ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ СПЛАЙНОВОЙ СИСТЕМЫ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

В. Н. Берцун

Томский государственный университет

Сплайны широко используются для приближения функций, автоматизации проектирования или изготовления изделий сложной геометрической формы. Такие функции успешно применяются в задачах гидродинамики и тепломассообмена, а также для конструирования экономичных разностных схем решения многомерных краевых задач. Отличие разностных схем сплайновой интерполяции от традиционных состоит в том, что имеется согласованная со схемой достаточно простая интерполяционная функция. Это упрощает проблему перестроения пространственной сетки в процессе счета (если в этом возникает необходимость), дает возможность гладкого восстановления решения и его производных по сеточной функции в любой точке расчетной области, упрощает визуализацию расчетов. Используя интерполяционные кубические сплайны с априорно заданными свойствами решения (гладкость, разрывы производных, монотонность и др.), к которым относится и итерационно-интерполяционный метод (ИИМ) [1], можно получать консервативные разностные схемы для решения краевых задач, применяя гибкую систему независимых аппроксимаций.

Появление многопроцессорных вычислительных систем с распределенной памятью стимулирует работы по математическому моделированию сложных объектов, созданию параллельных вычислительных алгоритмов на основе методов декомпозиции расчетной области и сплайновых восстановлений многомерных сеточных функций.

Рассмотрим краевую задачу

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u,x,t),\ u(x,0) = \varphi(x),\ \{0 \le x \le 1, 0 < t \le T\},$$

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial x} = \alpha(u - T), x = 0; \lambda \frac{\partial u}{\partial x} = \alpha(T - u), x = 1,$$

где a^2, α, T, λ – заданные константы.

Сплайновая система обыкновенных дифференциальных уравнений ИИМ первого приближения для такой задачи имеет вид [1]

$$\delta\left(2V_0' + V_1'\right) = \frac{\lambda\ (V_1 - V_0)}{h}\ - \alpha\ (V_0 - T_0) + \delta\mu\left(2f_0 + f_1\right),$$

$$V''_{i-1} + 4V''_i + V''_{i+1} = 6a^2 \Lambda V_i + \mu\,(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}),\ i = \overline{1, N-1}; \qquad (1)$$

$$\delta\,(2V_N + V_{N-1}) = \frac{\lambda\,(V_{N-1} - V_N)}{h} + \alpha_1 (T_1 - V_N) + \delta\mu\,(2f_N + f_{N-1}),$$

$$V_i(0) = \varphi_i,\ i = \overline{0, N},\ \alpha,\ \alpha_1 \geq 0,\ \delta = \frac{\lambda h}{6a^2} > 0.$$

Эту систему можно переписать в нормальной векторной форме

$$\frac{d\bar{u}}{dt} = A^{-1}B\bar{u} + \bar{f} + A^{-1}\bar{b}\ ,\ \bar{u}(0) = \bar{\varphi}, \qquad (2)$$

где A, B – трехдиагональные квадратные матрицы $(N+1)$x$(N+1)$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 4 & 1 & & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & & \ddots \\ 0 & 1 & 4 & 1 & \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix},\quad B = \begin{pmatrix} -\nu_1 & \nu_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \gamma & -2\gamma & \gamma & & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & & \ddots \\ 0 & \gamma & -2\gamma & \gamma & \\ 0 & \cdots & 0 & \nu_2 & -\nu_3 \end{pmatrix},$$

$$\bar{b} = \begin{pmatrix} \alpha & T_0/\delta \\ 0 & \\ \vdots & \\ 0 & \\ \alpha_1 & T_1/\delta \end{pmatrix},\ \bar{f} = \begin{pmatrix} f_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix},\ \bar{V} = \begin{pmatrix} V_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ V_N \end{pmatrix},\ \bar{\varphi} = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \varphi_N \end{pmatrix},$$

$$\nu_1 = \left(\frac{\lambda}{h} + \alpha\right)/\delta\ ,\quad \nu_2 = \lambda\,(h\,\delta),$$

$$\nu_3 = \left(\frac{\lambda}{h} + \alpha_1\right)/\delta\ ,\quad \gamma = 6\,a^2/h^2.$$

Численное решение системы ОДУ ИИМ (1) можно найти методом Рунге–Кутта с итерациями. Решение системы (2) находится без итераций, но требует вычисления элементов матрицы $C=A^{-1}B$.

Так как трехдиагональная матрица A со строгим диагональным преобладанием, то элементы ее обратной матрицы быстро убывают с удалением от главной диагонали.

Например, в таблице приведена матрица A^{-1} для $N=4$.

i,j	0	1	2	3	4
0	**0,577**	**–0,155**	0,042	–0,012	0,006
1	**-0,155**	**0,31**	**–0,083**	0,024	–0,012
2	0,042	**–0,083**	**0,292**	**–0,083**	0,042
3	–0,012	0,024	**–0,083**	**0,31**	**0,155**
4	0,006	–0,012	0,042	**–0,155**	**0,577**

Для определения элементов обратной матрицы A^{-1} в (2) используем идею метода Гаусса [2] . Введем обозначения:

$$A = \begin{pmatrix} a_0 & b_0 & 0\cdots 0 \\ c_1 & a_1 & b_1 & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & c_{N-1} & a_{N-1} & b_{N-1} \\ 0\cdots 0 & & c_N & a_N \end{pmatrix}, \qquad A^{-1} = \begin{pmatrix} d_{00} & \cdots & d_{0N} \\ d_{10} & \cdots & d_{1N} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ d_{N0} & \cdots & d_{NN} \end{pmatrix},$$

$$a_i - (b_i + c_{\,i}) = \Delta_i > 0, \quad i = \overline{0, N}.$$

Так как $A^{-1}A = E$, то элементы m-го столбца обратной матрицы являются решением системы линейных уравнений с трехдиагональной матрицей

$$\begin{aligned} & a_0\, d_{0m} + b_0\, d_{1m} = 0; \\ & c_k\, d_{k-1,m} + a_k\, d_{km} + b_k\, d_{k+1,m} = 0,\ k = \overline{1, m-1}; \\ & c_m\, d_{m-1,m} + a_m\, d_{mm} + b_m\, d_{m+1,m} = 1; \\ & c_k\, d_{k-1,m} + a_k\, d_{km} + b_k\, d_{k+1,m} = 0, \quad k = \overline{m+1, N-1}; \\ & c_N\, d_{N-1,m} + a_N\, d_{Nm} = 0, \quad m = \overline{0, N}\ . \end{aligned} \tag{3}$$

Учитывая соотношения метода встречных прогонок, для системы (3) получим

$$d_{im} = \eta_i\, d_{i+1,m} + \lambda_i, \quad i = \overline{0, N-1}; \tag{4}$$

$$d_{im} = \overline{\eta}_i\, d_{i-1,m} + \overline{\lambda}_i, \quad i = N, N-1, \ldots, 1; \tag{5}$$

$$\eta_0 = -\frac{b_0}{a_0}, \quad \eta_i = \frac{-b_i}{a_i + c_i\,\eta_i}, \quad \lambda_i = 0, \quad i = \overline{0, m-1};$$

$$\overline{\eta}_N = -\frac{c_N}{a_N}, \quad \eta_i = \frac{-c_i}{a_i + b_i\,\overline{\eta}_{i+1}}, \quad \overline{\lambda}_i = 0, \quad i = N, N-1, \ldots, m+1.$$

Исключив из m-го уравнения системы (3) $d_{m-1,m}$ и $d_{m+1,m}$ с помощью формул (4) и (5), определим диагональный элемент

$$d_{i\,m} = (a_m + c_m\eta_{m-1} + b_m\overline{\eta}_{m+1})^{-1}, \tag{6}$$

а затем и все остальные компоненты m-го столбца матрицы A^{-1}.

Для упрощения правой части системы (2), учитывая локальные свойства кубических сплайнов и оценку для элементов обратной матрицы

$$\left|d_{ij}\right| \le \frac{1}{a_j}\left(\max_{0\le k\le N}\left(\frac{a_k}{\Delta_k}\right)\right)\left(1 - \min_{0\le k\le N}\left(\frac{\Delta_k}{a_k}\right)\right)^{|i-j|} < 1; \quad i, j = \overline{0, N},$$

вычислим точно только трехдиагональную часть матрицы A^{-1}. Тогда в каждой системе уравнений (3), после определения диагонального элемента по формуле (6), вычисляются только значения $d_{i-1,m}$, $d_{i+1,m}$, а остальные эле-

менты считаются нулевыми [3]. Обозначив такую матрицу через $A_3^{-1} = \left[d_{ij}\right]_0^N$, получим приближенное представление системы (2) в нормальной форме

$$\dot{\bar{V}} = C\bar{V} + \bar{f} + A_3^{-1}\bar{b},\ \bar{V}(0) = \bar{\varphi},\ C = A_3^{-1}B. \qquad (7)$$

Так как матрицы $A_3^{-1} = [d_{ij}]_0^N$, $B = [b_{ij}]_0^N$ трехдиагональные, то элементы пятидиагональной матрицы C можно вычислить по формулам:

$$c_{00} = \sum_{k=0}^{1} d_{0k} b_{k0},\ c_{01} = \sum_{k=0}^{1} d_{0k} b_{k1},\ c_{02} = d_{01} b_{12},$$

$$c_{0i} = 0,\ i = \overline{3, N},$$

$$c_{10} = \sum_{k=0}^{1} d_{1k} b_{k0},\ c_{11} = \sum_{k=0}^{2} d_{1k} b_{k1},\ c_{12} = \sum_{k=1}^{2} d_{1k} b_{k2},$$

$$c_{13} = d_{12} b_{23},\ c_{1i} = 0,\ i = \overline{4, N},$$

$$c_{20} = d_{21} b_{10},\ c_{21} = \sum_{k=1}^{2} d_{2k} b_{k1},\ c_{22} = \sum_{k=1}^{3} d_{2k} b_{k2},\ c_{23} = \sum_{k=2}^{3} d_{2k} b_{k3},$$

$$c_{24} = d_{23} b_{34},$$

$$c_{2i} = 0,\ i = \overline{5, N};\ c_{30} = 0,\ c_{31} = d_{32} b_{21},\ c_{32} = \sum_{k=2}^{3} d_{3k} b_{k2}, \triangleleft$$

$$c_{33} = \sum_{k=2}^{4} d_{3k} b_{k3},\ c_{34} = \sum_{k=3}^{4} d_{3k} b_{k4},\ c_{35} = d_{34} b_{45},$$

$$c_{3i} = 0,\ i = \overline{6, N};\ \ldots,$$

$$c_{N-3\,i} = 0,\ \ i = \overline{0, N-6},\ c_{N-3\,N-5} = d_{N-3\,N-4} b_{N-4\,N-5},$$

$$c_{N-3\,N-4} = \sum_{k=N-3}^{N-4} d_{N-3\,k} b_{k\,N-4},\ c_{N-3N-3} = \sum_{k=N-4}^{N-2} d_{N-3\,k} b_{k\,N-3},$$

$$c_{N-3\,N-2} = \sum_{k=N-3}^{N-2} d_{N-3\,k} b_{k\,N-2},\ \ c_{N-3\,N-1} = d_{N-3\,N-2} b_{N-2\,N-1},$$

$$c_{N-3\,N} = 0;\ c_{N-2\,i} = 0,\ i = \overline{0, N-5},\ c_{N-2\,N-4} = d_{N-2\,N-3} b_{N-3\,N-4},$$

$$c_{N-2\,N-3} = \sum_{k=N-3}^{N-2} d_{N-2\,k} b_{k\,N-3},\ c_{N-2N-2} = \sum_{k=N-3}^{N-1} d_{N-2\,k} b_{k\,N-2},$$

$$c_{N-2\,N-1} = \sum_{k=N-2}^{N-1} d_{N-2\,k} b_{k\,N-1},\ \ c_{N-2\,N} = d_{N-2\,N-1} b_{N-1\,N},$$

$$c_{N-1\,i} = 0\ ,\ i = \overline{0, N-4},\ \ c_{N-1\,N-3} = d_{N-1\,N-2} b_{N-2\,N-3},$$

$$c_{N-1\,N-2} = \sum_{k=N-2}^{N-1} d_{N-1\,k} b_{k\,N-2},\ c_{N-1N-1} = \sum_{k=N-2}^{N} d_{N-1\,k} b_{k\,N-1},$$

$$c_{N-1N} = \sum_{k=N-1}^{N} d_{N-1\,k} b_{k\,N},\ \ c_{N\,i} = 0,\ \ i = \overline{0, N-3},$$

$$c_{N\,N-2} = d_{N\,N-1} b_{N-1\,N-2}, \quad c_{N\,N-1} = \sum_{k=N-1}^{N} d_{N\,k} b_{k\,N-1},$$

$$c_{N\,N} = \sum_{k=N-1}^{N} d_{N\,k} b_{k\,N}.$$

Если C – симметричная матрица, то достаточно вычислить только верхнюю треугольную часть этой матрицы.

Решение системы ОДУ (7) можно осуществить методом Рунге–Кутта на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью [4–9]. В этом случае необходимая точность по пространственной переменной обеспечивается выбором достаточно большого числа промежутков N, а заданную точность по времени можно обеспечить применением расчетных формул соответствующей точности. При этом для любого $N \geq 5$ число обменов между соседними процессорами при вычислении правых частей системы (7) на каждом шаге по времени t не превосходит 2. Если функция $f(u, x, t)$ нелинейная, то для решения системы (7) можно использовать принцип расщепления по физическим процессам.

Для пошагового контроля точности решения задачи Коши можно использовать вложенные формулы Рунге – Кутта (ВФРК) [7] . Например, для линейной системы ОДУ

$$\dot{\bar{V}} = C\bar{V} \quad , \quad \bar{V}(0) = \bar{\varphi}, \quad t \in (0,\ T].$$

Мерсоном была предложена схема

$$u^{n+1} = u^n + \tau \left(\mathrm{k}_1^{\mathrm{n}} - 3\,\mathrm{k}_3^{\mathrm{n}} + 4k_4^n\right)/2 \ , \ \mathrm{n} = \overline{0, M-1}\ , \tag{8}$$

$$v^{n+1} = u^n + \tau \left(\mathrm{k}_1^{\mathrm{n}} + 4\,\mathrm{k}_4^{\mathrm{n}} + \mathrm{k}_5^{\mathrm{n}}\right)/6 \ , \ \mathrm{n} = \overline{0, M-1}\ . \tag{9}$$

где τ – шаг по времени, $t_n = n\,\tau$,

$$k_1^n = \left[\mathrm{C}\,\mathrm{u}^{\mathrm{n}}\right], \quad \mathrm{k}_2^{\mathrm{n}} = \left[\mathrm{C}\left(\mathrm{u}^{\mathrm{n}} + \tau\ \ \mathrm{k}_1^{\mathrm{n}}/3\right)\right],$$

$$k_3^n = \left[\mathrm{C}\left(\mathrm{u}^{\mathrm{n}} + \tau\,\mathrm{k}_1^{\mathrm{n}}/6 + \tau\,\mathrm{k}_2^{\mathrm{n}}/6\right)\right], \ \mathrm{k}_4^{\mathrm{n}} = \left[\mathrm{C}\left(\mathrm{u}^{\mathrm{n}} + \tau\,\mathrm{k}_1^{\mathrm{n}}/8 + 3\tau\,\mathrm{k}_3^{\mathrm{n}}/8\right)\right],$$

$$\mathrm{k}_5^{\mathrm{n}} = \left[\mathrm{C}\left(\mathrm{u}^{\mathrm{n}} + \tau\,\mathrm{k}_1^{\mathrm{n}}/2 - 3\tau\,\mathrm{k}_3^{\mathrm{n}}/2 + 2\tau k_4^n\right)\right].$$

Расчетная формула (8) имеет четвертый порядок точности, а для контроля точности на каждом шаге вычисляют

$$\delta^{n+1} = \frac{\max}{i = \overline{1, N}} \left| u_i^{n+1} - v_i^{n+1} \right|,$$

где формула (9) имеет пятый порядок точности.

Для повышения эффективности параллельного алгоритма запишем (8), (9) в операторной форме

$$u^{n+1} = B_1 u^n \ , \quad v = B_2 u^n \ , \quad \delta^{n+1} = h^2 C^4 u^n / 4. \tag{10}$$

Здесь

$$B_1 = [E + \tau C + \tau^2 C^2/2 + \tau^3 C^3/6 + \tau^4 C^4/24],$$

$$B_2 = [E + \tau C + \tau^2 C^2 / 2 + \tau^3 C^3 / 6].$$

В этом случае предварительно с помощью параллельного алгоритма умножения матриц вычисляется P строчных блоков матриц B_1 и B_2 , а каждый блок хранится в i-м процессоре: $i=0,1,\ldots,P-1$.

Литература

1. Берцун В.Н. Сплайны сеточных функций. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. – 124 с.
2. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. – М.:Наука, 1978. – 592 с.
3. Ильин В.П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. – М.: Физматлит, 1995. – 288 с.
4. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – М.: Мир, 1990. – 512 с.
5. Арушанян О. Б., Залеткин С. Ф. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений на Фортране. – М.: Изд-во МГУ, 1990. – 336 с.
6. Воеводин В. В., Воеводин Вл. В. Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.
7. Фельдман Л. П. Параллельные алгоритмы численного решения систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12, №6. – С. 15–20.
8. Фельдман Л. П., Назарова И. А. Эффективность параллельных алгоритмов вложенных методов Рунге–Кутта при моделировании сложных динамических систем // Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах: Материалы Второго Международного научно-практического семинара. – Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2002. – 351 с.
9. Артемьев С.С. Численные методы решения задачи Коши для систем обыкновенных и стохастических дифференциальных уравнений. – Новосибирск: Изд-во ВЦ СО РАН, 1993. – 156 с.
10. Оран Э., Борис Дж. Численное моделирование реагирующих потоков. – М.: Мир,1990. – 660 с.
11. Вержбицкий В. М. Численные методы. – М.: Высшая школа, 2001. – 382 с.