

Параллельный вариант численного метода решения многомерного уравнения переноса с запаздыванием

С.И. Солодушкин^{1,2}
solodushkin_s@mail.ru

А.А. Сагоян¹
arsensag@mail.ru

И.Ф. Юманова¹
yuirfa@mail.ru

1 – УрФУ (Екатеринбург)

2 – ИММ УрО РАН (Екатеринбург)

Аннотация

Построено семейство разностных схем для численного решения многомерного уравнения первого порядка с запаздывающим аргументом. Изучены порядок аппроксимации, устойчивость и порядок сходимости. Приведен алгоритм решения, допускающий параллельную реализацию. На тестовых примерах показана хорошая слабая и сильная масштабируемость параллельной версии. Экспериментальные оценки порядков сходимости соответствуют теоретическим оценкам.

1 Введение и формальная постановка

Уравнения в частных производных первого порядка (известные также как уравнения переноса) с запаздыванием возникают при моделировании в различных областях естествознания [1, 2, 3, 4]. Качественная теория функционально-дифференциальных уравнений в частных производных (ФДУ в ЧП) развита достаточно полно (см., например, [4] и ссылки в ней). Существует обширная библиография, посвященная вопросам существования, единственности, устойчивости и асимптотическому поведению решений ФДУ в ЧП. В то же время аналитически ФДУ в ЧП решаются лишь в исключительных ситуациях, а потому разработка, обоснование и программная реализация численных методов для этих уравнений вызывают значительный интерес.

Метод прямых [5, 6, 7] сводит ФДУ в ЧП к системе ФДУ в обыкновенных производных, которая может быть решена специальными методами, однако, системы уравнений, возникающие после дискретизации по пространству, являются жесткими. Неявные разностные схемы для ФДУ в ЧП [8, 9, 10] позволяют избежать проблемы жесткости, но для того, чтобы найти решения в каждом следующем временном слое, необходимо решать систему нелинейных уравнений большой размерности.

Эффективные разностные схемы для ФДУ в ЧП, в том числе, уравнений переноса с запаздыванием были разработаны в [11, 12]. Основная идея этих работ — принцип разделения конечномерной и бесконечномерной (функциональной) составляющих в структуре ФДУ. Чтобы учесть запаздывание, используется интерполяция и экстраполяция дискретной предыстории. Экстраполяция, в частности, позволяет авторам строить неявные схемы и позволяет избежать необходимости решать нелинейные уравнения на каждом временном слое. Подход, используемый в настоящей работе, близок к [11, 12] и основан на применении методов проверки устойчивости двухслойных разностных схем [13] и принципе разделения конечномерной и бесконечномерной составляющих.

Copyright © by the paper's authors. Copying permitted for private and academic purposes.

In: A.A. Makhnev, S.F. Pravdin (eds.): Proceedings of the 47th International Youth School-conference “Modern Problems in Mathematics and its Applications”, Yekaterinburg, Russia, 02-Feb-2016, published at <http://ceur-ws.org>

Увеличение производительности суперкомпьютеров приводит к повышению интереса к разработке параллельных вариантов численных методов. Ниже мы приведем обзор некоторых подходов. Первый класс методов основан на декомпозиции области решения, классическим является альтернирующий метод Шварца для эллиптических уравнений, последовательный по своей природе. Чтобы распараллелить метод Шварца, применяются разнообразные подходы: аддитивный метод Шварца, параллельные многосеточные методы с предобуславливанием, параллельный метод Шварца с весами и т. д. [14]. Параллельные методы декомпозиции области зарекомендовали себя как очень эффективные для решения эллиптических уравнений [15] и были обобщены и адаптированы для решения уравнений диффузии-конвекции [16, 17].

Параллельная реализация метода полу-Лагранжевого типа для уравнения переноса рассматривалась в [18]. Разностная схема с переменным шаблоном построена на основе интегрального неравенства между соседними временными слоями. Данный подход позволяет авторам избежать ограничений типа Куранта, накладываемых на соотношение между шагами по времени и по пространству.

Настоящая работа обобщает результат [19, 20, 21] на многомерный по пространству случай и представляет параллельную версию соответствующего численного метода.

Рассмотрим многомерное уравнение переноса с запаздыванием:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \sum_{\alpha=1}^p \frac{\partial u}{\partial x_\alpha} = f(x, t, u(x, t), u_t(x, \cdot)), \quad (1)$$

здесь $x = (x_1, \dots, x_p)$, $x_\alpha \in [0, X_\alpha]$, и $t \in [t_0, \theta]$ — пространственная и временная переменные; $u(x, t)$ — искомая функция; $u_t(x, \cdot) = \{u(x, t + \xi), -\tau \leq \xi < 0\}$ — предыстория искомой функции к моменту t , $\tau > 0$ — величина запаздывания, коэффициент $a > 0$.

Пусть $\bar{G} = \prod_{\alpha=1}^p [0, X_\alpha]$ — p -мерный прямоугольник с границей Γ . Заданы начальные и граничные условия

$$u(x, t) = \varphi(x, t), \quad x \in \bar{G}, \quad t \in [t_0 - \tau, t_0], \quad (2)$$

$$u(x, t) = g(x, t), \quad x \in \Gamma, \quad t \in [t_0, \theta]. \quad (3)$$

Пусть f , φ , g таковы, что (1)–(3) имеет единственное решение, обладающее той степенью гладкости, которая требуется для построения численного метода [4].

Обозначим через $\mathcal{Q} = \mathcal{Q}[-\tau, 0)$ множество функций $u(\xi)$, кусочно-непрерывных на $[-\tau, 0)$ с конечным числом точек разрыва первого рода, непрерывных справа в точках разрыва.

Введем в \mathcal{Q} норму $\|u\|_{\mathcal{Q}} = \sup_{\xi \in [-\tau, 0)} |u(\xi)|$. Для построения численного метода и обоснования его сходимости дополнительно предположим, что функционал $f(x, t, u, v(\cdot))$ определен на $\bar{G} \times [t_0, \theta] \times \mathbb{R} \times \mathcal{Q}$ и Липшицев по двум последним аргументам:

$$\exists L_f \in \mathbb{R} \quad \forall x \in \bar{G}, t \in [t_0, \theta], u^1 \in \mathbb{R}, u^2 \in \mathbb{R}, v^1 \in \mathcal{Q}, v^2 \in \mathcal{Q} :$$

$$|f(x, t, u^1, v^1(\cdot)) - f(x, t, u^2, v^2(\cdot))| \leq L_f (|u^1 - u^2| + \|v^1(\cdot) - v^2(\cdot)\|_{\mathcal{Q}}).$$

2 Построение разностной схемы

Рассмотрим разбиение отрезка $[0, X_\alpha]$ на части с шагом $h_\alpha = X_\alpha/N_\alpha$, где N_α — число отрезков разбиения по соответствующей координате. На \bar{G} введем сетку $\bar{\omega}_h = \{(i_1 h_1, \dots, i_p h_p), i_\alpha = 0, \dots, N_\alpha\}$.

Мы используем обозначение $x_{(i)} = (x_{i_1}, \dots, x_{i_p}) = (i_1 h_1, \dots, i_p h_p)$, $i_\alpha = 0, 1, \dots, N_\alpha$, здесь индекс i — это p -мерный вектор. Обратим внимание, что $x_\alpha \in \mathbb{R}$ — это α -я координата вектора x , в то время как $x_{(i)} \in \mathbb{R}^p$ — узел в сетке $\bar{\omega}_h$.

Введем $\bar{\omega}_\Delta = \{t_j = t_0 + \Delta, j = 0, \dots, M\}$, где $\Delta = (\theta - t_0)/M$. Для простоты изложения предполагаем, что $\tau/\Delta = m$ целое.

Наконец, определим сетку $\bar{\omega}_{h\Delta} = \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\Delta = \{(x_{(i)}, t_j), x_{(i)} \in \bar{\omega}_h, t_j \in \bar{\omega}_\Delta\}$. В узлах сетки $\bar{\omega}_{h\Delta}$ будем искать приближенное решение задачи (1)–(3).

Обозначим через u_j^i приближение функции u в узле: $u_j^i \approx u(x_{(i)}, t_j)$, где $(x_{(i)}, t_j) \in \bar{\omega}_{h\Delta}$.

Функционал $f(x_{(i)}, t_j, u(x_{(i)}, t_j), u_{t_j}(x_{(i)}, \cdot))$ может зависеть от значений u между узлами, а потому для его вычисления необходима интерполяция сеточной функции u_j^i . Для каждого момента времени t_j и величины запаздывания $\xi \in [-\tau, 0)$ либо $t_j + \xi \leq t_0$, в этом случае полагаем $u(x_{(i)}, t_j + \xi) = \varphi(x_{(i)}, t_j + \xi)$, либо $t_j + \xi > t_0$, в этом случае используем интерполяцию.

Для каждого узла $(x_{(i)}, t_j)$ определим его дискретную предысторию:

$$\{u_l\}_j^i = \{u_l^i \mid \max\{0, j-m\} \leq l \leq j\}.$$

Определение 1 *Отображение I , определенное на множестве \mathcal{A}_j^i всех возможных дискретных предысторий и действующее по правилу*

$$I : \mathcal{A}_j^i \rightarrow \mathcal{Q}[-\min\{\tau, t_j\}, 0] : \{u_l\}_j^i \mapsto v^{i,j}(\cdot) = v^{i,j}(t_j + \xi),$$

называется оператором интерполяции дискретной предыстории.

Для построения численного метода, обладающего нужными свойствами, достаточно применять кусочно-линейную интерполяцию. Именно, для дискретной предыстории $\{u_l\}_j^i$ определим

$$v^{i,j}(t_j + \xi) = \frac{1}{\Delta} \left((t_{l+1} - t_j - \xi) u_l^i + (t_j + \xi - t_l) u_{l+1}^i \right), \quad t_l \leq t_j + \xi \leq t_{l+1}. \quad (4)$$

Оператор кусочно-линейной интерполяции имеет 2-й порядок на точном решении, т. е. существуют константы C_1 и C_2 такие, что для всех $i = (i_1, \dots, i_p)$, $i_\alpha = 0, 1, \dots, N_\alpha$, $j = 1, \dots, M$, и $t \in [\max\{0, t_j - \tau\}, t_j]$ выполняется:

$$|v^{i,j}(t) - u(x_{(i)}, t)| \leq C_1 \max_{\max\{0, j-m\} \leq l \leq j} |u_l^i - u(x_{(i)}, t_l)| + C_2 \Delta^2.$$

Рассмотрим разностные операторы, которые аппроксимируют первые производные по пространственным переменным,

$$\Omega_\alpha u_j^i = \begin{cases} \frac{-4u_j^{i[-1\alpha]} - \frac{2h_\alpha}{a} \left(f_j^{i[-1\alpha]} - \sum_{\beta=1, \beta \neq \alpha}^p \frac{\partial g(x_{(i)[-1\alpha]}, t_j)}{\partial x_\beta} - \frac{\partial g(x_{(i)[-1\alpha]}, t_j)}{\partial t} \right) + 4u_j^i}{2h_\alpha}, & \text{для } i_\alpha = 1, \\ \frac{u_j^{i[-2\alpha]} - 4u_j^{i[-1\alpha]} + 3u_j^i}{2h_\alpha}, & \text{для } i_\alpha \geq 2. \end{cases}$$

Здесь $x_{(i)[-1\alpha]}$ — сосед узла $x_{(i)}$, сдвинутый влево на один шаг h_α по соответствующей координате, т. е. узел $(i_1 h_1, \dots, i_{\alpha-1} h_{\alpha-1}, (i_\alpha - 1) h_\alpha, i_{\alpha+1} h_{\alpha+1}, \dots, i_p h_p)$, $u_j^{i[-1\alpha]}$ — сеточное приближение функции $u(x, t)$, вычисленное в узле $(x_{(i)[-1\alpha]}, t_j)$.

Рассмотрим семейство разностных схем ($0 \leq s \leq 1$) для $j = 0, \dots, M-1$ и $i = (i_1, \dots, i_p)$, $i_\alpha = 1, \dots, N_\alpha$:

$$\frac{u_{j+1}^i - u_j^i}{\Delta} + a \sum_{\alpha=1}^p (s \Omega_\alpha u_{j+1}^i + (1-s) \Omega_\alpha u_j^i) = f_j^i \quad (5)$$

с начальными и граничными условиями

$$u_0^i = \varphi(x_{(i)}, t_0), \quad v^{i,0}(t) = \varphi(x_{(i)}, t), \quad t < t_0,$$

$$u_j^i = g(x_{(i)}, t_j), \quad x_{(i)} \in \Gamma.$$

Здесь $f_j^i = f(x_{(i)}, t_j, u_j^i, v^{i,j}(\cdot))$ — значение функционала f , вычисленное на приближенном решении, $v^{i,j}(\cdot)$ — результат интерполяции. Для построения численного метода мы дополнительно предполагаем, что $g(x, t)$ дифференцируема.

3 Исследование сходимости

Определение 2 *Обозначим $\varepsilon_j^i = u(x_{(i)}, t_j) - u_j^i$, $i = (i_1, \dots, i_p)$, $i_\alpha = 1, \dots, N_\alpha$, $j = 0, \dots, M$. Будем говорить, что метод (5) сходится, если $\varepsilon_j^i \rightarrow 0$ при $h \rightarrow 0$ и $\Delta \rightarrow 0$ для всех i и j . Будем говорить, что метод сходится с порядком $\sum_{\alpha=1}^p h_\alpha^{q_1} + \Delta^{q_2}$, если существует константа C такая, что $\|\varepsilon_j^i\| \leq C \left(\sum_{\alpha=1}^p h_\alpha^{q_1} + \Delta^{q_2} \right)$ для всех i и j .*

Определение 3 Невязкой метода (5) назовем сеточную функцию

$$\Psi_j^i = \frac{u(x_{(i)}, t_{j+1}) - u(x_{(i)}, t_j)}{\Delta} + a \sum_{\alpha=1}^p (s \Omega_\alpha u(x_{(i)}, t_{j+1}) + (1-s) \Omega_\alpha u(x_{(i)}, t_j)) - \bar{f}_j^i, \quad (6)$$

где $\bar{f}_j^i = f(x_{(i)}, t_j, u(x_{(i)}, t_j), u_{t_j}(x_{(i)}, \cdot))$ – значение функционала f , вычисленное на точном решении.

Теорема 1 Пусть точное решение $u(x, t)$ задачи (1) – (3) трижды непрерывно дифференцируемо по x_α , дважды непрерывно дифференцируемо по времени t и все первые производные решения по x_α непрерывно дифференцируемы по t , тогда невязка метода (5) имеет порядок $\sum_{\alpha=1}^p h_\alpha^2 + \Delta$.

Доказательство теоремы сводится к разложению функции u в ряд Тейлора в окрестности точки $(x_{(i)}, t_j)$; для одномерного случая см. [20].

В силу нелинейного характера зависимости функционала f от решения и его предыстории, мы применим аппарат общих схем с последствием, разработанный в [22] для случая функционально-дифференциальных уравнений с обыкновенными производными и примененный в дальнейшем для уравнений в частных производных [11, 12].

Без ограничения общности мы рассмотрим случай однородных граничных условий $u(x, t) = 0$, $x \in \Gamma$, $t \in [t_0, \theta]$. Действительно, замена вида $\tilde{u}(x, t) = u(x, t) - \hat{g}(x, t)$, где $\hat{g}(x, t)$ – произвольная функция, обладающая нужной степенью гладкости, совпадающая с $g(x, t)$ при $x \in \Gamma$, $t \in [t_0, \theta]$, сводит изначально поставленную задачу к задаче с однородными граничными условиями.

Доказательство сходимости будем проводить методом вложения семейства (5) в общую разностную схему с последствием [22]. Идея близка к [19, 20] и основана на методе повышения размерности.

Пусть p фиксировано. Для каждого $t_j \in \bar{\omega}_\Delta$ определим значения дискретной предыстории вектором \vec{y}_j , для этого упорядочим компоненты вектора u_j^i в лексикографическом порядке:

$$\vec{y}_j = \left(u_j^{(1, \dots, 1)}, u_j^{(2, \dots, 1)}, \dots, u_j^{(N_1, \dots, 1)}, \dots, u_j^{(N_1, \dots, N_p)} \right)^\top \in Y_p,$$

здесь $j = 0, \dots, M$, знак \cdot^\top означает транспонирование, Y_p – линейное пространство, $\dim Y_p = N_1 \times N_2 \times \dots \times N_p$. Например, при $p = 1$, имеем $\vec{y}_j = \left(u_j^1, u_j^2, \dots, u_j^{N_1} \right)^\top$.

Построим разностный оператор $A : Y_p \rightarrow Y_p$, который соответствует $\sum_{\alpha=1}^p \Omega_\alpha$. Для этого рассмотрим последовательность матриц D_α , $\alpha = 1, \dots, p$, где каждая следующая (начиная со второй) рекуррентно определяется через предыдущую.

Рассмотрим $N_1 \times N_1$ матрицу D_1 , которая соответствует разностному оператору Ω_1 :

$$D_1 = \frac{a}{2h_1} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -4 & 3 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 1 & -4 & 3 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 3 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 1 & -4 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & -4 & 3 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 1 & -4 & 3 \end{pmatrix}.$$

Определим матрицу $E_1 = \frac{a}{2h_2} I_1$, где I_1 – единичная $N_1 \times N_1$ -матрица. Далее, определим матрицу D_2 , которая имеет блочно-трехдиагональную форму, каждый блок имеет размер $N_1 \times N_1$, и в каждой строке N_2 блоков:

$$D_2 = \begin{pmatrix} D_1 + 4E_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -4E_1 & D_1 + 3E_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ E_1 & -4E_1 & D_1 + 3E_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & -4E_1 & D_1 + 3E_1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -4E_1 & D_1 + 3E_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & E_1 & -4E_1 & D_1 + 3E_1 \end{pmatrix}.$$

Далее аналогично. Таким образом определим линейный оператор A через его квадратную матрицу размера $N_1 \times N_2 \times \cdots \times N_p$:

$$A = \begin{pmatrix} D_{p-1} + 4E_{p-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -4E_{p-1} & D_{p-1} + 3E_{p-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ E_{p-1} & -4E_{p-1} & D_{p-1} + 3E_{p-1} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -4E_{p-1} & D_{p-1} + 3E_{p-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & E_{p-1} & -4E_{p-1} & D_{p-1} + 3E_{p-1} \end{pmatrix},$$

где $E_{p-1} = \frac{a}{2h_p} I_{p-1}$, а I_{p-1} — единичная матрица размерности $N_1 \times \cdots \times N_{p-1}$.

Лемма. 1 Для всякого p , матрица D_p положительно определена.

Доказательство. Матрица D_1 имеет положительные собственные числа $\lambda_1(D_1) = 2a/h$, $\lambda_2(D_1) = \dots = \lambda_{N_1}(D_1) = 3a/2h$, следовательно, положительно определена. Для всякого p матрица D_p нижнетреугольная с положительными диагональными элементами. Все ее главные миноры равны произведению соответствующих диагональных элементов, следовательно, положительны. Матрица D_p положительно определена по критерию Сильвестра. Лемма доказана.

Перепишем систему (5) в форме

$$\frac{\vec{y}_{j+1} - \vec{y}_j}{\Delta} + sA\vec{y}_{j+1} + (1-s)A\vec{y}_j = \vec{F}_j. \quad (7)$$

Определим линейный оператор $B = I + s\Delta A$ (I — единичный оператор соответствующей размерности) и запишем (7) в виде двуслойной разностной схемы в каноническом виде [13]:

$$B\frac{\vec{y}_{j+1} - \vec{y}_j}{\Delta} + A\vec{y}_j = \vec{F}_j. \quad (8)$$

В силу леммы 1, оператор A положительно определен, следовательно, B положительно определен. Таким образом, B обратим, и можно записать (8) в виде

$$\vec{y}_{j+1} = S\vec{y}_j + \Delta B^{-1}\vec{F}_j,$$

где $S = (I - \Delta B^{-1}A)$ — так называемый оператор продвижения на шаг.

В пространстве Y_p определим скалярное произведение и энергетическую норму

$$(y, u) = h_1 h_2 \cdots h_p \sum_{i=1}^{N_1 \times \cdots \times N_p} y^i u^i, \quad \|y\|_{Y_p} = \sqrt{(Ay, y)},$$

далее определим соответствующую индуцированную операторную норму.

Определение 4 Разностную схему (8) будем называть устойчивой, если $\|S\|_{Y_p} < 1$.

Отметим, что в [13, стр. 324–330] дана эквивалентная формализация устойчивости двуслойных разностных схем.

Теорема 2 Если $s \geq 1/2$, разностная схема (8) устойчива.

Доказательство. Рассмотрим (8) с позиции операторно-разностных уравнений и применим методы проверки устойчивости двуслойной разностной схемы [13]. Проведем симметризацию в уравнении (8), домножив обе части уравнения на A^{-1} , который обратим в силу леммы 1, получим

$$(A^{-1} + s\Delta E) \frac{\vec{y}_{j+1} - \vec{y}_j}{\Delta} + E \vec{y}_j = A^{-1} \vec{F}_j.$$

Обозначим $\hat{B} = A^{-1} + s\Delta E$, $\hat{A} = E$ и $\hat{F}_j = A^{-1} \vec{F}_j$, получим

$$\hat{B} \frac{\vec{y}_{j+1} - \vec{y}_j}{\Delta} + \hat{A} \vec{y}_j = \hat{F}_j. \quad (9)$$

Метод (9) устойчив в энергетической норме тогда и только тогда, когда $2\hat{B} \geq \Delta \hat{A}$ [13, стр. 333, теорема 1]. Это требование эквивалентно тому, что $A^{-1} + \Delta E(s-0.5) \geq 0$. Поскольку A^{-1} положительно определенный, последнее неравенство выполняется для любых Δ , как только $s \geq 0.5$. Теорема доказана.

Важной особенностью предлагаемого метода является то, что условие устойчивости $s \geq 1/2$ не накладывает ограничений на шаги разбиения, как это имеет место быть в условиях Куранта–Леви.

Методом вложения в общую схему [22] доказывается

Теорема 3 Пусть выполняются условия теоремы 1 и используется оператор кусочно-линейной интерполяции (4). Тогда если $s \geq 0.5$, то метод (5) сходится с порядком $\sum_{\alpha=1}^p h_{\alpha}^2 + \Delta$.

4 Параллельная реализация и численные эксперименты

Для простоты изложения все конструкции и обозначения в этом разделе вводятся для случая $p = 2$; по этой причине результаты численных экспериментов также приводятся для случая $p = 2$.

Для нахождения $u_j^{i_1, i_2}$ при $i_1 \geq 2$, $i_2 \geq 2$, требуется найти решение в 9 узлах сетки (рис. 1а). Такой тип рекуррентных информационных зависимостей позволяет последовательно находить решения. Соответственно, метод (5) может быть запрограммирован в виде трех вложенных циклов: внешний — по времени, два внутренних — по пространству.

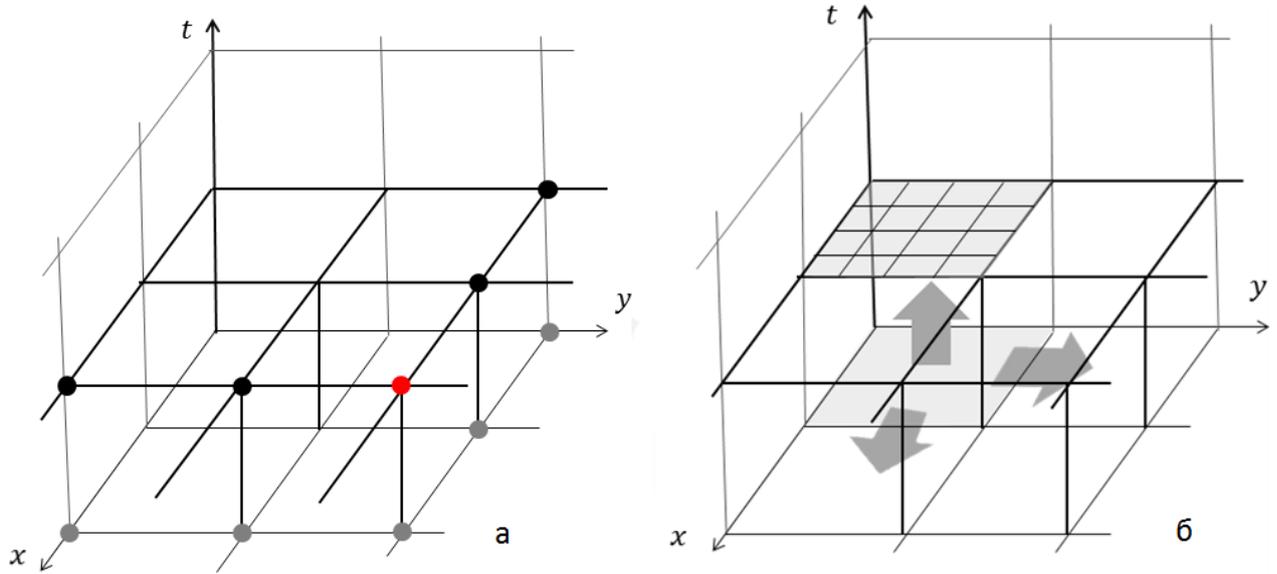


Рис. 1: а) сетка и информационные зависимости; б) расположение блоков в пространстве и информационная зависимость между блоками.

Реорганизуем вычисления таким образом, чтобы решения в некоторых узлах сетки можно было находить параллельно. Разрежем сетку на $K_1 \times K_2$ пространственных колодезев. Назовем (k_1, k_2) -м, $k_1 = 1, \dots, K_1$, $k_2 = 1, \dots, K_2$, пространственным колодезем множество узлов сетки

$$\{(i_1, i_2, j) \mid i_1 = (k_1 - 1)N_1/K_1, \dots, k_1 N_1/K_1 - 1, i_2 = (k_2 - 1)N_2/K_2, \dots, k_2 N_2/K_2 - 1, j = 1, \dots, M\}.$$

Задачу нахождения сеточного решения разделим между процессами; именно, пусть (k_1, k_2) -й процесс вычисляет решение в (k_1, k_2) -м пространственном колодце, $k_1 = 1, \dots, K_1$, $k_2 = 1, \dots, K_2$, т. е. требуется организовать $K_1 \times K_2$ потоков.

Поток $(1, 1)$ не имеет информационных зависимостей от других потоков. Для нахождения решения на $(j+1)$ -м временном слое, процесс (k_1, k_2) , $k_1 \geq 2$, $k_2 \geq 2$, должен получить от процесса $(k_1 - 1, k_2)$ значения $u_j^{i_1, i_2}$, где $i_1 = (k_1 - 1)N_1/K_1 - 2, (k_1 - 1)N_1/K_1 - 1$, $i_2 = (k_2 - 1)N_2/K_2, \dots, k_2 N_2/K_2 - 1$, и от процесса $(k_1, k_2 - 1)$ — значения $u_j^{i_1, i_2}$, где $i_1 = (k_1 - 1)N_1/K_1, \dots, k_1 N_1/K_1 - 1$, $i_2 = (k_2 - 1)N_2/K_2 - 2, (k_2 - 1)N_2/K_2 - 1$, в этом состоит информационная зависимость между потоками.

Для каждого фиксированного набора k_1, k_2, j назовем блоком $B_j^{k_1, k_2}$ следующее множество узлов:

$$\{(i_1, i_2, j) \mid i_1 = (k_1 - 1)N_1/K_1, \dots, k_1 N_1/K_1 - 1, i_2 = (k_2 - 1)N_2/K_2, \dots, k_2 N_2/K_2 - 1, j = 1, \dots, M\}.$$

Поскольку блоки являются объединением узлов сетки, они наследуют информационные зависимости, имевшиеся между узлами; именно, для нахождения решения в блоке необходимо, чтобы был завершен счет в блоках, от которых он имеет информационные зависимости: $B_j^{k_1-1, k_2}$ и $B_j^{k_1, k_2-1}$. Кроме того, блоки естественным образом упорядочиваются в пространстве (x_1, x_2, t) (рис. 26).

Для обеспечения возможности параллельного счета необходимо построить такие сепарабельные гиперплоскости [21, 23], которые проходят через блоки таким образом, что блоки, лежащие на данной гиперплоскости, имеют информационные зависимости только от блоков, лежащих по одну сторону от данной гиперплоскости. Блоки, в которых параллельно находятся решения, лежат на одной сепарабельной гиперплоскости. Не сложно показать, что блоки $B_j^{k_1, k_2}$ и $B_{j'}^{k'_1, k'_2}$ лежат на одной сепарабельной гиперплоскости тогда и только тогда, когда $k_1 + k_2 + j = k'_1 + k'_2 + j'$. Так, например, в блоках $B_2^{1,1}$, $B_1^{2,1}$ и $B_1^{1,2}$ решения можно искать параллельно. Поскольку задача нахождения решения в блоке трудоемкая, а передача данных между соседними потоками требует мало времени, эффективность распараллеливания высокая.

Численные эксперименты проводились на кластере ИММ УрО РАН «Уран». Использовалось следующее оборудование и программное обеспечение: процессоры INTEL XEON E5450, 2×4 ядра, 3 ГГц; кэш память второго уровня 2×6 МБ (5400 Sequence); оперативная память 16 ГБ DDR2; операционная система Linux 2.6.32. Код написан на языке C, использован компилятор Intel C++ compiler (ICC) v14.0.0, использована библиотека MPI MVAPICH2 Intel 13.0. Используемую вычислительную архитектуру можно охарактеризовать как гибридную, так как на каждом узле используется как распределенная, так и общая память.

Выше было использовано понятие «процесс» для обозначения абстрактной единицы, выполняющей вычисления, конкретизируем данное понятие. Согласно принципам MPI, число процессов равно числу вычислительных узлов.

Чтобы проиллюстрировать качество распараллеливания, рассмотрим тестовое уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial t} = 2u(x, y, t) - u(x, y, t - 1) - x - y - t + 2,$$

где $0 \leq x \leq 2$, $0 \leq y \leq 2$, $0 \leq t \leq 4$, с начальными и граничными условиями

$$u(x, y, t) = x + y + t, \quad 0 \leq x \leq 2, \quad 0 \leq y \leq 2, \quad -1 \leq t \leq 0,$$

$$u(0, y, t) = y + t, \quad u(x, 0, t) = x + t, \quad 0 \leq x \leq 2, \quad 0 \leq y \leq 2, \quad 0 \leq t \leq 4.$$

Легко проверить, что поставленная начально-краевая задача имеет точное решение $u(x, y, t) = x + y + t$. В силу того, что решение линейно зависит от всех аргументов, а метод (5) имеет порядок второй по пространству и первый по времени, погрешность численного решения во всех экспериментах будет мала, порядка 10^{-14} .

Таблица 1 содержит результаты численных экспериментов. Число отрезков разбиения по пространственным переменным выбрано одинаковым и изменяется от 64 до 1024, число отрезков разбиения по времени постоянно и равно 100. Число процессов указано в первой строке таблицы и меняется от 1 до 64. Ячейки таблицы содержат медианное время счета в минутах. Ускорение рассчитывалось по отношению к последовательному, т. е. однопроцессорному, варианту.

Для оценки качества распараллеливания сделана оценка сильной масштабируемости. Сильная масштабируемость характеризует изменение времени решения задачи с увеличением количества процессоров (или вычислительных узлов) при неизменном общем объеме задачи [23]. Сильная масштабируемость определяется и может быть численно найдена как отношение $T(N)/(N_0 T(N_0))$, где $T(N)$ — время решения задачи

Таблица 1: Время решения тестового уравнения для сеток различного размера на разном числе процессоров и оценка ускорения

Размеры сетки	Число процессоров							
	1	4	9	16	25	36	49	64
$64 \times 64 \times 100$	0.039	0.022	0.02	0.014	0.015	0.015	0.018	0.017
$128 \times 128 \times 100$	0.152	0.043	0.023	0.018	0.018	0.019	0.02	0.019
$256 \times 256 \times 100$	0.478	0.16	0.079	0.049	0.038	0.031	0.031	0.028
$512 \times 512 \times 100$	2.103	0.503	0.274	0.174	0.12	0.088	0.074	0.068
$1024 \times 1024 \times 100$	6.934	2.267	0.879	0.595	0.399	0.299	0.238	0.201
Ускорение		3.058	7.889	11.647	17.399	23.165	29.179	34.471

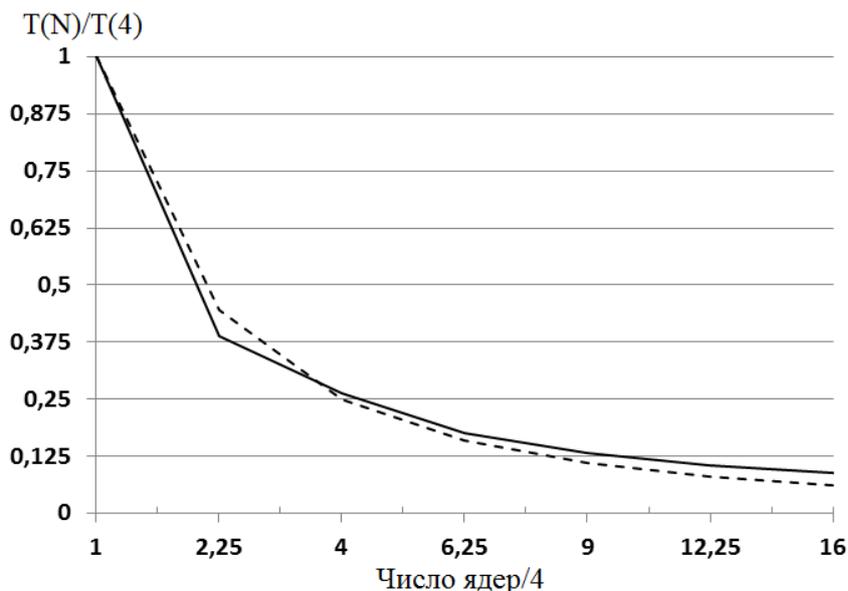


Рис. 2: Сильная масштабируемость на примере тестового уравнения: сплошная — экспериментальная оценка, пунктирная — идеальная сильная масштабируемость

с использованием N узлов, N_0 — начальное число узлов. При $N_0 = 1$ производится сравнение параллельной версии и последовательной, что может приводить к некорректным результатам сравнения, а потому в экспериментах положили $N_0 = 4$. В случае идеальной масштабируемости время вычислений обратно пропорционально числу вычислительных узлов. В эксперименте сильная масштабируемость близка к идеальной (см. рис. 2).

Чтобы проиллюстрировать качество численного метода, рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial t} = -2(u - \sin t) \frac{x + y}{1 + x^2 + y^2} + \frac{\pi}{2} u(x, y, t - \pi) - \int_{-\pi/2}^0 u(x, y, t + \xi) d\xi + \left(\frac{\pi}{2} + 1\right) \sin t,$$

где $-2 < x < 2$, $-5 < y < 5$, $0 < t \leq 4\pi$, с начальными и граничными условиями

$$u(x, y, t) = \frac{1}{1 + x^2 + y^2} + \sin t, \quad -2 \leq x \leq 2, \quad -5 \leq y \leq 5, \quad -\pi \leq t \leq 0,$$

$$u(-2, y, t) = \frac{1}{5 + y^2} + \sin t, \quad u(x, -5, t) = \frac{1}{26 + x^2} + \sin t, \quad -2 \leq x \leq 2, \quad -5 \leq y \leq 5, \quad 0 \leq t \leq 4\pi.$$

Эта начально-краевая задача имеет точное решение $u(x, y, t) = \frac{1}{1 + x^2 + y^2} + \sin t$. В таблице 2 представлена зависимость погрешности численного решения $\text{diff} = \max_{i,j} |u_j^i - u(x_i, t_j)|$ методом (5) при $s = 0.8$ в

зависимости от выбора шагов h и Δ . Для простоты положим $h_1 = h_2$ и обозначим этот шаг h .

Таблица 2: Погрешность численного решения в зависимости от шагов

Вариант	1	2	3	4	5	6	7	8
h	1/5	1/10	1/10	1/20	1/5	1/10	1/20	1/40
Δ	$\pi/20$	$\pi/20$	$\pi/40$	$\pi/40$	$\pi/200$	$\pi/200$	$\pi/200$	$\pi/200$
diff	0.0902	0.0919	0.0481	0.0495	0.0530	0.0135	0.0038	0.0031

В экспериментах № 5–7 погрешность, обусловленная дискретизацией по времени, мала в сравнении с погрешностью, обусловленной дискретизацией по координате; анализ поведения погрешности показывает квадратичную сходимость по пространственным переменным: уменьшение шага в два раза приводит к уменьшению погрешности примерно в два раза. Анализ таблицы показывает, что только согласованное уменьшение шагов приводит к соответствующему уменьшению погрешности, так как общая погрешность уже в большей степени обусловлена дискретизацией по времени.

Согласно теореме 2, при $s = 0.8$ разностная схема (5) является устойчивой при любом соотношении шагов, однако в силу некорректности операции численного дифференцирования при уменьшении h аппроксимация производных по пространству в (5) становится более чувствительной к ошибкам машинного округления, что приводит к росту погрешности. Согласованное с h уменьшение Δ является своего рода регуляризатором, который не позволяет вычислительным ошибкам расти и накапливаться. Эксперименты № 1–4 служат тому иллюстрацией.

Отметим, что порядок численного интегрирования для вычисления операторов распределенного запаздывания должен быть согласован с порядком метода (5).

Благодарности

Работа поддержана грантом РФФИ 14-01-00065, РНФ 14-35-00005 и программой 02.A03.21.0006 от 27.08.2013.

Список литературы

- [1] B. A. van Tiggelen, S. Skipetrov (Eds.). *Wave Scattering in Complex Media: From Theory to Applications*. Proceedings of the NATO Advanced Study Institute, Corsica, France, 10-22 June 2002.
- [2] S.A. Gourley, R. Liu, J. H. Wu. Spatiotemporal Distributions of Migratory Birds: Patchy Models with Delay. *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.*, 9(2): 589–610, 2010.
- [3] T. Luzyanina, J. Cupovic, B. Ludewig and G. Bocharov. Mathematical models for CFSE labelled lymphocyte dynamics: asymmetry and time-lag in division. *J. Math. Biol.*, 69(6-7): 1547–83, 2013.
- [4] J. Wu. *Theory and applications of partial functional differential equations*. New York: Springer–Verlag, 1996.
- [5] L. Tavernini. Finite difference approximation for a class of semilinear Volterra evolution problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 14(5): 931–949, 1977.
- [6] B. Zubik-Kowal. Stability in the Numerical Solution of Linear Parabolic Equations with a Delay Term. *BIT Numerical Mathematics*, 41(1): 191–206, 2001.
- [7] Z. Kamont and M. Netka. Numerical method of lines for evolution functional differential equations. *J. Numer. Math.*, 19(1): 63–89, 2011.
- [8] Z. Kamont and K. Przadka. Difference methods for first order partial differential-functional equations with initial-boundary conditions. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 31(10): 1476–1488, 1991.
- [9] Z. Kamont and K. Kropielnicka. Implicit difference methods for evolution functional differential equations. *Siberian Journal of Numerical Mathematics*, 14(4): 361–379, 2011.

- [10] W. Czernous and Z. Kamont. Comparison of explicit and implicit difference methods for quasilinear functional differential equations. *Appl. Math.*, 38(3): 315-340, 2011.
- [11] V. G. Pimenov, A. B. Lozhnikov. Difference schemes for the numerical solution of the heat conduction equation with aftereffect. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, 275: 137–148, 2011.
- [12] V. G. Pimenov, S. Sviridov. Numerical methods for advection equations with delay. *American Institute of Physics. Conference Proceeding. Proceedings of 40th International Conference Applications of Mathematics in Engineering and Economics*, 1631(114): 114–121, 2014.
- [13] A.A. Samarskii. *Theory of differential schemes*. Moscow: Nauka, 1989 (in Russian). = A.A. Самарский. *Теория разностных схем*. М.: Наука, 1989.
- [14] J.H. Bramble, J.E. Pasciak, J. Xu. Parallel multilevel preconditioners. *J. Math. Comput.*, 55: 1–22, 1990.
- [15] B. F. Smith, P. E. Bjorstad and W. Gropp. *Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations*. Cambridge University Press, 1996.
- [16] P.N. Vabishchevich. Parallel domain decomposition algorithms for parabolic problems. *Mat. Model.*, 9(5): 77-86, 1997.
- [17] D.P. Yang. Parallel domain decomposition procedures of improved D-D type for parabolic problems. *J. Comput. Appl. Math.*, 233: 2779–2794, 2010.
- [18] Efremov A. et al. A Computational Realization of a Semi-Lagrangian Method for Solving the Advection Equation. *Journal of Applied Mathematics* 2014, Article ID 610398, 2014.
- [19] S. I. Solodushkin. A difference scheme for the numerical solution of an advection equation with aftereffect. *Russian Mathematics, Allerton Press*, 57: 65–70, 2013.
- [20] S. I. Solodushkin, I. F. Yumanova and R. H. De Staelen. First order partial differential equations with time delay and retardation of a state variable, *Journal of Computational and Applied mathematics*, 289: 322–330, 2015.
- [21] S. I. Solodushkin, A. A. Sagoyan, I. F. Iumanova. A Parallel Algorithm for Solving the Advection Equation with a Retarded Argument. *CEUR Workshop Proceedings* 1513:57–66, 2015.
- [22] V. G. Pimenov, General Linear Methods for the Numerical Solution of Functional-Differential Equations, *Differential Equations*, 37(1): 116–127, 2001.
- [23] M. McCool, A. D. Robison, J. Reinders. *Structured Parallel Programming*. Waltham, USA: Elsevier, 2012.

Parallel variant of numerical algorithm for solving a multidimensional advection equation with time delay

Svyatoslav I. Solodushkin^{1,2}, Arsen A. Sagoyan¹, Irina F. Iumanova¹

1 – Ural Federal University (Yekaterinburg, Russia)

2 – Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics (Yekaterinburg, Russia)

Keywords: parallel numerical methods, difference scheme, advection equation, time delay, parallel programming.

We describe a family of difference schemes for the numerical solving of first-order multi-dimensional equations with partial derivatives and time delay. The order of approximation, stability and order of convergence are studied. The proposed numerical algorithm allows parallel implementation. High weak and strong scalability of parallel version are illustrated in test examples. Experimental evaluation of convergence orders are in consistent with theoretical estimates.