

О.А. Дмитрієва, д-р техн. наук, проф.,
Донецький національний технічний університет, м. Покровськ, Україна
olha.dmytriieva@donntu.edu.ua

Паралельні однокрокові колокаційні схеми дискретизації методом прямих для моделювання об'єктів з розподіленими параметрами

В роботі розглянуто питання, пов'язані з паралельним моделюванням об'єктів з розподіленими параметрами при дискретизації рівнянь в частинних похідних за просторовими змінними методом прямих. Початкове завдання зводилося до задачі Коші, описуваної системою звичайних диференціальних рівнянь. Управління точністю обчислень в методі прямих здійснювалося за допомогою однокрокових колокаційних блокових методів. Формування розрахункових різницевих схем інтегрування базувалося на використанні інтегро-інтерполяційного методу. Для розроблених однокрокових колокаційних схем дискретизації для методу прямих доведено збіжність і стійкість за початковими даними і за правою частиною. Наведено результати тестових реалізацій запропонованих схем дискретизації на завданнях з відомими точними розв'язками.

Ключові слова: колокаційні схеми, дискретизація, метод прямих, рівняння в частинних похідних, задача Коші, розподілені параметри.

DOI: 10.31474/1996-1588-2019-1-28-33-41

Вступ

Основним математичним апаратом при моделюванні динамічних об'єктів з розподіленими параметрами є диференціальні рівняння в частинних похідних (ДРЧП), які дозволяють описувати фізичні процеси в таких областях, як механіка суцільних середовищ, термодинаміка, квантова механіка, електродинаміка, теорія пружності і багато інших [1-2]. При цьому аналітичний розв'язок рівнянь в частинних похідних вдається отримати лише в одиничних випадках, тому роль чисельних методів для розв'язання таких задач важко переоцінити [3].

Незважаючи на існування класичних підходів до чисельного розв'язання таких задач, які базуються на явних і неявних різницевих схемах, схемах розщеплення, встановлення, скінченних елементів [1-2, 4], проблема ефективного розв'язання таких задач залишається актуальною і вимагає подальшого розвитку. Основні напрямки, на які в останні роки орієнтуються дослідники, полягають у використанні неструктурованих або адаптивних сіток, багатосіткових підходів або(та) розпаралелювання [5-10]. Неструктуровані сітки дозволяють враховувати складну геометричну конфігурацію границь, адаптивні уточнення спрямовані на мінімізацію розмірності вузлів сітки для досягнення бажаної точності розв'язання. Багатосіткові методи в першу чергу орієнтовані на розв'язання лінійних систем рівнянь, що виникають з дискретизації рівнянь в частинних похідних. Однак всі ці підходи значно збільшують складність моделювання, а розмірність сформованих систем лінійних або нелінійних алгебраїчних

рівнянь інколи досягає порядків 10^{12} - 10^{14} [9]. Розв'язання систем такого порядку не може бути отримано без залучення багатопроекторних комп'ютерів. Тому орієнтація на паралельне розв'язання отриманих завдань є першочерговою при розробці ефективних методів моделювання поведінки об'єктів з розподіленими параметрами.

Метою роботи є розробка паралельних методів дискретизації рівнянь в частинних похідних за просторовими змінними з можливістю управління кроком інтегрування за часом.

Завдання дослідження полягають у формуванні розрахункових схем для методу прямих зі змінною розмірностей розрахункових блоків, доведенні стійкості і збіжності отриманих методів, дослідженні точності обчислень в методі прямих при інтегруванні однокроковими блоковими методами.

Дискретизація ДРЧП за просторовими змінними

Для простоти викладу можна обмежити розгляд рівняння з розподіленими параметрами одним параболічним рівнянням

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

з початковою умовою виду

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

граничними умовами першого

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

другого

$$\frac{\partial u(x_0, t)}{\partial x} = g_1(t), \quad \frac{\partial u(L, t)}{\partial x} = g_2(t) \quad (4)$$

або третього роду

$$\alpha_0 u(x_0, t) + \beta_0 \frac{\partial u(x_0, t)}{\partial x} = g_1(t), \quad (5)$$

$$\alpha_1 u(L, t) + \beta_1 \frac{\partial u(L, t)}{\partial x} = g_2(t).$$

За допомогою методу прямих початкову задачу (1-5) можна звести до задачі Коші [11-15]

$$u'(t) = \varphi(t, u(t)), u(t_0) = u_0, t \in [t_0, T]. \quad (6)$$

Отримана система звичайних диференціальних рівнянь (СЗДР) (6) може бути реалізована з використанням відомих паралельних підходів [2,12,16] з відповідними початковими і граничними умовами. Такий підхід дозволяє досить ефективно реалізовувати великий клас еволюційних рівнянь.

При чисельному розв'язанні сформованої СЗДР (6), розмірність якої залежить від кроку за просторовою змінною (h -уточнення), виникають додаткові можливості, пов'язані з апроксимацією більш високого порядку (p -уточнення), локальним контролем помилок і автоматичною зміною кроку інтегрування за часом (τ -уточнення) [12,16]. В роботі, що пропонується, будуть розглядатися питання, пов'язані тільки з τ -уточненням, що особливо актуально при чисельному розв'язанні жорстких диференціальних рівнянь. Для управління кроком в роботі пропонується використовувати колокаційні блокові методи [2,12], які дозволяють забезпечувати паралельне управління кроком інтегрування для цілого блоку точок.

Управління точністю обчислень в методі прямих при інтегруванні однокроковими блоковими методами

Основна ідея, на якій базується конструювання блокових методів для вирішення СЗДР на паралельних комп'ютерах, полягає в одночасному отриманні наближень точного розв'язання в рівновіддалених точках блоку (рис. 1) [2]. Розглядається розв'язання задачі Коші (6) однокроковим колокаційним блоковим методом (7) з числом розрахункових точок s

$$u_{n,i} = u_{n,0} + \tau \left(b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^s a_{i,j} F_{n,j} \right), \quad (7)$$

$$i = 1, 2, \dots, s, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

де $u_{n,i}$ – наближені розв'язання задачі Коші (6), що визначаються відповідними різницевиими схемами (7) в точках $t_{n,i}$, $i = 1, 2, \dots, s$,

τ – крок інтегрування,

$F_{n,j} = \varphi(t_n + j\tau, u_{n,j})$ – праві частини рівняння (6) у відповідних точках, $j = 0, 1, \dots, s$,

$b_i, a_{i,j}$ - коефіцієнти розрахункової схеми.

Разом з тим, якщо мова йде про чисельне інтегруванні жорстких диференціальних рівнянь, виникає необхідність в зміні кроку інтегрування, що неможливо забезпечити всередині блоку. З одного боку, це є недоліком методу, але, з іншого боку, оскільки точки всередині блоку розташовані

регулярно [2], є можливість визначення і зіставлення локальних похибок у всіх співпадаючих точках блоку (рис. 2).

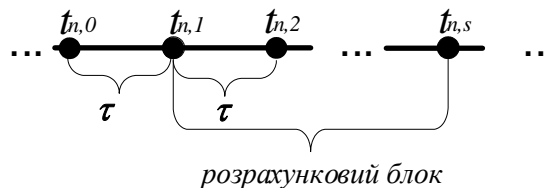


Рисунок 1 – Розміщення розрахункових точок в блоковій різницевій схемі (1 × s) при дискретизації методом прямих

Алгоритми управління точністю обчислень базуються на використанні колокаційних блокових однокрокових методів, які задаються різницевиими схемами з різними порядками апроксимації. Паралельний рахунок здійснюється в межах одного циклу для всіх точок блоків з розмірностями s і $s+1$, обчислення проводяться незалежно, необхідність в обмінах виникає тільки після отримання кінцевих результатів для обох блоків розрахункових точок (рис. 2). Виділяються дві системи процесорних вузлів, на яких запускаються паралельні процеси. Перша система вузлів забезпечує паралельну реалізацію однокрокового колокаційного блокового s -точкового методу, що вимагає s процесорних елементів для отримання значень $u_{n,i}^{(1)}$, $i = 0, 1, 2, \dots, s$. На другий системі вузлів здійснюється реалізація однокрокового колокаційного блокового $s+1$ -точкового методу с отриманням значень $u_{n,i}^{(2)}$, $i = 0, 1, 2, \dots, s, s + 1$. Оскільки методи є неявними, кожен часовий крок має на увазі проведення деякої кількості ітерацій, що забезпечують необхідну локальну точність. Реалізація обох методів здійснюється автономно, що забезпечує грубозернистість обчислень.

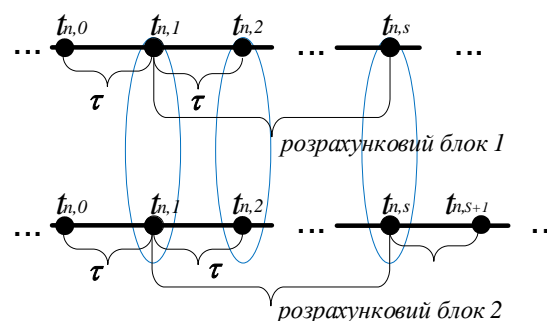


Рисунок 2 – Визначення локальних помилок у методі прямих на однокрокових блокових різницевиих схемах (1 × s) і (1 × (s + 1))

Оскільки обчислення проводяться для блоків точок, які розташовані регулярно, є можливість зіставлення розв'язків, отриманих методами з різними порядками точності, в s розрахункових точках, що збігаються $t_{n,1}, t_{n,2}, \dots, t_{n,s}$. Якщо нор-

ма вектору розбіжностей не перевищує задану глобальну точність обчислень $\|u_{n,i}^{(1)} - u_{n,i}^{(2)}\| \leq tol$, $i = 1, 2, \dots, s$, за основу береться розв'язок, отриманий колокаційним блоковим $s+1$ точковим методом $u_{n,i}^{(2)}$ в точках $t_{n,i}$, $i = 1, 2, \dots, s, s+1$. Розраховується нове значення кроку τ_{new} . Якщо норма вектору розбіжностей не перевищує задану локальну точність обчислень, тобто $tol < \|u_{n,i}^{(1)} - u_{n,i}^{(2)}\| \leq \varepsilon$, $i = 1, 2, \dots, s$, за основу береться розв'язок, отриманий колокаційним блоковим $s+1$ точковим методом $u_{n,i}^{(2)}$ в точках $t_{n,i}$, $i = 1, 2, \dots, s$, формується новий крок τ_{new} і нова опорна точка. Якщо отриманий розв'язок не забезпечує задану локальну точність, від поточного кроку необхідно відмовитися, виконавши його скорочення [2].

Формування однокрокових колокаційних схем дискретизації для методу прямих

Виберемо в якості основної і допоміжної розрахункових схем однокрокові колокаційні блокові різницеві схеми з числом розрахункових точок відповідно s і $s+1$. Точки колокації вводяться в вигляді рівномірної сітки (рис. 1) по кожній утвореній прямій

$t_{n,i} = t_{n,0} + i\tau \in [t_{n,0}, t_{n,s+1}]$, $i = 0, 1, \dots, s, s+1$, формується канонічний вид однокрокових колокаційних блокових схем з числом розрахункових точок s і $s+1$ [2,12]. Для відокремлення різницевої схем, що сприяють отриманню розв'язань методами з розмірністю розрахункових блоків s і $s+1$ відповідно, позначимо шукані змінні за першою розрахунковою схемою $u_{n,i}^{(1)}$ та $u_{n,i}^{(2)}$ – за другою.

$$u_{n,i}^{(1)} = u_{n,0} + \tau \left(b_i^{(1)} F_{n,0} + \sum_{j=1}^s a_{i,j}^{(1)} F_{n,j} \right), \quad (8)$$

$$i = 1, 2, \dots, s, n = 1, 2, \dots, N,$$

$$u_{n,i}^{(2)} = u_{n,0} + \tau \left(b_i^{(2)} F_{n,0} + \sum_{j=1}^s a_{i,j}^{(2)} F_{n,j} \right),$$

$$i = 1, 2, \dots, s+1, n = 1, 2, \dots, N,$$

де $u_{n,i}^{(1)}, u_{n,i}^{(2)}$ – наближені розв'язання задачі Коші (6), що визначаються відповідними різницевоюми схемами (8) в точках $t_{n,i}$, $i = 0, 1, 2, \dots, s, s+1$

τ – крок інтегрування,

$F_{n,j} = \varphi(t_n + j\tau, u_{n,j})$ – праві частини рівняння (6) у відповідних точках, $j = 0, 1, \dots, s, s+1$,

$a_{i,j}^{(1)}, b_i^{(1)}, a_{i,j}^{(2)}, b_i^{(2)}$ – коефіцієнти відповідних розрахункових схем.

Виведення системи різницевої рівнянь здійснюється з використанням інтегро-інтерполяційного методу [2]. Для цього визначається інтерполяційний многочлен Лагранжа $L_{m+s-1}(t)$, вузли інтерполяції якого збігаються з точками колокації різницевої методів $t_{n,j}$, а зна-

чення функції в вузлах інтерполяції відповідають значенням в правій частині рівняння (6) $F_{n,j} = \varphi(t_n + j\tau, u_{n,j})$ в точках $j = 0, 1, \dots, s, s+1$. Для формування різницевої схем інтегрування буде здійснюватися в межах $(t_{n,0}, t_{n,i})$, $i = 1, 2, \dots, s, s+1$

$$u_{n,i}^{(1)} = u_{n,0} + \int_{t_{n,0}}^{t_{n,i}} L_s(t) dt, \quad (9)$$

$$u_{n,i}^{(2)} = u_{n,0} + \int_{t_{n,0}}^{t_{n,i}} L_{s+1}(t) dt.$$

На основі наведених співвідношень (8) можна сформулювати розрахункові схеми для реалізації методу прямих зі збільшенням розрахункового блоку. Оберемо розмірності розрахункових блоків $s = 2, s+1 = 3$. Після побудови інтерполяційного многочлена Лагранжа для першої розрахункової схеми ($s = 2$) і інтегрування його у відповідних межах, отримуємо першу систему різницевої рівнянь:

$$u_{n,1}^{(1)} = u_{n,0} + \frac{\tau}{12} (5F_{n,0} + 8F_{n,1} - F_{n,2}), \quad (10)$$

$$u_{n,2}^{(1)} = u_{n,0} + \frac{\tau}{3} (F_{n,0} + 4F_{n,1} + 2F_{n,2})$$

Введемо додатковий вузол в розрахунковий блок і згенеруємо нову систему різницевої рівнянь

$$u_{n,1}^{(2)} = u_{n,0} + \frac{\tau}{24} (9F_{n,0} + 19F_{n,1} - 5F_{n,2} + F_{n,3}), \quad (11)$$

$$u_{n,2}^{(2)} = u_{n,0} + \frac{\tau}{3} (F_{n,0} + 4F_{n,1} + 2F_{n,2}),$$

$$u_{n,3}^{(2)} = u_{n,0} + \frac{3\tau}{8} (F_{n,0} + 3F_{n,1} + 3F_{n,2} + F_{n,3}).$$

На основі розробленої програмної системи можна формувати розрахункові схеми з будь-якою розмірністю розрахункових блоків, яка визначається виходячи з вимог щодо точності наближення розв'язань. Оцінки похибки отриманих різницевої рівнянь формуються у вигляді залишкового члена при розкладанні розв'язань в ряди Тейлора. Для перевірки порядків апроксимації отриманих колокаційних схем виду (8) необхідно, задавши точки колокації, згенерувати різницевої схеми виду (10-11), а потім знайти нев'язки рівнянь, що складають зазначені системи, і розкласти їх в ряд Тейлора поблизу шуканого розв'язку. Найнижчий порядок нев'язку в точці визначає порядок апроксимації схеми в цілому. Розглянемо схеми (10-11) і визначимо їх порядки апроксимації. Для визначення значення $u_{n,s}$ необхідно вирішити систему рівнянь у кожній з використовуваних точок колокації, в такому разі шукані оцінки для різницевої схеми (10) набудуть вигляду

$$r_{n,1}^{(1)} = -\frac{1}{2} x^{(4)}[0] \tau^3 + O[\tau]^4, \quad r_{n,2}^{(1)} = [0] \tau^4.$$

Оцінки, отримані у точках колокації різницевої рівняннями (11), відповідно

$$r_{n,1}^{(2)} = \frac{19}{30} x^{(5)}[0] \tau^4 + O[\tau]^5,$$

$$r_{n,2}^{(2)} = \frac{1}{30} x^{(5)}[0] \tau^4 + O[\tau]^5,$$

$$r_{n,3}^{(2)} = \frac{1}{10} x^{(5)} [0] \tau^4 + O[\tau]^5.$$

Таким чином, колокаційна блокова однокрокова схема (10) має 3-ій порядок апроксимації, а схема (11) має 4-ий порядок апроксимації.

Стійкість і збіжність однокрокових колокаційних схем дискретизації для методу прямих

Однокрокові багатоточкові колокаційні блокові методи, які визначаються співвідношенням (7), завжди стійкі за початковими даними. Це прямо випливає з того, що розв'язання однорідної системи, що відповідає (7), мають вигляд:

$$u_{n,i} = u_{n,0}, i = 1, 2, \dots, s,$$

і є рівномірною за n обмеженими. Для довільної правої частини необхідно отримати оцінку, яка встановлює стійкість розв'язання рівняння за правою частиною, з якої випливає, що якщо різницеве рівняння (7) апроксимує вихідне рівняння (6), то розв'язання різницевої задачі (7) сходиться при $\tau \rightarrow 0$ до вирішення вихідної задачі (6), причому порядок точності збігається з порядком апроксимації [3].

Дослідження стійкості однокрокових блокових колокаційних методів для жорстких задач проводилося, як це прийнято, на модельному одновимірному рівнянні. Якщо позначити матриці коефіцієнтів системи рівнянь (7) через

$$A = (a_{ij}), i = 1, 2, \dots, s, j = 1, 2, \dots, s,$$

$$b^T = (b_1, b_2, \dots, b_s)$$

та ввести відповідні вектори

$$U_n = (u_{n,j}), j = 1, 2, \dots, s, n = 1, 2, \dots,$$

$$\Phi_n = (F_{n,j}), j = 1, 2, \dots, s, n = 1, 2, \dots,$$

$$e = (1, 1, \dots, 1)^T,$$

то у векторній формі рівняння (7) матиме вигляд:

$$U_n = e u_{n,0} + \tau (F_{n,0} b + A \Phi_n).$$

Підставляючи в праву частину

$$F_{n,0} = \lambda u_{n,0}, \Phi_n = \lambda U_n,$$

можна отримати:

$$U_n = e u_{n,0} + \mu (u_{n,0} b + A U_n), \quad (12)$$

де $\mu = \lambda \tau$.

Після перетворень формується рівняння

$$(E - \mu A) U_n = u_{n,0} (e + \mu b),$$

розв'язання якого відносно U_n

$$U_n = u_{n,0} (E - \mu A)^{-1} (e + \mu b) = G u_{n,0},$$

де вектор $G = (g_1, g_2, \dots, g_s)^T$, являє собою множення матриці на вектор

$$G = \begin{pmatrix} 1 - \mu a_{1,1} & -\mu a_{1,2} & \dots & \mu a_{1,s} \\ -\mu a_{2,1} & 1 - \mu a_{2,2} & \dots & \mu a_{2,s} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\mu a_{s,1} & -\mu a_{s,2} & \dots & 1 - \mu a_{s,s} \end{pmatrix}^{-1} * \begin{pmatrix} 1 + \mu b_1 \\ 1 + \mu b_2 \\ \dots \\ 1 + \mu b_s \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Якщо ввести допоміжний вектор розмірності s :

$$U_{n-1} = (u_{n-1,1}, u_{n-1,2}, \dots, u_{n-1,s}),$$

де $u_{n-1,s} = u_{n,0}$, можна перейти до еквівалентної системи:

$$U_n = G U_{n-1}, n = 1, 2, \dots$$

з матрицею (14). Стійкість чисельного методу (7) визначається власними значеннями матриці \check{G} .

$$\check{G} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & g_1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & g_2 \\ & & \dots & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & g_s \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Видно, що елементи цієї матриці є раціональними функціями від μ і власні значення матриці \check{G} також будуть залежати від μ . Тому необхідно знайти ті області для власних значень μ , в яких $|q(\mu)| \leq 1$. По виду матриці \check{G} можна зробити висновок, що вона має $s - 1$ нульових власних чисел $q_1 = q_2 = \dots = q_{s-1} = 0$ і $q_s = g_s$. Оскільки ранг матриці \check{G} дорівнює одиниці, кожному власному значенню відповідають різні ненульові власні вектори.

Перевіримо, наприклад, стійкість однокрокових дво- та триточкових методів (10-11). Підставляючи в праві частини (10-11) $F_{n,i} = \lambda u_{n,i}$ отримаємо відповідно:

$$u_{n,1}^{(1)} = u_{n,0} + \frac{1}{12} \mu (5u_{n,0} + 8u_{n,1} - u_{n,2}), \quad (15)$$

$$u_{n,2}^{(1)} = u_{n,0} + \frac{1}{3} \mu (u_{n,0} + 4u_{n,1} + 2u_{n,2}),$$

$$u_{n,1}^{(2)} = u_{n,0} + \frac{1}{24} \mu (9u_{n,0} + 19u_{n,1} - 5u_{n,2} + u_{n,3}), \quad (16)$$

$$u_{n,2}^{(2)} = u_{n,0} + \frac{1}{3} \mu (u_{n,0} + 4u_{n,1} + u_{n,2}),$$

$$u_{n,3}^{(2)} = u_{n,0} + \frac{3}{8} \mu (u_{n,0} + 3u_{n,1} + 3u_{n,2} + u_{n,3}).$$

Елементи векторів $G^{(1)}$ та $G^{(2)}$ відповідно до систем (15-16) отримаємо зі співвідношення (13)

$$G^{(1)} = \begin{pmatrix} -\frac{6 + \mu^2}{2(3 - 3\mu + \mu^2)} \\ \frac{3 + 3\mu + \mu^2}{3 - 3\mu + \mu^2} \end{pmatrix},$$

$$G^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{-12 + 6\mu + \mu^2 - \mu^3}{-12 + 18\mu - 11\mu^2 + 3\mu^3} \\ \frac{-12 - 6\mu + \mu^2 + \mu^3}{-12 + 18\mu - 11\mu^2 + 3\mu^3} \\ \frac{12 + 18\mu + 11\mu^2 + 3\mu^3}{-12 + 18\mu - 11\mu^2 + 3\mu^3} \end{pmatrix},$$

тому матриці \check{G} матимуть такий вигляд

$$\check{G}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{6 + \mu^2}{2(3 - 3\mu + \mu^2)} \\ 0 & \frac{3 + 3\mu + \mu^2}{3 - 3\mu + \mu^2} \end{pmatrix},$$

$$\tilde{G}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{-12 + 6\mu + \mu^2 - \mu^3}{-12 + 18\mu - 11\mu^2 + 3\mu^3} \\ 0 & 0 & \frac{-12 - 6\mu + \mu^2 + \mu^3}{-12 + 18\mu - 11\mu^2 + 3\mu^3} \\ 0 & 0 & \frac{12 + 18\mu + 11\mu^2 + 3\mu^3}{-12 + 18\mu - 11\mu^2 + 3\mu^3} \end{pmatrix}$$

Визначимо власні значення матриці $\tilde{G}^{(1)}$

$$q_1 = 0, \quad q_2 = \frac{3 + 3\mu + \mu^2}{3 - 3\mu + \mu^2}$$

для матриці $\tilde{G}^{(2)}$ відповідно

$$q_1 = q_2 = 0, \quad q_3 = -\frac{12 + 18\mu + 11\mu^2 + 3\mu^3}{-12 + 18\mu - 11\mu^2 + 3\mu^3}$$

Границею області стійкості (15) є множина таких точок, для яких $|q(\mu)| = 1$. Покажемо (рис. 3-4), що для однокрокових багатокрокових методів (15-16) такою межею є уявна вісь, тобто множина точок $\mu = i\alpha$, де α - довільне дійсне число. Областю стійкості методів є ліва напівплощина $Re(\mu) < 0$, так як для дійсних від'ємних значень μ має місце $0 \leq q(\mu) < 1$.

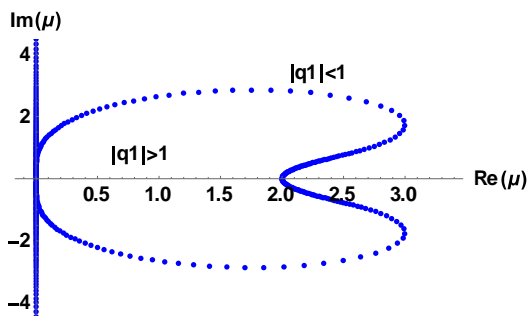


Рисунок 3 – Межі області стійкості блокового однокрокового колокаційного методу (15)

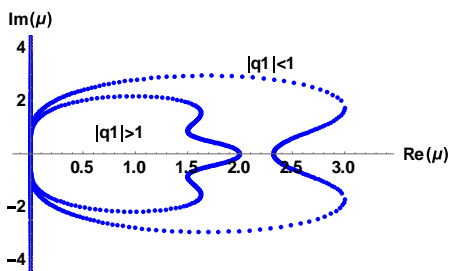


Рисунок 4 – Межі області стійкості блокового однокрокового колокаційного методу (16)

Таким чином, колокаційні блокові однокрокові схеми (10-11) є A -стійкими. Аналогічно перевіряється стійкість блокових методів з довільною кількістю точок розрахункових блоків. На рис. 5-6 наведені границі областей стійкості для блоків розмірності $s = 4, s + 1 = 5$ відповідно.

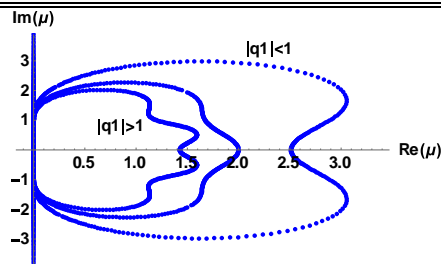


Рисунок 5 – Межі області стійкості блокового однокрокового колокаційного методу $s = 4$.

Тобто, однокроковий п'ятиточковий колокаційний блоковий також є A -стійким і його порядок апроксимації на одиницю більше кількості розрахункових точок.

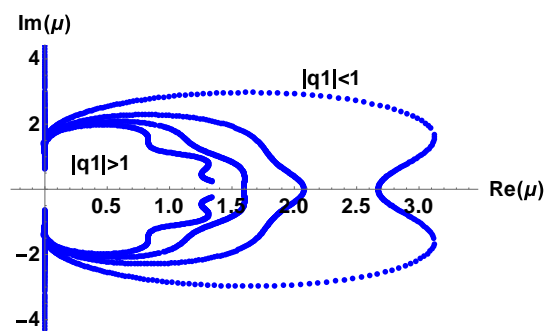


Рисунок 6 – Межі області стійкості блокового однокрокового колокаційного методу $s + 1 = 5$.

Тестова реалізація схем дискретизації для методу прямих

Паралельна реалізація методу прямих на основі розглянутих в підрозділі алгоритмів управління кроком, заснованих на блокових методах зі зміною розмірності розрахункових блоків, проводилася на тестових завданнях з відомими точними розв'язками. В [17] наведено точний розв'язок

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

однорідного ($f(x, t) = 0$) тестового рівняння теплопровідності (1) з параметрами

$$L = 1, T = 1, a = 1,$$

в початковій умові якого

$$u(x, 0) = \sin(\pi x) + \sin(k\pi x) \quad (17)$$

міститься параметр жорсткості $k \gg 1$, що забезпечує швидке убуття компоненти розв'язання $e^{-\pi^2 a^2 k^2 t} \sin(k\pi x)$. На границях задані умови першого роду

$$u(0, t) = u(L, t) = 0. \quad (18)$$

В [17] наведені дані про те, що реалізація цього рівняння відомим різницеvim методом Кранка-Ніколсона дає неприйнятну точність, яка різко погіршується зі збільшенням параметра жорсткості k , знижуючись при $k = 10$ до значення 0.61. Реалізація цього ж завдання за допомогою методу прямих дозволяє значно підвищити точність розрахунків.

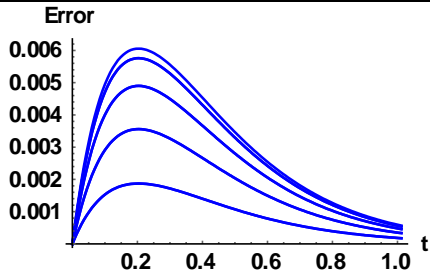


Рисунок 7 – Глобальні похибки в методі прямих для завдання (1,17-18) з кроком за просторовою змінною $h = 0.1$

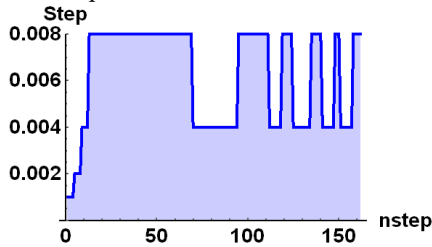


Рисунок 8 – Варіація кроку інтегрування в методі прямих для завдання (1,17-18) з кроком за просторовою змінною $h = 0.1$

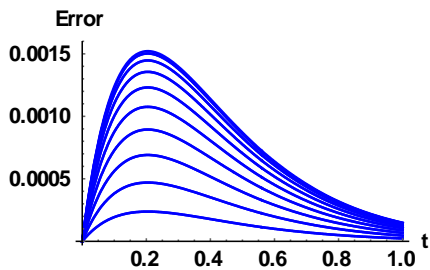


Рисунок 9 – Глобальні похибки в методі прямих для завдання (1,17-18) з кроком за просторовою змінною $h = 0.05$

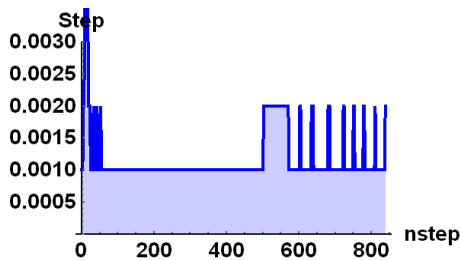


Рисунок 10 – Варіація кроку інтегрування в методі прямих для завдання (1,17-18) з кроком за просторовою змінною $h = 0.05$

На рис. 7-8 наведено графіки глобальних помилок і зміни кроку інтегрування при розбитті відрізка за просторовою змінною з кроком $h = 0.1$, на рис. 9-10 крок за просторовою змінною зменшено вдвічі, $h = 0.05$.

Наступне тестування виконувалося для параболічного рівняння, наведеного в [11]. Розглядався окремий випадок однорідного рівняння теп-

лопровідності (1) зі значеннями параметрів $L = 1, T = 1, a = 1$, з початковою умовою

$$u(x, 0) = \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right), \quad (19)$$

граничними умовами другого роду

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial u(L, t)}{\partial x} = 0, \quad (20)$$

з відомим точним розв'язком

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

Графіки глобальних помилок і зміни кроку інтегрування, отримані при реалізації методу прямих на основі однокрокових багатоточкових колокаційних блокових схем зі змінною розмірності розрахункових блоків, наведено на рис. 11-14. Розбиття відрізка за просторовою змінною проводилося з кроками $h = 0.1$ для системи з 11 рівнянь та $h = 0.05$ для системи з 21 рівняння відповідно.

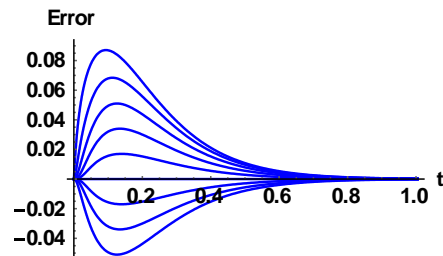


Рисунок 11 – Глобальні похибки в методі прямих для завдання (1,19-20) з кроком за просторовою змінною $h = 0.1$

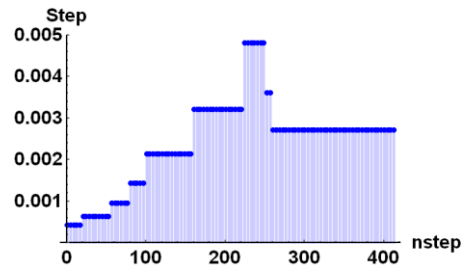


Рисунок 12 – Варіація кроку інтегрування в методі прямих для завдання (1,19-20) з кроком за просторовою змінною $h = 0.1$

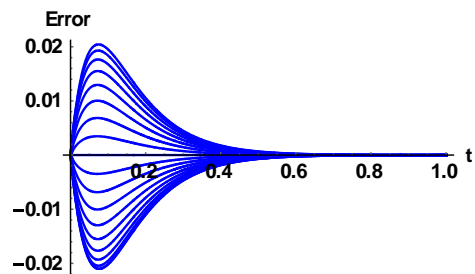


Рисунок 13 – Глобальні похибки в методі прямих для завдання (1,19-20) з кроком за просторовою змінною $h = 0.05$

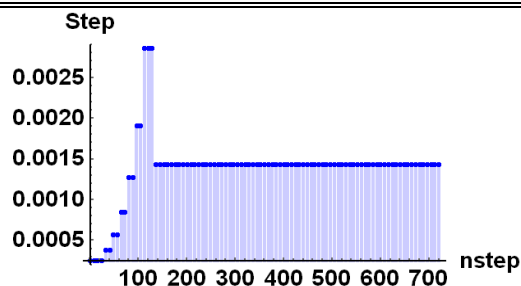


Рисунок 14 – Варіація кроку інтегрування в методі прямих для завдання (1,19-20) з кроком за просторовою змінною $h = 0.05$

Дані обчислювальних експериментів говорять про те, що зведення еволюційних рівнянь методом прямих до розв'язання задачі Коші дозволяє застосовувати автоматичне керування довжиною кроку за часовою змінною при реалізації в паралельних обчислювальних системах, що забезпечує розв'язання задачі (1-5) за короткий час і з прийнятною точністю.

Висновки

У роботі наведені паралельні алгоритми управління кроком інтегрування за часом (τ -уточнення) при реалізації методу прямих для рівнянь з частинними похідними колокаційними блоковими різницевиими схемами. Розглядалися питання генерування колокаційних однокрокових методів зі змінними розмірностями розрахункових блоків, застосування яких дає змогу керувати кроком інтегрування за часом. У розроблених алгоритмах локальні похибки визначалися і зіставлялися у співпадаючих колокаційних точках блоку. Паралельний рахунок здійснювався в межах одного циклу для всіх точок блоків з відповідними розмірностями однокрокових методів $1 \times s(s+1)$. Дві нитки обчислень реалізовувались незалежно, і необхідність в обмінах виникала тільки після отримання кінцевих результатів для блоків розрахункових точок. Побудова процедури управління кроком дозволила просуватися відразу на s або на $s+1$ розрахункову точку в залежності

від нормованих величин розбіжностей, отриманих при формуванні чергового блоку, що забезпечувало відповідне прискорення навіть при послідовній реалізації.

На відомих тестових завданнях виконана паралельна реалізація запропонованих алгоритмів управління кроком. В якості тестових обиралися рівняння в частинних похідних, які за рахунок просторової дискретизації зводилися до розв'язання початкового завдання методом прямих. Таким чином тестові завдання розглядалися як системи звичайних диференціальних рівнянь розмірності, що залежить від обраного кроку за просторовою змінною.

Наукова новизна полягає у розробці паралельних однокрокових блокових методів дискретизації рівнянь в частинних похідних за просторовими змінними, в обґрунтуванні стійкості і збіжності отриманих методів.

Практична значимість полягає у підвищенні ефективності паралельних комп'ютерів при чисельному розв'язанні задач великої розмірності із сильною зв'язністю, коли кількість інформаційних обмінів порівнянна із числом обчислювальних операцій. Створено програмне забезпечення модифікованих чисельних алгоритмів і алгоритмів розв'язання задач із розподіленими параметрами, орієнтоване на обчислювальні системи з паралельною архітектурою. Отримано програмну реалізацію чисельних методів для розв'язання жорстких і погано обумовлених задач в паралельних обчислювальних системах. Розроблено програмне забезпечення паралельних алгоритмів керування кроком і порядком інтегрування для розв'язання жорстких систем, що засновані на колокаційних однокрокових блокових методах. Для автоматичного формування обчислювальних схем розроблена програмна система, заснована на використанні інтегро-інтерполяційного методу, що дозволяє генерувати коефіцієнти різницеви схем, визначати порядок апроксимації і оцінювати апріорну величину похибки в вузлах розрахункових блоків.

Список літератури

1. Фельдман Л.П. Чисельні методи в інформатиці/ Л.П. Фельдман, А.І. Петренко, О.А. Дмитрієва. – К.: Видавнича група BHV, 2006. – 480 с.
2. Дмитриева О. А. Параллельные численные методы моделирования динамических объектов: монография / О.А. Дмитриева. –Покровск: ГВУЗ «ДонНТУ», 2016. – 384 с
3. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. – М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1989. – 432 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. 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.
9. 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
10. Variational space–time elements for large-scale systems/ [Hesch C., S.Schuß M. Dittmann, S Eugster, M. Favino, R. Krausec] // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2017. - №326. – P. 541 - 572.
11. Schiesser W. Method of Lines Analysis of Turing Models / W. Schiesser. – 2017. – Published. – 268 p.
12. Дмитриева О.А. Разработка коллокационных схем параллельного управления шагом в эволюционных уравнениях / О.А. Дмитриева, Н.Г. Гуськова // Вестник НТУ "ХПИ". Серия: Информатика и моделирование. – Харьков: НТУ "ХПИ". – 2018. – № 24(1300). – С. 25 – 36.
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. Parallel multiple blocked methods of Bickart type / [E. Bashkov, O. Dmitrieva, N. Huskova, M. Michalska] // June 2019, Proceedings of SPIE, USA – The International Society for Optical Engineering 11176(1): 11176-201. – 9 p.
17. 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. Feldman, L., Petrenko, A., Dmitrieva, O., (2006), "Numerical methods in computer science", [Chisel'ni metodi v informatici], Kiev, Publishing Group BHV, 480 p.
2. Dmitrieva, O., (2016), "Parallel numerical methods for modeling dynamic object", [Paralleln'nye chislennye metody modelirovaniya dinamicheskikh ob"ektov], Pokrovsk. DonNTU, 384 p.
3. Samarskiy, A., Gulin, A., (1989), "Numerical methods" [Chislennye metody], M.: Nauka, 432 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. 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.
9. 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.
10. Hesch, C., etc., (2017), "Variational space–time elements for large-scale systems", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, P. 541-572.
11. Schiesser, W., (2017), "Method of Lines Analysis of Turing Models", Published, 268 p.
12. Dmitrieva, O., Huskova, N., (2018), "Development of collocation schemes for parallel control of step applicable to the evolution equations", [Razrabotka kollokacionnyh shem parallelnogo upravleniya shagom v jevoljucionnyh uravnenijah], Kharkov, NTU "KhPI, P. 25 – 36.
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. Bashkov, E., Dmitrieva, O., Huskova, N. and ets. Parallel multiple blocked methods of Bickart type // June

2019, Proceedings of SPIE, USA – The International Society for Optical Engineering 11176(1): 11176-201. – 9 p. 17. Cash, J., (1984), "New finite difference schemes for parabolic equations", Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) J., P. 433-446.

Надійшла до редакції 22.05.2019

О.А. ДМИТРИЕВА

Донецкий национальный технический университет, г. Покровск, Украина
olha.dmytriieva@donntu.edu.ua

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ОДНОШАГОВЫЕ КОЛОКАЦИОННЫЕ СХЕМЫ ДИСКРЕТИЗАЦИИ МЕТОДОМ ПРЯМЫХ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОБЪЕКТОВ С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

В работе рассмотрены вопросы, связанные с параллельным моделированием объектов с распределенными параметрами при дискретизации уравнений в частных производных по пространственным переменным методом прямых. Первоначальная задача сводилась к задаче Коши, описываемой системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Управление точностью вычислений в методе прямых осуществлялось с помощью одношаговых коллокационных блочных методов. Формирование расчетных разностных схем интегрирования базировалось на использовании интегро-интерполяционного метода. Доказаны сходимости и устойчивость по начальным данным и по правой части предложенных одношаговых коллокационных схем дискретизации для метода прямых. Приведены результаты тестовой реализации схем дискретизации для метода прямых на задачах с известными точными решениями.

Ключевые слова: коллокационные схемы, дискретизация, метод прямых, уравнения в частных производных, задача Коши, распределенные параметры.

O. DMITRIEVA

Donetsk National Technical University, Pokrovsk, Ukraine
olha.dmytriieva@donntu.edu.ua

PARALLEL SINGLE-STEP COLLOCATION DISCRETIZATION DIAGRAMS BY THE DIRECT METHOD FOR MODELING OBJECTS WITH DISTRIBUTED PARAMETERS

The paper presents parallel control algorithms for the integration time step (τ -refinement) of the straight line method for partial differential equations with collocation block difference schemes. The issues of generating collocation one-step methods with interchangeable dimensions of the calculation blocks were considered, the application of which allows us to control the integration step over time. In the developed algorithms, local errors were determined and compared at coinciding collocation points of the block. Parallel calculation was carried out within one cycle for all the points of blocks with the corresponding dimensions of $1 \times s$ ($s + 1$) one-step methods. Two threads of calculations were implemented independently, and the need for exchange arose only after obtaining the final results for blocks of calculation points. The construction of the step control procedure allowed us to advance immediately to s or to $s + 1$ calculated points depending on the normalized values of the discrepancies obtained during the formation of the next block, this ensured the corresponding acceleration even during sequential implementation.

On well-known test problems, a parallel implementation of the proposed step control algorithms was performed. Partial derivatives were chosen as test equations, which due to spatial discretization were reduced to solving the original problem by the direct method. Thus, the test tasks were considered as systems of ordinary differential equations, the dimensions of which depended on the chosen step in the spatial variable.

Scientific novelty lies in the development of parallel one-step block methods for discretizing partial differential equations with respect to spatial variables, in substantiating the stability and convergence of the obtained methods.

The practical significance lies in increasing the efficiency of parallel computers in the numerical solution of large-dimensional problems with strong connectivity, when the number of information exchanges is comparable to the number of computational operations. The software for modified numerical algorithms and algorithms for solving problems with distributed parameters, focused on computing systems with a parallel architecture, has been created. The software implementation of numerical methods for solving hard and poorly conditioned problems in parallel computing systems is obtained. Software has been developed for parallel step and integration control algorithms for solving rigid systems based on collocation single-step block methods. For the automatic formation of computational schemes, a software system has been developed based on the use of the integro-interpolation method, which allows generating the coefficients of difference schemes, determining the approximation order and estimating the a priori error in the nodes of the calculation blocks.

Key words: collocation schemes, discretization, direct method, partial differential equations, Cauchy problem, distributed parameters.