УДК 004.272.2:519.63

О.А. Дмитриева[1,2], д-р техн. наук, проф.,
Н.Г. Гуськова[1,3], аспирант
[1] Донецкий национальный технический университет, г. Покровск, Украина
[2] Исследовательский центр моделирующих технологий (SRC SimTech)
университета Штутгарта, Германия, olha.dmytriieva@donntu.edu.ua
[3]Высшая техническая школа университета прикладных наук,
г. Бинген, Германия, huskovanadiia@gmail.com

Реализация метода прямых для уравнений в частных производных коллокационными блочными разностными схемами

Данная работа посвящена вопросам получения решений уравнений в частных производных с помощью метода прямых, который представляет собой полудискретный метод с дискретизацией по пространственным переменным, обеспечивающий сведение начальной задачи к задаче Коши, описываемой системой обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ). Такой подход позволяет достаточно эффективно реализовать большой класс эволюционных уравнений. Рассмотрены вопросы решения полученной СОДУ коллокационными блочными методами, позволяющими обеспечить эффективную параллельную реализацию. При этом все преимущества решения СОДУ (параллельное управление шагом, локальный контроль ошибок, устойчивость решения) реализованы для случая частных производных без значительного увеличения вычислительной сложности. Для тестовых уравнений в частных производных параболического типа с различными типами краевых условий и параметрами жесткости проведены множественные компьютерные эксперименты.

Ключевые слова: уравнения в частных производных, метод прямых, задача Коши, параллельные блочные методы, начальные и граничные условия, погрешность.

DOI: 10.31474/1996-1588-2018-1-26-8-18

Введение

Построение математической модели, позволяющей объективно описывать реальный объект, представляет собой замкнутую систему уравнений с использованием большого количества параметров, которые, как правило, подразумевают сильную взаимосвязь. Этот факт значительно усложняет математическую формулировку модели и, в большинстве случаев, характеризуется отсутствием аналитического решения [1-3]. Получение численного решения при этом становится возможным только с привлечением высокопроизводительной вычислительной техники, как правило, с параллельной архитектурой.

Эта проблема становится особенно актуальной при реализации математических моделей, основанных на системах уравнений в частных производных, когда речь идет о необходимости дискретизации области поиска решения, которая может значительно усложняться еще и за счет геометрической конфигурации границ. В результате дискретизации формируется система линейных или нелинейных алгебраических уравнений, размерность которой может достигать порядков 10^{12}-10^{14}. Решение систем такого порядка не может быть получено без привлечения многопроцессорных компьютеров [4]. Но простым увеличением вычислительной мощности эта проблема не может быть решена. Только комбинируя преимущества суперкомпьютеров и современные численные методы моделирования можно ожидать значительного улучшения численного решения дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП).

Цель работы состоит в исследовании проблемы сведения уравнений в частных производных к задаче Коши, описываемой системой обыкновенных дифференциальных уравнений, для эффективной параллельной реализации.

Задача исследования состоит в построении пространственной дискретизации эволюционных уравнений в частных производных методом прямых и численной реализации системы обыкновенных дифференциальных уравнений с привлечением коллокационных блочных разностных схем.

Анализ современных подходов к параллельному решению ДУЧП

В последнее время по многочисленным свидетельствам исследователей [4-7], наиболее эффективный вклад в решение ДУЧП в спектре применений вносят следующие подходы: неструктурированные сетки, адаптивность, многосеточные методы и параллелизм [6-10]. Неструктурированные сетки являются необходимым условием для представления комплекса геометрии, адаптивные уточнения этих сеток позволяют минимизировать количество точек сетки для достижения желаемой точности решения. Многосеточные методы оказались самыми быстрыми решателями для линейных систем уравнений, возникающих из дискретизации уравнений в частных производных. Наконец, эти методы могут быть распараллелены для их использования в высокопроизводительных компьютерах. Несмотря на широкое признание эффективности этих подходов [5-6], причина медленного их принятия заключается в том, что сильные взаимосвязи всех четырех подходов значительно увеличивают сложность. Очень трудно разработать надежные итеративные решатели, а комбинация описанных методов в одном пакете программного обеспечения требует нескольких десяток человеко-лет работы [4], в то время как реализация одной компоненты может быть получена небольшим коллективом.

В работах [7-10] рассматриваются подходы, ориентированные на решение уравнений в частных производных с динамической компонентой (параболических), которые могут быть сведены к итеративному решению эллиптических уравнений, возникающих на каждом дискретном временном шаге. Рассматривается задача численного вычисления приближения к решению $u(x,t)$ параболического уравнения в частных производных

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x,t), x \in [x_0, L], t \in [t_0, T] (1)$$

с начальным условием вида

$$u(x,t_0) = q(x), (2)$$

граничными условиями

$$u(x_0,t) = g_1(t), u(L,t) = g_2(t). (3)$$

Стандартная процедура решения состоит в том, чтобы полностью дискретизировать уравнение (1), получив дискретную эллиптическую задачу на каждом временном шаге [4,8], в которой для аппроксимации производной по времени используется неявная схема. Полученные эллиптические задачи решаются последовательно с использованием любого итерационного метода. Потенциальный параллелизм в этом типе вычислений ограничивается параллелизмом решения эллиптического уравнения, поскольку вычисления по времени обрабатывается строго последовательно. Но, как правило, эти вычисления содержат наибольший объем вычислительной работы, т.е. количество дискретных временных шагов может быть во много раз больше, чем ширина пространственной сетки.

В [8] предложена схема, в которой параболическая задача может быть сведена к эллиптической одновременно на множестве последовательных временных шагов. Этот же подход исследован в серии экспериментов [9-10]. К сожалению, метод может быть реализован только при выполнении достаточно жестких условий [8]. В [10] рассматривается параллельный метод шага по времени, т.е. предлагается схема, посредством которой стандартные итерации выполняются одновременно по уравнениям на последовательных временных шагах. Это позволило соединить параллельность в пространстве и времени. Успех метода связан с возможностью перекрытия итераций эллиптического уравнения на разных временных слоях. Однако при использовании быстрых многосеточных решателей, требующих лишь очень небольшого числа итераций, потенциал параллелизма таких подходов во времени довольно ограничен.

Сведение ДУЧП к задаче Коши методом прямых

Данная работа посвящена вопросам получения решений уравнений в частных производных с помощью метода прямых, который представляет собой полудискретный метод [1-2,11-13], обеспечивающий сведение начальной задачи к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) во времени с помощью дискретизации по пространственной переменной (рис. 1). Этот подход является неприменимым для чисто эллиптических уравнений, но позволяет достаточно эффективно реализовать большой класс эволюционных уравнений. Полученная система может быть реализована с использованием разработанных параллельных подходов к решению СОДУ [11-13], с исходными начальными и граничными условиями. При этом все преимущества решения (параллельное управление шагом, локальный контроль ошибок, простота явных методов и устойчивость неявных) могут быть реализованы и для случая частных производных, т.е. метод прямых позволяет получить приближения более высокого порядка при дискретизации пространственных производных без значительного увеличения вычислительной сложности.

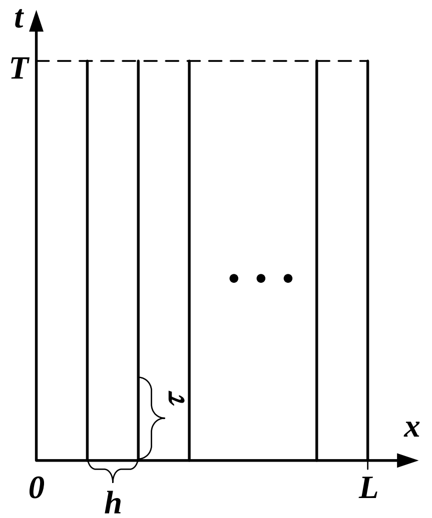

Рисунок 1 – Дискретизация одномерного уравнения (1) в пространстве

Авторы [11] для решения параболических уравнений в частных производных предложили использовать подход, основанный на сведении исходной задачи к задаче Коши с помощью метода прямых (method of lines, MOL). Основная идея метода заключается в замене пространственных (граничных) частных производных алгебраическими приближениями [1, 14-15]. После такой замены остается только переменная времени, но, при этом замена пространственной переменной сводится к формированию системы обыкновенных дифференциальных переменных (СОДУ), которая аппроксимирует исходное уравнение в частных производных. Таким образом, задача состоит в формировании аппроксимирующей СОДУ, после чего становятся применимы практически любые методы численного интегрирования. Таким образом, одной из характерных особенностей MOL является использование существующих численных методов для решения СОДУ.

Для выполнения пространственной дискретизации рассматривается одномерное параболическое уравнение в частных производных

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, t \in [t_0, T], x \in [x_0, L] (4)$$

с начальным условием вида (2) и граничными условиями (3). Самым простым вариантом замены пространственной (граничной) частной производной в (4) является центральное приближение 2-го порядка, основанное на разложение в ряд Тейлора

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2). (5)$$

Подстановка уравнения (5) в (4) дает систему аппроксимирующих ОДУ

$$\frac{du}{dt} = a^2 \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}, i = 1,2, \dots, N. (6)$$

Полученная система (6) является трехдиагональной системой алгебраических уравнений (три неизвестных в каждом уравнении). Для такой разреженной матрицы неизвестных, которая имеет ленточную структуру, разработаны специальные алгоритмы, позволяющие использовать структурные особенности, что приводит к значительной экономии времени вычислений. Кроме того, для получения решения могут быть использованы специальные библиотечные процедуры, содержащие дополнительные функции, такие, как автоматическая настройка шага интегрирования (τ-уточнение) и аппроксимация более высокого порядка (p-уточнение).

Однако существует ряд сложностей. При выборе схемы с высоким порядком аппроксимации возникают значительные числовые колебания (наблюдается неустойчивость решения), что характерно для явных методов, а сокращение порядка ведет к чрезмерному сглаживанию или округлению результата в пространственных точках x, где решение быстро меняется. Проблема существенно усложняется, если речь идет не о решении одномерного уравнения (1), а о d-мерном уравнении.

$$u_t - \Delta u = f(x,t), x \in \Omega = (0,1)^d, t \in [t_0, T] (7)$$

с начальным условием (2) и граничными условиями

$$u(x,t) = g(x,t), x \in \Omega_G. (8)$$

Кроме того, для уравнений в частных производных существенным фактором может стать геометрия области, в которой находится решение. В этом случае разумный выбор системы координат, с одной стороны, облегчает получение численного решения, поскольку система координат будет выбрана так, чтобы отражать особенности области, с другой стороны, может привести к осложнениям, обусловленным нерегулярной геометрией. Тогда приходится прибегать к процедуре увеличения или уменьшения интервала сетки (h-уточнение).

Одним из ключевых вопросов при численном решении сформированной задачи Коши для СОДУ

$$u' = \varphi\big(t, u(t)\big), u(t_0) = y_0, t \in [t_0, T], (9)$$

как правило, большой размерности, является выбор метода решения, который должен быть ориентирован на реализацию в параллельных вычислительных системах. Кроме того, метод решения должен обладать возможностями настройки шага интегрирования, т.е. обеспечивать функцию - уточнения. Для реализации описанных задач в работе предлагается использование коллокационных блочных методов с контролем на шаге, которые подробно описаны в работах [16-17].

Численная реализация метода прямых коллокационными блочными методами

Коллокационные методы для решения задачи Коши (9) строятся на интерполяционных многочленах, степени которых совпадают с количеством точек коллокации, а значения многочленов в этих точках совпадают с правыми частями дифференциального уравнения в расчетных точках [16]. Используя в качестве точек коллокации множество точек равномерной сетки (рис. 2) по каждой образованной прямой

$$t_{n,i} = t_{n,0} + i\tau \in \left[t_{n,-m+1}, t_{n,s}\right],$$
$$i = -(m-1), -(m-2), \dots, 0, 1, \dots, s,$$

формируется канонический вид многошаговых коллокационных блочных методов с числом опорных точек m и числом расчетных точек s [17]

$$u_{n,i} = u_{n,0} + \tau\left(\sum_{j=-(m-1)}^{0} b_{i,j}F_{n,j} + \sum_{j=1}^{s} a_{i,j}\,F_{n,j}\right),$$

$$i = 1,2,\dots,s, (10)$$

где $u_{n,i}$ – приближенные значения решения задачи Коши (9) в точках $t_{n,i}, i = 0,1,2,\dots,s$,

τ – шаг интегрирования,

$F_{n,j} = \varphi(t_n + j\tau, u_{n,j})$ – правые части уравнения (10) в соответствующих точках, $j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0, 1, \dots, s$,

$a_{i,j}$ и $b_{i,j}$ – коэффициенты расчетной схемы.

Для разграничения рассчитанных и искомых точек введем соответствующие обозначения и представим их в виде векторов

$U_n = \{u_{n,j}\}, n = 1,2,\dots, \quad j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0,$ – вектор посчитанных точек,

$U_{n+1} = \{u_{n+1,j}\}, n = 1,2,\dots, j = 1,2,\dots,s$ - вектор искомых точек,

$F_{n,j} = \varphi(t_n + j\tau, u_{n,j}), n = 1,2,\dots,$ $j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0,$

$F_{n+1,j} = \varphi(t_n + j\tau, u_{n,j}), n = 1,2,\dots, j = 0,1,\dots,s$ – соответственно, правые части уравнения (9) в известных и искомых точках,

$U_{n,0} = (u_{n,0})e$– решение в точке $t_{n,0}$,

e – единичный вектор размерности s.

Тогда в векторной форме система уравнений (10) будет иметь вид

$$U_{n+1} = U_{n,0} + \tau(BF_n + AF_{n+1}). (11)$$

Для начала расчета необходимо ввести множество опорных значений U_0, которые могут быть определены одношаговым методом, обеспечивающим требуемую точность расчетов

$$U_0 = \{u_{0,j}\}, j = 1-m, 2-m, \dots, 0.$$

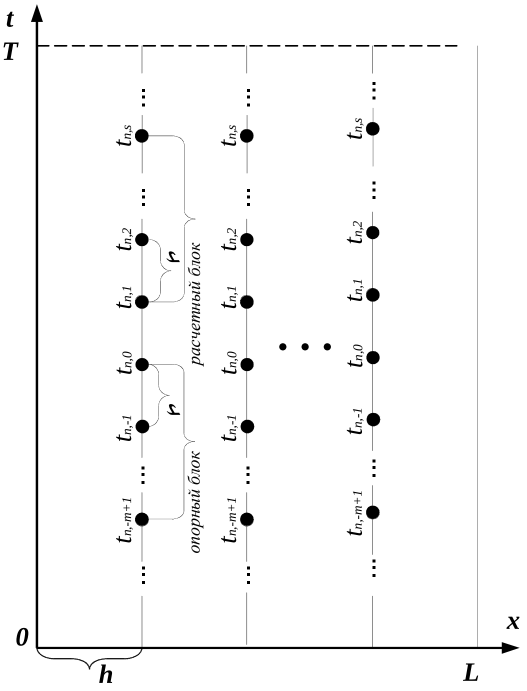

Рисунок 2 - Схема закрепления опорных и расчетных точек на каждой прямой

Тогда поиск численного решения может быть сведен к решению на каждом шаге нелинейной системы уравнений (11), с последовательным определением векторов $U_1, U_2, \dots$. Необходимо обратить внимание на то, что каждое уравнение в (10) содержит $m+s$ неизвестных коэффициентов

$$b_{i,j}, j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0, i = 1,2,\dots,s,$$

$$a_{i,j}, j = 1,2,\dots,s, i = 1,2,\dots,s,$$

которые могут быть определены из условий аппроксимации [16-17], или с помощью интегро-интерполяционного метода [18]. В работах [16-17] доказана устойчивость этих методов по начальным данным и по правой части, также для них определен максимальный порядок аппроксимации, составляющий величину $m+s$.

После определения неизвестных коэффициентов и формирования матриц A и B с соответствующими размерностями $s \times m$ и $s \times s$ вычисления многошаговым блочным методом, представленным в виде системы нелинейных уравнений (11) можно свести к следующему итерационному процессу

$$U_{n+1}{}^{(1)} = U_{n,0}e + \tau BF_n, (12)$$

$$U_{n+1}{}^{(r+1)} = (U_{n,0}e + \tau BF_n) + \tau AF_{n+1}{}^{(r)}, n = 1,2,\dots$$

До начала решения системы (12) предварительно определяются значения вектора U_0 в опорных точках начального блока. Вычисление приближенных значений решения задачи Коши в каждом следующем расчетном блоке осуществляется итерационно (12). Определение начальных значений в расчетном блоке осуществляется на основе многошагового предикторного метода Адамса, что позволяет повысить точность начального приближения.

Компьютерные эксперименты

В качестве тестовых уравнений в работе использовались одномерные параболические задачи с различными типами граничных условий и с известными точными решениями для оценивания глобальной погрешности решения. Дискретизация по пространственной переменной осуществлялась многошаговым многоточечным коллокационным блочным методом с числом опорных и расчетных точек в блоке 2×2. При тестировании основной упор делался на сравнительный анализ точности решения методом прямых по отношению к известным явным и неявным сеточным методам с соизмеримыми размерностями шагов по времени и по пространству. Поэтому процедура управления шагом интегрирования (τ-уточнения) не использовалась, решение формировалось последовательно, оценивание характеристик параллелизма не проводилось. Предполагается, что сопоставление временных характеристик и оценивание эффективности параллельной реализации относится к перспективе развития данной работы.

Эксперимент 1. Тестирование выполнялось для параболического уравнения с известным точным решением, описанного в [14]. Рассматривается частный случай уравнения теплопроводности (4) со значениями параметров $L = 1, T = 1, a = 1$,с начальным условием

$$u(x,0) = sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), (10)$$

граничными условиями первого рода

$$u(0,t) = u(L,t) = 0, (11)$$

и известным точным решением

$$u(x,t) = e^{-\left(\frac{\pi^2}{L^2}\right)t} sin\left(\frac{\pi x}{L}\right).$$

Проводился сравнительный анализ численной реализации уравнения (4) с условиями (10)-(11) с помощью явного и неявного метода сеток и метода прямых с сопоставимыми шагами по пространству $L/20$и по времени $T/20$. Результат численного решения этой задачи методом прямых представлен на рис.3. На рис. 4-6 представлены соответственно, величины глобальной погрешности при реализации задачи методом прямых, явным и неявным методом сеток. Из рис. 4 видно, что метод прямых имеет значительное преимущество по точности по сравнению с неявной (рис.5) и явной (рис. 6) разностными схемами и незначительное превышение по времени, затраченному на поиск решения при последовательной реализации, при том, что предполагаемая параллельная реализация позволит значительно улучшить показатель времени.

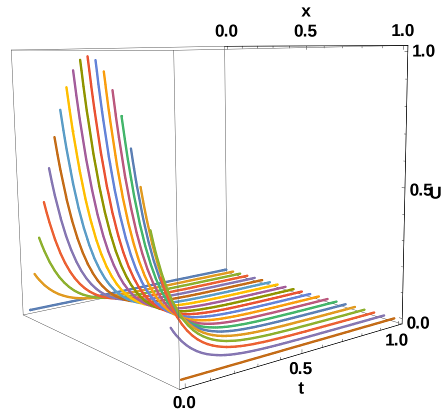

Рисунок 3 – Графики численного решения задачи (4) с условиями (10-11) методом прямых

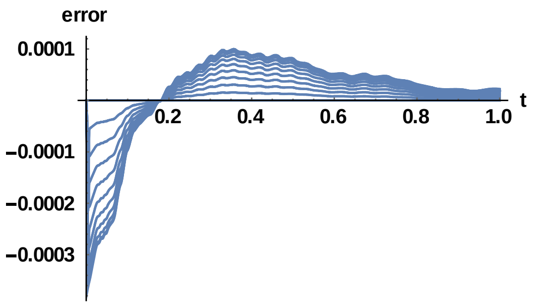

Рисунок 4 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (10-11) методом прямых

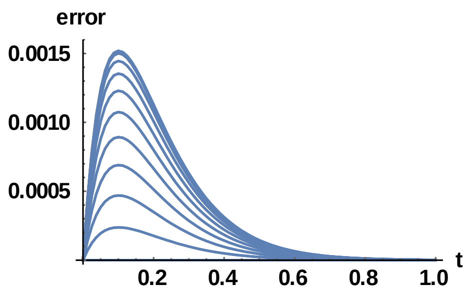

Рисунок 5 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (10-11) неявным методом сеток

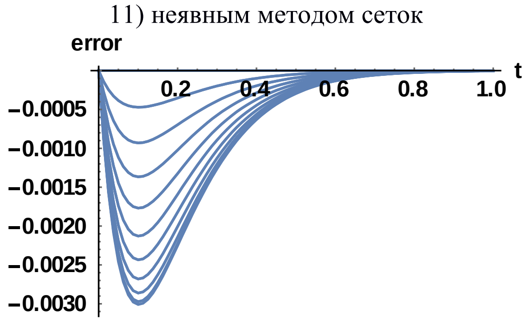

Рисунок 6 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (10-11) явным методом сеток

Эксперимент 2. Тестирование выполнялось для параболического уравнения с известным точным решением, описанного в [15]. Рассматривается частный случай уравнения теплопроводности (4) со значениями параметров $L = 1, T = 1, a = 1$, с начальным условием

$$u(x,0) = cos\left(\frac{\pi x}{L}\right), (12)$$

граничными условиями второго рода

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial u(L,t)}{\partial x} = 0, (13)$$

и известным точным решением

$$u(x,t) = e^{-\left(\frac{\pi^2}{L^2}\right)t} cos\left(\frac{\pi x}{L}\right).$$

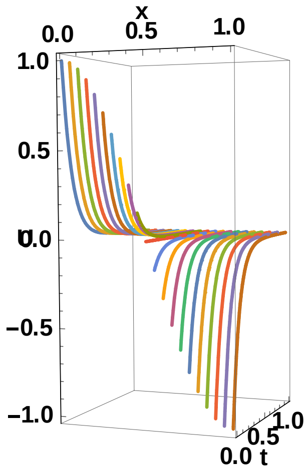

Рисунок 7 – Графики численного решения задачи (4) с условиями (12-13) методом прямых

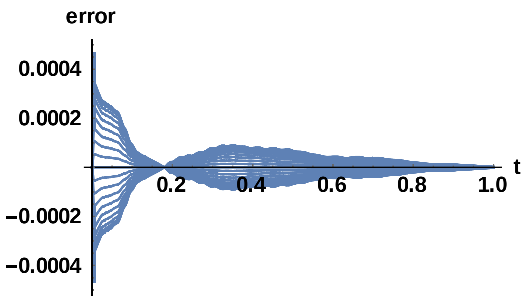

Рисунок 8 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (12-13) методом прямых

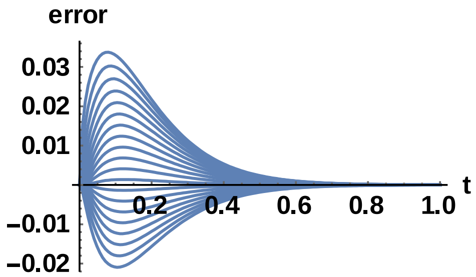

Рисунок 9 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (12-13) неявным методом сеток

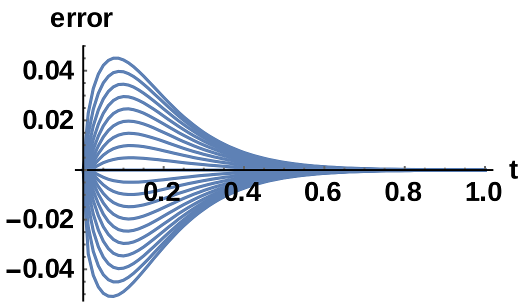

Рисунок 10 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (12-13) явным методом сеток

Так же, как и в предыдущем эксперименте, проводился сравнительный анализ численной реализации уравнения (4) с условиями (12-13) с помощью явного и неявного метода сеток и метода прямых с сопоставимыми шагами по пространству $L/20$и по времени $T/20$. Результат численного решения этой задачи методом прямых представлен на рис.7. На рис. 8-10 представлены соответственно, величины глобальной погрешности при реализации задачи методом прямых, неявным (рис. 9) и явным (рис. 10) методом сеток. Из рис. 8 видно, что метод прямых имеет значительное преимущество перед результатами, полученными с помощью явных и неявных разностных схемам с сопоставимыми размерам сетки по времени и пространству.

Эксперимент 3. Тестирование осуществлялось для тестовой задачи Шиссера (Schiesser) [14]. Рассматривалось уравнение теплопроводности (2) на интервалах по пространству $-5 \leq x \leq 5$ и по времени $0 \leq t \leq 1$, с параметром $a = 1$, с начальным условием

$$u(x,0) = \frac{1}{2}e^{-(x-1)^2} + e^{-(x+2)^2}, (14)$$

с граничными условиями слева - Дирихле и справа - Неймана

$$u(-5,t) = 0, \frac{\partial u(5,t)}{\partial x} = 0, (15)$$

с известным точным решением

$$u(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{4a^2t+1}}\left(e^{\frac{3(2x+1)}{4a^2t+1}} + 2\right)e^{\frac{-(x+2)^2}{4a^2t+1}}.$$

Эксперимент проводился с целью исследования влияния размера шага по пространственной переменной на величину глобальной погрешности. Результаты экспериментов приведены на рис. 11-13. Сокращение шага по пространству (в два раза) приводит к ожидаемому снижению глобальной погрешности (практически на порядок). Вместе с тем стоит заметить, что при этом в два раза вырастает размерность системы, что при последовательной реализации ощутимо влияет на время получения решения, в то время, как в параллельном варианте этот показатель не будет оказывать существенного влияния.

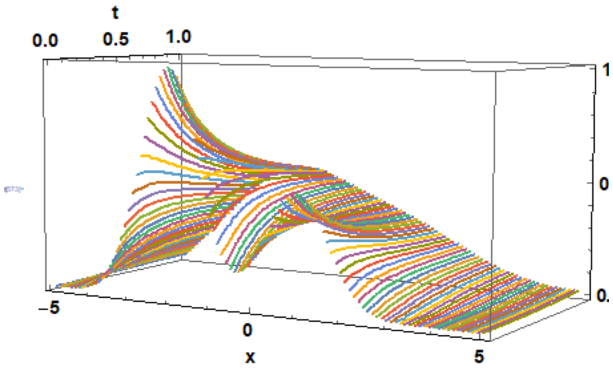

Рисунок 11 – Графики численного решения задачи (4) с условиями (14-15) методом прямых

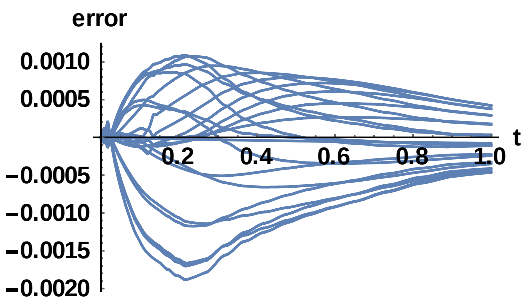

Рисунок 12 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (14-15) методом прямых с шагом 1/5

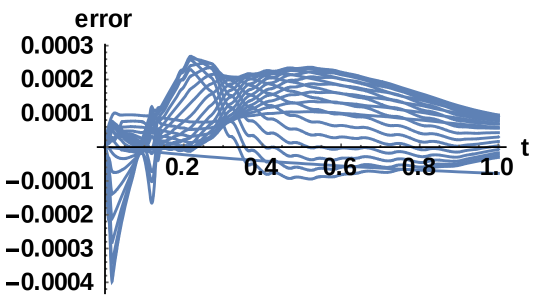

Рисунок 13 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (14-15) методом прямых с шагом 1/10

Эксперимент 4. В [19] приведено точное решение

$$u(x,t) = e^{-\pi^2 a^2 t} sin(\pi x) + e^{-\pi^2 a^2 k^2 t} sin(k\pi x)$$

тестового жесткого уравнения теплопроводности (4), в начальном условии которого

$$u(x,0) = sin(\pi x) + sin(k\pi x) (16)$$

содержится параметр жесткости $k \gg 1$, обеспечивающий быстрое убывание компоненты решения $e^{-\pi^2 a^2 k^2 t} sin(k\pi x)$. На границах заданы условия вида (11). В [19] приведены данные о том, что реализация этого уравнения известным разностным методом Кранка-Николсона дает неприемлемую точность, которая резко ухудшается с увеличением параметра жесткости k, понижаясь, при $k = 10$ до значения 0.61. Реализация этой же задачи с помощью метода прямых позволяет значительно повысить точность расчетов. На рис. 14-17 приведены численные решения и графики глобальных погрешностей при вариации параметра жесткости *k*.

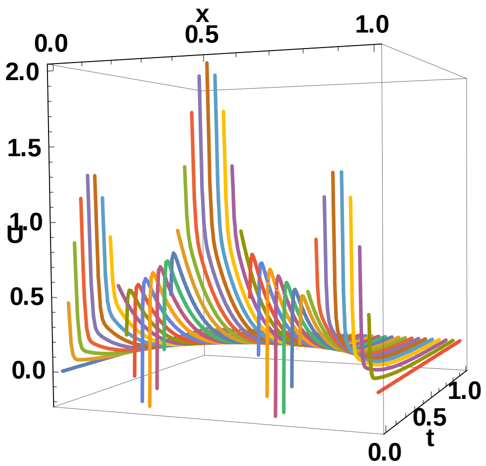

Рисунок 14 – Графики численного решения задачи (4) с условиями (11), (16) методом прямых, $k = 5$

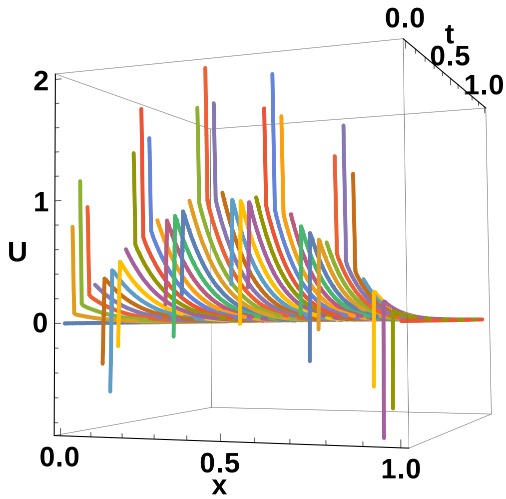

Рисунок 15 – Графики численного решения задачи (4) с условиями (11), (16) методом прямых, $k = 10$

Из рис. 16-17 видно, что величина глобальной погрешности растет с увеличением параметра жесткости, но при этом она значительно меньше величины, приведенной в [19] для случая использования разностной схемы повышенной точности.

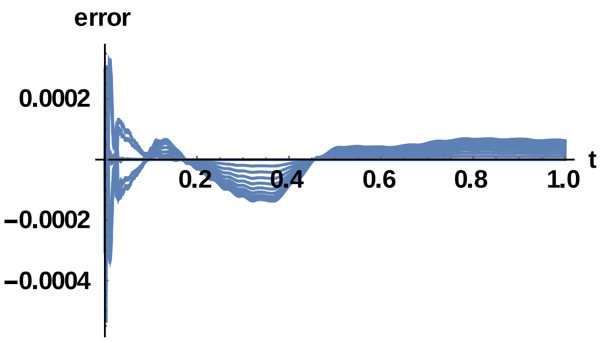

Рисунок 16 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (11), (16) методом прямых, $k = 5$

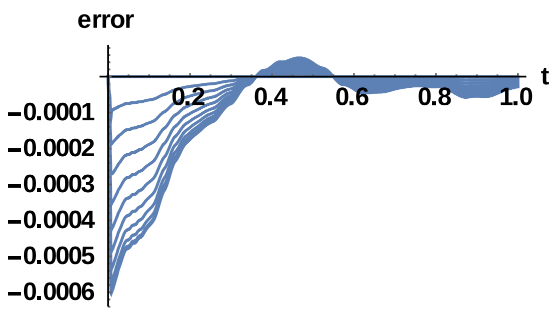

Рисунок 17 – Графики глобальной погрешности численного решения задачи (4) с условиями (11), (16) методом прямых, $k = 10$

Заключение

В работе исследовалась проблема получения численного решения эволюционных уравнений в частных производных с помощью метода прямых, который представляет собой полудискретный метод дискретизации по пространственным переменным, обеспечивающий сведение начальной задачи к задаче Коши, описываемой системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Рассматривались вопросы возможной параллельной реализации полученной задачи. Проведен анализ современных подходов к параллельному решению ДУЧП, осуществлено сведение эволюционного уравнения к задаче Коши методом прямых. Обоснована численная реализация метода прямых коллокационными блочными разностными схемами. При этом все преимущества решения СОДУ (параллельное управление шагом, локальный контроль ошибок, устойчивость решения) реализованы для случая частных производных без значительного увеличения вычислительной сложности.

В качестве тестовых уравнений в работе использовались одномерные параболические задачи с различными типами граничных условий и с известными точными решениями для оценивания глобальной погрешности решения. Дискретизация по пространству осуществлялась многошаговым многоточечным коллокационным блочным методом с числом опорных и расчетных точек в блоке 2×2.

Проведенные компьютерные эксперименты условно подразделялись на несколько классов. При тестировании задач первого класса (4), (10-11), (12-13) основной упор делался на сравнительный анализ точности решения методом прямых по отношению к известным явным и неявным сеточным методам с соизмеримыми размерностями шагов по времени и по пространству, процедура управления шагом интегрирования (τ-уточнения) не использовалась. Во втором классе тестов (4), (14-15) рассматривалось влияние вариации шага по пространству на величину глобальной погрешности. Показано, что сокращение шага по пространственной переменной приводит к ожидаемому снижению глобальной погрешности (практически на порядок). Третий класс экспериментов (4), (11), (16) был посвящен решению жестких эволюционных задач с возможностью вариации параметра жесткости. Для этого класса задач показаны значительные преимущества метода прямых.

Поскольку проведение всех компьютерных экспериментов осуществлялось в последовательном режиме, ожидается, что последующие эксперименты в параллельных средах с использованием в качестве опорных для реализации в методе прямых коллокационных блочных разностных схем, изначально ориентированных на параллельное решение, позволят значительно улучшить показатель времени.

Научная новизна состоит в использовании при сведении эволюционных уравнений к методу прямых многоточечных коллокационных блочных разностных схем, ориентированных на эффективную параллельную реализацию и позволяющих обеспечивать управление шагом интегрирования.

Практическая значимость состоит в построении пространственной дискретизации эволюционных уравнений в частных производных методом прямых и численной реализации системы обыкновенных дифференциальных уравнений с привлечением коллокационных блочных разностных схем. Предложенный подход позволяет значительно повысить точность по отношению к известным явным и неявным сеточным методам с соизмеримыми размерностями шагов по времени и по пространству. Использование коллокационных блочных разностных схем, включающих процедуру управления шагом по времени (τ-уточнения), позволяет работать с жесткими задачами, а ориентация этих методов на параллельные среды позволяет значительно сократить время поиска решения.

Список литературы

1. Schiesser W. Method of Lines Analysis of Turing Models / W. Schiesser. – 2017. – Published. – 268 p.
2. Shakeri F. The method of lines for solution of the one-dimensional wave equation subject to an integral conservation condition/ F. Shakeri, M. Dehghan // Journal Computers & Mathematics with Applications. – 2008. – Vol. 56, № 9. – P. 2175-2188.
3. Старченко А.В. Методы параллельных вычислений/ А.В. Старченко, В.Н. Берцун. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2013. – 223 с.
4. Parallel solution of Partial Differential Equations with Adaptive Multigrid Methods on Unstructured Grids/ [Bastian P., Birken K., Johannsen K., Lang S., Reichenberger V., Wieners C., Wittum G., Wrobel C.]// High Performance Computing in Science and Engineering. – Springer, Berlin, Heidelberg. – 2000. – P. 496-508
5. Emmett M. Toward an efficient parallel in time method for partial differential equations/ M. Emmett, M. Minion// Communications in Applied Mathematics and Computational. – 2012. – Vol. 7, № 1. – P. 105-132.
6. Multigrid Reduction in Time for Nonlinear Parabolic Problems: A Case Study/ [Falgout R. ,Manteuffel T., O'Neill B, Schroder J.] //SIAM Journal on Scientific Computing. – 2017. – Vol. 39, № 5. – P. 298-322.
7. Multigrid method based on a space-time approach with standard coarsening for parabolic problems / [Franco S., Gaspar F., Pinto M., Rodrigo C.]// Applied Mathematics and Computation. – 2018. – № 317. – P. 25 - 34.
8. Hackbusch W. Parabolic multigrid methods/ W. Hackbusch, R. Glowinski, J.-L. Lions// Computing Methods in Applied Sciences and Engineering. – 1984. – North-Holland, Amsterdam. – P. 189-197.
9. Li B. A new multigrid method for unconstrained parabolic optimal control problems/ B. Li, J. Liu, M. Xiao// Journal of Computational and Applied Mathematics. – 2017. - № 326. – P. 358-373.
10. Bolten M. A multigrid perspective on the parallel full approximation scheme in space and time/ M. Bolten, D. Moser, R. Speck // Numerical Linear Algebra with Applications. - 2017. - №1. – P. 1-24.
11. Sharaf A. A good spatial discretization in the method of lines/ A. Sharaf, H. Bakodah // Applied Mathematics and Computation. – 2005. – № 171. – P. 1253-1263
12. Variational space–time elements for large-scale systems/ [Hesch C., S.Schuß M. Dittmann, S Eugster, M. Favinoc, R. Krausec] // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2017. - №326. – P. 541 - 572.
13. Ramos H. An almost L-stable BDF-type method for the numerical solution of stiff ODEs arising from the method of lines/ H. Ramos, J. Vigo-Aguiar // Numer. Methods Partial Differential Equations. – 2007. – № 23. – P. 1110-1121
14. Schiesser W. A Compendium of Partial Differential Equation Models: Method of Lines Analysis with Matlab / W. Schiesser, G. Griffiths. – Cambridge. – 2009. – 490 p.
15. Schiesser W. Differential Equation Analysis in Biomedical Science and Engineering/W. Schiesser. – Wiley. – 2014. – 440 p.
16. Дмитриева О. А. Параллельные численные методы моделирования динамических объектов: монография / О.А. Дмитриева. –Покровск: ГВУЗ «ДонНТУ», 2016. – 384 с
17. Дмитрієва О.А. Паралельне моделювання динамічних об'єктів зі сконцентрованими параметрами/ О.А. Дмитрієва. – Харків: «Ноулідж», 2014. – 335 с.
18. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. – М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1989. – 432 с.
19. Cash J. R. New finite difference schemes for parabolic equations // Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) J. – 1984. -Vol. 21, № 3. – P. 433-446.

References

1. Schiesser, W., (2017), "Method of Lines Analysis of Turing Models", Published, 268 p.
2. Shakeri, F., Dehghan, M., (2008), "The method of lines for solution of the one-dimensional wave equation subject to an integral conservation condition", Journal Computers & Mathematics with Applications, P. 2175-2188.
3. Starchenko, A., Bercun, V., (2013), "Methods of parallel computations" [Metody parallel'nyh vychislenij]. – Tomsk: Izd-vo Tom. un-ta, 223 p.
4. Bastian, P., etc., (2000), "Parallel solution of Partial Differential Equations with Adaptive Multigrid Methods on Unstructured Grids", Springer, Berlin, P. 496-508
5. Emmett, M., Minion, M., (2012), "Toward an efficient parallel in time method for partial differential equations", Communications in Applied Mathematics and Computational, P. 105-132.
6. Falgout, R., etc., (2017), "Multigrid Reduction in Time for Nonlinear Parabolic Problems: A Case Study", SIAM Journal on Scientific Computing, P. 298-322.
7. Franco, S., etc., (2018), "Multigrid method based on a space-time approach with standard coarsening for

parabolic problems", Applied Mathematics and Computation, P. 25 - 34.
8. Hackbusch, W., Glowinski, R., Lions, J., (1984), "Parabolic multigrid methods", Computing Methods in Applied Sciences and Engineering, North-Holland, Amsterdam, P. 189-197.
9. Li, B., Liu, J., Xiao, M., (2017), "A new multigrid method for unconstrained parabolic optimal control problems", Journal of Computational and Applied Mathematics, P. 358-373.
10. Bolten, M., Moser, D., Speck, R., (2017), "A multigrid perspective on the parallel full approximation scheme in space and time", Numerical Linear Algebra with Applications, P. 1-24.
11. Sharaf, A., Bakodah, H., (2005), "A good spatial discretization in the method of lines", Applied Mathematics and Computation, P. 1253–1263.
12. Hesch, C., etc., (2017), "Variational space–time elements for large-scale systems", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, P. 541-572.
13. Ramos, H., Vigo-Aguiar, J., (2007), "An almost L-stable BDF-type method for the numerical solution of stiff ODEs arising from the method of lines", Numer. Methods Partial Differential Equations, P. 1110–1121.
14. Schiesser, W., Griffiths, G., (2009), "Compendium of Partial Differential Equation Models: Method of Lines Analysis with Matlab", Cambridge, 490 p.
15. Schiesser, W., (2014), "Differential Equation Analysis in Biomedical Science and Engineering", Wiley, 440 p.
16. Dmitrieva, O., (2016), "Parallel numerical methods for modeling dynamic object", [Parallel'nye chislennye metody modelirovanija dinamicheskih ob"ektov], Pokrovsk. DonNTU, 384 p.
17. Dmitrieva, O., (2014), "Parallel simulating of dynamic objects with lumped parameters" [Paralel'ne modeljuvannja dinamichnih ob'єktiv zi skoncentrovanimi parametrami], Kharkiv. Noulidzh, 335 p.
18. Samarskij, A., Gulin, A., (1989), "Numerical methods" [Chislennye metody], M.: Nauka, 432 p.
19. Cash, J., (1984), "New finite difference schemes for parabolic equations", Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) J., P. 433-446.

Надійшла до редакції 22.01.2018

O. DMITRIEVA[1,2], **N. HUSKOVA**[1,3]
[1]Donetsk National Technical University, Pokrovsk, Ukraine
[2]Stuttgart Research Centre for Simulation Sciences (SRC SimTech), University Stuttgart, Germany
[3]Higher Technical School of the University of Applied Sciences, Bingen, Germany

REALIZATION OF THE METHOD OF LINES FOR PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS BY COLLOCATION BLOCK DIFFERENCE SCHEMES

This paper is devoted to the problem of obtaining solutions of partial differential equations using the method of lines, which is a semi-discrete method of discretization in space, which ensures the reduction of the initial problem to the Cauchy problem described by a system of ordinary differential equations (SODU). Such an approach allows us to effectively implement a large class of evolution equations. The problems of solving the received SODU by collocation block methods are considered, allowing to provide an effective parallel implementation. Moreover, all the advantages of the SODU solution (parallel step control, local error control, stability of the solution) are realized for the case of partial derivatives without significant increase in computational complexity.

As test equations, one-dimensional parabolic problems were used with different types of boundary conditions and with known exact solutions for estimating the global error of the solution. The spatial discretization was performed by a multi-step multipoint collocation block method with the number of reference and calculated points in the 2×2 block.

The computer experiments carried out were conditionally divided into several classes. When testing the problems of the first class, the main emphasis was made on the comparative analysis of the accuracy of the solution by the method of lines with respect to known explicit and implicit grid methods with commensurate dimensions of steps in time and space. The procedure for controlling the integration step (τ-refinement) was not used. In the second class of tests, the influence of the variation of the step in space on the magnitude of the global error was considered. It is shown that a shortening of the step with respect to the spatial variable leads to the expected decrease in the global error (by almost an order of magnitude). The third class of experiments was devoted to solving rigid evolutionary problems with the possibility of varying the stiffness parameter. For this class of problems, the advantages of the method of lines are shown.

Since all computer experiments were carried out in a sequential mode, it is expected that subsequent experiments in parallel environments using collocation block difference schemes in method of lines, which are initially oriented to a parallel solution, will significantly improve the time exponent.

The basic of the material, included in the article, was obtained by the author while working at the SimTech Research Center for Modeling Technologies (SimTech) of the University of Stuttgart. The author is grateful to the director of the SimTech Institute, the president of the International Association of Applied Mathematics and Mechanics, Professor Wolfgang Ehlers for many years of cooperation and support, which contributed to the achievement of new results.

Keywords: partial differential equations, method of lines, Cauchy problem, parallel block methods, initial and boundary conditions, error.

О.А. ДМИТРІЄВА[1,2], **Н.Г. ГУСЬКОВА**[1,3]
[1]Донецький національний технічний університет, м. Покровськ, Україна
[2]Дослідницький центр моделюючих технологій (SRC SimTech) університету Штуттгарта, Німеччина
[3]Вища технічна школа університету прикладних наук, м. Бінген, Німеччина

РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДУ ПРЯМИХ ДЛЯ РІВНЯНЬ В ЧАСТКОВИХ ПОХІДНИХ КОЛОКАЦІЙНИМИ БЛОКОВИМИ РІЗНИЦЕВИМИ СХЕМАМИ

Дана робота присвячена питанням отримання розв'язків рівнянь в часткових похідних за допомогою методу прямих, який представляє собою напівдискретний метод з дискретизацією за просторовими змінними, що забезпечує зведення початкової задачі до задачі Коші, яка описується системою звичайних диференціальних рівнянь (СЗДР). Такий підхід дозволяє досить ефективно реалізувати великий клас еволюційних завдань. Розглянуто питання розв'язання отриманої СЗДР колокаційними блоковими методами, що дозволяють забезпечити ефективну паралельну реалізацію. При цьому всі переваги розв'язань СЗДР (паралельне управління кроком, локальний контроль помилок, стійкість розв'язання) реалізовані для випадку часткових похідних без значного збільшення обчислювальної складності. Для тестових рівнянь в часткових похідних параболічного типу з різними типами крайових умов і параметрами жорсткості проведені множинні комп'ютерні експерименти.

Ключові слова: рівняння в часткових похідних, метод прямих, задача Коші, паралельні блокові методи, початкові і граничні умови, похибка.