

повышенного порядка точности, так и особенности конструирования параллельных вычислительных алгоритмов [1 - 10].

Изложение основного материала исследований

Сеточные аппроксимации уравнения переноса

Температурные поля в условиях конвективного теплообмена связаны с полями скоростей. В общем случае между полем скоростей и температурным полем существует связь, т.е. распределение температуры зависит от распределения скоростей и, наоборот, распределение скоростей зависит от распределения температуры. В частном случае, когда массовыми силами в уравнениях Навье - Стокса можно пренебречь, а вязкость считать не зависящей от температуры, двусторонняя связь превращается в одностороннюю. Распределение скоростей становится независимым от распределения температуры. В этом случае можно говорить о задачах тепло - и массообмена, решаемых на заданном фоне динамических полей скорости. Известной проблемой, возникающей при построении разностных схем для данного класса задач, является аппроксимация нелинейных конвективных составляющих, входящих в эти уравнения. Структуру построения схем повышенного порядка точности для данного класса задач рассмотрим на примере линеаризованного одномерного уравнения переноса, соответствующего схемам расщепления по пространственной переменной x [2-4]:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + u \frac{\partial Y}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где Y – моделирует конвективно-диффузионный перенос; α – обобщенный коэффициент диффузии; u – линеаризованная скорость конвекции.

Известной проблемой, возникающей при построении разностных схем для уравнения (1) является

аппроксимация конвективного члена $u \frac{\partial Y}{\partial x}$. Разностные

схемы, в которых для представления конвективных членов используются центральные разности по пространственным переменным, приводит к нарушению монотонности в искомым решениях. Схемы же с разностями против потока оказываются точнее схем с центральными разностями не в смысле порядка ошибки аппроксимации, а в физическом смысле. Поэтому точность конечно-разностного представления производных для данного класса задач оказывается не эквивалентной точности представления дифференциального уравнения (1) [4]. В дальнейшем анализе при построении разностных схем уравнения (1) будем пользоваться понятием транспортности конвективного переноса. Конечно-разностный аналог дифференциального уравнения (1) будет обладать свойством транспортности, если возмущение, наложенное на функцию Y , переносится за счет конвекции только в направлении скорости u [4,5].

Пусть требуется найти приближенное решение уравнения (1) в области $x \in [x_0, x_L]$,

$t \in [t_0, T]$ при заданных условиях однозначности: начальном

$$Y|_{t=t_0} = YO(x), \quad (2)$$

и граничных условиях первого рода

$$Y|_{x=x_0} = YW(t), \quad Y|_{x=x_L} = YL(t) \quad (3)$$

Области определения искомой функции Y сопоставим сеточную область

$$\left. \begin{aligned} x_p &= x_{p-1} + p \times Dx1, \\ Dx1 &= (x_L - x_0) / 2m, \quad p = 1, 2m - 1 \\ t_j &= t_{j-1} + j \times Dt1, \quad Dt1 = (T - t_0) / M, \\ j &= 1, 2, \dots, M, \quad M \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

где m – целочисленный параметр счетности узлов по пространственной переменной.

Решение уравнения (1) в окрестности x_p - го узла сетки ищется в классе аналитических функций в виде ряда Тейлора [6]

$$Y_{p+\varepsilon_x,1}(t, \varepsilon_x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_x^n Y_{p,n+1}(t), \quad (5)$$

где

$$\varepsilon_x = \frac{x - x_p}{x_{p+1} - x_p} \in [-1, 1], \quad (6)$$

– нормированная переменная; $Y_{p,n+1}(t)$ - совокупность неизвестных тейлоровских компонент ($n=0, 1, 2, \dots$).

В общем случае линеаризованная скорость u в уравнении (1) зависит от переменных x и t . Аппроксимируем эту зависимость в окрестности

x_p ($p = 1, 2m - 1$) узла ступенчатой функцией:

$$u_{p+\varepsilon_x,1}(x, t)|_{\varepsilon_x=0} = u_{p,1} = const. \quad (7)$$

Для построения схем, обладающих свойством транспортности, введем в рассмотрение понятие целостного параметра транспортности β , выбираемого из условий:

$$\left. \begin{aligned} \beta &= -1, \text{ если } u_{p,1} > 0 \\ \beta &= +1, \text{ если } u_{p,1} < 0 \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

В дальнейшем предполагается, что условия (8) будут формализованы в виде function Sign ($u_{p,1}$: real): integer, возвращающей по обращению к ней значение знака скорости. После подстановки функции

$Y_{p+\varepsilon_x,1}(t, \varepsilon_x)$ (5) в уравнение (1), приравнявая коэф-

фициенты при одинаковых степенях ε_x^n , получим совокупность его дифференциальных следствий в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ):

$$\begin{aligned} Y_{p,n+1}(\varepsilon_t)' + (n+1) B_p Y_{p,n+2}(\varepsilon_t) = \\ = (n+1)(n+2) A_p Y_{p,n+3}(\varepsilon_t), \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$B_p = Dt1 \frac{u_{p,1}}{Dx1}, \quad A_p = Dt1 \frac{\alpha_p}{Dx1^2}, \quad (10)$$

$$Dx1 = x_{p=1} - x_p, \quad Dt1 = t_{j-1} - t_j$$

– сеточные комплексы, имеющие нулевую размерность;

$$\varepsilon_t = \frac{t - t_p}{Dt1} \in [0,1], \quad J = 1, 2, \dots, M. \quad (11)$$

– нормированная независимая переменная времени, j – номера временных слоев.

Покажем, что СОДУ (9) имеет форму Коши. Представим функцию YO(x), входящую в начальное условие (2), в виде ряда Тейлора[7]

$$YO_{p+\varepsilon_x,1}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_x^n YO_{p,n+1}, \quad (12)$$

где YO_{p,n+1} – известные тейлоровские компоненты начальной функции. После подстановки (5) в условие (2), приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях ε_x^n , найдем

$$Y_{p,n+1}(\varepsilon_t)_{\varepsilon_t=0} = YO_{p,n+1}, \quad (13)$$

что и требовалось доказать. Очевидно, что для текущего временного слоя компоненты YO_{p,n+1} берутся с предыдущего j-1 – го временного слоя.

Для построения замкнутых математических моделей на дифференциальных следствиях (9) при граничных условиях первого рода (3) конструирование численных алгоритмов повышенного порядка точности реализуется следующим образом [6,7].

Ограничимся в правой части функции (5) конечным числом слагаемых n=N, где N=2, 3, ... - произвольное целое число. Положив $\varepsilon_x = \pm 1$ и выделяя слагаемые

$Y_{p,N+1}$, $Y_{p,N}$, получим два алгебраических уравнения

$$\left. \begin{aligned} Y_{p,N+1} + Y_{p,N} &= F1 \\ Y_{p,N+1} - Y_{p,N} &= F2 \end{aligned} \right\}, \quad (14)$$

где

$$\left. \begin{aligned} F1 &= \left[Y_{p+1,1} - \sum_{n=0}^{N-2} Y_{p,n+1} \right] \\ F2 &= \left[Y_{p-1,1} - \sum_{n=0}^{N-2} (-1)^n Y_{p,n+1} \right] \end{aligned} \right\}, \quad (15)$$

Решение системы алгебраических уравнений (14) представляются в конечном виде:

$$\left\{ \begin{aligned} Y_{p,N+1} \\ Y_{p,N} \end{aligned} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ \begin{aligned} [Y_{p+1,1} \pm (-1)^N Y_{p-1,1}] - \\ - \sum_{n=0}^{N-2} [1 \pm (-1)^{N+n}] Y_{p,n+1} \end{aligned} \right\}, \quad (16)$$

где N=2, 3, ... - параметр редукции бесконечного ряда Тейлора (5) по n до n=N. Соотношения (16) в дальнейшем будем называть **закрывающими связями (ЗС)**. В частном случае при N=2, 3, получим:

$$\left. \begin{aligned} N = 2, \quad Y_{p,3} &= \frac{1}{2} \left[(Y_{p+1,1} + Y_{p-1,1}) - 2Y_{p,1} \right] \\ Y_{p,2} &= \frac{1}{2} \left[(Y_{p+1,1} - Y_{p-1,1}) - \Delta \right] \end{aligned} \right\}, \quad (17)$$

$$\left. \begin{aligned} N = 3, \quad Y_{p,4} &= \frac{1}{2} \left[(Y_{p+1,1} + Y_{p-1,1}) - 2Y_{p,2} \right] \\ Y_{p,3} &= \frac{1}{2} \left[(Y_{p+1,1} - Y_{p-1,1}) - 2Y_{p,1} \right] \end{aligned} \right\}, \quad (18)$$

и т. д.

Отметим, что конечно-разностные соотношения (17) совпадают с центральными разностями, имеющими следующий порядок аппроксимации

$$\left[\delta_{p,3} \right]_{<} \approx - \frac{Dx1^4}{24} \sup \left| \frac{\partial^4 Y}{\partial x^4} \right|, \quad \left[\delta_{p,2} \right]_{<} \approx - \frac{Dx1^3}{6} \left| \frac{\partial^3 Y}{\partial x^3} \right|.$$

Таким образом, ограничив в (9) параметр n конечным интервалом $n = 0, N - 2$, где N=2,3,... - произвольное целое число, представляется возможным конструирование численных алгоритмов для диффузионных составляющих с произвольным порядком точности по пространственной переменной [7].

При построении ЗС для дискретизации конвективных слагаемых в (9) необходимо учитывать условия транспортности (8). Ограничимся в правой части функции (5) конечным числом слагаемых n=N, где N=1,2,3,... - параметр редуцирования. Положив $\varepsilon_x = \beta$ получим алгебраическое уравнение первого порядка относительно тейлоровской компоненты $Y_{p,N+1}^k$. ЗС для конвективных слагаемых в (9) принимают следующий вид:

$$Y_{p,N+1}^k = \frac{1}{\beta^N} \left[Y_{p+\beta,1} - \sum_{n=0}^{N-1} \beta^n Y_{p,n+1} \right], \quad (19)$$

При N=1,2 получим

$$N = 1, \quad Y_{p,2}^k = \frac{1}{\beta} \left[Y_{p+\beta,1} - Y_{p,1} \right], \quad (20)$$

$$N = 2, \quad Y_{p,3}^k = \frac{1}{\beta^2} \left[Y_{p+\beta,1} - Y_{p,1} - \beta Y_{p,2} \right], \quad (21)$$

и т.д. Соотношение (20) при этом соответствует односторонним конечно-разностным схемам, имеющим следующий порядок аппроксимации:

$$\left\| \delta_{p,2} \right\| \leq -\beta \frac{Dx1^2}{2} \sup \left| \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} \right|.$$

В простейшем случае при N=2 в СОДУ (9) целочисленная переменная n изменяется в пределах $n = 0, 0$. Используя неявные схемы аппроксимации СОДУ (9) по переменной ε_t , получим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), имеющих трехдиагональную структуру

$$C_p Y_{p+1,1} - Y_{p,1} + D_p Y_{p-1,1} = f_{p,1}, \quad (22)$$

где

$$\left. \begin{aligned} C_p &= \frac{1}{\text{Det}} \left[A_p + \frac{1}{2}(1-\beta) \left| B_{p,1} \right| \right], \\ D_p &= \frac{1}{\text{Det}} \left[A_p + \frac{1}{2}(1+\beta) \left| B_{p,1} \right| \right], \\ f_{p,1} &= \frac{-Y_{0,1}}{\text{Det}}, \\ \text{Det} &= (1+2A_{p,1} + \left| B_{p,1} \right|). \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

В СЛАУ (22) элементы $Y_{0,1}$ и $Y_{2m,1}$ принимают значения граничных функций (3):

$$Y_{0,1} = YW(t_j), \quad Y_{2m,1} = YL(t_j), \quad (24)$$

а сеточные функции $Y_{p,1}$, $Y_{0,p,1}$ отнесены соответственно к j -му и предыдущему $j-1$ -му временным слоям, т.е. алгоритм дискретной задачи является эволюционным, как и поставленная задача (1-13). Очевидно, что математическая модель (22) - (24) обладает свойством транспортности конвективного переноса, если параметр транспортности β выбирается из условий (8). Аналогичным образом конструируются и схемы при других значениях параметра N . Например, при $N=3$ в СОДУ (9) $n = \overline{0,1}$. Для данного случая в качестве зависимых переменных рассматривается кроме самой функция $Y_{p,1}(\varepsilon_t)$ также и вторая тейлоровская компонента $Y_{p,2}(\varepsilon_x)$, т.е. ее градиентный аналог. Схемы более высокого порядка точности конструируются аналогичным образом.

Распараллеливание вычислений

Решение СЛАУ (22)–(24) можно рассматривать как одну из наиболее распространенных задач численного анализа. Для рассмотренного класса задач тепло- и массообмена это особенно актуально при решении больших многомерных задач в таких областях науки и техники, как металлургическая теплотехника, гидродинамика и т.д. Действительно, принятие в качестве методологической основы разностных схем расщепления, во-первых - обеспечивает экономичную и устойчивую реализацию численных моделей методом скалярных прогонок. Во-вторых, для выявления в последовательных программах скрытого параллелизма для эффективного его использования, позволяет выявить явные или скрытые свойства программы, определяющие ее строение. Или, как говорят иначе, ее **информационную структуру** [8]. Мы будем считать, что информационная структура программы для данного класса задач есть совокупность сведений о том, как отдельные элементы программы связаны между собой. Для этого достаточно будет рассмотреть СЛАУ следующего вида

$$C_p Y_{p+1,1} - Y_{p,1} + D_p Y_{p-1,1} = f_{p,1}, \quad (25)$$

где $\{C_p, D_p, f_{p,1}\}$ – известные последовательности. Элементы $\{Y_{0,1}, Y_{2m,1}\}$ – несут информацию о граничных условиях. Для граничных условий первого рода их

значения соответствуют принятым в (24). Покажем, что распараллеливание СЛАУ (25) с помощью перестановок, в основе которого лежит алгоритм «нечетно-четной» редукции, скрыто много возможностей для распараллеливания алгоритма решения подобных СЛАУ. Заметим, что это становится возможным лишь при условии, когда число узлов сетки (4) является степенью двойки, т.е. когда параметр счетности m в (4) будет удовлетворять условию [10]

$$m = 2^{k^*}, \quad (26)$$

где k^* – положительное целое число. Выполнение условия (26) приводит к следующим сеточным областям различной счетности

$$\left. \begin{aligned} k^* = 1, m = 2, p = \overline{1,3}, \\ k^* = 2, m = 4, p = \overline{1,7}, \\ k^* = 3, m = 8, p = \overline{1,15}, \\ k^* = 4, m = 16, p = \overline{1,31}, \quad \text{и т.д.} \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

Для такой топологии сеточных узлов представляется возможным описание множества $p = 1, 2m - 1$ по их свойствам кратности двум. Множеству $p = \{1, 2, 3, \dots, 2m-1\}$, элементы которого располагаются в порядке возрастания номеров, представляется возможным сопоставить $k = 0, k^*$ – последовательностей следующего вида

$$p_k = V_k 2^{k^* - k}, \quad (28)$$

где $V_k = \{1, 3, 5, \dots\}$ – множество нечетных чисел, ограниченных по k сверху

$$V_{k, \max} = 2^{k+1} - 1. \quad (29)$$

Классификация номеров узлов сеточной области с топологией, по свойствам их кратности двум, позволяет спрогнозировать на плоскости параллельную форму алгоритма решения СЛАУ (25) в виде графа, вершинами которого являются номера сеточных узлов (28).

При $k = 0$ из соотношений (28) получаем номер центрального узла сеточной области $p_0 = 1 \times 2^{k^*}$, равного по определению (26) значению параметра счетности m . Именно этот номер и будет определять вершину графа параллельного алгоритма. При $k=1$ из соотношений (28) получаем индексы двух смежных узлов $p_1 = 1 \times 2^{k^* - 1}$, $p_3 = 3 \times 2^{k^* - 1}$, определяющих первый ярус параллельной формы алгоритма и т.д. Завершающий ярус реализуется при $k = k^*$ и соответствует последовательности индексов, характеризующих полную совокупность сеточных узлов, имеющие нечетные номера $p_{k^*} = \{1, 3, 5, \dots, 2m - 1\} \times 2^0$. Таким образом, высотой параллельной формы алгоритма должно быть число k^* , входящее в условие (28). Число вершин в ярусах параллельной формы алгоритма должно определяться длиной $V_k - x$ последовательностей, ограниченных сверху числом $V_{k, \max}$, вычисляемого по формуле (29).

Отображение алгоритма обращения СЛАУ (25) на вычислительный граф параллельной формы реализу-

ется с помощью перестановок, в основе которых лежит алгоритм <<нечетно-четной>> редукции [9]. Идея этого алгоритма состоит в исключении коэффициентов системы с помощью элементарных преобразований строк. На первом этапе алгоритма конструируются формулы для бинарных операций замещения строк

$$\left. \begin{aligned} Y_{p-2^{k-1},1} &= -f_{p-2^{k-1}}^{(k-1)} + C_{p-2^{k-1}}^{(k-1)} Y_{p,1} + \\ &+ D_{p-2^{k-1}}^{(k-1)} Y_{p-2^k,1} \\ Y_{p+2^{k-1},1} &= -f_{p+2^{k-1}}^{(k-1)} + C_{p+2^{k-1}}^{(k-1)} Y_{p,1} + \\ &+ D_{p+2^{k-1}}^{(k-1)} Y_{p,1} \end{aligned} \right\}, \quad (30)$$

где $k=1, 2, \dots$ – целочисленный параметр операций. При $k=1$ из соотношений (30) найдем выражения для $Y_{\pm 1,1}$, 1-х сеточных функций, где индекс (0) в последовательностях

$\{C_{p\pm 1}^0, D_{p\pm 1}^0, f_{p\pm 1}^0\}$ характеризует их принадлежность к исходной СЛАУ (25). После их подстановки замещением в уравнение (25) получаем трехдиагональную алгебраическую систему той же структуры порядка m относительно переменных

$\{Y_{2,1}, Y_{4,1}, \dots, Y_{2m-2,1}\}$. Благодаря этой операции замещение из всех строк СЛАУ (25) исключаются переменные с нечетными номерами. В общем случае k -го повторного применения этого процесса к $(k-1)$ -му редуцируется в СЛАУ той же структуры:

$$C_p^{(k)} Y_{p+2^k,1} - Y_{p,1} + D_p^{(k)} Y_{p-2^k,1} = f_{p,1}^{(k)}, \quad (31)$$

где

$$\left. \begin{aligned} C_p^{(k)} &= \frac{C_p^{(k-1)} C_{p+2^{k-1}}^{(k-1)}}{De_{k,p}^{(k)}}, D_p^{(k)} = \frac{D_p^{(k-1)} D_{p-2^{k-1}}^{(k-1)}}{De_{k,p}^{(k)}} \\ f_p^{(k)} &= \frac{1}{De_{k,p}^{(k)}} \left(f_{p,1}^{(k-1)} + C_p^{(k-1)} f_{p+2^{k-1},1}^{(k-1)} + D_p^{(k-1)} f_{p-2^{k-1},1}^{(k-1)} \right) \\ De_{k,p}^{(k)} &= (1 - C_p^{(k-1)} D_{p+2^{k-1}}^{(k-1)} - D_p^{(k-1)} C_{p-2^{k-1}}^{(k-1)}) \end{aligned} \right\}, \quad (32)$$

Очевидно, что применение этого процесса редукции при $k = k^*$ приводит к одному уравнению относительно сеточной функции центрального узла $Y_{m,1}$.

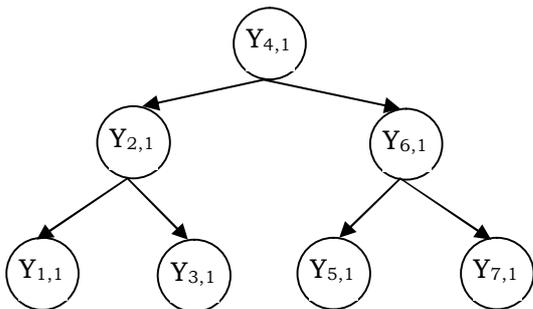


Рис. 1. Схема операций исследования САУ (56) при $m=4$

Более наглядно последовательность этих операций можно представить в виде графа параллельного алгоритма. На рис. 1,2 приведены графы алгоритмов, соответствующие различным значениям параметра m .

В общем случае вычислительный граф параллельной формы алгоритма можно представить в следующем виде

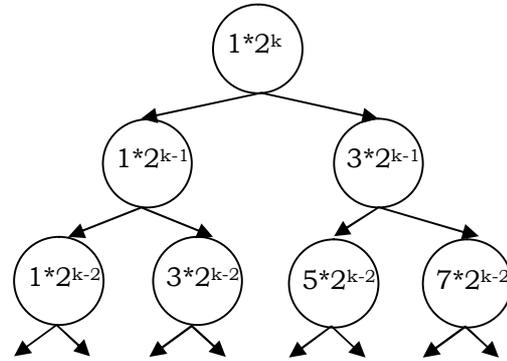


Рис. 2. Схема операций исследования СЛАУ (25) для произвольного значения параметра m

Заключительный ярус в схеме Рис.2 включает полную последовательность сеточных функций с нечетными номерами. Таким образом, представляется возможность обсудить наиболее важные свойства параллельных форм алгоритма решения СЛАУ (25) методом <<нечетно-четной>> редукции. Во-первых, очевидно, что применение графов для описания и исследования общей задачи отображения описанного выше алгоритма на архитектуру параллельных вычислительных систем, делает эту процедуру наглядной. Во-вторых, на каждом фиксированном уровне все операции разветвления могут быть выполнены одновременно и параллельно. В третьих – на любом уровне процесса декомпозиции исходной СЛАУ декомпозиция всех промежуточных систем также может выполняться параллельно. Следовательно, можно утверждать, что разработанный алгоритм обладает высокой степенью параллелизма. Его применение для решения трехдиагональных СЛАУ (25) на параллельных вычислительных устройствах является весьма перспективным направлением прикладной математики.

Выводы и перспективы дальнейших исследований

Большинство обычных алгоритмов решения трехдиагональных систем уравнений (25) (метод прогонки, сдваивания, разложение матрицы в произведение двухдиагональных матриц и т.д.[9]) при наличии нескольких процессоров работают, как правило, не быстрее, чем при наличии одного процессора. Причина этого – в существенной последовательности вычислений обычных алгоритмов [8-10]. В алгоритме <<нечетно-четной редукции>>, напротив, скрыто много возможностей распараллеливания. Это объясняется тем, что алгоритм перестановок решает систему уравнений одновременно с двух концов. Поэтому, его применение для решения трехдиагональных систем на параллельных ЭВМ для

данного класса задач может быть весьма перспективным направлением прикладной математики. Становится также возможным и совместное использование метода прогонки и параллельных алгоритмов, описанных выше. Действительно, для решения СЛАУ (31) при $k=1$, размерность которой по сравнению с исходной в два раза меньше, можно использовать алгоритм прогонок. Тогда определение переменных, имеющих нечетные номера, представляется возможным вычислить по формулам (30) на $m/2$ – процессорах одновременно и т.д.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ивашенко В.П., Швачич Г. Г., Соболенко А. В., Протопопов Д. В. Информационная система интеллектуальной поддержки принятия решений процесса прокатки // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. 3(3)2003 – С. 4.-10.
2. Коздоба Л. А. Вычислительная теплофизика. – Киев: Наук. Думка, 1992, 224 с.
3. Себиси Т., Брэдшоу П. Конвективный теплообмен. Физические основы и вычислительные методы: Пер. с англ. – М.: Мир, 1987, 592 с.
4. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. Пер. с англ. – М.: Мир, 1980., 816 с.
5. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. – М.: Наука. 1989, 608 с.
6. Шмукин А. А. О численно-аналитическом методе решения задач механики жидкости и газа // Прикладные вопросы аэродинамики летательных аппаратов. – Киев: Наук.думка. 1984. С. 87-97
7. Шмукин А. А. Численно-аналитический способ дискретизации нестационарных задач тепло- и массообмена. – Днепропетровск, 1991., 14 с. (Препринт /АН Украины, ин-т техн. механики; 91-16).
8. Воеводин В. В. Математические модели и методы в параллельных процессах. – М.: Наука. Гл.ред.физ.-мат. мет., 1986, 29 с.
9. Системы параллельной обработки: Пер. с англ. / Под редакцией Д. Ивенса. – М.: Мир, 1985, 416 с.
10. Швачич Г.Г., Шмукин А.А. Особенности конструирования параллельных вычислительных алгоритмов для ПЭВМ в задачах тепло – и массообмена // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. 2(8)2004 – С. 42-47.

пост.13.06.05