

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ ЗАДАЧ КОНВЕКЦИИ–ДИФФУЗИИ НА ОСНОВЕ СХЕМ РАСЩЕПЛЕНИЯ

### Введение

В связи с интенсивным промышленным развитием, оказывающим на окружающую среду глобальное воздействие, в настоящее время уделяется большое внимание вопросам развития численных методов математического моделирования процессов переноса загрязнений в атмосфере [1–9].

Для многомерных нестационарных задач получили широкое распространение методы факторизации и расщепления [1, 2, 10–14], которые позволяют свести решение исходных задач к последовательному или параллельному решению уравнений с меньшей размерностью. При этом актуально построение численных алгоритмов на основе разностных схем бегущего счета с явной организацией вычислений, а также применение современной высокопроизводительной техники с параллельной архитектурой, позволяющее значительно сократить время расчета.

В данной работе для численного решения трехмерного нестационарного уравнения конвективной диффузии предлагается подход, использующий методику геометрического расщепления и решение полученных одномерных дифференциальных задач с помощью разностных схем бегущего счета. Исследованы вопросы построения, аппроксимации, устойчивости и монотонности предложенных разностных схем расщепления бегущего счета.

Для уменьшения времени исполнения алгоритмов бегущего счета на распределенных вычислительных системах исследуется три схемы распределения данных: с разбиением сетки по одной, двум и трем координатам. Анализ быстродействия проводился путем получения теоретических оценок и сравнения их с результатами вычислительных экспериментов.

### Постановка задачи

Вопросы построения и исследования схем расщепления по геометрическим координатам рассмотрим на примере трехмерного уравнения конвективной диффузии [1, 2]

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_1 \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_2 \frac{\partial C}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_3 \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \sigma C = f \quad (1)$$

в области  $\bar{G} = G \cup \Gamma = \{0 \leq x \leq l_1, 0 \leq y \leq l_2, 0 \leq z \leq l_3\}$  на временном интервале  $0 < t \leq T$ .

Уравнение (1) дополняется однородным граничным условием первого рода и начальным условием

$$\begin{aligned} C|_{(x,y,z) \in \Gamma} &= 0, \\ C|_{t=0} &= C_0(x, y, z), (x, y, z) \in G. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $C(x, y, z, t)$  — концентрация примеси,  $\Gamma$  — граница области  $G$ ,  $\mathbf{V}$  — вектор скорости воздушного потока с компонентами  $(u, v, w)$ ,  $\mu_\alpha = \mu_\alpha(x, y, z)$ ,

$\alpha = 1, 2, 3$  — коэффициенты турбулентной диффузии,  $\sigma$  — коэффициент трансформации примеси,  $f(x, y, z)$  — функция распределения источников загрязнения.

Предполагается, что компоненты вектора скорости воздушного потока удовлетворяют уравнению неразрывности

$$\operatorname{div} \mathbf{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0.$$

### Схема расщепления

Для задач конвекции-диффузии с постоянными, возможно, зависящими от времени компонентами вектора скорости  $\mathbf{V}$ , схему расщепления на дифференциальном уровне можно получить, представляя уравнение переноса (1) в операторном виде

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (A_1 + A_2 + A_3)C = f, \quad (3)$$

где

$$A_1 C = u \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_1 \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad A_2 C = v \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_2 \frac{\partial C}{\partial y} \right),$$

$$A_3 C = w \frac{\partial C}{\partial z} + \sigma C - \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_3 \frac{\partial C}{\partial z} \right).$$

Пусть  $E$  — единичный оператор. Тогда, предполагая, что для некоторого момента времени  $t$  решение уравнения (3) известно, значение  $C(x, y, z, \xi)$  для момента  $\xi = t + \tau$  можно представить с помощью ряда Тейлора в виде

$$C(x, y, z, \xi) = C(x, y, z, t) + \tau \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial t} + O(\tau^2) =$$

$$= [E - \tau(A_1 + A_2 + A_3)]C(x, y, z, t) + \tau f + O(\tau^2). \quad (4)$$

Рассмотрим три вспомогательные задачи:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + A_1 C_1 = 0, \quad C_1(x, y, z, t) = C(x, y, z, t), \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} + A_2 C_2 = 0, \quad C_2(x, y, z, t) = C_1(x, y, z, \xi), \quad (6)$$

$$\frac{\partial C_3}{\partial t} + A_3 C_3 = f, \quad C_3(x, y, z, t) = C_2(x, y, z, \xi), \quad (7)$$

решения которых для момента времени  $\xi$  можно записать в виде

$$C_1(x, y, z, \xi) = [E - \tau A_1]C_1(x, y, z, t) + O(\tau^2),$$

$$C_2(x, y, z, \xi) = [E - \tau A_2]C_2(x, y, z, t) + O(\tau^2),$$

$$C_3(x, y, z, \xi) = [E - \tau A_3]C_3(x, y, z, t) + \tau f + O(\tau^2).$$

Отсюда, учитывая, что  $C_2(x, y, z, t) = C_1(x, y, z, \xi)$ ,  $C_3(x, y, z, t) = C_2(x, y, z, \xi)$ , для решения третьей вспомогательной задачи получаем

$$C_3(x, y, z, \xi) = [E - \tau(A_1 + A_2 + A_3)]C(x, y, z, t) + \tau f + O(\tau^2). \quad (8)$$

Принимая  $C(x, y, z, \bar{k}) = C_3(x, y, z, \bar{k})$  и сравнивая выражения (4) и (8), приходим к утверждению, что, решая последовательно задачи (5)–(7), получаем решение уравнения (1) для момента времени  $\bar{k}$  с погрешностью  $O(\tau^2)$ .

### Разностные схемы бегущего счета

Для численного решения нестационарных задач (5)–(7) в области  $\bar{G}$  введем пространственную равномерную разностную сетку с шагами  $h_1, h_2, h_3$ :

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_h = \omega_h \cup \gamma_h = \{(x, y, z) : x = x_i = ih_1, i = \overline{0, N_1}; y = y_j = jh_2, j = \overline{0, N_2}; \\ z = z_k = kh_3, k = \overline{0, N_3}; h_\alpha = l_\alpha / N_\alpha, \alpha = 1, 2, 3\}, \end{aligned}$$

где  $\omega_h$  — множество внутренних узлов,  $\gamma_h$  — множество граничных узлов. Множество внутренних узлов можно представить в виде  $\omega_h = \omega_1 \times \omega_2 \times \omega_3$ , где  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$  — одномерные равномерные сетки.

Определим конечномерное гильбертово пространство  $H_h$  сеточных функций, заданных на сетке  $\bar{\omega}_h$  и равных нулю на ее границе. Скалярное произведение в  $H_h$  зададим соотношением

$$(\varphi, \psi) = \sum_{(x,y,z) \in \omega_h} \varphi(x, y, z) \psi(x, y, z) h_1 h_2 h_3,$$

тогда норма  $\|\varphi\| = \sqrt{(\varphi, \varphi)}$ . Для самосопряженного и положительного разностного оператора  $D$  можно определить энергетическое пространство  $H_D$  со скалярным произведением  $(\varphi, \psi)_D = (D\varphi, \psi)$  и нормой  $\|\varphi\|_D = \sqrt{(D\varphi, \varphi)}$ .

Для сеточных функций, заданных на сетке  $\bar{\omega}_h$  и равных нулю на ее границе, определим также скалярные произведения по формулам:

$$\begin{aligned} (\varphi, \psi)_{\omega_1} &= \sum_{x \in \omega_1} \varphi(x, y, z) \psi(x, y, z) h_1, (y, z) \in \omega_2 \times \omega_3, \\ (\varphi, \psi)_{\omega_2} &= \sum_{y \in \omega_2} \varphi(x, y, z) \psi(x, y, z) h_2, (x, z) \in \omega_1 \times \omega_3, \\ (\varphi, \psi)_{\omega_3} &= \sum_{z \in \omega_3} \varphi(x, y, z) \psi(x, y, z) h_3, (x, y) \in \omega_1 \times \omega_2. \end{aligned}$$

Используя эти обозначения, скалярное произведение в  $H_h$  можно записать, например, в виде

$$(\varphi, \psi) = (((\varphi, \psi)_{\omega_1}, 1)_{\omega_2}, 1)_{\omega_3}. \quad (9)$$

Пусть  $\omega_\tau = \{t : t = t_n = n\tau, n = \overline{0, N}, N\tau = T\}$  — равномерная временная сетка с шагом  $\tau$ . В дальнейшем при исследовании устойчивости нестационарных задач будем рассматривать сеточные функции  $\varphi(t_n)$  дискретного аргумента  $t_n \in \omega_\tau$  со значениями из некоторого конечномерного пространства  $H_h$ , т.е.  $\varphi(t_n) = \varphi^n \in H_h$ .

Перейдем к вопросу построения разностных схем бегущего счета для численного решения системы дифференциальных уравнений (5)–(7) на примере уравнения (5).

**Разностная схема бегущего счета с направленными разностями.** Используя для аппроксимации конвективных слагаемых схемы с направленными разностями [10, 12], легко убедиться, что разностное уравнение

$$\varphi_t^n + u\varphi_{\bar{x}}^{n+1} - (a_1\varphi_{\bar{x}}^{n+1})_x = 0, \quad u \geq 0, \quad (x, y, z) \in \omega_h \quad (10)$$

аппроксимирует дифференциальное уравнение (5) с первым порядком, а условия монотонности выполняются при любых значениях  $\tau$  и  $h_1$ . Здесь  $\varphi$  — сеточная функция, заданная в узлах сетки  $\omega_h$ , и используются общепринятые обозначения теории разностных схем [12, 15]:

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi(x_i, y_j, z_k, t_n) = \varphi_{i,j,k}^n = \varphi^n = \varphi_{i,j,k}, \\ \varphi_t &= (\varphi^{n+1} - \varphi^n) / \tau, \quad \varphi_x = (\varphi_{i+1,j,k} - \varphi_{i,j,k}) / h_1, \quad \varphi_{\bar{x}} = (\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i-1,j,k}) / h_1, \\ (a_1\varphi_{\bar{x}})_x &= \frac{1}{h_1} (a_{i+1}\varphi_x - a_i\varphi_{\bar{x}}) = \frac{1}{h_1^2} (a_{i+1}\varphi_{i+1} - (a_{i+1} + a_i)\varphi_i + a_i\varphi_i), \\ a_1 &= a_i = a_{i,j,k} = \mu_{i-1/2} = \mu_1(x_{i-1/2}, y_j, z_k). \end{aligned}$$

Аналогично определяются разностные операторы по другим координатным направлениям:  $\varphi_y, \varphi_{\bar{y}}, (a_2\varphi_{\bar{y}})_y$  и  $\varphi_z, \varphi_{\bar{z}}, (a_3\varphi_{\bar{z}})_z$ , которые используются для аппроксимации дифференциальных выражений  $A_2, A_3$ .

Если в уравнении (10) оператор  $\varphi_x^{n+1}$  заменить соответствующим оператором при  $t = t_n$ , то в результате получим двухслойную схему бегущего счета

$$\varphi_t + u\varphi_x^{n+1} - \frac{1}{h_1} (a_{i+1}\varphi_x^n - a_i\varphi_{\bar{x}}^{n+1}) = 0, \quad u \geq 0. \quad (11)$$

Уравнение (11) можно переписать в виде

$$\varphi_t + u\varphi_x^{n+1} - (a_1\varphi_x^{n+1})_x + \frac{\tau}{h_1} a_{i+1}\varphi_{xt}^n = 0,$$

отсюда следует, что основной вклад в погрешность аппроксимации уравнения (11) вносит слагаемое  $O(\tau/h_1)$ .

Поступая аналогично при  $u < 0$ , можно получить двухслойную схему бегущего счета

$$\varphi_t^n + u\varphi_x^{n+1} - \frac{1}{h_1} (a_{i+1}\varphi_x^{n+1} - a_i\varphi_x^n) = 0, \quad u < 0. \quad (12)$$

Отличительная особенность рассматриваемых разностных схем бегущего счета (11), (12) — возможность их реализации по явным рекуррентным соотношениям. Действительно, анализ шаблона разностной схемы (11) свидетельствует о том, что для определения значения функции  $\varphi_i^{n+1}$  необходимо знать значение функции в соседней слева точке на разностной сетке. Поэтому, используя граничные условия, можно последовательно рассчитать значение сеточной функции на  $(n+1)$ -м шаге по времени.

Из анализа шаблона разностной схемы (12) следует, что для определения сеточной функции  $\varphi_i^{n+1}$  необходимо знать значение функции  $\varphi$  в соседней справа точке на разностной сетке, что тоже дает возможность проводить расчеты по рекуррентным соотношениям.

На основе уравнений (11), (12) разностную схему бегущего счета для решения дифференциальных задач (5)–(7) можно записать в виде системы вспомогательных одномерных разностных схем:

$$\frac{\varphi_1^{n+1} - \varphi_1^n}{\tau} + \begin{cases} u\varphi_{1x}^{n+1} - \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi_{1x}^{n+1}) = 0, & u \geq 0, \\ u\varphi_{1x}^{n+1} - \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_{1x}^{n+1} - a_{1i}\varphi_x^n) = 0, & u < 0, \end{cases} \quad (13)$$

$$\frac{\varphi_2^{n+1} - \varphi_2^n}{\tau} + \begin{cases} v\varphi_{2y}^{n+1} - \frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_{2y}^n - a_{2j}\varphi_{2y}^{n+1}) = 0, & v \geq 0, \\ v\varphi_{2y}^{n+1} - \frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_{2y}^{n+1} - a_{2j}\varphi_{2y}^n) = 0, & v < 0, \end{cases} \quad (14)$$

$$\frac{\varphi^{n+1} - \varphi_3^n}{\tau} + \begin{cases} w\varphi_z^{n+1} + \sigma\varphi^{n+1} - \frac{1}{h_3}(a_{3k+1}\varphi_{3z}^n - a_{3k}\varphi_z^{n+1}) = f, & w \geq 0, \\ w\varphi_z^{n+1} + \sigma\varphi^{n+1} - \frac{1}{h_3}(a_{3k+1}\varphi_z^{n+1} - a_{3k}\varphi_{3z}^n) = f, & w < 0, \end{cases} \quad (15)$$

$$n = 0, 1, \dots, \varphi^n \in H_h,$$

с соответствующими начальными условиями.

Таким образом, чтобы найти приближенное решение исходной дифференциальной задачи (1), (2) на слое  $t_{n+1}$  по начальным данным  $\varphi^n$  на слое  $t_n$ , надо решить три одномерные задачи (13)–(15). Сначала решается уравнение (13) и находят промежуточные значения  $\varphi_1^{n+1}$ , которые на втором этапе используются в уравнении (14) для определения вспомогательной сеточной функции  $\varphi_2^{n+1}$ . На третьем шаге найденные значения  $\varphi_2^{n+1}$  используются в качестве начальных для определения приближенного решения  $\varphi^{n+1}$ .

Теперь рассмотрим важное свойство устойчивости разностной схемы (13)–(15) по начальным данным и покажем ее равномерную устойчивость. Для исследования устойчивости сеточных задач (13)–(15) используем подход, основанный на получении априорных оценок для каждой вспомогательной задачи.

По структуре разностные схемы (13)–(15) совпадают с уравнениями (11), (12), поэтому для удобства в дальнейшем ограничимся рассмотрением устойчивости разностных задач (11), (12).

Для получения априорной оценки воспользуемся принципом замороженных коэффициентов [16] и преобразуем уравнения (11), (12) с постоянным коэффициентом диффузии  $a_1(x, y, z) \equiv a_1 = \text{const}$  к каноническому операторному виду

$$B\varphi_t + A\varphi = 0, \quad (16)$$

где линейные операторы  $B, A$  действуют в гильбертовом пространстве  $H_h$ ,

$$\varphi = \varphi^n \in H_h.$$

Как известно [12, 15], необходимое и достаточное условие устойчивости по начальным данным двухслойной разностной схемы (16) с самосопряженными положительными операторами  $A, B$  означает выполнение операторного неравенства

$$B \geq 0,5\tau A, \quad (17)$$

причем для решения  $\varphi^{n+1}$  справедлива оценка в энергетической норме  $\|\cdot\|_A$ :

$$\|\varphi^{n+1}\|_A \leq \|\varphi^n\|_A, \quad n = \overline{0, N}.$$

Выражения для операторов  $A, B$  при  $a_1(x, y, z) \equiv a_1 = \text{const}$  получим, исходя из уравнений (11), (12), записанных в эквивалентном виде

$$\varphi_t + u\varphi_x^n + a_1\Lambda\varphi^n + u\tau\varphi_{xt}^n + \frac{\tau}{h_1}a_1\varphi_{xt}^n = 0, \quad u \geq 0, \quad \Lambda\varphi = -\varphi_{xx},$$

$$\varphi_t + u\varphi_x^n + a_1\Lambda\varphi^n + u\tau\varphi_{xt}^n - \frac{\tau a_1}{h_1}\varphi_{xt}^n = 0, \quad u < 0.$$

Отсюда после преобразований находим, что выражения для операторов схемы (16) можно представить в компактном виде  $A = A_0 + A_1$ ,  $B = B_0 + B_1$ ,

$$A_0\varphi = \left(a_1 + \frac{|u|h_1}{2}\right)\Lambda\varphi, \quad u \geq 0, \quad u < 0, \quad A_1\varphi^n = \begin{cases} u\varphi_x^n, & u \geq 0, \\ u\varphi_x^n, & u < 0; \end{cases} \quad (18)$$

$$B_0\varphi = E\varphi + \left(\frac{|u|\tau h_1}{2} + \frac{\tau a_1}{h_2}\right)\Lambda\varphi, \quad u \geq 0, \quad u < 0, \quad B_1\varphi = \begin{cases} \left(u\tau + \frac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_x^n, & u \geq 0, \\ \left(u\tau - \frac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_x^n, & u < 0. \end{cases} \quad (19)$$

Используя разностные формулы Грина [15], а также представление скалярного произведения  $(\cdot, \cdot)$  в виде (9), можно показать самосопряженность и положительную определенность операторов  $A_0, B_0$  в смысле скалярного произведения  $(\cdot, \cdot)$ . Аналогично может быть установлена кососимметричность операторов  $A_1, B_1$ , тогда  $(A_1\varphi, \varphi) = 0$ ,  $(B_1\varphi, \varphi) = 0$ . Поэтому условие устойчивости (17) эквивалентно условию  $B_0 \geq 0,5\tau A_0$ .

В результате условие устойчивости принимает вид

$$E + |u|\frac{\tau h_1}{4}\Lambda + \frac{\tau}{2}A_0 \geq \frac{\tau}{2}A_0.$$

Это условие всегда выполняется, поэтому разностная схема (16), (18), (19) равномерно устойчива по начальным данным в энергетической норме  $\|\cdot\|_{A_0}$ .

Таким образом, справедливо следующее утверждение.

**Теорема 1.** Двухслойная разностная схема бегущего счета (16), (18), (19) при всех возможных значениях коэффициента диффузии равномерно устойчива по начальным данным в энергетической норме  $\|\cdot\|_{A_0}$ , и для ее решения имеет место априорная оценка

$$\|\varphi^{n+1}\|_{A_0} \leq \|\varphi^n\|_{A_0}, \quad n = \overline{0, N}.$$

Из предыдущих рассуждений следует, что для вспомогательной задачи (13) при всех возможных значениях коэффициента диффузии и компоненты вектора скорости воздушного потока по координате  $Ox$  выполняется операторное условие устойчивости. Из принципа замороженных коэффициентов следует, что схема (13) равномерно устойчива по начальным данным, если условие (17) выполнено при всех возможных значениях коэффициентов  $a_1(x, y, z)$  и  $u$ .

Изложенная схема доказательства устойчивости полностью применима для исследования устойчивости вспомогательных двухслойных разностных схем бегущего счета (14), (15). Аналогично может быть установлена равномерная устойчивость вспомогательных задач (14), (15), что в целом гарантирует устойчивость вычислений при переходе с  $n$ -го временного слоя на  $(n+1)$ -й временной слой.

Для исследования монотонности схем (11), (12) представим их в индексных обозначениях, разрешенных относительно  $\varphi_{i,j,k}^{n+1}$ . Из условия положительности коэффициентов находим, что разностная схема бегущего счета (13) монотонна при  $\tau \leq h_1^2 / \max_{(x,y,z) \in \omega_h} a_1$ .

**Разностная схема бегущего счета с аппроксимацией конвективного члена на центральной разности.** Для решения задачи (5) исследуем разностную схему бегущего счета, полученную из уравнения с использованием аппроксимации конвективного слагаемого центральной разностью

$$\varphi_t^n + u\varphi_x^n - (a_1\varphi_x^{n+1})_x = 0, \quad \varphi_x^n = 0,5(\varphi_{\bar{x}} + \varphi_x).$$

Отсюда в зависимости от знака компоненты  $u$  приходим к двухслойным схемам бегущего счета

$$\varphi_t^n + \frac{u}{2}(\varphi_{\bar{x}}^{n+1} + \varphi_x^n) - \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^n - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^{n+1}) = 0, \quad u \geq 0, \quad (20)$$

$$\varphi_t^n + \frac{u}{2}(\varphi_{\bar{x}}^n + \varphi_x^{n+1}) - \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_x^{n+1} - a_{1i}\varphi_{\bar{x}}^n) = 0, \quad u < 0. \quad (21)$$

Уравнения (20), (21) можно преобразовать к виду

$$\varphi_t^n + u\varphi_x^n - (a_1\varphi_{\bar{x}}^n)_x + \frac{u\tau}{2}\varphi_{xt}^n + \frac{\tau}{h_1}a_{1i}\varphi_{\bar{x}t}^n = 0, \quad u \geq 0, \quad (22)$$

$$\varphi_t^n + u\varphi_x^n - (a_1\varphi_{\bar{x}}^n)_x + \frac{u\tau}{2}\varphi_{xt}^n - \frac{\tau}{h_1}a_{1i+1}\varphi_{xt}^n = 0, \quad u < 0, \quad (23)$$

отсюда следует, что основной вклад в погрешность аппроксимации схем бегущего счета вносит слагаемое  $O(\tau/h_1)$ .

Теперь, используя предыдущие рассуждения, разностную схему бегущего счета для решения дифференциальных задач (5)–(7) с аппроксимацией конвективного члена центральной разностью можно записать в виде системы разностных задач:

$$\frac{\varphi_1^{n+1} - \varphi_1^n}{\tau} + \begin{cases} \frac{u}{2}(\varphi_{1\bar{x}}^{n+1} + \varphi_{1x}^n) - \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_{1x}^n - a_{1i}\varphi_{1\bar{x}}^{n+1}) = 0, \quad u \geq 0, \\ \frac{u}{2}(\varphi_{1\bar{x}}^n + \varphi_{1x}^{n+1}) - \frac{1}{h_1}(a_{1i+1}\varphi_{1x}^{n+1} - a_{1i}\varphi_{1\bar{x}}^n) = 0, \quad u < 0; \end{cases} \quad (24)$$

$$\frac{\varphi_2^{n+1} - \varphi_2^n}{\tau} + \begin{cases} \frac{v}{2}(\varphi_{2\bar{y}}^{n+1} + \varphi_{2y}^n) - \frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_{2y}^n - a_{2j}\varphi_{2\bar{y}}^{n+1}) = 0, \quad v \geq 0, \\ \frac{v}{2}(\varphi_{2\bar{y}}^n + \varphi_{2y}^{n+1}) - \frac{1}{h_2}(a_{2j+1}\varphi_{2y}^{n+1} - a_{2j}\varphi_{2\bar{y}}^n) = 0, \quad v < 0; \end{cases} \quad (25)$$

$$\frac{\varphi_3^{n+1} - \varphi_3^n}{\tau} + \begin{cases} \frac{w}{2}(\varphi_{3\bar{z}}^{n+1} + \varphi_{3z}^n) + \sigma\varphi^{n+1} - \frac{1}{h_3}(a_{3k+1}\varphi_{3z}^n - a_{3k}\varphi_{3\bar{z}}^{n+1}) = f, \quad w \geq 0, \\ \frac{w}{2}(\varphi_{3\bar{z}}^n + \varphi_{3z}^{n+1}) + \sigma\varphi^{n+1} - \frac{1}{h_3}(a_{3k+1}\varphi_{3z}^{n+1} - a_{3k}\varphi_{3\bar{z}}^n) = f, \quad w < 0, \end{cases} \quad (26)$$

$$n = 0, 1, \dots, N, \quad \varphi^n \in H_h,$$

с соответствующими начальными условиями.

Устойчивость разностных схем (24)–(26) исследуем на примере схемы (24) при  $a_1(x, y, z) \equiv a_1 = \text{const}$ , исходя из ее представления в операторном виде (16). Для этого снова воспользуемся уравнениями (22), (23), на основании анализа которых можно получить выражения для операторов схемы (16):

$$A\varphi = u\varphi_x + a_1\Lambda_1\varphi, \quad u \geq 0, \quad u < 0, \quad B\varphi = \begin{cases} E\varphi + \left(\frac{u\tau}{2} + \frac{\tau\mu_1}{h_1}\right)\varphi_{\bar{x}}, & u \geq 0, \\ E\varphi + \left(\frac{u\tau}{2} - \frac{\tau\mu_1}{h_1}\right)\varphi_x = 0, & u < 0; \end{cases} \quad (27)$$

$$B_0\varphi = \begin{cases} E\varphi + \left(\frac{u\tau h_1}{4} + \frac{\tau a_1}{2}\right)\Lambda\varphi, & u \geq 0, \\ \varphi + \left(\frac{\tau a_1}{2} - \frac{u\tau h_1}{4}\right)\Lambda\varphi, & u < 0, \end{cases} \quad B_1\varphi = \begin{cases} \left(\frac{u\tau}{2} + \frac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_x, & u \geq 0, \\ \left(\frac{u\tau}{2} - \frac{\tau a_1}{h_1}\right)\varphi_x, & u < 0. \end{cases} \quad (28)$$

В результате анализа свойств операторов  $A, B$  легко установить, что

$$A = A^* > 0, \quad B = B^* > 0, \quad (A\varphi, \varphi) = (A_0\varphi, \varphi) + (A_1\varphi, \varphi) = (A_0\varphi, \varphi), \\ (B\varphi, \varphi) = (B_0\varphi, \varphi) + (B_1\varphi, \varphi) = (B_0\varphi, \varphi),$$

где  $A_0\varphi = a_1\Lambda\varphi$ ,  $A_1\varphi = u\varphi_x$ ,  $u \geq 0, u < 0$ .

Это означает, что операторное условие устойчивости разностных схем (16), (27), (28) принимает вид  $B_0 \geq 0,5\tau A_0$  или

$$E + \left(\frac{|u|\tau h_1}{4} + \frac{\tau a_1}{2}\right)\Lambda \geq \frac{\tau a_1}{2}\Lambda.$$

Нетрудно видеть, что такое операторное неравенство выполняется для произвольных шагов сетки.

В результате сформулируем утверждение.

**Теорема 2.** Двухслойная разностная схема бегущего счета (16), (27), (28) при всех допустимых значениях коэффициента диффузии равномерно устойчива по начальным данным в энергетической норме  $\|\cdot\|_{A_0}$ , и для ее решения имеет место априорная оценка

$$\|\varphi^{n+1}\|_{A_0} \leq \|\varphi^n\|_{A_0}, \quad n = \overline{0, N}.$$

Поскольку разностная схема (24) при всех допустимых значениях коэффициента диффузии и компоненты вектора скорости вдоль координаты  $Ox$  может быть представлена в операторном виде (16), (27), (28), то из принципа замороженных коэффициентов следует равномерная устойчивость вспомогательной схемы бегущего счета (24) по начальным данным.

Отметим, что изложенная схема доказательства устойчивости полностью переносится на случай исследования устойчивости схем бегущего счета (25) и (26).

Для того чтобы рассмотреть свойство монотонности разностных схем бегущего счета (20), (21), запишем эти уравнения в индексных обозначениях, разрешенных относительно  $\varphi_{i,j,k}^{n+1}$ . Условия монотонности схем (20), (21) и, следова-

тельно, разностной схемы (24) будут выполнены, если  $\tau \leq \frac{2h_1^2}{2\max(a_1) - |u|h_1}$ ,  
 $h_1 < \frac{2\min(a_1)}{|u|}$ .



## Параллельные алгоритмы для разностных схем бегущего счета

Несмотря на то, что явные разностные схемы и схемы расщепления являются алгоритмами, построенными для увеличения быстродействия, при решении задач большого размера или на большом временном интервале актуально увеличение их быстродействия с использованием распараллеливания на распределенных системах.

Рассмотрим алгоритмы распараллеливания на системах с распределенной памятью для четырех разностных схем:

- 1) схемы бегущего счета с направленными разностями (13)–(15);
- 2) схемы бегущего счета с аппроксимацией конвективного члена центральной разностью (24)–(26);
- 3) схемы расщепления с решением одномерных уравнений методом Кранка–Николсона (результатирующие трехдиагональные СЛАУ при этом решаются методом прогонки);
- 4) двухшаговые явные схемы расщепления, описанные в [17].

Распределение данных по вычислительной системе здесь можно проводить следующим образом.

— Одномерно [18], когда изначально процесс  $r = \overline{0, P-1}$ , где  $P$  — количество процессов, обрабатывает блок элементов сетки

$$(x_i, y_j, z_k), \quad i = \overline{0, N_1}, \quad j = r \frac{N_2}{P}, (r+1) \frac{N_2}{P}, \quad k = \overline{0, N_3},$$

где  $\frac{N_{1,2,3}}{P}$  здесь и в дальнейшем — целое. После проведения вычислений по координате  $x$  происходит перераспределение данных так, чтобы каждый процесс имел возможность обрабатывать блок, построенный аналогичным образом разбиением по координате  $y$ , и далее аналогично — по координате  $z$ . В данном случае решение конкретного одномерного уравнения проводится без распараллеливания, а обмены данными между процессами являются глобальными.

— Двухмерно по схеме для попеременно-треугольного метода, описанной в [19]. Здесь в памяти процесса  $(r_1, r_2)$ ,  $r_1 = \overline{0, \sqrt{P}-1}$ ,  $r_2 = \overline{0, \sqrt{P}-1}$  (здесь и в дальнейшем считаем, что  $\sqrt{P}$ ,  $\frac{N_1}{\sqrt{P}}$  и  $\frac{N_2}{\sqrt{P}}$  — целое) содержится блок

$$(x_i, y_j, z_k), \quad i = r_1 \frac{N_1}{\sqrt{P}}, (r_1+1) \frac{N_1}{\sqrt{P}}, \quad j = r_2 \frac{N_2}{\sqrt{P}}, (r_2+1) \frac{N_2}{\sqrt{P}}, \quad k = \overline{0, N_3},$$

элементов сетки, который, в свою очередь, разбивается на блоки по координате  $z$  (при этом количество слоев  $g$  в блоке является параметром схемы распределения). Обработывая блок  $b$ , процесс  $(r_1, r_2)$ ,  $0 < r_{1,2} < \sqrt{P}-1$  ожидает получения значений функций в смежных узлах от процессов  $(r_1-1, r_2)$  и  $(r_1, r_2-1)$ , производит необходимые вычисления одновременно по трем координатам и отправляет значения в смежных узлах процессам  $(r_1+1, r_2)$  и  $(r_1, r_2+1)$ . В случае  $r_{1,2} = 0$  или  $r_{1,2} = \sqrt{P}-1$  часть обменов не проводится. Подобная организация вычислительного процесса применима только в случае, когда конкретные одномерные уравнения решаются явными одношаговыми схемами, или задача в целом решается попеременно-треугольными схемами расщепления.

— Трехмерно по красно-черной схеме [18], когда сетка разбивается на  $P^3$  блоков и каждый процесс последовательно обрабатывает  $P^2$  блоков, локально

обмениваясь данными со смежными по рангу процессами. Данные при этом разбиваются с наложением, значения функций в граничных узлах блоков содержатся в памяти двух процессов и синхронизируются при необходимости.

Вычислительная сложность последовательных алгоритмов имеет порядок  $O(N_1N_2N_3)$ . При одномерной и трехмерной схемах распределения выполнение арифметических операций распараллеливается линейно. В двухмерной схеме не все вычислительные ресурсы задействуются, в результате ускорение нелинейно.

Основное влияние на масштабируемость алгоритмов при этом имеет количество и объем операций обмена данными.

В случае одномерной схемы распределения время, тратящееся одним процессом на обмен данными, при допущении линейной зависимости времени обмена от объема данных и  $N_1 = N_2 = N_3 = N$  будет равняться

$$T_1(P) = 3(P-1) \left( \frac{N^3}{P} k_s + L_s \right),$$

где  $k_s$  и  $L_s$  — параметры линейной зависимости.

При двухмерной схеме распределения, каждый процесс будет выполнять  $4 \frac{N}{g}$  операции обмена значениями в  $\frac{gN}{\sqrt{P}}$  элементах сетки. Оценка общего времени обменов при этом будет

$$T_2(P, g) = 4 \frac{N}{g} L_s + \frac{N^2}{\sqrt{P}} k_s.$$

Для трехмерной схемы время обменов будет равняться

$$T_3(P) = 3(P-1) \left( \frac{N^2}{P} k_s + L_s \right).$$

Вышеприведенные оценки позволяют сделать вывод о низкой эффективности схемы с одномерным распределением данных. Быстродействие двухмерной и трехмерной схем имеет одинаковый порядок по  $N$ , однако схема с двухмерным распределением имеет лучший порядок по  $P$  и соответственно лучшую масштабируемость.

**Результаты вычислительных экспериментов.** Уравнение (1) решалось на кластере СКИТ-3 Института кибернетики НАНУ в области  $\bar{G}$  на сетке  $\bar{\omega}_h$  с количеством узлов  $300 \times 300 \times 300$  при таких данных:

$$l_1 = l_2 = l_3 = 20, \quad \tau = 0,01, \quad \sigma = 0, \quad f = 0, \quad \mathbf{V} = (1,0, 0,5, 0,75).$$

Начальное и граничное условия порождены явным решением краевой задачи

$$C(x, y, z, t) = e^{-4\mu_1 t} \sin(2(x - u_1 t)) + e^{-4\mu_2 t} \sin(2(y - u_2 t)) + e^{-4\mu_3 t} \sin(2(z - u_3 t)),$$

где  $u_1 = 1,0, u_2 = 0,5, u_3 = 0,75, \mu_1 = 0,1, \mu_2 = 0,2, \mu_3 = 0,05$ .

Производилось решение задачи на десяти шагах по времени. Среднее быстродействие параллельных алгоритмов при решении вышеописанной задачи для одного шага по времени приведено в таблице. Отметим, что схема с аппроксимацией конвективного члена центральной разностью имеет ту же вычислительную сложность, что и схема с направленными разностями, поэтому не рассматривалась

при тестировании быстродействия алгоритмов. Оптимальное быстродействие при использовании двухмерной схемы распределения было получено при  $g = N/P$ .

Таблица

Количество процессов	Время решения, мс					
	Схема с направленными разностями			Схема Кранка–Николсона		Явная попеременно-треугольная схема расщепления
	Одномерное распределение	Двухмерное распределение	Трехмерное распределение	Одномерное распределение	Трехмерное распределение	Двухмерное распределение
1	1290	1290	1290	4650	4650	720
2	1650	—	890	4820	4220	—
4	1670	810	700	5120	4250	560
9	1550	560	650	3700	3300	500
12	1430	—	700	3240	3080	—
16	1210	490	770	3170	3110	390

Быстродействие параллельных алгоритмов с одномерным и трехмерным распределением для схемы с направленными разностями представлено на рис. 1. Глобальность обменов данными в схеме с одномерным распределением приводит в данном случае к тому, что ускорение работы не наблюдается даже при задействовании большого количества вычислительных ресурсов. В случае с трехмерным распределением количество процессов, при котором достигалось минимальное время решения, равнялось 9. Малая вычислительная сложность алгоритма является причиной того, что уже при небольшом количестве процессов увеличение времени, тратящегося на обмен данными, приводит к замедлению его работы.

Ускорение, достигаемое при использовании вышеописанных алгоритмов, представлено на рис. 2. Полученные результаты показывают высокую масштабируемость наиболее медленной из исследуемых схемы Кранка–Николсона независимо от организации распределения данных по системе. Алгоритмы с использованием двухмерной схемы распределения данных также показывают большое ускорение, которое, однако, падает для наиболее быстрой из рассматриваемых схемы 4.

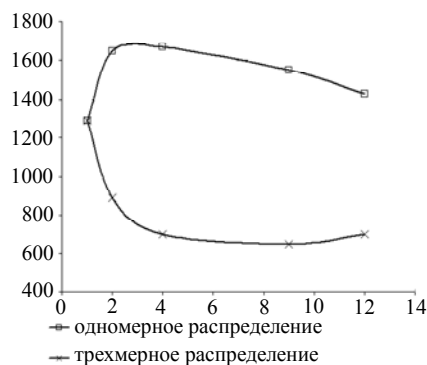


Рис. 1

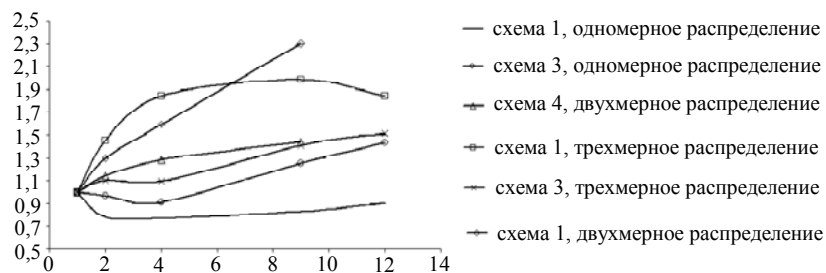


Рис. 2

## Заключення

В настоящей статье предложен подход для численного решения многомерных нестационарных уравнений конвективной диффузии, использующий идею расщепления и реализацию полученных одномерных разностных схем с помощью явных схем бегущего счета. Исследованы вопросы построения схем расщепления, аппроксимации, устойчивости и монотонности исследуемых разностных схем с явной реализацией вычислений. Проанализированы три схемы распределения данных по вычислительной системе применительно к разностным схемам расщепления, получены теоретические оценки быстродействия и проведены вычислительные эксперименты. Показано, что одномерная схема распределения слоями ячеек сетки неэффективна для рассматриваемых задач. Схема с красно-черным разбиением сетки на блоки по трем координатам показала существенно большее ускорение по сравнению с одномерной схемой, однако масштабируемость ее сравнительно низка — минимальное время работы было достигнуто с помощью девяти процессорных ядер. Использование шаблона распределения данных с разбиением по двум координатам применяемого при распараллеливании попеременно-треугольных схем показало наибольшее быстродействие и масштабируемость, однако для покоординатных схем расщепления его применимость ограничена одношаговыми схемами.

Отметим также возможность использования в рамках одного узла распределенной системы таких средств параллельных вычислений, как многопоточность и графические процессоры. Однако в свете полученных результатов относительно масштабируемости рассматриваемых алгоритмов эффективность дополнительного ускорения в пределах одного узла и его влияние на масштабируемость требует дальнейшего изучения.

*A.V. Gladky, V.O. Bohaienko*

### ДОСЛІДЖЕННЯ ПАРАЛЕЛЬНИХ АЛГОРИТМІВ ДЛЯ ЗАДАЧ КОНВЕКЦІЇ–ДИФУЗІЇ НА ОСНОВІ СХЕМ РОЗЩЕПЛЕННЯ

Для розв'язання тривимірного нестационарного рівняння конвективної дифузії запропоновано підхід на основі методики геометричного розщеплення з подальшим розв'язанням отриманих одновимірних задач за допомогою різницевих схем біжучого розрахунку. Для запропонованих різницевих схем розщеплення досліджено питання апроксимації, стійкості та монотонності. Досліджено три схеми розподілу даних при реалізації алгоритмів біжучого розрахунку на кластерних системах. Отримано теоретичні оцінки їх швидкодії, що порівнювались з результатами обчислювальних експериментів.

*A.V. Gladky, V.A. Bohaienko*

### A STUDY OF PARALLEL ALGORITHMS FOR SOLVING CONVECTION–DIFFUSION PROBLEMS USING SPLITTING SCHEMES

An approach on the base of geometric splitting method with further solution of obtained one-dimensional problems using running finite difference schemes has been proposed for solving three-dimensional unsteady convection-diffusion equation. Approximation, stability and monotony have been studied for proposed splitting finite difference schemes. Three data partitioning patterns used in running schemes implementation on cluster systems have been analysed. Theoretical estimations of their performance compared with computation experiments results have been obtained.

1. Згуровский М.З., Скопецкий В.В., Хруц В.К., Беляев Н.Н. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде. — Киев : Наук. думка, 1997. — 368 с.
2. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. — М. : Наука, 1982. — 320 с.
3. Алоян А.Е. Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. — М. : Наука, 2008. — 415 с.
4. Гладкий А.В., Сергієнко І.В., Скопецкий В.В., Гладка Ю.А. Основы математичного моделювання в екології. — Київ : НТУУ «КПІ», 2009. — 240 с.
5. Parra-Guevara D., Skiba Yu.N. On optimal solution of an inverse air pollution problem: Theory and numerical approach // Mathematical and Computer Modelling. — 2006. — **43**. — P. 766–778.
6. Parra-Guevara D., Skiba Yu.N. Industrial pollution transport. Part 1. Formulation of the problem and air pollution estimates // Environmental Modeling & Assessment. — 2000. — **5**. — P. 169–175.
7. Parra-Guevara D. Skiba Yu.N. Industrial pollution transport. Part 2. Control of industrial emissions // Ibid. — 2000. — **5**. — P. 177–184.
8. Skiba Yu.N., Parra-Guevara D., Belitskaya V.D. Air quality assessment and control of emission rates // Environmental monitoring and assessment. — 2005. — **111**. — P. 89–112.
9. Dang Q., Ehrhardt M. Adequate numerical solution of air pollution problems by positive difference schemes on unbounded domains // Math. Comput. Modelling. — 2006. — **44**. — P. 834–856.
10. Гладкий А.В. Об исследовании алгоритмов расщепления в задачах конвекции-диффузии // Кибернетика и системный анализ. — 2014. — № 4. — С. 76–88.
11. Грищенко А.Е., Марцафей А.С. Об одном двухшаговом алгоритме расщепления в задачах теплопереноса // Там же. — 2011. — № 6. — С. 125–131.
12. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. — М. : Эдиториал УРСС, 2004. — 248 с.
13. Марчук Г.И. Методы расщепления. — М. : Наука, 1988. — 264 с.
14. Саульев В.К. Об одном способе численного интегрирования уравнений диффузии // ДАН. — 1957. — **115**, № 6. — С. 1077–1080.
15. Самарский А.А., Гулин А.В. Устойчивость разностных схем. — М. : Наука, 1973. — 416 с.
16. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы математической физики. — М. : Научный мир, 2003. — 316 с.
17. Гладкий А.В., Благовещенская Т.Ю., Богаенко В.А. Алгоритмы параллельной реализации методов расщепления в задачах переноса загрязнений в атмосфере // Международный научно-технический журнал «Проблемы управления и информатики». — 2014. — № 5. — С. 134–146.
18. Булавацкий В.М., Скопецкий В.В., Богаенко В.А. Параллельный алгоритм расчета фильтрационно-конвективной диффузии загрязнений из водоносных горизонтов // УСиМ. — 2008. — № 5. — С. 18–23.
19. Скопецкий В.В., Богаенко В.А. Моделирование прямых и обратных задач распространения загрязнений в воздушной среде с помощью кластерной системы СКИТ // Там же. — 2007. — № 5. — С. 86–92.

Получено 11.07.2016