

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МАССОПЕРЕНОСА В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ

Фельдман Л. П.

Кафедра ПМИИ ДонНТУ, feldman@r5.dgtu.donetsk.ua

Рыбников П. А.

Всероссийский научно-исследовательский институт
гидротехники и мелиорации
uhm@mail.ur.ru

Abstract

Feldman L.P., Rybnikov P. A. Parallel methods for numeral task decision mass transfer in under ground waters. Difference schemes of raised exactness at times for parabolic regional tasks are been and accorded studied. Exactness order estimations of offered method are presented. Algorithm for parallel decision of got difference equalization, acceleration of one near to parallel decision for task that on obvious difference scheme is described. A on-estep multipoints parallel algorithm has more high exactness on comparison with reputed difference schemes and acceleration near maximum.

Введение

Современные программные пакеты для решения прикладных задач гидрогеодинамики, массо- и теплопереноса используют алгоритмы, разработанные в свое время для последовательных вычислений. Поэтому они не могут быть эффективно использованы при численной реализации на многопроцессорных вычислительных системах. И хотя, некоторые из используемых методов (разностный метод, методы граничных элементов и конечных элементов) позволяют построить параллельный алгоритм их реализации, такие алгоритмы не всегда достаточно эффективны. Разработка методов решения задач, численная реализация параллельных алгоритмов которых изначально ориентирована на многопроцессорные системы определенной структуры, значительно повышает эффективность их использования и существенно сокращает время решения сложных многомерных нестационарных задач [1].

Параллельные алгоритмы численного решения

Для разработки параллельных алгоритмов решения краевых задач на SIMD системах предлагается использовать метод прямых с дальнейшей аппроксимацией полученной системы обыкновенных дифференциальных уравнений блочными одношаговыми и многошаговыми разностными методами [2]. Работа посвящена исследованию сходимости, определению оценок погрешности и эффективности параллельных блочных алгоритмов решения параболических краевых задач. Для упрощения изложения рассматриваются алгоритмы численного решения одномерного параболического уравнения с краевыми условиями первого рода.

$$\begin{aligned} \partial_t u &= c^2 \partial_{x,x} u + \varphi(x, t), \quad 0 < x < l, \\ u(x, 0) &= g(x), \quad u(0, t) = p(t), \quad u(l, t) = q(t). \end{aligned} \quad (1)$$

Уравнение (1) аппроксимируется по методу прямых системой обыкновенных дифференциальных уравнений, следующего вида

$$\begin{aligned} \frac{dU_m(t)}{dt} &= c^2 \frac{U_{m-1}(t) - 2U_m(t) + U_{m+1}(t)}{h^2} + \Phi_m(t), \quad h = \frac{l}{M}, \quad m = \overline{1, M-1}, \\ U_m(0) &= g(mh), \quad U_0(t) = p(t), \quad U_M(t) = q(t). \end{aligned} \quad (2)$$

Для численного решения задачи Коши (2) используется параллельный одношаговый

блочный метод [2]. Множество N точек равномерной сетки $t_i, i = \overline{1, n}$ и $t_N = T$ с шагом τ разбивается на блоки, содержащие k точек, $k \cdot l = N$. В каждом блоке вводится номер точки $i = 0, 1, \dots, k$ и через $t_{n,i} = (nk+i)$ обозначается точка n -го блока с номером i . Точка $t_{n,0}$ называется началом блока n , а $t_{n,k}$ - концом блока. Очевидно, что имеет место $t_{n,k} = t_{n+1,0}$. В каждом блоке искомые k значений для всех функции $U_m(t_i), i = \overline{1, k}, m = \overline{1, M-1}$ могут быть вычислены одновременно [2]. Поэтому блочные методы особенно удачно реализуются на параллельных вычислительных системах. Различают два типа блочных методов: одношаговый и многошаговый блочные методы. В первом методе только последняя точка предшествующего блока используется в следующем блоке, тогда как во втором методе используются все или часть точек предшествующего блока.

Одношаговые многоточечные блочные методы

Пусть через $v_{m,n,i}$ обозначено значение сеточной функции соответствующее значению функции $U_m(t_{n,i})$. Тогда уравнения одношагового разностного метода для блока n , содержащего k узлов можно записать в виде [3].

$$v_{m,0,0} = g_m, m = \overline{0, M}, v_{0,n,i} = p_{n,i}, v_{M,n,i} = q_{n,i}, n = \overline{1, l}, i = \overline{1, k},$$

$$v_{m,n,i} - v_{m,n,0} = \tau (b_i F_{m,n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{m,n,j}), \quad (3)$$

где $F_{m,n,j} = c^2 \frac{v_{m-1,n,j} - 2v_{m,n,j} + v_{m+1,n,j}}{h^2} + \Phi_{m,n,j}, m = \overline{1, M-1}, n = \overline{1, l}, i = \overline{1, k}$.

В статье [4] показано, что коэффициенты $b_i, a_{i,j}, i, j = 1, 2, \dots, k$ можно найти, решив следующую систему уравнений для выбранного k .

$$b_i + \sum_{j=1}^k a_{i,j} = i, \sum_{j=1}^k j^{s-1} a_{i,j} = \frac{i^s}{s}, i = \overline{1, k}, s = \overline{2, p}. \quad (4)$$

При этом наивысший порядок аппроксимации одношагового k -точечного блочного метода равен $k+1$. Таким образом, порядок аппроксимации разностной схемой (6) смешанной задачи (1) для параболического дифференциального уравнения на ее решении равен $O(\tau^{k+1} + h^2)$.

После подстановки в систему уравнений (3) выражения для $F_{m,n,j}$ она примет вид.

$$\sigma \sum_{j=1}^k a_{i,j} (v_{m-1,n,j} - 2v_{m,n,j} + v_{m+1,n,j}) - v_{m,n,i} = -(\sigma b_i v_{m-1,n,0} + (1 - 2\sigma b_i) v_{m,n,0} + \sigma b_i v_{m+1,n,0}) -$$

$$\tau (b_i \Phi_{m,n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} \Phi_{m,n,j}), m = \overline{1, M-1}, n = \overline{1, l}, i = \overline{1, k}, \sigma = \frac{c^2 \tau}{h^2}. \quad (5)$$

Для исследования устойчивости метода (5) используем спектральный признак. Решение уравнений (5) будем выполнять параллельным алгоритмом, в котором значения приближенных решений во всех k точках блока n находятся одновременно. Поэтому частные решения однородной системы уравнений (6), соответствующей (5)

$$\sigma \sum_{j=1}^k a_{i,j} (v_{m-1,n,j} - 2v_{m,n,j} + v_{m+1,n,j}) - v_{m,n,i} = -(\sigma b_i v_{m-1,n,0} + (1 - 2\sigma b_i) v_{m,n,0} + \sigma b_i v_{m+1,n,0}) \quad (6)$$

будем искать в виде:

$$v_{m,0,0} = E^{l m \varphi}, v_{m,n,0} = v_{m,n,0} \lambda_k, v_{m,n,j} = v_{m,n,0} \lambda_j = \lambda_k^n \lambda_j E^{l m \varphi}, j = \overline{1, k}, n = \overline{0, l}. \quad (7)$$

После подстановки частных решений (7) в уравнения (6) и их упрощения, получается система уравнений для определения собственных значений $\lambda_j, j = \overline{1, k}$,

$$\lambda_i + 4\sigma \sum_{j=1}^k a_{i,j} \lambda_j \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right) = 1 - 4\sigma b_i \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right), i = \overline{1, k}. \quad (8)$$

Например, значения элементов $b_i, a_{ij}, i, j = \overline{1, 2}$ матриц **B** и **A** соответственно, определенные из системы (4) для двухточечного блочного метода, равны

$$B = \left(\frac{5}{12}, \frac{1}{3}\right)^T, A = \begin{pmatrix} \frac{8}{12} & -\frac{1}{12} \\ \frac{4}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

Решение системы уравнений (8) для одношагового двухточечного метода полученное в *Mathematica* имеет вид

$$\lambda_1 \rightarrow -\frac{-3 + 8 \sigma^2 \sin\left[\frac{\varphi}{2}\right]^4}{3 + 12 \sigma \sin\left[\frac{\varphi}{2}\right]^2 + 16 \sigma^2 \sin\left[\frac{\varphi}{2}\right]^4}$$

$$\lambda_2 \rightarrow -\frac{-3 + 12 \sigma \sin\left[\frac{\varphi}{2}\right]^2 - 16 \sigma^2 \sin\left[\frac{\varphi}{2}\right]^4}{3 + 12 \sigma \sin\left[\frac{\varphi}{2}\right]^2 + 16 \sigma^2 \sin\left[\frac{\varphi}{2}\right]^4}$$

Из полученных выражений для λ_1 и λ_2 следует, что при $\sigma > 0$ имеет место $-0.5 < \lambda_1 \leq 1, 0 < \lambda_2 \leq 1$, т.е. необходимое условие устойчивости для одношаговой двухточечной разностной схемы выполняется при любом положительном значении σ . Для иллюстрации приводятся графики функций $\lambda_1[\sigma, \varphi], \lambda_2[\sigma, \varphi]$.

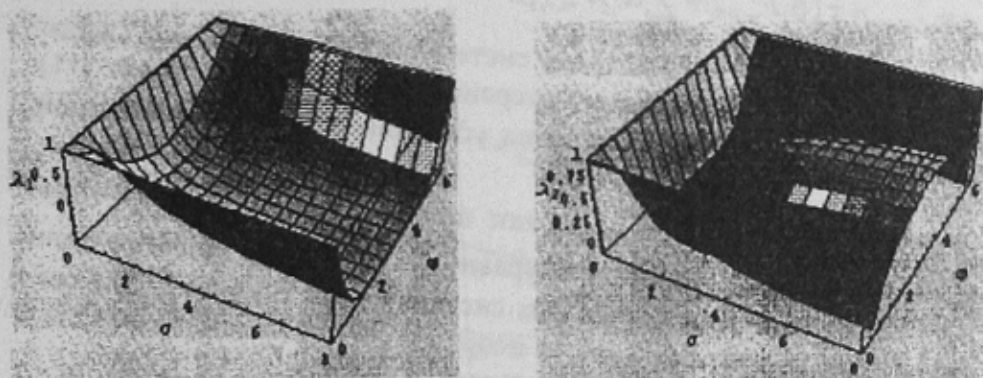


Рисунок 1- Графики функций $\lambda_1[\sigma, \varphi], \lambda_2[\sigma, \varphi]$.

Итерационные методы решения разностных уравнений

Разностная схема (5) является неявной, поэтому для вычисления приближенных значений решения задачи Коши (2) в произвольном блоке n необходимо решить систему линейных алгебраических уравнений (5). Для параллельного решения системы (5) предлагается использовать следующий итерационный алгоритм:

1. аппроксимируются начальные и граничные условия:

$$v_{m,0,0} = g_m, m = \overline{0, M}, v_{0,n,i} = p_{n,i}, v_{M,n,i} = q_{n,i}, n = \overline{1, l}, i = \overline{1, k}.$$

2. вычисляется по формулам Эйлера исходное приближение для каждого искомого значения $v_{m,n,i}^{(0)}$, в очередном блоке n , для всех узлов сетки $m = \overline{1, M-1}$ на соответствующих временных слоях разностной сетки.

$$v_{m,n,i}^{(0)} = v_{m,n,0} + i\tau F_{m,n,0}, \quad i = \overline{1, k}.$$

3. используя полученное на шаге 2 исходное приближение для очередного блока n , решается параллельным итерационным методом система уравнений (5). Выполняется необходимое число итераций до достижения требуемой точности

$$v_{m,n,i}^{(s+1)} = \left[\sigma \sum_{j=1, j \neq i}^k a_{i,j} (v_{m-1,n,j}^{(s)} - 2v_{m,n,j}^{(s)} + v_{m+1,n,j}^{(s)}) + \sigma (v_{m-1,n,i}^{(s)} + v_{m+1,n,i}^{(s)}) - \right. \\ \left. \tau (\sigma b_{ii} v_{m-1,n,0} + (1 - 2\sigma b_i) v_{m,n,0} + \sigma b_i v_{m+1,n,0}) + (b_i \Phi_{m,n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} \Phi_{m,n,j}) \right] / (1 + 2\sigma a_{i,i}), \quad (9)$$

$$m = \overline{1, M-1}, n = \overline{1, l}, i = \overline{1, k}, s = \overline{0, k-1}.$$

4. осуществляется переход к пункту 2 для решения задачи в следующем блоке $n+1$, если не достигли конца отрезка интегрирования. При этом, как было установлено в [4], выполнение k шагов вычислений по формулам (9) в случае сходимости итерационного процесса обеспечат получение приближенного решения с локальной ошибкой порядка $O(\tau^{k+1})$. Для сходимости метода (9) достаточно, чтобы выполнялось:

$$4\sigma \max_i \sum_{j=1, j \neq i}^k |a_{i,j}| \leq 1, \quad i = \overline{1, k}. \quad (10)$$

Выполнение условия (10) для произвольной многошаговой разностной схемы налагает ограничения на выбор значения σ . Требования условий сходимости (10) являются завышенными и их можно смягчить, если использовать блочные разностные схемы, в которых используется аппроксимация производных по времени по соседним узлам. Разностные уравнения такого типа имеют вид

$$v_{m,n,i} - v_{m,n,i-1} = \tau (\beta_i F_{m,n,0} + \sum_{j=1}^k \alpha_{i,j} F_{m,n,j}), \quad i = \overline{1, k}, \quad (11)$$

Условия сходимости итерационного процесса для системы (11) значительно слабее условия (10). Например, для сходимости процесса итераций двухточечного метода (11) достаточно, чтобы $\sigma \leq \frac{1}{4}$. Последнее слабее условия устойчивости явной разностной схемы.

Описанные выше алгоритмы (9,10) позволяют производить вычисления одновременно для всех узлов $i = \overline{1, k}$ блока n , каждого уравнения $m = \overline{1, M-1}$. Поэтому они могут эффективно выполняться на вычислительных системах типа SIMD [1]. Для реализации потенциального параллелизма алгоритма необходимо использовать 2D-сетку процессоров размерности $k \times M$. Его ускорение выражается формулой:

$$S_{Mk}^b = \frac{Mk}{(1 + (k+1)T_U / T_F)(k+1)}, \quad (12)$$

где T_U — время такта параллельного обмена в SIMD структуре, T_F — время вычисления значения $v_{m,n,i}$ по формуле (9) на процессорном элементе. Хотя ускорение блочного алгоритма (12) меньше ускорения параллельного алгоритма (13)

$$S_M = M / (1 + 2T_U / T_F), \quad (13)$$

реализующего вычисления по формулам явной разностной схемы, однако, разница между ними не столь значительна. Так, например, при $k=4$ и $T_U / T_F = 0.1$ их отношение равно 0.64. С другой стороны, блочный метод имеет второй порядок точности по h и $k+1$ - по τ , явный метод имеет тот же второй порядок точности по h и только первый порядок точности по τ . Поэтому при решении с одинаковым шагом τ результат, полу-

чаемый блочным методом будет значительно более точным, чем расчеты по явной схеме. При одинаковой точности результатов расчеты по блочному алгоритму можно выполнять с большим шагом по τ , что, в конечном счете, позволит решить задачу значительно быстрее.

Решение тестовой задачи

Для иллюстрации полученных выводов была решена одношаговыми двухточечными блочными методами (9) и (11) в пакете *Mathematica* задача

$$\partial_t u = c^2 \partial_{xx} u, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t, \quad u(x, 0) = E^{\lambda x} \sin(\pi x), \quad u(0, t) = 0, \quad u(1, t) = 0. \quad (14)$$

Результаты численного решения представлены на рис.2.

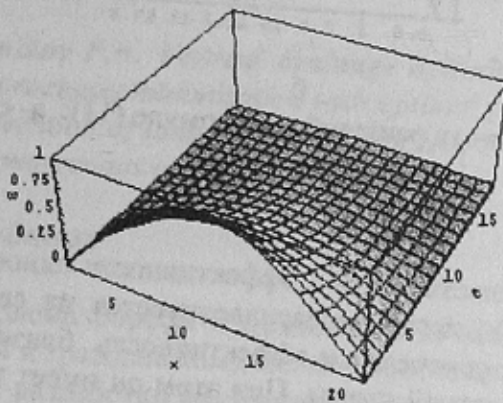
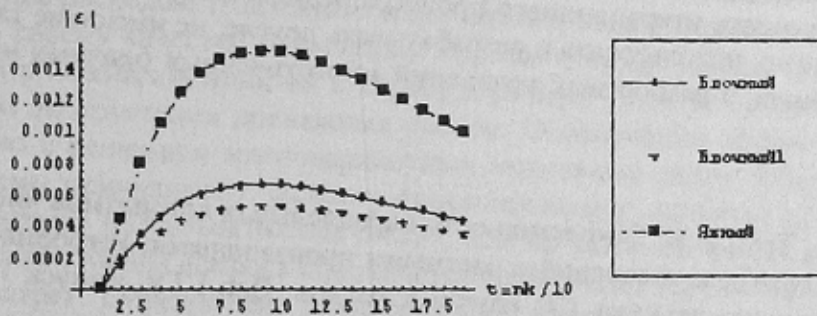


Рисунок 2- Поверхность, изображающая решение задачи (14) одношаговым двухточечным методом (11) с шагом $\tau = 0.002$.

Погрешности приближенных решений, полученные с использованием блочных мето-



дов, изображены на рис. 3 и 4.

Рисунок 3. Графики погрешностей приближенных решений, полученные с шагом $\tau = 0.00125$: блочный - формула (9), блочный1-формула (11)

Как следует из рис.3, погрешность блочного метода на порядок меньше погрешности явного метода при одинаковых шагах τ и h . Кроме того, решение по формулам блочного метода (11) можно получить с шагом τ вдвое большим, чем шаг обеспечивающий устойчивость явной схемы. На рис.4а приведен график погрешностей приближенного решения полученный по методу (11) при шаге $\tau = 0.00275$. При таком шаге метод (10) уже расходится, а явный метод неустойчив. Максимальная ошибка блочного метода (11) в два раза меньше ошибки решения по явной схеме, выполненного с шагом по времени вдвое меньшим, чем в блочном методе.

Для метода (11) можно практически найти оптимальный шаг, при котором ошибка будет наименьшей. Для рассматриваемой задачи таким шагом является $\tau = 0.00205$. На рис 4б приведен график ошибки при решении задачи с этим шагом. Погрешность в последнем случае в шестьдесят раз меньше, чем на рис.4 а.

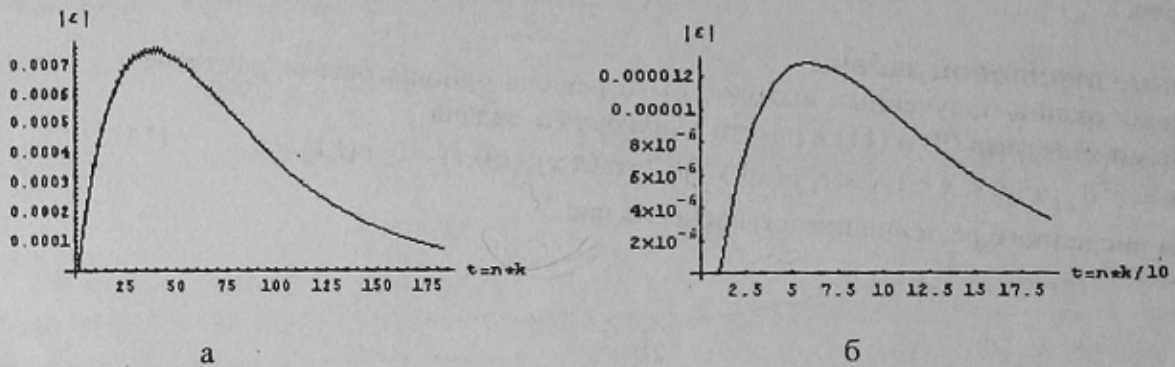


Рисунок 4. График погрешностей приближенных решений по формуле (11): а- с шагом $\tau = 0.00275$, б- $\tau = 0.00205$

Заключение

Приведенные в статье результаты свидетельствуют об эффективности одношагового двухточечного блочного метода (11). Он легко распараллеливается на сетке процессоров, его характеристики параллелизма: ускорение и эффективность близки к соответствующим характеристикам явной разностной схемы. При этом он имеет точность на порядок выше точности явной схемы. Однако, преимущества блочных методов существенно ограничиваются условиями сходимости итерационных методов решения соответствующих им разностных уравнений, что не позволяет выбирать шаги h и τ независимо. К сожалению, для блочных методов с числом точек в блоке больше двух ограничения на сходимость итерационного процесса решения значительно усиливаются. Поэтому необходимо использовать и разрабатывать другие, не имеющие таких ограничений, способы решения разностных уравнений многоточечных блочных методов.

Литература

1. Фельдман Л. П., Труб И.И. Эффективность параллельных алгоритмов численного решения краевых задач для уравнений с частными производными. Информатика, кибернетика и вычислительная техника. Сб. научных трудов Дон ГТУ, выпуск 1. Донецк, 1997, С. 26-34.
2. Системы параллельной обработки: Пер.с англ./ Под ред. Ивенса. - М.: Мир, 1985-416 с.
3. Фельдман Л. П. Параллельные интерполяционные алгоритмы численного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений на SIMD компьютере.// Наукові праці ДонДТУ . Серія: Проблеми моделювання та проектування динамічних систем, випуск 10:-Донецьк, 1999, С.20-25.
4. Фельдман Л. П. Сходимость и оценка погрешности параллельных одношаговых блочных методов моделирования динамических систем с сосредоточенными параметрами.// Научные труды ДонГТУ. Серия: Информатика, кибернетика и вычислительная техника, выпуск 15:- Донецк: ДонГТУ, 2000, С. 34-39.

Поступила в редакційну колегію 15. 11.2001 р.