

Разработка параллельного алгоритма решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений

Д.А. Турсунов¹, М.Е. Семенов²

Уральский государственный педагогический университет¹, Томский политехнический университет²

Работа посвящена разработке параллельного алгоритма, который учитывает архитектуру вычислительного кластерного комплекса "СКИФ-Политех" (<http://cluster.tpu.ru/>).

Параллельный алгоритм разрабатывается для численного решения задачи Коши на примере балансовой модели пластической деформации материалов с гранецентрированной кубической (ГЦК) структурой. Математическая модель, описывающая закономерности пластической деформации ГЦК материалов, включает следующие переменные: плотность сдвигообразующих дислокаций, плотности дислокационных диполей межузельного и вакансионного типов, а также концентрации межузельных атомов, вакансий и бивакансий [1].

Модель записана в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), которая является жесткой. Жесткость системы обусловлена тем, что интенсивности накопления дислокаций и точечных дефектов существенно разноскоростные, кроме этого в ходе моделирования значения параметров внешнего воздействия на материал могут изменяться скачкообразно, что также оказывает влияние на собственные числа якобиана системы уравнений. Данные особенности задачи Коши накладывают существенные ограничения на выбор и реализацию численного метода интегрирования.

Предлагается использовать метод коллокаций для записи блочной формы n -шагового k -точечного метода в виде формул дифференцирования назад. Преимуществом предлагаемых методов является, то, что для каждого k -точечного блока новые значения искомой функции вычисляются одновременно. Благодаря этой особенности блочных методов вычисления для каждого узла блока можно реализовать параллельно [2].

Для апробации предлагаемого метода численно были найдены решения задачи Коши для автономных ОДУ (линейный и нелинейный случаи), жестких систем ОДУ (нелинейный и неоднородный случаи). Результаты численных экспериментов [2] показали, что решение тестовых задач Коши может быть найдено с помощью одношагового 9-точечного блочного метода с более низкой абсолютной погрешностью, чем у существующих блочных методов. В дальнейшем планируется провести оптимизацию алгоритма численного решения задачи Коши с помощью предлагаемых блочных методов и выбрать наилучшее сочетание количество шагов (n) и точек в блоке (k).

Предлагаемые блочные методы являются самостартующими и могут быть использованы для численного решения задачи Коши для уравнений и систем ОДУ первого порядка различной степени жесткости.

Литература

1. Семенов М.Е., Колупаева С.Н. Деформация ГЦК монокристаллов с мгновенным изменением температуры и скорости деформации // Известия высших учебных заведений. Физика. 2014. Т. 57, N 11/2. С. 157–160.
2. Semenov M., Tursunov D., Erkebaev U. Design block methods for solving ordinary differential equations // Fifth Congress of the Turkic World Mathematicians, 5-7 June, 2014, Bulan-Sogottu, Kyrgyzstan, Proceedings. Bishkek: Kyrgyz Mathematical Society, 2014. P. 159–163.