

# О параллельном алгоритме решения уравнений «реакция-диффузия-конвекция»

В. Е. Карпов, А. И. Лобанов

В приложениях возникают системы жестких обыкновенных дифференциальных уравнений (ЖС ОДУ) высокой размерности со специальной структурой. В частности, при решении задач «реакция-диффузия-конвекция» с использованием разностных схем высокого порядка матрица Якоби возникающей системы ОДУ будет блочно-трехдиагональной. Рассматривается вопрос построения параллельного варианта метода Розенброка для решения таких систем. В отличие от известных по литературным данным реализаций, высокая степень параллельности достигается как за счет выбора итерационного метода решения системы алгебраических уравнений, так и за счет декомпозиции расчетной области.

В ряде приложений возникают системы жестких обыкновенных дифференциальных уравнений (ЖС ОДУ) высокой размерности со специальной структурой. В частности, при решении задач типа «реакция-диффузия-конвекция» с использованием разностных схем высокого порядка аппроксимации матрица Якоби возникающей системы ОДУ будет блочно-трехдиагональной. Поясним сказанное на примере. Рассмотрим уравнение непрерывности для фракций вещества  $(y_j \rho)'_t + \text{div}(y_j \rho v) = w_j$ , где  $\rho$  — массовая плотность смеси реагирующих веществ,  $v$  — скорость смеси,  $y_i$  — массовая доля фракции вещества в смеси,  $w_i$  — скорость образования или расходования фракции. Рассмотрим использование аналога сеточно-характеристического метода [1]. Вдоль характеристики каждое уравнение системы переходит в обыкновенное дифференциальное уравнение. Запишем систему ОДУ в векторном виде  $\dot{\mathbf{Y}} = \mathbf{f}(\mathbf{Y}, t)$ . Правая часть системы уравнений получается в результате интерполяции по соседним пространственным узлам. Система ОДУ имеет размерность  $k \cdot N$ , где  $k$  — количество фракций вещества в смеси, а  $N$  — число пространственных узлов внутри расчетной области. Для ее решения воспользуемся методом Розенброка

$$\mathbf{Y}^{n+1} = \mathbf{Y}^n + \sum_{j=1}^s \gamma_j \mathbf{k}_j, \quad \mathbf{k}_i = \mathbf{B}_i^{-1} \delta_i(\mathbf{Y}^n, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{i-1}), \quad \text{где } \mathbf{B}_i = \mathbf{E} - \tau \mu_{ii} \mathbf{J}, \quad \delta_i(\mathbf{Y}^n, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{i-1}) =$$

$$= \tau \mathbf{f} \left( \mathbf{Y}^n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} \mathbf{k}_j \right) + \tau \mathbf{J} \sum_{j=1}^{i-1} \mu_{ij} \mathbf{k}_j, \quad i = 1, \dots, s. \quad \text{Здесь } \mathbf{E} \text{ — единичная матрица, } \mathbf{J} \text{ — матрица}$$

Якоби системы,  $\mu_{ij}, \gamma_j, \beta_{ij}$  — коэффициенты метода,  $s$  — количество стадий. Обращение матрицы  $\mathbf{B}$  будем проводить неявным итерационным методом  $\frac{\mathbf{k}_i^{m+1} - \mathbf{k}_i^m}{\zeta} =$

$$= \mathbf{C}_i^{-1} \left( \delta_i(\mathbf{Y}^n, \mathbf{k}_1^m, \dots, \mathbf{k}_{i-1}^m) - \mathbf{B}_i \mathbf{k}_i^m \right), \quad \text{где } \mathbf{C}_i = \text{diag } \mathbf{B}_i \text{ — блочно-диагональная часть матрицы } \mathbf{B}_i,$$

$\zeta$  — итерационный параметр.

Наибольший интерес представляет распараллеливание на системах с распределенной памятью, которое осложняется структурой матрицы Якоби. Выходом из сложившейся ситуации является приближенное вычисление векторов  $\mathbf{k}$  на отдельных узлах комплекса. На параллельных вычислительных комплексах возможно расширение зоны ответственности каждого узла пропорционально числу процессоров. В настоящее время проводятся тестовые расчеты для оценки погрешностей метода при решении модельных задач.

## Литература

1. М.–К. М. Магомедов, А. С. Холодов. Сеточно-характеристические численные методы. — М.: Наука, 1988. — 290 с.