_{s}}{\gamma_{s}} \bar{\boldsymbol{U}}_{k}^{m} + \frac{1}{\tilde{\eta}^{2}} \Phi_{2} \left(\bar{\boldsymbol{\Psi}}_{k}^{m,s} \right) \right) - \frac{\beta_{s}}{\gamma_{s}} \bar{\boldsymbol{U}}_{k}^{m}, \quad s = 1, 2, 3.$$
(5.28)

Для двумерного одностороннего волнового уравнения требуется не только стабилизировать численную неустойчивость разностной аппроксимации для оператора $\partial/\partial z$, но и неустойчивость вещественной Паде-аппроксимации (5.2). Метод AM5-I5 (комбинация схемы Адамса – Мультона пятого порядка точности и сплайн фильтрации пятого порядка) позволяет решить обе эти проблемы.

Алгоритм 5.5 для экстраполяции волнового поля на основе решения одностороннего волнового уравнения методом Адамса – Мультона. Для того чтобы вычислить функции $\bar{\mathbf{U}}^m, \bar{\mathbf{\Psi}}^m$ с точностью $O(h_x^{\xi} + h_z^5)$, где ξ определяется аппроксимацией (5.6), необходимо выполнить:

1. Пусть число узлов сетки Ω в направлении z нечетно. Для всех i для функций $\Phi_1(\bar{u}_{ik}^m)$, $\Phi_2(\bar{\psi}_{ik}^{m,s})$ независимо построить одномерные сплайны пятого порядка в направлении z, используя только нечётные значения k.

- 2. Заменить значения функции $\Phi_1(\bar{u}_{ik}^m)$, $\Phi_2(\bar{\psi}_{ik}^{m,s})$ для чётных k их интерполяционными значениями, используя сплайны пятого порядка.
- 3. Для k = 4, ..., K 1
 - 3.1. Рассчитать функции $\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$ на основе решения уравнения (5.26).
 - 3.2. Рассчитать функции $\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s}$, s = 1, 2, 3 на основе решения уравнения (5.27).
- Перейти к вычислению последующих коэффициентов разложения ряда Лагерра (m + 1), (m + 2) и так далее.

Рассмотренный способ стабилизации решения позволяет обеспечить устойчивость не только неявных схем Адамса – Мультона, но и явных схем Адамса – Башфорта, которые будут устойчивы при существенно меньших шагах h_z . Как следствие, число решаемых систем линейных алгебраических уравнений вида (5.26) и (5.27) многократно увеличивается, что делает метод Адамса – Башфорта неэффективным.

Исследуем метод типа предиктор-корректор, совмещающий вычислительную экономичность явных и устойчивость неявных схем Адамса – Мультона. Для уравнения (5.5а) в качестве процедуры прогноза выберем явный метод Адамса – Башфорта пятого порядка точности

$$\frac{\bar{u}_{ik+1}^m - \bar{u}_{ik}^m}{h_z} = \frac{1}{720c} \sum_{j=-4}^0 \varrho_j \left(\sum_{s=1}^3 \left(\tilde{\eta} \bar{\psi}_{ik+j}^{m,s} + \Phi_1 \left(\bar{\psi}_{ik+j}^{m,s} \right) \right) - \tilde{\eta} \bar{u}_{ik+j}^m - \Phi_1 \left(\bar{u}_{ik+j}^m \right) \right),$$
(5.29)

где $\varrho_0 = 1901$, $\varrho_{-1} = -2774$, $\varrho_{-2} = 2616$, $\varrho_{-3} = -1274$, $\varrho_{-4} = 251$. В качестве коррекции будем использовать схему Адамса – Мультона пятого порядка точности (5.24), где неизвестные значения $\bar{\psi}_{ik+1}^{m,s}$ следует заменять предсказанными значениями, тогда как функции \bar{u}_{ik+1}^m выражаются явно. Если для коррекции использовать схему (5.24) и в правую часть подставлять предсказанные значения как для $\bar{\psi}_{ik+1}^{m,s}$, так и для \bar{u}_{ik+1}^m , то для устойчивости потребуются меньшие шаги h_z и одновременно бо́льшее число коррекций.

Алгоритм 5.6 для экстраполяции волнового поля на основе решения одностороннего волнового уравнения методом предиктор-корректор. Для того чтобы вычислить функции $\bar{\mathbf{U}}^m$, $\bar{\Psi}^m$ с точностью $O(h_x^{\xi} + h_z^5)$, где ξ определяется аппроксимацией (5.6), необходимо выполнить:

- 1. Пусть число узлов сетки Ω в направлении z нечетно. Для всех i для функций $\Phi_1(\bar{u}_{ik}^m)$, $\Phi_2(\bar{\psi}_{ik}^{m,s})$ независимо построить одномерные сплайны пятого порядка в направлении z, используя только нечётные значения k.
- 2. Заменить значения функции $\Phi_1(\bar{u}_{ik}^m), \Phi_2(\bar{\psi}_{ik}^{m,s})$ для чётных k их интерполяционными значениями на основе сплайн аппроксимации пятого порядка.
- 3. Для k = 4, ..., K 1
 - 3.1. Используя схему Адамса Башфорта (5.29), рассчитать прогнозируемое значение $\breve{\mathbf{U}}_{k+1}^m$.
 - 3.2. Используя (5.28) с вычисленным значением $\breve{\mathbf{U}}_{k+1}^m$, рассчитать прогнозируемое значение для функций $\breve{\Psi}_{k+1}^{m,s}$, s = 1, 2, 3.
 - 3.3. Используя схему (5.24), подставляя $\breve{\Psi}_{k+1}^{m,s}$ вместо $\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s}$, рассчитать скорректированное значение для функций $\breve{\breve{U}}_{k+1}^m$.
 - 3.4. Используя (5.28) с вычисленным значением $\breve{\mathbf{U}}_{k+1}^m$, рассчитать $\bar{\mathbf{\Psi}}_{k+1}^{m,s}$, s = 1, 2, 3.
 - 3.5. Используя схему (5.24) и вычисленное значение $\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s}$, рассчитать $\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$.
- Перейти к вычислению последующих коэффициентов разложения ряда Лагерра (m + 1), (m + 2) и так далее.

Таким образом, в рамках метода предиктор-корректор вместо системы линейных алгебраических уравнений (5.26) со знаконеопределенной несимметричной матрицей необходимо решать системы линейных алгебраических уравнений вида (5.28) со знакоопределенными симметричным матрицами меньших размерностей, что позволяет использовать экономичные алгоритмы вычислительной линейной алгебры и сократить время счёта. По сравнению с методом Марчука, который имеет второй порядок точности, метод предиктор-корректор имеет пятый порядок точности. Дальнейшее повышение порядка аппроксимации нецелесообразно, так как для обеспечения устойчивости потребуется задавать существенно меньший шаг h_z . Как для метода Адамса, так и для метода предиктор-корректор необходимо вычислять несколько начальных значений вблизи z = 0. Для этого требуется применять другие методы расчёта, например, метод Ричардсона или схему Кранка – Николсон с более подробным шагом h_z .

5.3.4. Алгоритм для решения 3D одностороннего волнового уравнения

В предыдущем разделе был сформулирован алгоритм 5.6, позволяющий перейти от решения системы вида (5.26) к решению серии подзадач меньших размерностей. Такая экономия достигается за счёт того, что в рамках алгоритма 5.6 используется схема предиктор-корректор, требующая решения разностных задач для эллиптических операторов второго порядка (5.28), тогда как схема Адамса – Мультона или метод Ричардсона требуют обращения эллиптических операторов более высоких порядков (5.26). Возможность стабилизации неустойчивой схемы предиктор-корректор позволяет сформулировать экономичный метод не только для решения двумерных задач, но и для трёхмерных. Трёхмерная геометрия представляет существенный интерес ввиду невозможности сведения трёхмерной волновой миграции к набору независимых двумерных подзадач [10]. Таким образом, трёхмерная задача должна решаться в полной постановке, для чего далее предложен соответствующий алгоритм.

Одностороннее волновое уравнение для трёхмерного случая имеет вид

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} = \pm i \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{c^2}{\omega^2} (k_x^2 + k_y^2)} \tilde{u}, \qquad (5.30)$$

а соответствующая Паде-аппроксимация записывается как

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} = -i\frac{\omega}{c} \left[1 - \sum_{s=1}^{n} \frac{\beta_s c^2 (k_x^2 + k_y^2)}{\omega^2 - \gamma_s c^2 (k_x^2 + k_y^2)} \right] \tilde{u}.$$
(5.31)

Коэффициенты γ_s , β_s – выбираются как и для двумерного случая в соответствии с таблицей 1.1. Для записи уравнения в области (x, y, z, t) введём в рассмотрение следующие вспомогательные функции:

$$\tilde{\psi}_{s} = \frac{\beta_{s}c^{2}\left(k_{x}^{2} + k_{y}^{2}\right)}{\omega^{2} - \gamma_{s}c^{2}\left(k_{x}^{2} + k_{y}^{2}\right)}\tilde{u}, \quad s = 1, 2, ..., n,$$

тогда уравнение (5.31) принимает вид

$$c\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} + i\omega \tilde{u} - i\omega \sum_{s=1}^{n} \tilde{\psi}_s = 0.$$

Применяя обратное преобразование Фурье по времени и пространству для двух последних уравнений, получаем систему дифференциальных уравнений в частных производных, определяющую процесс экстраполяции волнового поля в глубину

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial z} - \sum_{s=1}^{n} \frac{\partial \psi_s}{\partial t} = 0, \quad (5.32a)$$

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi_s}{\partial t^2} - \gamma_s\left(\frac{\partial^2\psi_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_s}{\partial y^2}\right) - \beta_s\left(\frac{\partial^2u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2u}{\partial y^2}\right) = 0, \quad s = 1, 2, \dots n. \quad (5.32b)$$

Выполняя преобразование Лагерра по времени для уравнений (5.32a) и (5.32b), получаем следующую задачу для вычисления *m*-ого коэффициента разложения

$$\tilde{\eta}\bar{u}^m + c\frac{\partial\bar{u}^m}{\partial z} = \sum_{s=1}^3 \left(\tilde{\eta}\bar{\psi}^m_s + \Phi_1\left(\bar{\psi}^m_s\right)\right) - \Phi_1\left(\bar{u}^m\right), \quad (5.33a)$$

$$\begin{pmatrix}
c^2 \gamma_s \left(\frac{\partial^2 \bar{\psi}_s^m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{\psi}_s^m}{\partial y^2} \right) - \tilde{\eta}^2 \bar{\psi}_s^m + \beta_s c^2 \left(\frac{\partial^2 \bar{u}^m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}^m}{\partial y^2} \right) = \Phi_2(\bar{\psi}_s^m), \quad (5.33b) \\
s = 1, 2, 3,
\end{cases}$$

где $\tilde{\eta} = \eta/2$, а индекс *m* обозначает номер слагаемого ряда (2.1), $\Phi_1(\bar{a}_m) = \eta \sum_{j=0}^{m-1} \bar{a}_j$, $\Phi_2(\bar{a}_m) = \eta^2 \sum_{j=0}^{m-1} (m-j) \bar{a}_j$.

<u>Алгоритм 5.7</u> для 3D экстраполяции волнового поля на основе решения одностороннего волнового уравнения методом предикторкорректор. Для того чтобы вычислить функции $\bar{\mathbf{U}}^m$, $\bar{\Psi}^m$ с точностью $O(h_x^{\xi_x} + h_y^{\xi_y} + h_z^5)$, где величины ξ_x , ξ_y определяются аппроксимацией (5.6), необходимо выполнить:

- 1. Пусть число узлов сетки Ω в направлении z нечетно. Для всех i для функций $\Phi_1(\bar{u}_{ijk}^m)$, $\Phi_2(\bar{\psi}_{ijk}^{m,s})$ независимо построить одномерные сплайны пятого порядка в направлении z, используя только нечётные значения k.
- Заменить значения функции Ф₁(ū^m_{ijk}), Ф₂(ψ^{m,s}_{ijk}) для чётных k их интерполяционными значениями на основе сплайн аппроксимации пятого порядка.
- 3. Для k = 4, ..., K 1
 - 3.1. Рассчитать прогнозируемое значение $\breve{\mathbf{U}}_{k+1}^m,$ используя схему Адамса Башфорта

$$\frac{\bar{u}_{ijk+1}^m - \bar{u}_{ijk}^m}{h_z} = \frac{1}{720c} \sum_{t=-4}^0 \varrho_t \left(\sum_{s=1}^3 \left(\tilde{\eta} \bar{\psi}_{ijk+t}^{m,s} + \Phi_1 \left(\bar{\psi}_{ijk+t}^{m,s} \right) \right) - \tilde{\eta} \bar{u}_{ijk+t}^m - \Phi_1 \left(\bar{u}_{ijk+t}^m \right) \right),$$

где $\rho_0 = 1901$, $\rho_{-1} = -2774$, $\rho_{-2} = 2616$, $\rho_{-3} = -1274$, $\rho_{-4} = 251$.

- 3.2. Используя (5.28) для вычисленного значения $\breve{\mathbf{U}}_{k+1}^m$, рассчитать прогнозируемое значение для функций $\breve{\Psi}_{k+1}^{m,s}$, s=1,2,3.
- 3.3. Используя схему Адамса Мультона

$$\frac{\bar{u}_{ijk+1}^m - \bar{u}_{ijk}^m}{h_z} = \frac{1}{720c} \sum_{t=-3}^1 \alpha_t \left(\sum_{s=1}^3 \left(\tilde{\eta} \bar{\psi}_{ijk+t}^{m,s} + \Phi_1 \left(\bar{\psi}_{ijk+t}^{m,s} \right) \right) - \left(5.34 \right) - \tilde{\eta} \bar{u}_{ijk+t}^m - \Phi_1 \left(\bar{u}_{ijk+t}^m \right) \right),$$

 $\alpha_{-3} = -19, \ \alpha_{-2} = 106, \ \alpha_{-1} = -264, \ \alpha_0 = 646, \ \alpha_1 = 251$ и подставляя $\breve{\Psi}_{k+1}^{m,s}$ вместо $\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s}$, рассчитать скорректированное значение для функций $\breve{\breve{U}}_{k+1}^m$.

- 3.4. Используя (5.28) с вычисленным значением $\check{\mathbf{U}}_{k+1}^m$, рассчитать $\bar{\mathbf{\Psi}}_{k+1}^{m,s}$, s = 1, 2, 3.
- 3.5. Используя схему (5.34) и вычисленное значение $\bar{\Psi}_{k+1}^{m,s}$, рассчитать $\bar{\mathbf{U}}_{k+1}^m$.
- Перейти к вычислению последующих коэффициентов разложения ряда Лагерра (m + 1), (m + 2) и так далее.

Таким образом, алгоритм 5.7 не отличается от алгоритма 5.6, за исключением того, что в уравнении (5.28) из-за трёхмерной геометрии матрицы M_s определяются как

$$M_s = \frac{\gamma_s c^2}{\tilde{\eta}^2} (\mathcal{L}_x + \mathcal{L}_y) - I,$$

где разностные операторы \mathcal{L}_x , \mathcal{L}_y , аппроксимирующие $\partial^2/\partial x^2$, $\partial^2/\partial y^2$, определяются схемой (5.6). Решение разностной задачи (5.28) может быть выполнено методом сопряжённых градиентов с предобусловливающим оператором вида

$$\frac{y_{i+1,j} - 2y_{i,j} + y_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{y_{i,j+1} - 2y_{i,j} + y_{i,j-1}}{h_y^2} - \sigma y_{i,j},$$

$$i = 2, ..., N_1 - 1, \ j = 2, ..., N_2 - 1,$$

где σ – коэффициент, позволяющий контролировать скорость сходимости итерационного процесса. В третьей главе было показано, что такие разностные уравнения могут быть эффективно решены на суперЭВМ на основе быстрых процедур, включающих алгоритм дихотомии. Высокий уровень производительности алгоритма дихотомии будет достаточным, чтобы обеспечить высокую скорость расчётов для решения одностороннего волнового уравнения в трёхмерном случае.

5.4. Численные расчёты

5.4.1. Решение модельной задачи для транспортного уравнения

Для тестирования спектрально-разностных алгоритмов высоких порядков точности и процедур их стабилизации, сначала для одномерного транспортного уравнения рассмотрим однородную модель среды со скоростью 3000м/с протяженностью 7.5км. Для тестовых расчётов зададим зависимость граничного условия (5.21) от времени как (2.11) с параметрами $t_0 = 0.2$ с., $\delta = 4$, $f_0 = 30$ Гц. Число слагаемых ряда Лагерра было задано n = 2500; параметр разложения был выбран $\eta = 600$.

Из табл. 5.2 видно, что при уменьшении шага сетки в два раза погрешность методов Адамса и Ричардсона уменьшается в соответствие с теоретическим порядком аппроксимации. Например, для сеток с числом узлов $N_x = 2000$ и N_x = 4000 величина погрешности АМ-схемы пятого порядка со сплайн-фильтрацией пятого порядка (AM5-I5) отличается в 31 раз, что почти соответствует пятому порядку аппроксимации. АМ-схема шестого порядка со сплайн-фильтрацией седьмого порядка (AM6-I7) демонстрирует шестой порядок точности, тогда как AM-схема пятого порядка (5.23) (AM5-D4) обладает только четвертым порядком аппроксимации. Из табл. 5.2 и рис. 5.15 также следует, что при одинаковых шагах сетки метод Ричардсона четвёртого порядка аппроксимации более точен по сравнению с методами Адамса пятого и шестого порядков. Здесь нет явного противоречия, так как оценка точности разностных схем включает в себя константу, независящую от шага сетки. Для метода Ричардсона эта константа меньше, чем для метода AM5-I5, так как сплайны строятся на сетке с удвоенным шагом. В тоже время метод Ричардсона требует решения вспомогательной задачи на сетке Ω_2 , поэтому более корректно сравнивать точность расчётов, когда общее число узлов сеток Ω_1, Ω_2 будет равно числу узлов сетки Ω для других методов. Действительно, сравнивая решения для метода Ричардсона при $N_x = 1500$ для сетки Ω_1 и методов Адамса при $N_x = 4500$, из табл. 5.2

N_x	AM5-I5	AM6-I7	CN	RK4	Richardson	AM5-D4
1000	0.32	0.18	1.47	0.99	6.04e-02	0.56
1500	6.67e-2	2.4e-2	1.51	0.92	1.13e-2	0.18
2000	1.72e-2	4.6e-3	1.38	0.6	3.5e-3	6.5e-2
3000	2.3e-3	4.18e-4	0.87	1.68	6.82e-4	1.33e-2
4000	5.6e-4	7.52e-5	0.53	5.46e-2	2.14e-4	4.2e-3
4500	3.1e-4	3.72e-5	0.43	3.39e-2	1.33e-4	2.6e-3

Таблица 5.2. Зависимость величины погрешности $\|u^{\text{exact}} - u^h\|_2 / \|u^{\text{exact}}\|_2$ от числа узлов сетки для различных методов

видно, что последние значительно точнее. Применение процедуры сплайн-фильтрации не приводит к существенной потере точности, иначе точность методов AM5-I5 и AM6-I7 была бы ниже или сопоставима с методом четвёртого порядка AM5-D4, для которого фильтрация не применяется.

Для сравнения аналогичные расчёты были выполнены для схемы Кранка – Николсон и явного метода Рунге – Кутты (RK4) [101], которые обладают вторым и четвертым порядком точности, соответственно. Для метода RK4 значения сеточных функции $\Phi_1(\bar{v}^m)$ в полуцелых узлах сетки вычислялись на основе сплайнов пятого порядка. Реализация неявного метода Рунге – Кутты высоких порядков нецелесообразна из-за существенно бо́льших вычислительных затрат по сравнению с предлагаемыми в данной работе подходами. Из табл. 5.2 и рис. 5.15 видно, что метод RK4 и Кранка – Николсон устойчивы и сходятся к аналитическому решению при уменьшении шага сетки. Однако для крупных шагов сетки метод RK4 обладает выраженной численной диссипацией, тогда как схема Кранка – Николсон, напротив, демонстрирует дисперсионную ошибку. Низкая точность для крупных шагов сетки делает применение этих алгоритмов невыгодным по сравнению с методами Адамса.

Для оценки диссипативных свойств предлагаемых методов рассмотрим



Рис. 5.15. Решение транспортного уравнения для фиксированного момента времени для различных спектрально-разностных алгоритмов и числа узлов сетки

квадратичный интеграл вида (равенство Парсеваля)

$$K(x) = \int_{0}^{\infty} v^{2}(x,t)dt = \sum_{k=0}^{\infty} \left[\bar{v}^{k}(x)\right]^{2}.$$
 (5.35)

Для задачи (5.13) и (5.21) для c = const > 0 при достаточном числе слагае-



Рис. 5.16. Зависимость величины K(x) от координаты для различных методов и числа узлов сетки

мых ряда Лагерра с хорошей точностью должно выполняться K(x) = const. Из рис. 5.16а, б видно, что для аналитического метода (2.18) и для схемы Кранка
– Николсон величина K(x) сохраняется с почти машинной точностью. Однако из-за численной дисперсии решение, полученное на основе схемы Кранка – Николсон для крупных шагов сетки, не удовлетворяет транспортному уравнению с какой-либо точностью. Метод Ричардсона для $N_x = 1000$ (рис. 5.16а) менее диссипативен, чем алгоритмы AM5-I5 и AM6-I7, тогда как с увеличением числа узлов сетки (рис. 5.16б) ситуация противоположна, что при решении двумерных задач для одностороннего волнового уравнения будет обуславливать более сильную устойчивость метода Ричардсона по сравнению с методами Адамса. Метод Рунге – Кутты наиболее диссипативный метод из всех рассматриваемых, вследствие чего функция, заданная в качестве начального условия, была сглажена до нулевого значения (рис. 5.15а). Таким образом, явный метод Рунге – Кутты и схема Кранка – Николсон не могут быть рекомендованы для использования в рамках спектрально-разностного метода Лагерра.

5.4.2. 2D/3D волновое поле от точеного источника

Теперь оценим точность метода Лагерра для одностороннего волнового уравнения, рассчитав импульс от точечного источника для однородной модели среды со скоростью 250м/с и размерами 3.5км ×1.5 км. Точечный источник (2.11) с параметрами $t_0 = 0.2$ с., $\delta = 4$, $f_0 = 30$ Гц был расположен в центре и на поверхности. Число слагаемых ряда Лагерра (2.1) было n = 4000 для T = 6с.; параметр разложения был выбран $\eta = 600$.

В разделе 5.4.1 для одномерного транспортного уравнения было показано, что при одинаковом шаге сетки метод Ричардсона более точен, чем схема AM5-I5, что справедливо и для двумерного случая. Если для метода Ричардсона шаг сетки Ω_1 выбрать $h_z = 1$ м, а для методов AM5-I5 и PC5-I5 положить равным $h_z = 0.3$ м, тогда общий объём вычислений и точность расчётов для всех трёх методов будут сопоставимы (рис. 5.17). Однако при более детальном рассмотрении значений амплитуд вдоль прямой "Срез" на рис. 5.18 видно, что методы AM5-I5 и PC5-I5 более точны, когда число узлов сетки Ω равно числу

узлов сеток Ω_1, Ω_2 .



Рис. 5.17. Мгновенный снимок волнового поля для момента времени t = 6с. для однородной скоростной модели; метод Ричардсона а) $h_{x,z} = 1$ м и б) $h_{x,z} = 0.5$ м; в) AM5-I5 метод с шагом сетки $h_x = 1$ м, $h_z = 0.3$ м, г) PC5-I5 метод с шагом сетки $h_x = 1$ м, $h_z = 0.3$ м

Бо́льшая точность и вычислительная экономичность методов AM5-I5, PC5-I5 достигается за счёт меньшей устойчивости по сравнению с методом Ричардсона. Экспериментально было выяснено, что для метода Ричардсона условие устойчивости имеет вид $h_z/h_x \leq 1$, тогда как для метода AM5-I5 необходимо чтобы $h_z/h_x < 0.4$, а для алгоритма PC5-I5 устойчивость достигается при $h_z/h_x < 0.3$. Тот факт, что минимальные шаги, требуемые для обеспечения хорошей точности и устойчивости, почти совпадают, позволяет утверждать о сбалансированности метода PC5-I5, который также на 30 - 40% экономичнее метода AM5-I5.

Дополнительно были рассмотрены методы AM6-I7 и AM5-D4, которые устойчивы для одномерного транспортного уравнения, однако неустойчивы для двумерного одностороннего волнового уравнения, так как помимо численной неустойчивости, обусловленной выбором способа аппроксимации для операто-



Рис. 5.18. Зависимость волнового поля от координаты вдоль прямой "Срез" (рис. 5.17) для различных методов и числа узлов сеток

ра $\partial/\partial z$, существует неустойчивость, возникающая из-за наличия сингулярной составляющей в решении одностороннего уравнения, то есть когда знаменатели (5.2) близки к нулю или обращаются в ноль. В методе AM5-D4 для аппроксимации $\partial/\partial z$ для правой и левой части уравнений (5.14), (5.16) использовались различные разностные схемы, что добавляло численную диссипацию, однако такой подход не позволяет ограничить рост сингулярных компонент для двумерного одностороннего волнового уравнения. Также метод AM6-I7 демонстрирует (рис. 5.16) меньшую диссипацию по сравнению с алгоритмом AM5-I5. Как следствие, недостаточный уровень фиктивного поглощения не позволяет стабилизировать неустойчивость для двумерного одностороннего волнового уравнения.

Аналогичные выводы можно сделать и для трёхмерных расчётов (рис. 5.19



Рис. 5.19. Мгновенный снимок волнового поля для момента времени t = 1.5с. для однородной скоростной модели; метод предиктор корректор $h_x = h_y = 2$ м, $h_z = 0.6$ м

и 5.19). Метод предиктор-корректор позволил существенно сократить вычислительные затраты, так как решение эллиптических уравнений на суперЭВМ с предобусловливающим оператором на основе метода разделения переменных или метода переменных направлений не представляет существенных трудностей после разработки алгоритма дихотомии в третьей главе. Все выводы относительно устойчивости и точности расчётов для двумерного случая справедливы и для трёхмерной геометрии.

Уравнение (5.1) было получено для однородной среды, однако расчёты можно проводить и для неоднородных сред, при этом следует учитывать, что аппроксимация (5.2) для вещественных коэффициентов γ_s , β_s может быть неустойчивой, особенно для моделей с резкими изменениями скоростей [155, 201]. Одна из причин неустойчивости состоит в том, что знаменатель (5.2) может прини-



Рис. 5.20. Мгновенный снимок волнового поля для момента времени t = 1.5с. для однородной скоростной модели; метод предиктор корректор $h_x = h_y = 1$ м, $h_z = 0.3$ м

мать сколь угодно близкие к нулю значения, что обуславливает значительный рост соответствующих Фурье-компонент решения. Также для отрицательных подкоренных значений, аппроксимация (5.2) является некорректной для вещественных коэффициентов γ_s , β_s . Несмотря на то что алгоритм сплайн-фильтрации ограничивает рост неустойчивых Фурье-компонент решения, перед проведением расчётов с разрывной скоростной моделью среды требуется её предварительное сглаживание.

Рассмотрим тест для неоднородных скоростных моделей рис. 5.21а и рис. 5.22а,б. Расчётные параметры были выбраны такими же как и для предыдущего теста с однородной скоростной моделью. Предварительное сглаживание скоростных моделей выполнялось посредством сглаживающего фильтра Гаусса с ядром 3×3. Для моделей рис. 5.21а и рис. 5.22а было достаточно однократного



Рис. 5.21. Мгновенный снимок волнового поля для t = 5с. для неоднородной скоростной модели среды а) метод Ричардсона с шагами сетки 1м; б) метод предиктор-корректор с шагами сетки $h_x=1$ м, $h_z=0.25$ м; в) схема Адамса – Мультона $h_x=1$ м, $h_z=0.25$ м; г) зависимость волнового поля от координаты вдоль линии "Срез" для различных методов и шагов сеток. Стрелки указывают на повышенную диссипации энергии волнового поля

применения сглаживающего фильтра, тогда как для модели рис. 5.226, включающей более высокие градиенты скоростей, требуется применять фильтр три раза. Число сглаживающих итераций может быть уменьшено, если использовать бо́льший размер ядра фильтра, например, 5 × 5 или 7 × 7.

Из рис. 5.21г видно, что наибольшей диссипацией обладает алгоритм на основе метода Ричардсона, а наименьшей метод AM5-I5. Это объясняет повышенную устойчивость метода Ричардсона, который для этой скоростной модели не требует предварительного сглаживания, в тоже время амплитуды интересующих нас волн сохраняются хуже, чем для методов AM5-I5 и PC5-I5. По точности методы AM5-I5 и PC5-I5 сопоставимы, при этом время счёта метода PC5-I5 минимально и соответствует времени счёта для теста с однородной скоростной моделью. Одинаковы временные затраты для двух тестов объясняется тем, что наличие неоднородности в среде при использовании прямых методов решения систем линейных алгебраических уравнений не влияет на производительность метода в целом. В расчётах с бо́льшими градиентами скоростей рис. 5.22a,б обнаруживаются дополнительные нефизические волны, которые отмечены стрелками. Чем больше локальная контрастность среды, тем больше будет амплитуда фиктивной волны, при этом её скорость распространения значительно меньше скорости среды, что согласуется с теорией [155, 201]. Данный тест показал, что посредством процедуры сплайн-фильтрации удалось стабилизировать как изначально неустойчивое уравнение, так и неустойчивость многошаговых схем, сохранив при этом хорошую обусловленность систем линейных алгебраических уравнений и высокую точность метода в целом.



Рис. 5.22. Мгновенный снимок волнового поля для t=5 с. для различных скоростных моделей для метода PC5-I5 с шагом сетки $h_x = 1$ м, $h_z = 0.25$ м. Стрелки указывают на нефизическую волну на границе раздела двух сред

5.4.3. Миграционные преобразования 2D/3D временных разрезов

Тестирование алгоритмов на основе комбинации преобразования Лагерра и метода Ричардсона выполнено в предыдущем разделе, где на примере решения задачи сейсморазведки реализована процедура волновой миграции после суммирования в рамках модели "взрывающихся границ" [109]. По сравнению с конечно разностным (FD) [40], Fourier Finite Difference (FFD) [206] и Phase Shift Plus Interpolation (PSPI) [140] методами, спектрально-разностный алгоритм на основе преобразования Лагерра позволил получить более точное решение. Рассмотрим аналогичные тесты для алгоритмов AM5-I5, PC5-I5 для решения двумерного и трёхмерного одностороннего волнового уравнения.

Скоростная модель, включающая синклиналь

На рис. 5.4а изображена скоростная модель, включающая синклиналь, для которой теоретические сейсмограммы на рис. 5.4б были получены с помощью алгоритма Гауссовых пучков [66, 102], реализованного в пакете "Siesmic Unix". Для задания граничного условия на дневной поверхности функция для сейсмограммы нулевых удалений $u(x, z, t)|_{z=0} = g(x, t)$ раскладывалась в ряд (2.1) с параметрами n = 2000 и $\eta = 600$ для $t \in [0, 4]$ с. Расчёты проводились на сетках с шагами $h_{x,z} = 10$ м, 5м и 0.5м.

Из рис. 5.23а,б видно, что метод Ричардсона менее точен, если общее число узлов Ω_1 , Ω_2 сеток равно числу узлов сетки Ω для методов AM5-I5, PC5-I5. Если же шаги сеток равны, тогда качество полученного изображения приблизительно одинаковое, однако метод Ричардсона требует в три раза больше вычислений по сравнению с другими методами. Алгоритмы AM5-I5 (рис. 5.23в,г) и PC5-I5 (рис. 5.23д,е) позволяют получить одинаковые по точности изображения, что свидетельствует о корректности расчётов, так как в основе AM5-I5 и PC5-I5 методов лежат различные идеи использования схем Адамса. Процедура сплайн-фильтрации позволяет стабилизировать неустойчивость с меньшими затратами, чем метод Ричардсона, при этом метод PC5-I5 на треть более экономичен, чем AM5-I5.

Скоростная модель "Sigsbee"

Для модели среды "Sigsbee2A" [218] (рис. 5.8а) теоретические сейсмограммы (рис. 5.8б) были рассчитаны с помощью алгоритма "взрывающихся границ", реализованного в пакете "Madagascar" [184]. Для задания граничного условия функции для сейсмограммы нулевых удалений $u(x, z, t)|_{z=0} = g(x, t)$ расклады-



Рис. 5.23. Мгновенный снимок волнового поля для момента времени t=4 с. для модели среды и сейсмограммы нулевых удалений на рис. 5.4

вались в ряд Лагерра для n=3500 с параметром $\eta=300$ для $t \in [0, 12]$ с. Расчёты были выполнены на сетке с шагами $h_{x,z} = 12.5$ м для метода Ричардсона и с шагами $h_x = 12.5$ м , $h_z = 4.16$ м для методов AM5-I5 и PC5-I5. Скоростная модель среды "Sigsbee2A" не является гладкой, поэтому для устойчивости алгоритмов

AM5-I5 и PC5-I5 требуется предварительное сглаживание. Если для модели, включающей синклиналь, для обеспечения устойчивости достаточно однократного сглаживания, то для модели "Sigsbee2A" процедура сглаживания применялась три раза. Для метода Ричардсона сглаживание скоростной модели не проводилось из-за более высокой внутренней диссипации.

Результаты моделирования для метода Ричардсона приведены на рис. 5.24, тогда как для методов AM5-I5 и PC5-I5 представлены одним общим рисунком 5.25, так как для этих методов различий в решении не наблюдается. Метод Ричардсона при суммарном числе узлов сеток Ω_1 , Ω_2 равном числу узлов сетки Ω для методов AM5-I5 и PC5-I5 обладает меньшей амплитудной точностью, что обусловлено более сильной численной диссипацией. Все три алгоритма продемонстрировали устойчивость, однако более экономичными являются многошаговые процедуры типа предиктор-корректор.



Рис. 5.24. Мгновенный снимок волнового поля для t=12с., рассчитанный методом Ричардсона с шагом сетки $h_{x,z} = 12.5$ м, для модели и сейсмограммы нулевых удалений на рис. 5.8

Таким образом, в результате тестирование выяснилось, что для устойчиво-



Рис. 5.25. Мгновенный снимок волнового поля для t=12с., рассчитанный методами AM5-I5 и PC5-I5 с шагами сетки $h_x=12.5$ м и $h_z=4.16$ м, для модели и сейсмограммы нулевых удалений на рис. 5.8

сти методов на основе схем Адамса, которые стабилизируются сплайн-фильтрацией, необходимо выбирать шаг h_z приблизительно в два или три раза меньшим, чем для метода Ричардсона. В этом случае вычислительные затраты будут сопоставимыми, однако точность метода Адамса будет выше за счёт более высокого порядка аппроксимации и меньшей численной диссипации. Различие по точности между алгоритмами AM5-I5 и PC5-I5 не наблюдается, поэтому в силу более простой программной реализации рекомендуется использовать метод PC5-I5.

Волновая миграция "до суммирования"

Проведём расчёт глубинного изображения на основе миграции "до суммирования", в рамках которой на основе решения одностороннего волнового уравнения для каждого источника выполняется продолжение волнового поля от приемников. Также на основе решения одностороннего волнового уравнения рассчитывается волновое поле от источника. После экстраполяции волновых полей, используя условие изображения вида [253]

$$I(x, z) = \sum_{s=1}^{K} \int_{0}^{T} R_{s}(x, z, t) S_{s}(x, z, t) dt,$$

можно вычислить изображение среды I(x, z). Здесь $R_s(x, z, t)$ – экстраполяция волнового поля от приемников для источника с номером s, S(x, z, t) – экстраполяция волнового поля от s-го источника, T – длительность регистрации сейсмического сигнала, а K – число источников. В [95] было показано, что приведённая процедура эквивалента решению уравнения с двумя квадратными корнями [40] в пространстве источник-приёмник.

Были обработаны реальные сейсморазведочные данные из района Восточной Сибири. Общее число пунктов взрыва для профиля было K=2193. Расстояние между приемниками было 25м, шаг по источникам составлял 50м. Скоростная модель среды была получена с помощью коммерческого пакета Paradigm и представлена на рис. 5.26. Сейсмограмма для нескольких пунктов взрывов изображена на рис. 5.27. Шаг экстраполяции по глубине составлял 1м, параметры разложения сейсмограмм для ряда Лагерра были $\eta = 1800$, n = 3000 для T = 2с. Было выполнено сравнение двух глубинных изображений рис. 5.28 и 5.29. Изображение на рис. 5.28 было получено с помощью коммерческого пакета Paradigm с использованием миграции Кирхгофа до суммирования, а изображение на рис. 5.29 с помощью миграции на основе решения одностороннего волнового уравнения.

Специалистами "Сибирского научно-исследовательского института геофизики, геологии и минерального сырья", а также специалистами из "Всероссийского научно-исследовательского геологического нефтяного института Новосибирский филиал" на основе сравнения полученных глубинных изображений было отмечено, что предлагаемый в диссертации алгоритм обладает требуемой точностью и позволяет получать глубинные изображения с более высоким раз-

228

решением, чем при миграции на основе интеграла Кирхгофа. Затраты для решения одностороннего волнового уравнения существенно выше, чем для метода Кирхгофа, однако, разработанный в диссертации алгоритм, позволяет проводить расчёты для более общих скоростных моделей сред.

Дополнительно были обработаны реальные сейсморазведочные данные из района Западной Сибири. Общее число пунктов взрыва для профиля было K = 201. Расстояние между приемниками было 25м, шаг по источникам составлял 50м. Скоростная модель среды представлена на рис. 5.30. Шаг экстраполяции по глубине составлял 1м, параметры разложения сейсмограмм для ряда Лагерра были $\eta = 1800$, n = 3000 для T = 2с. Было выполнено сравнение двух глубинных изображений на рис. 5.31 и 5.32. Изображение на рис. 5.32 получено с помощью миграции на основе решения одностороннего волнового уравнения. Видно, что разломы в центре изображения лучше сфокусированы посредством метода Лагерра, также разработанный в диссертации алгоритм обладает значительно большей разрешающей способностью.

3D Миграция

Для региона Западной Сибири была выполнена 3D волновая миграция на основе модели взрывающихся границ для реальных сейсморазведочных данных. Скоростная модель среды представлена на рис. 5.33 Для экстраполяции волнового поля с наблюдаемой поверхности в глубину использовался трёхмерный алгоритм 5.7. Экстраполяция проводилась для времён $t \in [0, 4]$ с. Параметры разложения ряда Лагерра для сейсмограммы были выбраны $\eta = 800$, число членов ряда задавалось n = 1500. Шаги по пространству были $h_{x,y} = 12.5$ м, а по глубине $h_z=4$ м. В качестве предобусловливающего оператора использовался оператор на основе метода разделения переменных, при этому высокая скорость сходимости предобусловленного метода сопряжённых градиентов позволяла получить решение задачи (5.28) за две-четыре итерации с почти линейно зависимостью величины ускорения от числа процессоров. Рассчитанное глубинное изображение представлено на рис. 5.34. В результате оценки результатов волновой миграции специалистами "Всероссийского научно-исследовательского геологического нефтяного института Новосибирский филиал" была подтверждена работоспособность предлагаемого подхода для трёхмерной геометрии, а полученное глубинное изображение было использовано для последующего геологического анализа.

5.5. Выводы

В пятой главе диссертации были разработаны новые спектрально-разностные алгоритмы высоких порядков точности для решения одностороннего волнового уравнения. Замена преобразования Фурье на преобразование Лагерра позволяет после разностной аппроксимации пространственных производных получить систему линейных алгебраических уравнений, которая удобна для решения прямыми методами, такими как параллельный алгоритмом дихотомии, разработанный в третьей главе диссертации. Численные эксперименты показали, что специальные разностные схемы, сохраняющие дисперсионное соотношение, позволяют уменьшить шаг сетки в горизонтальном направлении приблизительно два раза по сравнению с классическими разностными схемами. В результате исследований удалось определить причины численной неустойчивости для многошаговых схем высокого порядка точности, используемых для аппроксимации производной для *z*-направления. Для стабилизации неустойчивости была разработана специальная стабилизирующая процедура на основе сплайн-фильтрации, что позволило реализовать многошаговые схемы Адамса и на их основе методы типа предиктор-корректор высоких порядков точности. Несмотря на то что метод Ричардсона более вычислительно затратен, чем многошаговые схемы Адамса, не следует полностью отказываться от его применения. Во-первых, метод Ричардсона обладает бо́льшей численной диссипацией, что позволяет рассчитывать неоднородные скоростные модели без их предварительного

230

сглаживания, также дополнительная устойчивость не будет избыточной при рассмотрении одностороннего волнового уравнения для упругой модели. Вовторых, метод Ричардсона может быть использован для вычисления начальных значений для многошаговых методов, которые не являются самостартующимися. Как правило, для решения этой проблемы применяются схемы типа Рунге – Кутты, однако в рамках метода Лагерра они не обеспечивают требуемой точности из-за сильной численной диссипации. Комбинация сплайн-фильтрации, многошаговых методов Адамса и преобразования Лагерра является взаимодополняющей. Экспериментально было проверено, что замена методов Адамса на схемы на основе конечных разностей "назад" не позволяет обеспечить устойчивости счёта посредством предлагаемых стабилизирующих процедур. Также как замена преобразования Лагерра на преобразование Фурье по времени делает сплайн-фильтрацию бессмысленной, так как в этом случае решение для каждой гармоники определяется независимо начальными условиями на дневной поверхности. Разработанное программное обеспечение позволяет проводить практические расчёты в рамках миграционных преобразований для расчёта глубинных изображений земных недр. Алгоритмы миграции были проверены на корректность и точность специалистами из "Сибирского научно-исследовательского института геофизики, геологии и минерального сырья" и из "Всероссийского научно-исследовательского геологического нефтяного института Новосибирский филиал". Было установлено, что предлагаемые в диссертации методы корректны и позволяют получать глубинные изображения высокого разрешения для сложных моделей сред.



Рис. 5.26. Скоростная модель среды, построенная коммерческим пакетом "Paradigm" для реального набора сейсморазведочных данных из района Восточной Сибири



Рис. 5.27. Сейсмограммы общего пункта взрыва для реального набора сейсморазведочных данных из района Восточной Сибири



Рис. 5.28. Глубинный разрез, рассчитанный посредством алгоритма миграции Кирхгофа до суммирования, реализованного в коммерческом пакете "Paradigm"



Рис. 5.29. Глубинный разрез, рассчитанный посредством разработанного в диссертации спектрально-разностного алгоритма волновой миграции до суммирования на основе решения одностороннего волнового уравнения 235



Рис. 5.30. Скоростная модель среды для реального набора сейсморазведочных данных из района Западной Сибири



Рис. 5.31. Глубинный разрез, рассчитанный посредством разработанного в диссертации спектрально-разностного алгоритма волновой миграции до суммирования



Рис. 5.32. Глубинный разрез, рассчитанный посредством стандартного алгоритма волновой миграции до суммирования на основе приближённых экстраполяторов



Рис. 5.33. Скоростная 3D модель среды для района Западной Сибири



Рис. 5.34. Изображение, построенное на основе решения трёхмерного одностороннего волнового уравнения для скоростной модели на рис. 5.33

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

- На основе предложенных в диссертации новых спектрально-разностных алгоритмов были разработаны программные комплексы для суперЭВМ для расчёта акустических и упругих волновых полей.
- На основе интегрального преобразования Лагерра по времени и конечноразностных аппроксимаций высокого порядка точности по пространству предложены и исследованы новые спектрально-разностные алгоритмы для экстраполяции 2D/3D волнового поля с наблюдаемой поверхности в глубину посредством решения одностороннего волнового уравнения. В виде программных комплексов реализованы 2D/3D процедуры волновой миграции, позволяющие рассчитывать изображения земных недр по данным сейсмических наблюдений.
- В рамках метода глубинного сейсмического зондирования выполнены расчёты волновых полей для скоростных моделей земной коры, полученных для юга Байкальской рифтовой зоны и сопредельных областей Монголии в эксперименте BEST (Baikal Explosion Seismic Transect).
- Для реализации спектрально-разностных алгоритмов были разработаны новые устойчивые численные методы расчёта значений интегралов от быстро осциллирующих функций. Предложены экономичные процедуры для вычисления функций и преобразования Лагерра.
- Для эффективной реализации спектрально-разностных методов на супер-ЭВМ были разработаны высокомасштабируемые параллельные прямые алгоритмы для решения систем линейных алгебраических уравнений.
- Предложены и исследованы новые стабилизирующие процедуры сплайнфильтрации, позволяющие ограничить как неустойчивость математиче-

ской модели экстраполяции волнового поля на основе решения одностороннего волнового уравнения, так и неустойчивость разностных аппроксимаций высокого порядка точности.

С целью дальнейшего развития результатов и методов диссертации предлагаются следующие перспективные направления исследований:

- оптимизация предложенных в диссертации прямых методов решения систем линейных алгебраических уравнений с целью проведения расчётов с использованием сотен тысяч процессоров;
- разработка универсальных программных библиотек для современных суперЭВМ для решения систем линейных алгебраических уравнений на основе предложенных в диссертации алгоритмов;
- исследование процедур сплайн-фильтрации для решения задачи экстраполяции волнового поля в глубину в рамках упругой модели;
- изучение возможности применения предложенного в диссертации алгоритма интегрирования быстро осциллирующих функций не только для выполнения преобразования Лагерра, но и для других классических ортогональных многочленов;
- разработка экономичного и устойчивого алгоритма для расчёта коэффициентов отражений с правильной размерностью для решения задачи миграции сейсмических данных.

Список литературы

- Акимова Е. Н. Об устойчивости распараллеливания метода немонотонной прогонки. — Новосибирск : Препринт ВЦ СО АН СССР, 1989. — Т. 818. — С. 18.
- 2. Акимова Е. Н. Распараллеливание алгоритма матричной прогонки // Математическое моделирование. — 1994. — Т. 6, № 9. — С. 61–67.
- Акимова Е. Н., Белоусов Д. В. Параллельные алгоритмы решения СЛАУ с блочно-трехдиагональными матрицами на многопроцессорных вычислителях // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. — 2011. — Т. 15, № 5. — С. 87–93.
- 4. Акимова Е. Н., Гемайдинов Д. В. Параллельные алгоритмы решения задачи гравиметрии о восстановлении плотности в слое // Тр. ИММ УрО РАН. — 2007. — Т. 13, № 3. — С. 3–21.
- Акимова Е. Н., Пинкина Н. А. Анализ устойчивости и реализация алгоритма распараллеливания прогонки // Проекционно-численые методы в задачах численного анализа. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР. — 1989. — С. 3–12.
- 6. Алексеев А. С., Михайленко Б. Г. О задаче Лэмба для неоднородного полупространства // Докл. АНСССР. — 1974. — Т. 241, № 1. — С. 84–86.
- 7. Алексеев А. С., Михайленко Б. Г. Численное моделирование процессов распространения сейсмических волн в радиально-неоднородной модели Земли // Докл. АН СССР. 1977. Т. 235, № 1. С. 46–49.
- 8. Алексеев А. С., Михайленко Б. Г. Метод расчета теоретических сейсмограмм для сложнопостроенных моделей сред // Докл. АН СССР. — 1978. — Т. 240, № 5. — С. 1062–1065.
- Астраханцев Г. П. Метод фиктивных областей для эллиптических уравнений второго порядка с естественными граничными условиями // ЖВМ и МФ. — 1978. — Т. 18, № 1. — С. 118–125.

- 10. Боганик Г. Н., Гурвич И. И. Сейсморазведка. Издательство АИС, 2006.
- Бугров А. Н., Коновалов А. Н. Об устойчивости алгоритма распараллеливания прогонки // Численные методы механики сплошной среды. — 1979. — Т. 10. — С. 139–146.
- 12. *Василенко В. А.* Сплайн-функции: теория, алгоритмы, программы. Новосибирск : Сибирское отделение изд-ва Наука, 1983. С. 240.
- Витковский В. Э., Федорук М. П. Вычислительная производительность параллельного алгоритма прогонки на кластерных суперкомпьютерах с распределенной памятью // Вычислительные методы и программирование. — 2008. — Т. 9. — С. 305–310.
- 14. *Воеводин В. В., Воеводин В. В.* Параллельные вычисления. БХВ-Петербург, 2004. — С. 608.
- Воеводин В. В., Тыртышников Е. Е. Численные методы решения задач с матрицами типа тёплицевых // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1981. — Т. 21, № 3. — С. 531–544.
- 16. Вшивков В. А., Терехов А. В. О самодействии в методе частиц в ячейках // Вычислительные методы и программирование. — 2008. — Т. 9. — С. 48–57.
- Вшивков В. А., Тарнавский Г. А., Неупокоев Е. В. Параллелизация алгоритмов прогонки: многоцелевые вычислительные эксперименты // Автометрия. — 2002. — Т. 38. — С. 74–86.
- 18. Гаврилюк И. П., Макаров В. Л. Преобразование кэлли и решение начальной задачи для дифференциального уравнения первого порядка с неограниченным операторным коэффициентом в гильбертовом пространстве // Матем. моделирование. 1994. Т. 6, № 6. С. 94–107.
- 19. *Гамбурцев Г. А.* Избранные труды. В 3 томах. Том 2. Основы сейсморазведки. — Наука, 2003.
- 20. Гасенко В. Г. Дифференциальный метод Фурье // Сибирский журнал индустриальной математики. — 2017. — Т. 20, № 1. — С. 21–30.
- 21. Гельфонд А. О. Исчисление конечных разностей. Москва : ГИФМЛ,

1959. - C. 400.

- 22. Годунов С. К. О численном решении краевых задач для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений // Успехи математических наук. — 1961. — Т. 3. — С. 171–174.
- 23. Годунов С. К., Рябенький В. С. Разностные схемы. Москва : Наука, 1977. С. 440.
- 24. Головашкин Д. Л. Параллельные алгоритмы решения сеточных уравнений трехдиагонального вида, основанные на методе встречных прогонок // Матем. моделирование. — 2005. — Т. 17. — С. 118–128.
- 25. *Де Бор К.* Практическое руководство по сплайнам. Перевод с англ. изд. Москва : Радио и связь, 1985. С. 304.
- 26. Демидов Г. В., Мартынов В. Н. Пошаговый метод решения эволюционных задач с использованием функций Лаггера // Сиб. журн. вычисл. матем. — 2010. — Т. 13, № 4.
- Демидов Г. В., Мартынов В. Н., Михайленко Б. Г. Метод решения эволюционных задач, использующий пошаговое преобразование Лагерра // Сиб. журн. вычисл. матем. — 2012. — Т. 15, № 2.
- 28. Дьяконов Е. Г. О построении итерационных методов на основе использования операторов, эквивалентных по спектру // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1966. Т. 6, № 1. С. 12–34.
- Жуков А. И. Метод Фурье в вычислительной математике. Москва : Наука, 1992. — С. 176.
- Ильин В. П. Прямой анализ устойчивости метода прогонки // Актуальные проблемы вычислительной математики и математического моделирования. — 1985. — С. 189–201.
- Ильин В. П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. — Москва : Физмалит, 1995. — С. 288.
- 32. *Ильин В. П.* Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. — Новосибирск: Изд. ИВМиМГ, 2001. — С. 318.

- Ильин В. П., Кузнецов Ю. И. Трехдиагональные матрицы и их приложения. — Москва : Наука, 1985. — С. 208.
- 34. Ильин В. П., Свешников В. М., Литвиненко С. А. Параллельная реализация трехмерного аналога метода писмана-речфорда // Автометрия. — 2003. — Т. 39. — С. 97–108.
- 35. Имомназаров Х. Х., Михайлов А. А. Использование спектрального метода Лагерра для решения линейной двумерной динамической задачи для пористых сред // Сиб. жсурн. индустр. матем. — 2008. — Т. 11, № 3. — С. 86–95.
- 36. *Кабанихин С. И.* Обратные и некорректные задачи. Сибирское научное издательство, 2008. С. 450.
- 37. Кабардов М. М., Рябов В. М. Ускорение сходимости рядов Лагерра в задаче обращения преобразования Лапласа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2009. — Т. 49, № 4. — С. 601–610.
- 38. Кауфман А. А., Левшин А. Л. Введение в теорию геофизических методов. Часть 5. Акустические и упругие волновые поля в геофизике. — Москва : Недра, 2006. — С. 652.
- 39. Кендэл М. Временные ряды. Москва : Финансы и статистика, 1981. С. 152.
- 40. *Клаербоут Д. Ф.* Сейсмическое изображение земных недр. Москва : Недра, 1989. С. 408.
- 41. *Кныш Д. В.* Параллельный прямой метод решения разделяющихся краевых задач // *Вычительные технологии.* 2008. Т. 13, № 4. С. 61–67.
- 42. *Коновалов А. Н.* Введение в вычислительную линейную алгебру. Новосибирск : Наука, 1993. — С. 159.
- 43. Коновалов А. Н. Полностью консервативные разностные схемы для динамических задач линейной теории упругости // Дифф. уравнения. — 2013. — Т. 49, № 7. — С. 885–896.
- 44. Коновалов А. Н., Попов Ю. П. Оптимальные, явно разрешимые дискрет-

ные модели с контролируемым дисбалансом полной механической энергии для динамических задач линейной теории упругости // Сибирский математический журнал. — 2015. — Т. 56, № 5. — С. 1092–1099.

- 45. Коновалов А. Н., Яненко Н. Н. Некоторые вопросы теории модульного анализа и параллельного программирования для задач математической физики и механики сплошной среды // Современные проблемы математической физики и вычислительной математики. — Наука, 1982. — С. 200–207.
- 46. *Корнеев В. Д., Малышкин В. Э.* Параллельное программирование мультикомпьютеров. Учебники НГТУ. — НГТУ, 2006. — С. 301.
- 47. Лаевский Ю. М. Метод конечных элементов. Новосибирск : Новосибибирский государственный университет, 1999. — С. 166.
- 48. Лаевский Ю. М., Мацокин А. М. Методы декомпозиции решения эллиптических и параболических краевых задач // Сиб. журн. вычисл. матем. 1999. Т. 2, № 4. С. 361–372.
- 49. Леонтович В. А., Фок В. А. Решение задачи о распространении электромагнитных волн вдоль поверхности земли по методу параболического уравнения // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1946. — Т. 16, № 7. — С. 557.
- 50. Логанова Л. В. Параллельный алгоритм метода циклических встречных прогонок для двумерной области // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета имени академика С.П. Королева. 2008. № 2. С. 164–174.
- 51. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. Москва : Наука, 1977. С. 456.
- 52. *Марчук Г. И.* Методы расщепления. Москва : Наука Гл. ред. физ.-ма. лит., 1988. С. 264.
- 53. *Марчук Г. И., Лебедев В. И.* Численные методы в теории переноса нейтронов. — Москва : Атомиздат, 1971. — С. 496.
- 54. Марчук Г. И., Шайдуров В. В. Повышение точности решений разностных

схем. — Москва : Наука, 1979. — С. 319.

- 55. Математическое моделирование и экспериментальные исследования вибросейсмических волновых полей в Южном Прибайкалье / А. В. Терехов, В. В. Ковалевский, А. Г. Фатьянов и др. // Интерэкспо Гео-Сибирь. — 2018.
- 56. *Михайленко Б. Г.* Сейсмические поля в сложно построенных средах. Новосибирск: Изд. ВЦ СО АН СССР, 1988.
- 57. Михайленко Б. Г., Решетова Г. В. Численно-аналитический метод решения задачи о распространении сейсмических и акустико-гравитационных волн для неоднородной модели Земля–Атмосфера // Сиб. журн. вычисл. матем. — 2006. — Т. 9, № 1. — С. 37–46.
- 58. Михайленко Б. Г., Соболева О. Н. Поглощающие граничные условия для уравнений теории упругости // Сиб. журн. вычисл. матем. 1998. Т. 1, № 3. С. 261–269.
- 59. *Морс Ф. М., Фешбах Г.* Методы теоретической физики. Москва : Издательство иностранной литературы, 1958. — С. 930.
- 60. Об организации параллельных вычислений и распараллеливаниии прогонки / Н. Н. Яненко, А. Н. Коновалов, Г. В. Шустов, А. Н. Бугров // Численные методы механики сплошной среды. — 1978. — Т. 9, № 7. — С. 139–146.
- 61. Паасонен В. И. Граничные условия повышенной точности в полюсах координатных систем // Вычислительные технологии. — 2000. — Т. 5, № 1. — С. 93–105.
- Петров И. Б., Лобанов А. И. Лекции по вычислительной математике : учебное пособие. Основы информационных технологий. — М.: Интуит, Бином, 2009.
- 63. Петров И. Б., Фаворскаяа А. В., Хохлова Н. И. Сеточно-характеристический метод на системах вложенных иерархических сеток и его применение для исследования сейсмических волн // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2017. — Т. 51, № 11. — С. 1804–1811.

- 64. Петров И. Б., Холодов А. С. Численное исследование некоторых динамических задач механики деформируемого твёрдого тела сеточно-характеристическим методом // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1984. Т. 24, № 5. С. 722–739.
- 65. Петров И. Б., Хохлов Н. И. Моделирование задач 3d сейсмики на высокопроизводительных вычислительных системах // Матем. моделирование. — 2014.
- 66. Попов М. М. Новый метод расчета волновых полей в высокочастотном приближении // Зап. научн. сем. ЛОМИ. 1981. Т. 104. С. 195–216.
- 67. *Решетова Г. В., Чеверда В. А.* Использование преобразования Лагерра для построения идеально подходящих поглощающих слоев без расщепления // *Матем. моделирование.* −2006. − Т. 18, № 10. − С. 91–101.
- 68. *Самарский А. А.* Теория разностных схемы. М.: Наука, 1977. С. 656.
- 69. *Самарский А. А., Андреев В. Б.* Разностные методы для эллиптических уравнений. Москва : Наука, 1976. С. 352.
- Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. Москва : Наука, 1978. — С. 592.
- Свидетельство № 2019612895 РФ. Программный комплекс Horizon 2D/3D: свид-во о гос. регистр. программы для ЭВМ // автор Терехов А. В.; правообл. ИВМиМГ СО РАН; зарегистр. 04.03.2019 г.
- 72. *Старченко А. В., Берцун В. Н.* Методы параллельных вычислений. Томск: ТГУ, 2013.
- 73. *Суетин П. К.* Классические ортогональные многочлены. Главная редакция физико-математической литературы из-ва "Наука", 1979. — С. 416.
- 74. Тарнавский Г. А., Шпак С. И. Схема распараллеливания операции решения систем алгебраических уравнений методом многомерной скалярной прогонки // Вычислительные методы и программирование. — 2000. — Т. 1. — С. 19–27.
- 75. Терехов А. В., Тимофеев И. В., Лотов К. В. Двумерная численная модель

плазмы для изучения процессов пучково-плазменного взаимодействия // Вестник НГУ. Серия: Физика. — 2010. — Т. 5, № 2. — С. 85–97.

- 76. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. — Главная редакция физико-математической литературы изд-ва "Наука 1972. — С. 736.
- 77. Тыртышников Е. Е. Теплицевы матрицы, некоторые их аналоги и приложения. Москва : Отдел вычислительной математики АН СССР, 1989. С. 182.
- 78. Тыртышников Е. Е. Модификации методов вычисления интегралов Чебышёва–Лагерра и Гаусса–Лежандра // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2004. — Т. 44, № 7. — С. 1187–1195.
- 79. Учет неоднородностей верхней части разреза в сейсморазведке. Современные технологии / В. С. Козырев, А. П. Жуков, И. П. Короткое и др. — М.: ООО «Недра-Бизнесцентр», 2003. — С. 227.
- 80. *Федоренко Р. П.* Итерационные методы решения разностных эллиптических уравнений // *УМН*.—1973.—Т. 28, № 2.—С. 121–182.
- Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения задач математической физики. — Сибирское отделение : Наука, 1967. — С. 197.
- Aavatsmark I. An introduction to multipoint flux approximations for quadrilateral grids // Computational Geosciences. — 2002. — Vol. 6, no. 3-4. — P. 405–432.
- 83. Abate J., Choudhury G., Whitt W. On the laguerre method for numerically inverting laplace transforms // INFORMS J. on Computing. — 1996. — Vol. 8, no. 4. — P. 413–427.
- 84. Akimova E. N., Belousov D. V. Parallel algorithms for solving linear systems with block-tridiagonal matrices on multi-core cpu with gpu. // J. Comput. Science. - 2012. - Vol. 3, no. 6. - P. 445-449.
- 85. Alpert B., Rokhlin V. A fast algorithm for the evaluation of legendre expansions // SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing. - 1991. -

Vol. 12, no. 1. – P. 158–179.

- 86. Angus D. A. The one-way wave equation: A full-waveform tool for modeling seismic body wave phenomena // Surveys in Geophysics. - 2013. - Vol. 35, no. 2. - P. 359-393.
- 87. Anisotropic complex pade hybrid finite-difference depth migrationanisotropic hybrid depth migration / D. Amazonas, R. Aleixo, J. Schleicher, J. Costa // *Geophysics.* - 2010. - Vol. 75, no. 2. - P. S51.
- Baysal E., Kosloff D., Sherwood J. Reverse time migration // Geophysics. 1983. — Nov. — Vol. 48, no. 11. — P. 1514–1524.
- Bcyclic: A parallel block tridiagonal matrix cyclic solver / S. P. Hirshman,
 K. S. Perumalla, V. E. Lynch, R. Sanchez // J. Comp. Phys. 2010. Vol.
 229. P. 6392-6404.
- 90. Bekakos M. P., Evans D. J. Parallel cyclic odd-even reduction algorithms for solving toeplitz tridiagonal equations on MIMD computers // Parallel Computing. - 1993. - Vol. 19, no. 5. - P. 545-561.
- Berenger J. P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves // J. Comp. Phys. 1994. Vol. 114. P. 185-200.
- 92. Bernhardt P. A., Brackbilla J. U. Solution of elliptic equations using fast poisson solvers // J. Comp. Phys. - 1984. - Vol. 53. - P. 382-394.
- 93. Berrut J.-P., Trefethen L. Barycentric lagrange interpolation // SIAM Review. - 2004. - Vol. 46, no. 3. - P. 501-517.
- 94. Bhat P. B., Raghavendra C. S., Prasanna V. K. Efficient collective communication in distributed heterogeneous systems // J. Parallel Distrib. Comput. - 2003. - Vol. 63, no. 3. - P. 251-263.
- 95. Biondi B. 3D Seismic Imaging. Society of Exploration Geophysicists, 2006.
- 96. Bitzarakis S., Papadrakakis M., Kotsopoulos A. Parallel solution techniques in computational structural mechanics // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. - 1997. - Vol. 148. - P. 75-104.
- 97. Boresi A. P., Chong K. P., Saigal S. Approximate Solution Methods in

Engineering Mechanics, 2nd Edition. — John Wiley & Son, 2003. — P. 280.

- 98. Bostan A., Salvy B., Schost E. Fast conversion algorithms for orthogonal polynomials // Linear Algebra and its Applications. - 2010. - Vol. 432, no. 1. - P. 249-258.
- 99. Boyd J. P. Chebyshev and Fourier Spectral Methods. Dover, New York, 2001. P. 688.
- 100. Bunks C. Effective filtering of artifacts for implicit finite-difference paraxial wave equation migration 1 // Geophysical Prospecting. - 1995. - Vol. 43, no. 2. - P. 203-220.
- 101. Butcher J. C. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. —
 2nd edition. Wiley, 2008.
- 102. Cerveny V. Gaussian beam synthetic seismograms // J. Geophys. 1985. Vol. 58. P. 44-72.
- 103. Chan T. F., Keyes D. E. Interface precontitionings for domain-decomposed convection-diffusion operators // Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations / Ed. by T.F. Chan, R. Glowinski, J. Periaux, O. Widlund. — SIAM, 1989.
- 104. Chan T. F., Mathew T. P. The interface probing technique in domain decomposition // SIAM J. Matrix Anal. Appl. - 1992. - Vol. 13. - P. 212-238.
- 105. Chapko R., Johansson B. T. Numerical solution of the dirichlet initial boundary value problem for the heat equation in exterior 3-dimensional domains using integral equations // Journal of Engineering Mathematics. — 2017. — Apr. — Vol. 103, no. 1. — P. 23–37.
- 106. Chew W. C., Weedon W. H. A 3d perfectly matched medium from modified maxwell's equations with stretched coordinates // Micro. Opt. Tech. Lett. – 1994. – Vol. 7. – P. 599–604.
- 107. Chu C., Stoffa P. L. Determination of finite-difference weights using scaled binomial windows // Geophysics. 2012. Vol. 77, no. 3. P. W17-W26.
- 108. Chung K.-L., Tsai Y.-H., Yan W.-M. A parallel solver for circulant block-
tridiagonal systems // Computers & Mathematics with Applications. — 1995. — Vol. 29, no. 1. — P. 109–113.

- 109. Claerbout J. F. Toward a unified theory of reflector mapping // Geophysics. -- 1971. -- Vol. 36, no. 3. -- P. 467-481.
- 110. Colton D., Wimp J. Analytic solutions of the heat equation and some formulas for laguerre and hermite polynomials // Complex Variables, Theory and Application: An International Journal. — 1984. — Vol. 3, no. 4. — P. 397–412.
- 111. Computational Ocean Acoustics / F. B. Jensen, W. A. Kuperman,M. B. Porter, H. Schmidt. Springer-Verlag New York, 2011.
- 112. Concus P., Golub H. G. Use of fast direct methods for the efficient numerical solution of non-separable elliptic equations // SIAM J. Numer. Anal. – 1973. – Vol. 10. – P. 1103–1120.
- 113. Cooley J. W., Tukey J. W. An Algorithm for the Machine Calculation of Complex Fourier Series // Math. Comput. - 1965. - Vol. 19. - P. 297-301.
- 114. Cottle R. W. Manifestations of the schur complement // Linear Algebra and its Applications. 1974. Vol. 8, no. 3. P. 189-211.
- 115. Courant R., Friedrichs K., Lewy H. Uber die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik // Mathematische Annalen. – 1928. – Vol. 100. – P. 32–74.
- 116. Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type // Proc. Camb. Phil. Soc. - 1947. - Vol. 43, no. 1. - P. 50-67.
- 117. Cui X., Lü Q. A parallel algorithm for block-tridiagonal linear systems // Applied Mathematics and Computation. — 2006. — Vol. 173, no. 2. — P. 1107– 1114.
- 118. Debnath L., Bhatta D. Integral Transforms and Their Applications, Second Edition. — Taylor & Francis, 2006.
- 119. Demko S. Inverses of band matrices and local convergence of spline projections // SIAM J. on Numer. Anal. 1977. Vol. 14, no. 4. P. 616-619.

- 120. Domain-Based Parallelism and Problem Decomposition Methods in Computational Science and Engineering / Ed. by D.E. Keyes, D.G. Truhlar, Y. Saad. — Philadelphia, PA, USA : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1995.
- 121. Douglas C. C., Haase G., Langer U. A Tutorial on Elliptic Pde Solvers and Their Parallelization.—SIAM, 2003.
- 122. Drossaert F. H., Giannopoulos A. A nonsplit complex frequency-shifted pml based on recursive integration for fdtd modeling of elastic waves // Geophysics. - 2007. - Vol. 72, no. 2. - P. T9-T17.
- 123. Dunkin I. W. Computation of model solutions in layered elastic media at high frequencies // Bull. Seismol. Soc. Amer. 1965. Vol. 55, no. 2. P. 355-358.
- 124. Engquist B., Majda A. Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves // Math. Comp. 1977. Vol. 31. P. 629-651.
- 125. Erhel J. A parallel gmres version for general sparse matrices // Electronic Transactions on Numerical Analysis. 1995. Vol. 3. P. 160-176.
- 126. Ernst O. G., Gander M. J. Why it is Difficult to Solve Helmholtz Problems with Classical Iterative Methods // Numerical Analysis of Multiscale Problems / Ed. by Ivan G. Graham, Thomas Y. Hou, Omar Lakkis, Robert Scheichl. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2012. — P. 325–363.
- 127. Faraj A. Yuan X. Automatic generation and tuning of mpi collective communication routines // ICS '05: Proceedings of the 19th annual international conference on Supercomputing. — New York, NY, USA : ACM, 2005. — P. 393–402.
- 128. A fast hermite transform / G. Leibon, Daniel N. Rockmore, W. Park et al. // Theoretical Computer Science. — 2008. — Vol. 409, no. 2. — P. 211–228. — Symbolic-Numerical Computations.
- 129. Fast reliable algorithms for matrices with structure / Ed. by T. Kailath,A. H. Sayed. Philadelphia, PA, USA : Society for Industrial and Applied

Mathematics, 1999.

- 130. A fast spectral subtractional solver for elliptic equations / E. Braverman,
 B. Epstein, Boris et al. // J. Sci. Comput. 2004. Vol. 21. P. 91-128.
- 131. Fatyanov A. G. Semi-analitical method of the solution of direct dynamic problems in layered mediums // Dokl. Akad. Nauk SSSR. 1990. Vol. 310.
- 132. Fatyanov A. G. Mathematical simulation of wave fields in media with arbitrary curvilinear boundaries // Applied Mathematics Letters. - 2005. --Vol. 8, no. 11. - P. 1216-1223.
- 133. Fatyanov A. G., Terekhov A. V. High-performance modeling acoustic and elastic waves using the parallel Dichotomy Algorithm // Journal of Computational Physics. - 2011. - Vol. 230, no. 5. - P. 1992-2003.
- 134. Fei T., Larner K. Elimination of numerical dispersion in finite-difference modeling and migration by flux-corrected transport // Geophysics. 1995. Vol. 60, no. 6. P. 1830–1842.
- 135. Fftw 3.2.2, (http://fftw.org/).
- 136. Fichtner A. Full Seismic Waveform Modelling and Inversion. Advances in Geophysical and Environmental Mechanics and Mathematics. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- 137. Free and smooth boundaries in 2-d finite-difference schemes for transient elastic waves / B. Lombard, J. Piraux, C. Gelis, J. Virieux // Geophysical Journal International. - 2008. - Vol. 172, no. 1. - P. 252-261.
- 138. Gautschi W. The condition of vandermonde-like matrices involving orthogonal polynomials // Linear Algebra and its Applications. — 1983. — Vol. 52-53. — P. 293–300.
- 139. Gazdag J. Wave equation migration with the phase-shift method // Geophysics. -- 1978. -- Vol. 43, no. 7. -- P. 1342-1351.
- 140. Gazdag J., Sguazzero P. Migration of seismic data by phase shift plus interpolation // Geophysics. - 1984. - Vol. 49, no. 2. - P. 124-131.

- 141. Gil A., Segura J., Temme N. M. Efficient computation of laguerre polynomials // Computer Physics Communications. - 2017. - Vol. 210. - P. 124-131.
- 142. Gohberg I., Olshevsky V. Complexity of multiplication with vectors for structured matrices // Linear Algebra and its Applications. 1994. Vol. 202. P. 163–192.
- 143. Gohberg I., Olshevsky V. Fast algorithms with preprocessing for matrixvector multiplication problems // Journal of Complexity. - 1994. - Vol. 10, no. 4. - P. 411-427.
- 144. Gray S. H., Marfurt K. H. Migration from topography: Improving the nearsurface image. // Can.J.Expl.Geophys. - 1995. - Vol. 31. - P. 18-24.
- 145. Grooss J. Parallel elliptic PDE solver. Informatics and Mathematical Modelling. — Technical University of Denmark, DTU, 2001.
- 146. Hale N., Townsend A. A fast fft-based discrete legendre transform // IMA Journal of Numerical Analysis. — 2016. — Vol. 36, no. 4. — P. 1670–1684.
- 147. Halpern L., Trefethen L. N. Wide-angle one-way wave equations // J. Acoust. Soc. Am. 1988. Vol. 84, no. 4. P. 1397-1404.
- 148. Handbook of Grid Generation / Ed. by J. F. Thompson, B. K. Soni, N. P. Weatherhill. — CRC Press, 1999.
- 149. Haskell N. A. The dispersion of surface waves on multilayered media // Bull. Seismol. Soc. Amer. - 1953. - Vol. 43, no. 1. - P. 17-34.
- 150. Heller D. Some aspects of the cyclic reduction algorithm for block tridiagonal linear systems // SIAM J. Numer. Anal. - 1978. - Vol. 13, no. 4. - P. 484-496.
- 151. Henderson H. V., Searle S. R. On deriving the inverse of a sum of matrices // SIAM Review. - 1981. - Vol. 23, no. 1. - P. 53-60.
- 152. Heroux M. A., Raghavan P., Simon H. D. Parallel Processing for Scientific Computing (Software, Environments and Tools). — Philadelphia, PA, USA : Society for Industrial and Applied Mathematics, 2006.
- 153. Hestholm S., Ruud B. 2d finite-difference elastic wave modelling including

surface topography // Geophysical Prospecting. — 1994. — Vol. 42, no. 5. — P. 371–390.

- 154. High-performance finite-element simulations of seismic wave propagation in threedimensional nonlinear inelastic geological media / F. Dupros, F. De Martin, E. Foerster et al. // Parallel Comput. - 2010. - Vol. 36, no. 5-6. - P. 308-325.
- 155. Higher order paraxial wave equation approximations in heterogeneous media / A. Bamberger, B. Engquist, L. Halpern, P. Joly // SIAM Journal on Applied Mathematics. — 1988. — Vol. 48, no. 1. — P. 129–154.
- 156. Hockney R. W., Jesshope C. R. Parallel Computers Two: Architecture, Programming and Algorithms. — Bristol, UK : IOP Publishing Ltd., 1988.
- 157. Hybrid modeling of p-sv seismic motion at inhomogeneous viscoelastic topographic structures / P. Moczo, E. Bystricky, J. Kristek et al. // Bulletin of the Seismological Society of America. — 1997. — Vol. 87, no. 5. — P. 1305–1323.
- 158. *Ihlenburg F.* Finite element analysis of acoustic scattering. Springer,
 1998. P. 224.
- 159. Iterative methods for 3d implicit finite-difference migration using the complex pade approximation / C. A. N. Costa, I. S. Campos, J. C. Costa et al. // *Journal of Geophysics and Engineering*. - 2013. - Vol. 10, no. 4. - P. 045011.
- 160. Jo J. A., et. al. Laguerre-based method for analysis of time-resolved fluorescence data: Application to in-vivo characterization and diagnosis of atherosclerotic lesions // Journal of biomedical optics. — 2006. — Vol. 11, no. 2.
- 161. Keilegavlen E., Aavatsmark I. Monotonicity for mpfa methods on triangular grids // Computational Geosciences. 2011. Vol. 15, no. 1. P. 3-16.
- 162. Keilson J., Nunn W., Sumita U. The bilateral laguerre transform // Applied Mathematics and Computation. - 1981. - Vol. 8, no. 2. - P. 137-174.
- 163. Kennett B. L. N. Theoretical reflection seismograms for elastic media // Geophysical Prospecting. - 1979. - Vol. 27, no. 2. - P. 301-321.

- 164. Kim H. J., Lee J. G. A parallel algorithm solving a tridiagonal toeplitz linear system // Parallel Computing. 1990. Vol. 13, no. 3. P. 289–294.
- 165. Kim S., Lim H. High-order schemes for acoustic waveform simulation // Appl. Numer. Math. 2007. Vol. 57, no. 4. P. 402-414.
- 166. Knopoff L. A. Matrix method for elastic wave problems // Bull. Seismol. Soc. Amer. - 1964. - Vol. 54. - P. 431-438.
- 167. Komatitsch D., Martin R. An unsplit convolutional perfectly matched layer improved at grazing incidence for the seismic wave equation // Geophysics. — 2007. — Vol. 72, no. 5. — P. SM155–SM167.
- 168. Konyukh G. V., Mikhailenko B. G., Mikhailov A. A. Application of the integral laguerre transforms for forward seismic modeling // Journal of Computational Acoustics. - 2001. - Vol. 09, no. 04. - P. 1523-1541.
- 169. Kuzuoglu M., Mittra R. Frequency dependence of the constitutive parameters of causal perfectly matched anisotropic absorbers // Microwave and Guided Wave Letters, IEEE. - 1996. - Dec. - Vol. 6, no. 12. - P. 447-449.
- 170. Kwan Y., Shen J. An efficient direct parallel spectral-element solver for separable elliptic problems // J. Comput. Phys. 2007. Vol. 225, no. 2. P. 1721-1735.
- 171. Lambiotte Jr. J. J., Voigt R. G. The solution of tridiagonal linear systems on the cdc star100 computer // ACM Trans. Math. Software. - 1975. --Vol. 1. - P. 308-329.
- 172. Ifd: An implicit finite-difference computer model for solving the parabolic equation : Rep. : 6659 / Nav. Underwater Syst. Ctr ; Executor: D. Lee, G. Botseas : 1982.
- 173. Lee D., Pierce A. D., Shang E.-C. Parabolic equation development in the twentieth century // Journal of Computational Acoustics. - 2000. - Vol. 08, no. 04. - P. 527-637.
- 174. Lee M. W., Suh S. Y. Optimization of one-way wave equations // Geophysics. -- 1985. -- Vol. 50, no. 10. -- P. 1634-1637.

- 175. Li Z. Compensating finite-difference errors in 3-d migration and modeling // Geophysics. — 1991. — Vol. 56, no. 10. — P. 1650–1660.
- 176. Liang W., Wang Y., Yang C. Determining finite difference weights for the acoustic wave equation by a new dispersion-relationship-preserving method // Geophysical Prospecting. - 2015. - Vol. 63, no. 1. - P. 11-22.
- 177. Lin H. X. A unifying graph model for designing parallel algorithms for tridiagonal systems // Parallel Computing. - 2001. - Vol. 27, no. 7. - P. 925-939.
- 178. Lindman E. L. "Free-space" boundary vonditions for the time dependent wave equation // Journal of Computational Physics. - 1975. - Vol. 18, no. 1. - P. 66-78.
- 179. Litko J. R. Interdeparture time and queue-length distributions via the laguerre transform // Queueing Systems. 1989. Dec. Vol. 4, no. 4. P. 367-381.
- 180. López J., Zapata E. L. Unified architecture for divide and conquer based tridiagonal system solvers // IEEE Trans. Comput. - 1994. - Vol. 43, no. 12. - P. 1413-1425.
- 181. Lotov K. V., Terekhov A. V., Timofeev I. V. Saturation of two-stream instability of an electron beam in plasma // Plasma Physics Reports. - 2009. --Vol. 35, no. 6. - P. 518-525.
- 182. Lu Y. Y. A complex coefficient rational approximation of 1+x // Applied Numerical Mathematics. — 1998. — Vol. 27, no. 2. — P. 141–154.
- 183. Ma S., Archuleta R. J., Liu P. Hybrid modeling of elastic p-sv wave motion: A combined finite-element and staggered-grid finite-difference approach // Bulletin of the Seismological Society of America. — 2004. — Vol. 94, no. 4. — P. 1557–1563.
- 184. Madagascar: open-source software project for multidimensional data analysis and reproducible computational experiments / S. Fomel, P. Sava, I. Vlad et al. // Journal of Open Research Software. - 2013.
- 185. Mastryukov A. F., Mikhailenko B. G. Inverse solution to the wave equation

using the laguerre transform // Russian Geology and Geophysics. — 2007. — Vol. 48, no. 7. — P. 575–580.

- 186. Mattor N., Williams T. J., Hewett D. W. Algorithm for solving tridiagonal matrix problems in parallel // Parallel Computing. - 1995. - Vol. 21, no. 11. - P. 1769-1782.
- 187. McNally J. M., Garey L. E., Shaw R. E. A communication-less parallel algorithm for tridiagonal toeplitz systems // J. Comput. Appl. Math. — 2008. — Vol. 212, no. 2. — P. 260–271.
- 188. Mikhailenko B. G. Spectral laguerre method for the approximate solution of time dependent problems // Applied Mathematics Letters. — 1999. — Vol. 12. — P. 105–110.
- 189. Mikhailenko B. G., Mastryukov A. F. Numerical solution of maxwell's equations for anisotropic media using the laguerre transform // Russian Geology and Geophysics. - 2008. - Vol. 49. - P. 621-627.
- 190. Milinazzo F. A., Zala C. A., Brooke G. H. Rational square-root approximations for parabolic equation algorithms // The Journal of the Acoustical Society of America. - 1997. - Vol. 101, no. 2. - P. 760-766.
- 191. Moczo P., Robertsson J. O. A., Eisner L. The finite-difference time-domain method for modeling of seismic wave propagation / Под ред. R. Dmowska, V. Maupin, R.-S. Wu. Elsevier, 2007. Т. 48 из Advances in geophysics. С. 421–516.
- 192. A new approach to fast polynomial interpolation and multipoint evaluation /
 V. Pan, A. Sadikou, E. Landowne, O. Tiga // Computers & Mathematics with Applications. 1993. Vol. 25, no. 9. P. 25-30.
- 193. Nielsen C., Thybo H. Lower crustal intrusions beneath the southern baikal rift zone: Evidence from full-waveform modelling of wide-angle seismic data // Tectonophysics. - 2009. - Vol. 470, no. 3. - P. 298-318.
- 194. Nielsen E., Muller R. P. A configuration interaction analysis of exchange in double quantum dots. — 1006.2735.

- 195. Numerical Linear Algebra for High Performance Computers / J. Dongarra,
 L. Duff, D. Sorensen, Henk A. van der Vorst. Philadelphia, PA, USA :
 Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998.
- 196. On some new approximate factorization methods for block tridiagonal matrices suitable for vector and parallel processors / H. B. Li, T. Z. Huang, Y. Zhang et al. // Mathematics and Computers in Simulation. 2009. Vol. 79. P. 2135-2147.
- 197. O'Neil M., Woolfe F., Rokhlin V. An algorithm for the rapid evaluation of special function transforms // Applied and Computational Harmonic Analysis. - 2010. - Vol. 28, no. 2. - P. 203-226. - Special Issue on Continuous Wavelet Transform in Memory of Jean Morlet, Part I.
- 198. Ortega J. M. Introduction to Parallel & Vector Solution of Linear Systems. New York, NY, USA : Plenum Press, 1988.
- 199. Papadrakakis M., Stavroulakis G., Karatarakis A. A new era in scientific computing: Domain decomposition methods in hybrid cpu-gpu architectures // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. - 2011. - Vol. 200. -P. 1490-1508.
- 200. Paprzycki M., Petrova S. I., Sanchez J. Implementing parallel elliptic solver on a beowulf cluster // Electron. J. Differ. Equ. - 1999. - P. 75-85.
- 201. Parabolic wave equation approximations in heterogenous media / A. Bamberger, B. Engquist, L. Halpern, P. Joly // SIAM Journal on Applied Mathematics. 1988. Vol. 48, no. 1. P. 99–128.
- 202. Parallel Algorithms for Numerical Linear Algebra / Ed. by Henk A. van der Vorst, Paul van Dooren. — North Holland, 2014.
- 203. Piskoulijski P. I. Error analysis of parallel algorithm for the solution of a tridiagonal toeplitz linear system of equations // Parallel Computing. — 1992. — Vol. 18, no. 4. — P. 431–438.
- 204. Povitsky A. Parallel adi solver based on processor scheduling // Appl. Math. Comput. - 2002. - Vol. 133, no. 1. - P. 43-81.

- 205. Qin J., Nguyen D. T. A tridiagonal solver for massively parallel computers // Adv. Eng. Softw. -- 1998. -- Vol. 29, no. 3-6. -- P. 395-397.
- 206. Ristow D., Rühl T. Fourier finite-difference migration // Geophysics. 1994. — Vol. 59, no. 12. — P. 1882–1893.
- 207. Robertsson J. A numerical free-surface condition for elastic/viscoelastic finite-difference modeling in the presence of topography // Geophysics. 1996. Vol. 61, no. 6. P. 1921–1934.
- 208. Ruggieroa V., Galligania E. A parallel algorithm for solving block tridiagonal linear systems // Computers and Mathematics with application. - 1992. --Vol. 24, no. 4. - P. 15-21.
- 209. Schöberl J. NETGEN An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules // Computing and Visualization in Science. - 1997. --Vol. 1. - P. 41-52.
- 210. Schöberl J., Gerstmayr J., Gaisbauer R. NETGEN automatic 3d tetrahedral mesh generator. — http://www.hpfem.jku.at/netgen/. — 2003. — May.
- 211. Schuster G. Seismic Inversion. Society of Exploration Geophysicists, 2017.
- 212. Seismic migration problems and solutions / S. H. Gray, J. Etgen, J. Dellinger,
 D. Whitmore // *Geophysics*. 2001. Vol. 66, no. 5. P. 1622-1640.
- 213. Sistare S., vandeVaart R., Loh E. Optimization of mpi collectives on clusters of large-scale smp's // Supercomputing '99: Proceedings of the 1999 ACM/IEEE conference on Supercomputing (CDROM). New York, NY, USA : ACM, 1999. P. 23.
- 214. Smith B. F., Bjørstad P. E., Gropp W. Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations. — Cambridge University Press, 1996.
- 215. Sourcebook of parallel computing / Ed. by Jack Dongarra, Ian Foster, Geoffrey Fox et al. — Morgan Kaufmann Publishers Inc., 2003.
- 216. The spectral element method for elastic wave equations: application to 2d and 3d seismic problems / D. Komatitsch, J.-P. Vilotte, R. Vai et al. // Inter-

national Journal for Numerical Methods in Engeneering. — 1999. — Vol. 45. — P. 1139–1164.

- 217. Strain J. A fast laplace transform based on laguerre functions // Mathematics of Computation. — 1992. — Vol. 58, no. 197. — P. 275–283.
- 218. Subsalt multiple attenuation and imaging: Observations from the Sigsbee2B synthetic dataset / J. Paffenholz, B. McLain, J. Zaske, P. J. Keliher // SEG Technical Program Expanded Abstracts 2002. 2002. P. 2122–2125.
- 219. Sun X.-. H., Zhang H., Ni L. M. Efficient tridiagonal solvers on multicomputers // IEEE Trans. Comput. - 1992. - Vol. 41, no. 3. - P. 286-296.
- 220. Sun X.-H. A scalable parallel algorithm for periodic symmetric Toeplitz tridiagonal systems. — Commack, NY, USA : Nova Science Publishers, Inc., 2001. — P. 149–156.
- 221. Sun X.-H., Zhang W. A parallel two-level hybrid method for tridiagonal systems and its application to fast poisson solvers // IEEE Trans. Parallel Distrib. Syst. - 2004. - Vol. 15, no. 2. - P. 97-106.
- 222. Tam C. K. W., Webb J. C. Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics // Journal of Computational Physics. — 1993. — Vol. 107, no. 2. — P. 262–281.
- 223. Tappert F. D. Wave Propagation and Underwater Acoustics / Ed. by Joseph B Keller, John S. Papadakis. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1977. — P. 224–287.
- 224. Tarek M. Domain Decomposition Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations. — Springer Berlin Heidelberg, 2008. — Vol. 61 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering.
- 225. Tarrass I., Giraud L., Thore P. New curvilinear scheme for elastic wave propagation in presence of curved topography // Geophysical Prospecting. – 2011. – Vol. 59, no. 5. – P. 889–906.
- 226. Temme N. M. Asymptotic estimates for laguerre polynomials // Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP. – 1990. – Jan. – Vol. 41,

no. 1. – P. 114–126.

- 227. Terekhov A., Mesgouez A., Lefeuve-Mesgouez G. Transient mechanical wave propagation in semi-infinite porous media using a finite element approach with domain decomposition technology // Lecture Notes in Computer Science. – Vol. 4671. – Springer Berlin Heidelberg, 2007. – P. 174–183.
- 228. Terekhov A. V. Parallel dichotomy algorithm for solving tridiagonal system of linear equations with multiple right-hand sides. // Parallel Computing. — 2010. — Vol. 36, no. 8. — P. 423–438.
- 229. Terekhov A. V. A fast parallel algorithm for solving block-tridiagonal systems of linear equations including the domain decomposition method // Parallel Computing. - 2013. - Vol. 39, no. 6-7. - P. 245-258.
- 230. Terekhov A. V. Spectral-difference parallel algorithm for the seismic forward modeling in the presence of complex topography // Journal of Applied Geophysics. - 2015. - Vol. 115. - P. 206-219.
- 231. Terekhov A. V. A highly scalable parallel algorithm for solving Toeplitz tridiagonal systems of linear equations // Journal of Parallel and Distributed Computing. - 2016. - Vol. 87. - P. 102–108.
- 232. Terekhov A. V. The Laguerre finite difference one-way equation solver // Computer Physics Communications. - 2017. - Vol. 214. - P. 71-82.
- 233. Terekhov A. V. The stabilization of high-order multistep schemes for the Laguerre one-way wave equation solver // Journal of Computational Physics. 2018. Vol. 368. P. 115–130.
- 234. Tessmer E., Kosloff D., Behle A. Elastic wave propagation simulation in the presence of surface topography // Geophysical Journal International. – 1992. – Vol. 108, no. 2. – P. 621–632.
- 235. Thomson W. T. Transmission of classic waves through a stratified solid material // J. Appl. Phys. 1950. Vol. 21, no. 1. P. 89-93.
- 236. *Timofeev I. V., Lotov K. V., Terekhov A. V.* Direct computation of the growth rate for the instability of a warm relativistic electron beam in a cold

magnetized plasma // Physics of Plasmas. - 2009. - Vol. 16, no. 063101.

- 237. Timofeev I. V., Terekhov A. V. Simulations of turbulent plasma heating by powerful electron beams // Physics of Plasmas. 2010. Vol. 17, no. 8. P. 083111.
- 238. Toselli A., Widlund O. Domain Decomposition Methods Algorithms and Theory. — Springer, 2004. — Vol. 34 of Springer Series in Computational Mathematics.
- 239. Trefethen L. N., Halpern L. Well-posedness of one-way wave equations and absorbing boundary conditions // Mathematics of Computation. 1986. Vol. 47, no. 176. P. 421–435.
- 240. Tucker P. G., Pan Z. A cartesian cut cell method for incompressible viscous flow // Applied Mathematical Modelling. 2000. Vol. 24, no. 8. P. 591-606.
- 241. Tufo H. M., Fischer P. F. Fast parallel direct solvers for coarse grid problems // J. Parallel Distrib. Comput. - 2001. - Vol. 61, no. 2. - P. 151-177.
- 242. Vadhiyar S. S., Fagg G. E., Dongarra J. Automatically tuned collective communications // Supercomputing '00: Proceedings of the 2000 ACM/IEEE conference on Supercomputing (CDROM). — Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, 2000. — P. 3.
- 243. Vajtersic M. Algorithms for Elliptic Problems, Efficient Sequential and Parallel Solvers. — Springer, 1993.
- 244. Virieux J., Calandra H., Plessix R.-E. A review of the spectral, pseudospectral, finite-difference and finite-element modelling techniques for geophysical imaging // Geophysical Prospecting. - 2011. - Vol. 59, no. 5. -P. 794-813.
- 245. Virieux J., Operto S. An overview of full-waveform inversion in exploration geophysics // GEOPHYSICS. 2009. Vol. 74, no. 6. P. WCC1-WCC26.
- 246. Wang H. H. A parallel method for tridiagonal equations // ACM Trans. Math. Softw. -- 1981. -- Vol. 7, no. 2. -- P. 170-183.

- 247. Washspress E. L. Optimal alternating-direction-implicate iteration parameters // J. Soc. Indust. Appl. Math. - 1962. - Vol. 10. - P. 339-350.
- 248. Weber H. Numerical computation of the fourier transform using laguerre functions and the fast fourier transform // Numerische Mathematik. – 1980. – Jun. – Vol. 36, no. 2. – P. 197–209.
- 249. Weeks W. T. Numerical inversion of laplace transforms using laguerre functions // J. ACM. - 1966. - Vol. 13, no. 3. - P. 419-429.
- 250. Wide-angle fd and ffd migration using complex padé approximations /
 D. Amazonas, C. Costa, J. Schleicher, R. Pestana // *Geophysics.* 2007. Vol. 72, no. 6. P. S215–S220.
- 251. Wu J.-G., Yan W.-M., Chung K.-L. A parallel solver for circulant toeplitz tridiagonal systems on hypercubes // J. Sci. Comput. - 1997. - Vol. 12, no. 4. - P. 409-431.
- 252. Yevick D., Thomson D. J. Complex padé approximants for wide-angle acoustic propagators // The Journal of the Acoustical Society of America. — 2000. — Vol. 108, no. 6. — P. 2784–2790.
- 253. Yilmaz O., Doherty S. M. Seismic Data Analysis: Processing, Inversion, and Interpretation of Seismic Data. — Society of Exploration Geophysicist, 2001.
- 254. Zhang J.-H., Yao Z.-X. Optimized explicit finite-difference schemes for spatial derivatives using maximum norm // Journal of Computational Physics. - 2013. - Vol. 250. - P. 511-526.
- 255. Zhang W., Shen Y. Unsplit complex frequency-shifted pml implementation using auxiliary differential equations for seismic wave modeling // Geo-physics. -2010. Vol. 75, no. 4. P. T141-T154.
- 256. Zhang Y., Zhang G., Bleistein N. Theory of true-amplitude one-way wave equations and true-amplitude common-shot migration // Geophysics. 2005. Vol. 70, no. 4. P. E1–E10.

Приложение А

Описание программного комплекса Horizon $2\mathrm{D}/3\mathrm{D}$

Программный комплекс Horizon 2D/3D разработан: (a) для расчёта процесса распространения акустических и упругих волн для моделей сред с осложнённым рельефом и BЧР, а также для расчёта теоретических сейсмограмм в контексте задачи глубинного сейсмического зондирования (ГСЗ), (б) для обработки сейсмограмм методами волновой миграции, основанной на решении одностороннего волнового уравнения. Первый модуль позволяет выполнять расчёты в рамках решения задачи ГСЗ, в том числе для удалений порядка нескольких тысяч длин волн. Скоростная модель и геометрия рельефа могут быть произвольными. Второй модуль позволяет выполнять глубинную миграцию до суммирования и после суммирования на основе решения одностороннего волнового уравнения для 2D/3D геометрии.

Алгоритмы программ построены на основе разработанных в диссертации спектрально-разностных аппроксимаций с использованием интегрального преобразования Лагерра по времени для акустических и упругих волновых уравнений, а также одностороннего волнового уравнения. Для аппроксимации осложнённого рельефа могу быть использованы ступенчатая или гибридная аппроксимации (на основе комбинации прямоугольной и треугольных сеток), а также метод скошенных ячеек. Скоростная модель может быть произвольной как для модуля (а), так и модуля (б). Рельеф для модуля (а) может быть задан произвольным.

Программный пакет Horizon 2D/3D состоит из четырёх основных модулей:

 модуль расчёта волновых полей и теоретических сейсмограмм для акустической и упругой моделей для больши́х удалений;

- модуль расчёта волновой миграции до суммирования на основе решения одностороннего волнового уравнения;
- модуль расчёта волновой миграции после суммирования на основе решения одностороннего волнового уравнения;
- модуль ввода/вывода данных задачи в формате SEG-Y для многопроцессорных вычислительных систем;

Программный комплекс Horizon 2D/3D может применяться в следующих областях:

- нефтяная промышленность;
- сейсмические исследования.

Программный комплекс Horizon 2D/3D обеспечивает выполнение следующих функций:

- Подготовка данных 2D/3D:
 - задание расчётных параметров и исходных пользовательских данных: сейсмограмм, скоростной модели среды;
 - запуск решения на многопроцессорной вычислительной системе в среде MPI;
 - мониторинг состояния расчёта на основе выдачи промежуточных результатов: мгновенных снимков волновых полей и сейсмограмм, интегральных оценок для полной механической энергии, скорость сходимости ряда Лагерра;
 - Генерация и оптимизация расчётных сеток.
- Математическая обработка 2D/3D задач:
 - проверка корректности входных данных;

- быстрое преобразование Лагерра по времени исходных сейсмограмм или функции, задающей форму импульса источника;
- процедура расчёта волнового поля и теоретических сейсмограмм;
- процедура экстраполяции волновых полей для двумерной геометрии;
- процедура экстраполяции волновых полей для трёхмерной геометрии;
- процедура вычисления корреляции волновых полей от приемников и источников;
- вспомогательные процедуры фильтрации глубинных изображений;
- Запись результатов обработки в формате SEG-Y.

Текст программы: программный комплекс Horizon 2D/3D написан на языке Fortran-2003/2008 с использованием библиотек для параллельного программирования MPI и OpenMP. Используются библиотеки численного анализа BLAS, LAPACK, FFTW, SPARSEKIT и генератор сеток NETGEN.

- Тип ЭВМ:
 - Кластер Interconnect Omni-Path 100 Gbps. Параллельная файловая система Intel Lustre - 200 ТБайт; (20 х) Вычислительные узлы Broadwell CPU (2 х) Intel Xeon E5-2697A v4 (2.6 Ггц, 16 ядер).RAM 128 Гбайт;
 - Серверы НР XL230a Gen9, каждый из которых содержит: Два 12-ядерных процессора Intel Xeon E5-2680v3 с тактовой частотой 2500 МГц.
 192 ГБ ОЗУ.
- Операционная система:
 - 64-битная операционная система GNU Linux.
- Язык программирования:

- Fortran-2003-2008
- Библиотеки для параллельного программирования MPI и OpenMP;
- Библиотеки численного анализа: BLAS, LAPACK, FFTW, SPARSEKIT;
- Генератор сеток NETGEN.

Объём программ: 730112 Байт (исходного текста)

Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ



Приложение Б

Акты о внедрении научных и практических

результатов диссертации

Министерство природных ресурсов и экологии Российской Федерации Федеральное агентство по недропользованию Российская Академия наук Федеральное государственное бюджетное учреждение «Всероссийский научно-исследовательский геологический нефтяной институт» (ФГБУ «ВНИГНИ») Новосибирский филиал внигни

630007, г. Новосибирск ул. Коммунистическая, д. 2, 10 этаж

тел. +7 (383) 230-85-20 e-mail: nf@vnigni.ru

_or « 10 » geraope 2018 г.

Для представления в диссертационный совет Д 003.061.02 пр. акад. Лаврентьева, 6 630090, Новосибирск, Россия

АКТ апробации

результатов диссертационной работы Терехова А.В. на тему

"Спектрально-разностные алгоритмы для моделирования волновых полей и их реализация на суперЭВМ"

Настоящим подтверждаем, что результаты диссертационного исследования Терехова Андрея Валерьевича "Спектрально-разностные алгоритмы для моделирования волновых полей и их реализация на суперЭВМ" обладают актуальностью, представляют практический интерес, а разработанные программы применялись для опытной обработки данных сейсморазведочных наблюдений. Установлено, что предлагаемый Тереховым А.В. новый алгоритм глубинной миграции на основе решения "одностороннего" волнового уравнения посредством спектрально-разностного метода Лагерра позволяет получать глубинные сейсмические разрезы с малым уровнем искажений, сохранением динамики коэффициентов отражения И с высоким разрешением. Вычислительный метод представляется перспективным для повышения качества обработки данных сейсморазведки в сложных сейсмогеологических условиях.

Заместитель директора Варламов С. Н. Бодпись Варианско Узостовению Вед. интенер Гиани внигни

Минобрначки России

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук (ИЯФ СО РАН)

Проспект ак. Лаврентьева, д. 11, г. Новосибирск, 630090 телефон: (383) 329-47-60, факс: (383) 330-71-63 http://www.inp.nsk.su, e-mail: inp@inp.nsk.su ОКПО 03533872 ОГРН 1025403658136 ИНН/КПП 5408105577 / 540801001

OT 27 HOR 2018 № 15311 - 67/62/5.2-1на № OT

Для представления в диссертационный совет

АКТ О ВНЕДРЕНИИ

результатов диссертационного исследования

Настоящим удостоверяется, что результаты диссертационного исследования Терехова Андрея Валерьевича "Спектрально-разностные алгоритмы для моделирования волновых полей и их реализация на суперЭВМ" используются в научно-исследовательской деятельности в "Институте ядерной физики имени Г.И. Будкера СО РАН" для численного моделирования процессов генерации электромагнитного излучения в системе плазма - электронный пучок, что позволяет интерпретировать результаты экспериментов на установке ГОЛ-ПЭТ и вести поиск наиболее эффективных режимов генерации терагерцового излучения гигаваттного уровня мощности.

Зам. директора Института по науже

M

Иванов А.А.

АКЦИОНЕРНОЕ ОБЩЕСТВО «СИБИРСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ГЕОЛОГИИ, ГЕОФИЗИКИ И МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ» (АО «СНИИГГиМС») 630091, Новосибирск, Красный пр., 67 Тел./факс (383) 230-94-00 е-таі! geology@sniiggims.ru ИНН 5406587935 КПП 540601001 р/сч. 40702810844050025180 Сибирский банк ПАО «Сбербанк» БИК 045004641 Кор.счет 3010181050000000641 ОКПО 01423607 ОКВЭД 72.19 <u>05.11.2018</u> № <u>D1-06/245</u>22 на № ______ от

Для представления в диссертационный совет

АКТ

о практическом применении результатов диссертационного исследования Терехова А.В. на тему "Спектрально-разностные алгоритмы для моделирования волновых полей и их реализация на суперЭВМ"

Настоящим Актом удостоверяется, что результаты диссертационного исследования Терехова Андрея Валерьевича «Спектрально-разностные алгоритмы для моделирования волновых полей и их реализация на суперЭВМ» были апробированы при обработке сейсморазведочных данных для региона Восточной Сибири. Предложенный Тереховым А.В. и реализованный в виде программного комплекса алгоритм миграции на основе решения "одностороннего" волнового уравнения обладает высокой разрешающей способностью, что является существенным преимуществом при построении сейсмических изображений.

Начальник отдела обработки и интерпретации АО «СНИИГГиМС»

ЧИИГТИ

Директор департамента Углеводородного сырья Е.В. Мосягин

В.Н. Беспечный