ДОПОВІДІ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

7 • 2011

ІНФОРМАТИКА ТА КІБЕРНЕТИКА

УДК 519.633

О. Ю. Грищенко, А. С. Марцафей, В. С. Федорова

Розпаралелювання різницевих схем на основі ДС-алгоритму

(Представлено академіком НАН України Я. М. Григоренком)

Запропоновано новий алгоритм розпаралелювання у чисельному моделюванні. Він базується на методі розщеплення за просторовими змінними та ДС-алгоритмі і є ефективним при моделюванні фізичних процесів, що описуються початково-крайовими задачами для систем лінійних і нелінійних параболічних рівнянь другого порядку при виконанні закону збереження. Алгоритм дозволяє уникнути процедури розв'язування систем алгебраїчних різницевих рівнянь високого порядку. Доведено сумарну апроксимацію поставленої задачі та безумовну стійкість алгоритму.

Аналізуючи чисельні методи розв'язування початково-крайових задач, слід зауважити, що вимоги до вибору алгоритмів їхньої реалізації в класичних послідовних підходах і в паралельних процесах обчислення дещо різні. Це, зокрема, стосується відношення до явних і неявних різницевих схем. При використанні векторних процесорів застосування явних різницевих схем має перевагу, оскільки ці схеми дозволяють одержати істотно векторизовані формули для обчислення розв'язку [1]. Недоліком явних схем є обмеження на величину часових кроків. При використанні неявних схем виникають додаткові затрати часу, пов'язані з нелокальною природою обчислювального алгоритму, оскільки, застосовуючи неявні схеми [2, 3] на кожному дробовому й цілому кроках, необхідно розв'язувати системи рівнянь. Зважаючи це, у даній роботі запропоновано алгоритм розпаралелювання, який базується на методі розщеплення за просторовими змінними та ДС-алгоритмі [4], який є ефективним при розв'язуванні початково-крайових задач математичної фізики для рівнянь другого порядку без мішаних похідних, зокрема, для задач тепломасоперенесення. Запропонований алгоритм дозволяє уникнути процедури розв'язування системи рівнянь, сумарно апроксимує поставлену задачу за часом і є безумовно стійким.

Постановка початково-крайової задачі й ДС-алгоритм її розв'язування. В області $Q = \{\Omega \times (0 < t < T)\}$, $\Omega = \{(x_1, x_2)\colon 0 < x_1 < 1,\ 0 < x_2 < 1\}$ розглянемо процес перенесення, який у наближенні нестискуваного середовища моделюється системою рівнянь

$$\frac{\partial u}{\partial t} + C(b)u - \Lambda u - f = 0, \tag{1}$$

$$\sum_{\alpha=1}^{2}\frac{\partial b_\alpha}{\partial x_\alpha}=0 \qquad (2)$$

при заданих початкових і граничних умовах

$$u|_{t=0}=u^0(x), \qquad x\in\Omega; \qquad u|_{\partial\Omega}=g(x,t), \qquad x\in\partial\Omega,$$

де $\vec{b}=(b_1,b_2)$ — вектор швидкості руху середовища,

$$C(b)=C_1(b)+C_2(b)=\sum_{\alpha=1}^{2}b_\alpha(x)\frac{\partial}{\partial x_\alpha}, \qquad \Lambda=(\Lambda_1+\Lambda_2)=\sum_{\alpha=1}^{2}\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(B_\alpha(x)\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\right), \qquad (3)$$

$B_\alpha(x)\geqslant 0$, а $b_\alpha=b_\alpha(x)$ для всіх $(\alpha=\overline{1,2})$ — неперервно-диференційовні за своїми змінними.

При виконанні умови (2) оператори

$$C^1(b)u=\vec{b}\,\mathrm{grad}\,u=\sum_{\alpha=1}^{2}b_\alpha(x)\frac{\partial u}{\partial x_\alpha} \qquad \text{та} \qquad C^2(b)u=\mathrm{div}(\vec{b}u)=\sum_{\alpha=1}^{2}\frac{\partial(b_\alpha u)}{\partial x_\alpha}$$

еквівалентні [5]. Якщо ж $b(x)=0$ або $\omega(x)=0$ при $x\in\partial\Omega$, то з умови (2) випливає, що $(C^1(b)\omega,\omega)=0$ у гільбертовому просторі $L_2(\Omega)$. Отже, оператори $C^1(b)$ та $C^2(b)$ — кососиметричні. У випадку, коли оператор конвективного перенесення моделюється рівністю

$$C=C^0=\frac{1}{2}\left(\sum_{\alpha=1}^{2}b_\alpha(x)\frac{\partial u}{\partial x_\alpha}+\sum_{\alpha=1}^{2}\frac{\partial(b_\alpha(x))}{\partial x_\alpha}\right), \qquad (4)$$

то $(C\omega,\omega)=0$ навіть якщо умова (2) не виконується.

Для побудови різницевої схеми в області Ω введемо рівномірну сітку $\omega_{\tau h}=\{x_{1,i},x_{2,j},t_n: x_{1,i}=ih_1; x_{2,j}=jh_2; t_n=n\tau; i=\overline{1,m_1}; j=\overline{1,m_2}; h_km_k=1; (k=1,2); \tau>0\}$, сіткові функції $y_{ij}^n=u(x_i,y_j,t_n)$, $f_{ij}^n=f(x_{1,i},y_{2,j},t_n)$ та різницеві оператори

$$y_{\overset{0}{x}}=\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2h}=\frac{du}{dx}+O(h^2), \qquad y_{\overline{x}}=\frac{y_i-y_{i-1}}{h}=\frac{du}{dx}+O(h),$$

$$y_x=\frac{y_{i+1}-y_i}{h}=\frac{du}{dx}+O(h), \qquad \Lambda_{h\alpha}y=(a_\alpha y_{\overline{x}\alpha})_{x_\alpha}=-\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(B_{\alpha\alpha}\frac{\partial u}{\partial x_\alpha}\right)+O(h^2),$$

де $a_\alpha=B_\alpha(x_\alpha-0{,}5h_\alpha)$, а оператор конвективного перенесення може бути записаний у одній із кососиметричних форм:

$$C(b)y=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{2}((b_\alpha(x)y)_{x_\alpha{}^0}+b_\alpha(x)y_{\overset{0}{x}_\alpha})+O(h^2), \qquad (5)$$

$$C(b)y=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{2}((b_\alpha^-(x)y)_{x_\alpha}+b_\alpha^+(x)y_{\overline{x}_\alpha}+(b_\alpha^+(x)y)_{\overline{x}_\alpha}+b_\alpha^-(x)y_{x_\alpha})+O(h) \qquad (6)$$

при

$$b_\alpha^+(x)=\frac{1}{2}(b_\alpha(x)+|b_\alpha(x)|)\geqslant 0; \qquad b_\alpha^-(x)=\frac{1}{2}(b_\alpha(x)-|b_\alpha(x)|)\leqslant 0; \qquad \alpha=1,2.$$

Для побудови розв'язку поставленої задачі використаємо ДС-алгоритм [4, 6]. Введену сіткову множину $\omega_{\tau h}$ розділимо на дві підмножини $\Omega_{\tau h}^{(1,n)}$ й $\Omega_{\tau h}^{(2,n)}$. Елементами першої будемо називати точки $(x_{1,i}, x_{2,j}, t_n)$ такі, що сума індексів $s = i + j + n$ — парна, інші точки віднесемо до другої підмножини. Вважатимемо, що розв'язком задачі є функція, обчислена через часовий крок 2τ, який має дві складові: непарний півкрок із номером $(2n+1)$ і парний із номером $(2n+2)$. На часовому шарі $(2n+1)$ обчислюються спочатку значення y_{ij}^{2n+1} у всіх точках $\Omega_{\tau h}^{(1,2n+1)}$ за явними різницевими формулами

$$\frac{y_{ij}^{2n+1} - y_{ij}^{2n}}{\tau} = -C(b)y_{ij}^{2n} + \Lambda_h y_{ij}^{2n} - f_{ij}^{2n+1}, \tag{7}$$

а потім у точках $\Omega_{\tau h}^{(2,2n+1)}$ — за неявними

$$\frac{y_{ij}^{2n+1} - y_{ij}^{2n}}{\tau} = -C(b)y_{ij}^{2n+1} + \Lambda_h y_{ij}^{2n+1} - f_{ij}^{2n+1}. \tag{8}$$

На шарі $(2n+2)$ знаходимо розв'язок спочатку у вузлах $\Omega_{\tau h}^{(1,2n+2)}$

$$\frac{y_{ij}^{2n+2} - y_{ij}^{2n+1}}{\tau} = -C(b)y_{ij}^{2n+1} + \Lambda_h y_{ij}^{2n+1} - f_{ij}^{2n+1}, \tag{9}$$

після чого в точках $\Omega_{\tau h}^{(2,2n+2)}$ за формулою

$$\frac{y_{ij}^{2n+2} - y_{ij}^{2n+1}}{\tau} = -C(b)y_{ij}^{2n+2} + \Lambda_h y_{ij}^{2n+2} - f_{ij}^{2n+1}. \tag{10}$$

Розв'язком задачі на часовому проміжку $[2n\tau, (2n+2)\tau]$ є значення y_{ij}^{2n+2}. Алгоритм (7), (8) є безумовно стійким [6] і дозволяє обчислювати шукану функцію у всіх вузлах сіткової області за явною розрахунковою схемою з похибкою апроксимації $O(\tau^2 + h^2)$, якщо $C(b)$ визначено за формулою (5), або $O(\tau^2 + h)$, якщо $C(b)$ апроксимується формулою (6).

Схема розщеплення за просторовими напрямками, побудована на основі ДС-алгоритму. При розв'язуванні багатовимірних задач алгоритм розщеплення ґрунтується на поданні операторів фізичних процесів у вигляді суми одновимірних операторів конвекції та дифузії [3, 7]

$$C(b)u = \sum_{\alpha=1}^{2} C_\alpha(b)u, \qquad \Lambda u = \sum_{\alpha=1}^{2} \Lambda_\alpha u. \tag{11}$$

Нижні індекси $\alpha = 1, 2$ біля операторів указують напрямок їхньої дії вздовж просторових координат x_1 та x_2.

Введемо вектори $\vec{\widetilde{\widetilde{U}}}^{2n}(j_0) = \{\widetilde{y}_{ij_0}^{2n}\}^T|_{i=1}^{m_1}$, $j_0 = \overline{1, m_2}$ та $\vec{\widetilde{\widetilde{V}}}^{2n}(i_0) = \{\widetilde{\widetilde{y}}_{i_0 j}^{2n}\}|_{j=1}^{m_2}$, $i_0 = \overline{1, m_1}$, і оператори $L_\alpha = C_\alpha - \Lambda_\alpha$, $\alpha = 1, 2$, та функції $\phi_{ij}^n = f_{ij}^n$. Оскільки значення розв'язку різницевої задачі на часовому кроці $2n$ відоме і $u_{ij}^{2n} = \widetilde{u}_{ij}^{2n} = \widetilde{\widetilde{u}}_{ij}^{2n}$, то обчислення компонент векторів $\vec{\widetilde{U}}^{2n+2}(j_0)$ та $\vec{\widetilde{\widetilde{V}}}^{2n+2}(i_0)$ можна проводити на $m_1 + m_2$ процесорах одночасно за формулами одновимірного ДС-алгоритму:

$$\frac{\widetilde{y}_{ij_0}^{2n+1} - y_{ij_0}^{2n}}{\tau} + L_1 y_{ij_0}^{2n} = \phi_{ij_0}^{2n+1}, \qquad (x_{1,i}, x_{2,j_0}, t_{2n+1}) \in \Omega_{\tau h}^{(1,2n+1)}, \tag{12}$$

$$\frac{\widetilde{y}_{ij_0}^{2n+1} - y_{ij_0}^{2n}}{\tau} + L_1\widetilde{y}_{ij_0}^{2n+1} = \phi_{ij_0}^{2n+1}, \qquad (x_{1,i}, x_{2,j_0}, t_{2n+1}) \in \Omega_{\tau h}^{(2,2n+1)}, \tag{13}$$

$$\frac{\widetilde{y}_{ij_0}^{2n+2} - \widetilde{y}_{ij_0}^{2n+1}}{\tau} + L_1\widetilde{y}_{ij_0}^{2n+1} = \phi_{ij_0}^{2n+1}, \qquad (x_{1,i}, x_{2,j_0}, t_{2n+2}) \in \Omega_{\tau h}^{(1,2n+2)}, \tag{14}$$

$$\frac{\widetilde{y}_{ij_0}^{2n+2} - \widetilde{y}_{ij_0}^{2n+1}}{\tau} + L_1\widetilde{y}_{ij_0}^{2n+2} = \phi_{ij_0}^{2n+1}, \qquad (x_{1,i}, x_{2,j_0}, t_{2n+2}) \in \Omega_{\tau h}^{(2,2n+2)} \tag{15}$$

при кожному фіксованому $j_0 = \overline{1, m_2}$ та

$$\frac{\widetilde{\widetilde{y}}_{i_0j}^{2n+1} - y_{i_0j}^{2n}}{\tau} + L_2 y_{i_0j}^{2n} = \phi_{i_0j}^{2n+1}, \qquad (x_{1,i_0}, x_{2,j}, t_{2n+1}) \in \Omega_{\tau h}^{(1,2n+1)}, \tag{16}$$

$$\frac{\widetilde{\widetilde{y}}_{i_0j}^{2n+1} - y_{i_0j}^{2n}}{\tau} + L_2\widetilde{\widetilde{y}}_{i_0j}^{2n+1} = \phi_{i_0j}^{2n+1}, \qquad (x_{1,i_0}, x_{2,j}, t_{2n+1}) \in \Omega_{\tau h}^{(2,2n+1)}, \tag{17}$$

$$\frac{\widetilde{\widetilde{y}}_{i_0j}^{2n+2} - \widetilde{\widetilde{y}}_{i_0j}^{2n+1}}{\tau} + L_2\widetilde{\widetilde{y}}_{i_0j}^{2n+1} = \phi_{i_0j}^{2n+1}, \qquad (x_{1,i_0}, x_{2,j}, t_{2n+2}) \in \Omega_{\tau h}^{(1,2n+2)}, \tag{18}$$

$$\frac{\widetilde{\widetilde{y}}_{i_0j}^{2n+2} - \widetilde{\widetilde{y}}_{i_0j}^{2n+1}}{\tau} + L_2\widetilde{\widetilde{y}}_{i_0j}^{2n+2} = \phi_{i_0j}^{2n+1}, \qquad (x_{1,i_0}, x_{2,j}, t_{2n+2}) \in \Omega_{\tau h}^{(2,2n+2)} \tag{19}$$

при кожному фіксованому $i_0 = \overline{1, m_1}$.

Зауважимо, що часовий проміжок $[2n\tau, (2n+2)\tau]$ формально можна привести до проміжку довжини $\tau' = 2\tau$ й записати формули (12)–(19) як формули дробових кроків. Але при такому записі ускладнюється формальне визначення сіткових множин $\Omega_{\tau h}^{(1,n)}$ та $\Omega_{\tau h}^{(2,n)}$.

Елементи масиву $A = (1/2)(A_1 + A_2)$, де A_1 та A_2 — масиви розмірності $m_1 \times m_2$, утворені значеннями $\widetilde{y}_{i,j}^{2n+2}$ та $\widetilde{\widetilde{y}}_{i,j}^{2n+2}$, тобто

$$y_{i,j}^{2n+2} = \frac{1}{2}\Big(\widetilde{y}_{i,j}^{2n+2} + \widetilde{\widetilde{y}}_{i,j}^{2n+2}\Big) \tag{20}$$

приймаються за розв'язок різницевої задачі, яка апроксимує задачу (1), (2) на часовому кроці $2n+2$.

Порядок сумарної апроксимації та стійкість ДС-алгоритму розщеплення. Очевидно, що жодна окрема різницева схема (12)–(19) алгоритму розщеплення не апроксимує поставлену задачу (1), (2). Але при послідовному їх виконанні та використанні (20) алгоритм має сумарну апроксимацію.

Теорема. *ДС-алгоритм* (12)–(20) *сумарно апроксимує систему* (1), (2) *і безумовно стійкий.*

Для доведення сумарної апроксимації проведемо низку простих перетворень в (12)–(20) і одержимо:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + C(b)u + \Lambda u - f - \left(\frac{y_{ij}^{2n+2} - y_{ij}^{2n}}{2\tau} + L_1\widetilde{y}_{ij}^{2n+1} + L_2\widetilde{\widetilde{y}}_{ij}^{2n+1} - \phi_{i,j}^{2n+1}\right) = O(\tau + h^m).$$

Тобто наведений алгоритм сумарно апроксимує рівняння (1) з похибкою $O(\tau + h^m)$, де $m = 1$, якщо оператор $C(b)u$ апроксимуємо за формулою (6), або $m = 2$ — якщо за формулою (5).

Оскільки $L_\alpha = C_\alpha - \Lambda_\alpha$, $(\alpha = 1, 2)$, де C_α — кососиметричні, а $-\Lambda_\alpha$ додатно визначені оператори, то $(L_\alpha u, u) \geqslant 0$. Враховуючи переставну властивість операторів [6] $(E - 2\tau L_\alpha)$ та $(E + 2\tau L_\alpha)^{-1}$ і використовуючи пари формул (12) та (15), (13) та (14), а також (16) та (19), (17) і (18), одержимо:

$$\widetilde{y}^{2n+2} = G_1 y^{2n} \qquad \text{та} \qquad \widetilde{\widetilde{y}}^{2n+2} = G_2 y^{2n},$$

де $G_\alpha = (E - 2\tau L_\alpha)(E + 2\tau L_\alpha)^{-1}$ $(\alpha = 1, 2)$ — оператори переходу з часового шару $2n$ на шар $2n+2$. Зважаючи на наведені вище властивості операторів $L_\alpha = C_\alpha - \Lambda_\alpha$ і обчисливши норму оператора за формулою $\|G_\alpha\| = \sup\limits_{\phi \neq 0} \dfrac{(G_\alpha \phi, G_\alpha \phi)}{(\phi, \phi)}$, одержуємо оцінку $\|G_\alpha\| \leqslant q < 1$. Тоді з (20) випливає

$$\|y^{2n+2}\| \leqslant \frac{1}{2}(\|\widetilde{y}^{2n+2}\| + \|\widetilde{\widetilde{y}}^{2n+2}\|) = \frac{1}{2}(\|G_1\|\|y^{2n}\| + \|G_2\|\|y^{2n}\|) =$$
$$= \frac{1}{2}(\|G_1\| + \|G_2\|)\|y^{2n}\| \leqslant \frac{1}{2}(q_1^n + q_2^n)\|y^0\| \leqslant \|y^0\|.$$

Доведення стійкості з урахуванням правої частини аналогічне доведенню, наведеному в роботі [6].

1. *Хіміч О. М., Полянко В. В., Попов О. В., Рудич О. В.* Використання багатопроцесорних комп'ютерів для розв'язування задач розрахунку міцності конструкцій // Праці міжнар. симп. "Питання оптимізації обчислень" (ПОО-XXXV). – Київ, 2009. – Т. 2. – С. 382–387.
2. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. – Москва: Наука, 1989. – 608 с.
3. *Марчук Г. И.* Методы расщепления. – Москва: Наука, 1988. – 264 с.
4. *Грищенко О. Ю., Ляшко С. І., Молдцов О. І.* Чисельне моделювання процесів релаксаційної газової динаміки. – Київ: ІЗМН Віпол, 1997. – 222 с.
5. *Самарский А. А., Вабищевич П. Н.* Вычислительная теплопередача. – Москва: УРСС, 2003. – 784 с.
6. *Грищенко О. Ю.* ДС-різницеві алгоритми розв'язування крайових задач для параболічних рівнянь другого порядку // Вісн. Київ. ун-ту. Сер. Фіз.-мат. науки. – 2000. – Вип. 1. – С. 227–231.
7. *Ковеня В. М., Яненко Н. Н.* Методы расщепления в задачах газовой динамики. – Новосибирск: Наука, 1981. – 304 с.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 17.11.2010

O. Yu. Gryshchenko, A. S. Martsafei, V. S. Fedorova

Paralellization of difference schemes based on the DS-algorithm

We propose a new algorithm of parallelization of a numerical modeling. It is based on the method of splitting a spatial variable and the DS-algorithm and is effective at the modeling of physical processes which are described by the initial-boundary-value problems for systems of linear and nonlinear parabolic equations of the second order with a law of conservation. The algorithm allows one to avoid the procedure of solving the systems of algebraic difference equations of higher order. The overall approximation of the task and the unconditional stability of the algorithm are proved.