面向大规模问题的可扩展性算法

-----王朝尉

本文的目的在于面向大规模科学计算问题研究高效的可扩展性算法，其中包括三个方面：有限元与无网格方法的耦合算法；基于显式时间差分算法的质量集中后的高阶有限元的波场模拟；以及交错网格有限差分波动方程并行计算。

经典的有限元方法理论成熟，应用广泛，但是在一些特殊的问题上难于应用，比如高频 Helmloltz 方程的求解，裂纹扩展等局部奇性问题，以及非线性大变形等网格扭曲问题；另外，传统的有限元算法在可扩展性上也不是很理想。无网格法的研究已经有几十年， 由于种种原因， 比 如计算量很大等，不能取代经典的有限元方法。无网格方法和有限元方法开始试图走到一起，而不是相互排斥。由于能结合二者的优点，新方法必然具有极强的生命 力。本论文第一部分结合无网格方法和有限元方法两者的优点，研究一种耦合的高精度算法，并对其误差分析进行一些有益的探索。Poisson 方程的算例表明，收敛阶基本吻合，验证了理论的正确性。 该方法具有较高的精度和较好的可扩展性。

论文第二部分对时间离散算法的可扩展性进行了思考。因为大量的科学与工程计算问题都包含时间项，计算效率不可忽视，甚至占据了大部分的计算量。一般而言， 隐式算法具有较好的稳定性，但由于每一步都要做矩阵的求逆运算，计算开销巨大，可扩展性十分差。相反，显式算法虽然稳定性方面不尽理想，但适合大规模计 算。本文对高阶有限单元的质量矩阵进行了对角化处理，进行了声波方程的高效计算；此外，研究了一阶和二阶吸收边界条件的具体实现，并运用于复杂构造 Marmousi 模型的实际计算，取得了较好的效果。

本文第三部分是波动方程的并行计算。在交错网格上，采用 PML 作为吸收边界，进行了有限差分波动方程的大规模并行计算，然后对并行效率进行了分析，取得了良好效果。

关键词: 可扩展性算法，有限元，无网格法，显式时间差分，质量集中，吸收边界，波动方程，完全匹配层，交错网格