Универсальные параллельные алгоритмы с многоточечной высокоточной аппроксимацией граничных условий*

В.И. Паасонен
Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск

Описывается универсальная технология расчета краевых задач в кусочно-однородных областях декартовых или произвольных ортогональных криволинейных систем координат с расположением границ подобластей на координатных линиях. Метод базируется на применении компактных схем внутри однородных подобластей и односторонних многоточечных аппроксимаций потоков в граничных условиях.

Введение

Для численного решения краевых задач в неоднородных областях, составленных из однородных включений, одинаково ориентированных относительно системы координат, предлагается класс разностных методов, допускающих параллельную реализацию [1, 2]. Метод применим для любой криволинейной ортогональной системы координат, а также распространяется на задачи с декомпозицией сложных областей на подобласти [3] с постановкой в качестве «мягких» граничных условий на разрезах условий равенства левых и правых односторонних производных. Предлагаемый метод сформулирован также для решения основанных на разностном подходе задач интерполяции сплайнами [4], когда множество узлов интерполяции составляют подмножество более детальной сеточной области, а условия гладкого сопряжения элементов интерполирующей функции записываются как равенство многоточечных разностных аналогов производных слева и справа от узла интерполяции.

Многие дифференциальные уравнения в частных производных второго порядка в прямоугольных и криволинейных ортогональных координатных системах могут быть аппроксимированы с четвертым, а иногда и с шестым порядком относительно шагов пространственной сетки на компактном множестве узлов, не выступающем за пределы 3×3×…×3-точечного шаблона. При этом возникает проблема аппроксимации с адекватной точностью также и краевых условий. Это можно

* Работа поддержана грантом РФФИ № 11-01-00294-а и междисциплинарным интеграционным грантом № 103.

сделать аппроксимируя закон сохранения в балансной ячейке на основе интегральной постановки либо аппроксимируя разностное граничное условие «как есть» по аналогии с дифференциальной постановкой.

Для достижения универсальности и хорошей структурированности алгоритма наиболее удобно использовать односторонние аналоги первых производных в граничных условиях, взяв достаточное число узлов сетки в односторонних аппроксимациях потока. Этот способ одинаково подходит и для условий Неймана, и для условий третьего рода, и для условий равенства потоков на границах раздела различных сред. Такой симбиоз компактных схем и многоточечных аппроксимаций граничных условий, допускающий как обычную реализацию, так и применение параллельных технологий, впервые предложен в [1].

Суть метода. Предположим, что решается система разностных уравнений вида

$$a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} = F_i,\ 0 < i < N,\ i \neq i_k,\ k = 1,...,r-1$$

с внешними граничными условиями при $i = i_0 = 0$ и $i = i_r = N$

$$\mu_0 u_0 - \frac{\nu_0}{h_1}\sum_0^s \alpha_j u_j = \phi_0, \quad \mu_r u_N - \frac{\nu_r}{h_r}\sum_0^s \alpha_j u_{N-j} = \phi_r$$

и с внутренними граничными условиями

$$\frac{\lambda_k}{h_k}\sum_0^s (-\alpha_j) u_{i-j} = \frac{\lambda_{k+1}}{h_{k+1}}\sum_0^s \alpha_j u_{i+j}, \quad i = i_k, \quad k = 1,...,r-1.$$

Эта система представляет собой разностную аппроксимацию одномерной краевой задачи в слоистом пакете или одномерный фрагмент многомерной системы, полученный в результате ее расщепления на одномерные задачи. Будем предполагать, что коэффициенты многоточечных разностных аналогов потоков выбраны, исходя из максимально возможного порядка аппроксимации граничных условий.

Описываемый ниже алгоритм является обобщением метода распараллеливания прогонки [2] и отличается от него неоднородностью области и наличием «длинных» граничных условий s-го порядка точности. Обозначим пока неизвестные значения решения в узлах разбиения и на внешних границах через $w_k, (k = 0,...,r)$ и введем в каждом слое $\omega_k, = \{x_{k-1} \le x \le x_k\}$ локальную нумерацию узлов $m = 0,...,M,\ M = m_k$. Вектор решения y^k в слое ω_k будем отыскивать в виде специальной линейной комбинации

$$y^k = p^k w_{k-1} + q^k w_k + z^k$$

решений трех задач, где z^k – решение неоднородного уравнения с нулевыми граничными условиями

$$a_{i_k+m} z^k_{m-1} + b_{i_k+m} z^k_m + c_{i_k+m} z^k_{m+1} = F_{i_k+m},$$

а p^k, q^k – два независимых решения соответствующего однородного уравнения с различным образом нормированными (единица слева, а нуль справа, и наоборот) граничными условиями. Процесс их решения составляет содержание первого этапа алгоритма, причем его можно реализовать независимо или параллельно для каждого из r слоев пакета. Легко заметить, что наша линейная комбинация y^k трех вспомогательных решений удовлетворяет исходному неоднородному уравнению с «правильными» граничными условиями $y^k_0 = w_{k-1}$, $y^k_M = w_k$, в чем можно убедиться непосредственной подстановкой. Уравнения для вычисления значений решения w_k получаем, используя граничные соотношения на внешних и внутренних границах. Так, подставляя выражение решения y^1, соответствующее первому слою, в соотношение на левой границе, получим

$$\mu_0 w_0 - \frac{\nu_0}{h_1} \sum_0^s \alpha_j \, (p^1_j \, w_0 + q^1_j \, w_1 + z^1_j) = \phi_0.$$

Очевидно, это равенство представляет собой линейное уравнение для двух неизвестных значений w_0 и w_1 решения на границах первого слоя, коэффициенты которого легко устанавливаются приведением в нем подобных слагаемых. Из правого граничного условия аналогично устанавливается связь для двух неизвестных значений w_{r-1} и w_r на границах последнего слоя, а из соотношения на k-й границе раздела сред следует трехточечная связь для значений искомого решения на трех последовательно расположенных границах раздела сред.

Таким образом, на втором этапе вектор значений решения на границах слоев может быть определен из системы уравнений с трехдиагональной матрицей. Размерность этой системы, очевидно, постоянна и равна общему числу границ $r+1$ в слоистом пакете. Эта задача существенно отличается от задач первого этапа, так как ее размерность не зависит от степени детальности сетки. Тем не менее ее необходимо исследовать на предмет устойчивости, в чем нас убеждают известные примеры плохо обусловленных систем малой размерности. Такое доказательство проведено в [1] в случае кусочно-постоянных теплофизических характеристик. Показано, что при условии диагонального преобладания в трехточечной задаче Дирихле для каждого отдельного слоя трехточечная система, связывающая значения решения на границах слоев, также имеет диагональное преобладание, а этого достаточно для устойчивости.

Заметим, что в исходной разностной постановке устойчивость не является очевидной, так как размерность задачи растет неограниченно при стремлении шага сетки к нулю, а матрица не относится к хорошо исследованному классу. В изложенном же параллельном методе из общей задачи выделены потенциально бесконечномерные части в виде ряда независимых классических задач Дирихле с хорошими свойствами, в то время как вектор значений решения на границах раздела сред определяется устойчивым образом из линейной системы постоянной размерности, не зависящей от шага сетки.

Многомерные задачи. При решении многомерных задач рассматриваемого класса изложенный алгоритм представляет практический интерес, поскольку нет смысла решать параллельно каждую одномерную систему. Распараллеливать многомерную задачу целесообразно по подобластям той размерности, какую имеет исходная задача. Например, в плоском случае архитектура такого разбиения может представлять собой набор полос или клеток. При этом вдоль полос на плоскости (или брусков в пространстве), составленных из смежных подобластей, возникают задачи рассмотренного выше типа.

Для упрощения логики решения представляется целесообразным продолжить все участки границ подобластей до пересечений с внешними габаритами, преобразуя довольно произвольную область в область клетчатой структуры. В таком случае смежные клетки могут оказаться занятыми как различными, так и одинаковыми материалами. Тем не менее фиктивную границу между двумя подобластями с одинаковыми материалами удобнее воспринимать как полноценную границу раздела сред и не записывать в ней разностную схему, а формулировать приближенно равенство потоков, как описано выше. При одинаковых теплофизических характеристиках это условие по существу будет означать условие гладкости решения – равенство разностных аппроксимаций левой и правой производной, которое можно рассматривать как «мягкое» внутреннее граничное условие. Это обстоятельство позволяет расширить границы применимости описанного метода, включив в них задачи, решаемые с помощью декомпозиции области на подобласти [3]. Возможен также и смешанный тип задач – с неоднородностью и с декомпозицией. В этом случае область имеет и фиктивные и реальные границы, однако условия на них ставятся единообразно в форме приближенного равенства потоков через границу.

Алгоритм решения многомерной задачи на одном временном шаге осуществляется в четыре этапа. Первые два – это прогонки в двух направлениях по всем линиям сетки, кроме границ клеток. На третьем этапе из высокоточных одномерных граничных условий явно вычис-

ляется решение на сторонах клеток, исключая углы. На заключительном этапе вычисляется решение в углах всех клеток явно по специальным формулам замыкания [5, 6], которые записываются на шаблоне типа «большой крест» с s узлами в каждом направлении от центра креста. В настоящее время формулы замыкания построены в общем виде для любого порядка точности и для любой ортогональной криволинейной системы координат.

Заключительные замечания. Конкретизируем вид односторонних многоточечных разностных аппроксимаций первых производных, которые используются при записи разностных граничных условий. Аппроксимируем первую производную на равномерной сетке с шагом h, применяя одностороннюю разделенную разность с произвольным числом узлов

$$\frac{\Delta_s}{h}u(x)=\frac{1}{h}\sum_0^s \alpha_k u(x+kh).$$

Если коэффициенты α_k удовлетворяют линейной алгебраической системе уравнений

$$\sum_0^s \alpha_k\, k^l=\delta_{1l},\quad l=0,\dots,s,$$

(δ – символ Кронекера), то погрешность аппроксимации первой производной на достаточно гладких функциях составляет величину $O(h^s)$, причем ввиду линейной независимости строк матрицы системы это есть максимально возможный порядок аппроксимации. Коэффициенты многоточечной разности «вперед» вычисляются по правилу Крамера в явном виде

$$\alpha_k=\frac{(-1)^{k+1}}{k}C_s^k,\ k\neq 0,\qquad \alpha_0=-\sum_1^s \alpha_k,$$

где C_s^k – число сочетаний из s по k. Аналогично определяется разность «назад» порядка s.

Для практических целей особый интерес представляет случай $s=4$, когда внутри однородных подобластей применяются компактные схемы и ожидается четвертый порядок точности в целом. Случай $s=2$ также интересен как основа для применения любых схем второго порядка точности как альтернативы структурно более сложным балансным схемам сквозного счета.

Важнейшими положительными сторонами предлагаемой методики являются применимость параллельных технологий, универсальность и хорошая структурированность алгоритма на основе единого подхода

для различных типов граничных условий, для любых порядков аппроксимации граничных условий и для широкого класса задач.

Литература

1. **Паасонен В.И.** Сходимость параллельного алгоритма для компактных схем в неоднородных областях // Вычислительные технологии. – 2005. – Т. 10, № 3. – С. 81–89.
2. **Яненко Н.Н., Коновалов А.Н., Бугров А.Н., Шустов Г.В.** Об организации параллельных вычислений и распараллеливании прогонки // Численные методы механики сплошной среды. 1978. – Т. 9, № 7. – С. 136–139.
3. **Паасонен В.И.** Параллельные алгоритмы на основе мягких внутренних граничных условий // Вычислительные технологии. 2006. – Т. 11, ч. 2. – Специальный выпуск. – С. 21–27.
4. **Паасонен В.И.** Высокоточные методы построения гиперболических сплайнов // Вычислительные технологии. – 2007. – Т. 12, № 2. – С. 115–121.
5. **Паасонен В.И.** Формулы замыкания для компактных схем в неоднородных областях // Вычислительные технологии. – 2009. – Т. 14, № 4. – С. 93–99.
6. **Ичетовкин Д.А., Паасонен В.И.** Численное исследование высокоточных схем в областях клетчатой структуры // Вычислительные технологии. – 2010. – Т. 15, № 6. – С. 81–87.