Вісник Національного технічного університету "ХПІ", 2022, № 1–2 (7-8)
ISSN 2079-0031 (Print) ISSN 2411-0558 (Online)

УДК 004.272.2:519.63 DOI: 10.20998/2411-0558.2022.02.09

О. А. ДМИТРІЄВА[1,2], д-р техн. наук, проф., [1]НТУУ "КПІ ім. І. Сікорського", Київ, Україна, [2]Інститут моделювання водно-екологічних систем університету Штутгарта, Німеччина,
В. Г. ГУСЬКОВА, PhD, ст. викл. НТУУ "КПІ ім. І. Сікорського", Київ, Україна

ГЕНЕРУВАННЯ ПАРАЛЕЛЬНИХ КОЛОКАЦІЙНИХ РІЗНИЦЕВИХ СХЕМ З ВИКОРИСТАННЯМ ІНТЕГРО-ІНТЕРПОЛЯЦІЙНОГО ПІДХОДУ

Розглянуто питання розробки стійких паралельних різницевих схем заданого порядку точності, орієнтованих на дискретизацію диференційних рівнянь або їх систем зі сконцентрованими та розподіленими параметрами, з використанням інтегро-інтерполяційного підходу до генерації розрахункових коефіцієнтів. Різницеві схеми, що пропонуються, сприяють підвищенню ефективності паралельного моделювання та оптимізації динамічних процесів, що описуються еволюційними рівняннями з розподіленими параметрами і характеризуються відсутністю аналітичних розв’язків. Введення в різницеві схеми похідних вищих порядків сприяє підвищенню точності отриманих результатів і вирівнюванню порядків апроксимації для всіх розрахункових точок у блоці. Пропонований підхід є універсальним для отримання різницевих рівнянь різних видів. Отримані на основі такого підходу розрахункові формули для багатоточкових різницевих рівнянь мають меншу обчислювальну складність і орієнтовані на реалізацію в обчислювальних системах з паралельною архітектурою. Бібліогр.: 15 назв.

Ключові слова: інтегро-інтерполяційний підхід; різницеві схеми; колокаційні блокові методи; паралельні обчислення.

Вступ. Об'єктивність результатів моделювання безпосередньо залежить від рівня розробки фундаментальної математичної моделі, її припущень та, особливо, від задіяних чисельних підходів для реалізації такої моделі. Ці питання стають особливо актуальними, коли лабораторні чи промислові експерименти неможливо провести через дорожнечу або відсутність реальної системи, яка тільки розробляється або ще, взагалі, не існує. Також метою моделювання може бути імітація еволюції процесів в часі, коли, наприклад, необхідно оцінити запаси та можливість поповнення водних ресурсів, обсяги виробництва відновлюваної енергії (сонячної, вітрової, геотермальної, припливної тощо) або зміни клімату [1 – 3]. До теперішнього часу для таких завдань математичне моделювання за підтримки високопродуктивних обчислень [4] залишається майже єдиним підходом [1], що забезпечує одержання об'єктивних результатів.

Аналіз стану питання. Обмеження галузі застосування відомих чисельних методів пояснюється безліччю факторів, серед яких складна геометрія області пошуку розв’язання, жорсткість, погана обумовленість, велика кількість параметрів, висока розмірність. Саме останній фактор, з одного боку, вимагає залучення високопродуктивних обчислень, а з іншого, обмежує застосування тих чи інших чисельних методів, через неможливість ефективної паралельної реалізації. Отже одним з ключових запитів до чисельного розв’язання прикладних завдань великої розмірності є вибір чисельного методу (методів), який повинен бути орієнтований на реалізацію в паралельних обчислювальних системах, і, за можливістю, враховувати топологію процесорного поля. Переважна більшість великомасштабних прикладних моделей включає диференційні рівняння (або їх системи), як звичайні, так і з частинними похідними. Такі рівняння дозволяють описувати динамічні процеси теплопровідності, зміни щільності концентрації речовин, поширення домішок, стійкості до відмов, відновлення м'язів, генерування нейронних сигналів та інші реакції [5]. Від успішності розв'язання таких рівнянь залежить адекватність та ефективність тієї чи іншої розробленої моделі. Незважаючи на те, що на сьогоднішній день розроблено та реалізовано безліч аналітичних та чисельних підходів для розв’язання тих чи інших диференційних рівнянь [6, 7], залишаються численні проблеми, що обмежують галузі застосування відомих методів.

Аналіз основних досягнень і літератури Пропоновані в [6 – 9] методи можуть використовуватися для паралельного моделювання динамічних об'єктів із зосередженими параметрами, а також об'єктів з розподіленими параметрами, для яких описові рівняння з частинними похідними можуть бути дискретизовані за допомогою методу прямих [10]. Значний інтерес містять питання моделювання поведінки мішаних систем, які складаються, наприклад, з диференційних і алгебраїчних рівнянь [11], але в такому разі автори обмежуються лише застосуванням стадійних методів, показники паралелізму яких є низькими [12]. В той же час до сучасних математичних моделей висуваються вимоги застосування стійких чисельних методів заданого порядку точності з високими показниками паралелізму. З цього приводу значний інтерес становлять питання розробки різницевих схем, загальні підходи до створення яких описано в роботах [12 – 15].

То ж становлять питання розробки алгоритмів генерації розрахункових коефіцієнтів стійких паралельних різницевих схем заданого порядку точності В [14] розглянуто питання паралельного отримання числових розв’язків звичайних диференційних рівнянь та їх систем або рівнянь з частинними похідними. При цьому зведення початкового

ISSN 2079-0031 (Print) ISSN 2411-0558 (Online)

завдання з частинними похідними до завдання Коші (1) здійснюється за допомогою методу прямих, який представляє собою напівдискретний метод [10] з дискретизацією за просторовою змінною (змінними)

$$u'(t) = f\big(t, u(t)\big), u(t_0) = u_0, t \in [t_0, T]. \quad (1)$$

У разі просторової дискретизації отримана система може бути реалізована з використанням розроблених паралельних підходів до розв'язання систем звичайних диференційних рівнянь (СЗДР) [13 – 14], з вихідними початковими і граничними умовами. При цьому всі переваги розв'язання (паралельне управління кроком, локальний контроль помилок, простота явних методів і стійкість неявних) можуть бути реалізовані і для випадку частинних похідних, тобто, такий підхід дозволяє отримати наближення вищого порядку при дискретизації просторових похідних без значного збільшення обчислювальної складності.

Мета статті. Робота присвячена питанням розробки стійких паралельних різницевих схем заданого порядку точності, орієнтованих на дискретизацію диференційних рівнянь або їх систем зі сконцентрованими або розподіленими параметрами, з використанням інтегро-інтерполяційного підходу до генерації розрахункових коефіцієнтів.

Інтегро-інтерполяційний підхід до генерації розрахункових коефіцієнтів. Інтегро-інтерполяційний підхід полягає в знаходженні багаточлена ступеня s, у якого в заданих точках (точках коллокації) похідні збігаються з векторним полем диференційного рівняння. Нехай s – позитивне натуральне число, що відповідає кількості розрахункових вузлів (розмірності блоку з номером n) $t_{n+1}, t_{n+2}, \dots, t_{n+s}$, для яких необхідно визначити значення наближених розв'язків диференціального рівняння $u_{n+1}, u_{n+2}, \dots, u_{n+s}$. Тоді по парах $\{t_{n+j}, f\big(t_{n+j}, u_{n+j}\big)\}, j = 0,1,2, \dots s$ можна побудувати багаточлен $P_s(t)$, значення похідних якого збігалися б з векторним полем диференціального рівняння (1) у точках колокації $f\big(t_{n+j}, u_{n+j}\big)$. Як правило, в якості такого інтерполяційного багаточлена використовується багаточлен Лагранжа. Якщо проінтегрувати рівняння (1) за t, можна отримати

$$x_{n+j} = x_n + \int_{t_n}^{t_n + j\tau} f\big(t, x(t)\big) dt, \qquad j = 0,1,2, \dots s \, . \quad (2)$$

Після здійснення заміни функції $f\big(t, x(t)\big)$ в (2) на поліном $P_s(t)$

$$u_{n+j} = u_n + \int_{t_n}^{t_n+j\tau} P_s(t)dt, \qquad j = 0,1,2, \dots s, \tag{3}$$

формується система нелінійних різницевих рівнянь для визначення значень $u_{n+j}, j = 0, 1, 2, \dots s$ наближеного розв'язання завдання Коші (1). Якщо вимоги точності розв’язання (1) високі, тоді система різницевих рівнянь може бути розширена або за рахунок введення додаткових розрахункових точок (збільшення значення s), або за рахунок переходу на різницеву схему з множиною m точок в опорному блоці, побудова багаточлена $P_s(t)$ в такому випадку здійснюється по парах $\{t_{n+j}, f(t_{n+j}, u_{n+j})\}, j = -m+1, -m+2, \dots, 0,1,2, \dots s.$ Також точність розрахунку можна підвищити за рахунок введення в систему різницевих рівнянь похідних вищих порядків [14]. Так, якщо ввести замість інтерполяційних багаточленів Лагранжа інтерполяційні багаточлени з кратними вузлами, наприклад, Гауса або Ерміта, для яких вимагати збігу в точках колокації $t_{n+1}, t_{n+2}, \dots, t_{n+s}$ не тільки значень функції $f(t, x(t))$, а й її похідних $f^{(j)}(t, x(t)), j = 1, 2, \dots, p_i$ до порядка p_i включно, можна значно підвищити порядок апроксимації, і, відповідно, швидкість збіжності. В якості багаточлена з кратними вузлами в роботі використовувалися багаточлени Ерміта, які можуть бути побудовані у вигляді рекурентних співвідношень:

$$H_0(t) = 1,$$

$$H_1(t) = 2t,$$

$$H_2(t) = 4t^2 - 2, \dots,$$

$$H_{n+1}(t) = 2tH_n(t) - 2nH_{n-1}(t),$$

із загальною формулою опису виду

$$H_n(t) = (-1)^n e^{t^2} \frac{d^n e^{-t^2}}{dt}.$$

Інтерполяційний багаточлен Ерміта $H_s(t)$ будується за таблицею $\{t_{n+j}, F_{n+j}, F'_{n+j}, \dots, F^{(p_j)}{}_{n+j}\}$, $j = 0,1,2, \dots, s$. Після заміни функції $f(t, x(t))$ в (2) на поліном Ерміта $H_s(t)$

$$u_{n+j} = u_n + \int_{t_n}^{t_n+j\tau} H_s(t)dt, \qquad j = 0,1,2, \dots s \tag{4}$$

можна отримати систему нелінійних різницевих рівнянь для визначення

ISSN 2079-0031 (Print) ISSN 2411-0558 (Online)

шуканих значень $u_{n+j}, j = 0,1,2, \dots s$ наближеного розв'язання завдання Коші (1).

Генерування коефіцієнтів колокаційних одно- і багатокрокових блокових різницевих схем. Одним з основних питань при ефективному застосуванні багатоточкових методів є визначення розрахункових коефіцієнтів різницевих схем, за допомогою яких погоджується топологія процесорного поля і задані порядки точності. В якості базових методів в роботі обрано колокаційні блокові одно- і багатокрокові методи [12, 13] з можливим залученням похідних вищих порядків [14]. Додатковою вимогою стає забезпечення стійкості чисельних різницевих схем, питання доказу стійкості таких схем досліджувалися в [12 – 14], в цих же роботах наведено шаблони і загальний вигляд розрахункових схем однокрокових (5) та багатокрокових (6) багатоточкових блокових методів

$$u_{n,i} = u_{n,0} + \tau\left(d_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^{s} a_{i,j} F_{n,j}\right), \;\; i = 1,2, \dots, s, n = 1,2, \dots, N, \quad (5)$$

$$u_{n,i} = u_{n,0} + \tau\left(\sum_{j=-(m-1)}^{0} b_{i,j} F_{n,j} + \sum_{j=1}^{s} a_{i,j}\, F_{n,j}\right), i = 1,2, \dots, s, \quad (6)$$

де $u_{n,i}$ – наближені значення розв'язання завдання Коші (1) в точках $t_{n,i}$, $i = 0,1,2, \dots, s$,

τ – крок інтегрування,

$F_{n,j} = f\left(t_n + j\tau, u_{n,j}\right)$ – праві частини рівняння (1) у відповідних точках, $j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0,1, \dots, s$,

$d_i, a_{i,j}$ і $b_{i,j}$ – коефіцієнти розрахункових схем,

$$i = 1,2, \dots, s, \quad j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0,1, \dots, s,$$

N – кількість розрахункових блоків,

s – розмірність блоку (кількість розрахункових точок).

Для розмежування розрахованих і шуканих точок і представлення різницевих співвідношень у векторному поданні можна ввести відповідні позначення:

$U_{n+1} = \{u_{n+1,i}\}, \; n = 1,2, \dots, N, \; i = 1,2, \dots, s$ – вектор шуканих точок,

$F_n = f\left(t_n + j\tau, u_{n,j}\right), \; n = 1,2, \dots, N, j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0$,

$F_{n+1} = f\left(t_n + j\tau, u_{n,j}\right), \; n = 1,2, \dots, N, j = 1, \dots, s$ – відповідно, праві частини рівнянь (5), (6) в відомих і шуканих точках,

$U_n = \left(u_{n,0}\right) e$ – відоме розв'язання в точці $t_{n,0}$,

ISSN 2079-0031 (Print) ISSN 2411-0558 (Online)

e – одиничний вектор розмірності s.

Тоді в векторній формі система рівнянь (5), (6) буде мати вигляд

$$U_{n+1} = U_{n,0} + \tau(BF_n + AF_{n+1}), \tag{7}$$

де B –вектор коефіцієнтів $\{d_1, d_2, \dots, d_s\}$ для випадка (5), або матриця коефіцієнтів $\{b_{i,j}\}, i = 1,2, \dots, s, j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0$ для (6), A – матриця коефіцієнтів $\{a_{i,j}\}, i, j = 1,2, \dots, s$.

Саме питання визначення коефіцієнтів $d_i, a_{i,j}$ і $b_{i,j}$ розрахункових схем, відповідно, визначення вигляду матриць A, B і є основним предметом розгляду цього підрозділу.

Процедура побудови інтерполяційних багаточленів та формування системи рівнянь на основі (3) – (4) для визначення розрахункових коефіцієнтів характеризується високою трудомісткістю, великими обсягами символьних перетворень. Проблема стає особливо гострою, коли, виходячи з посилень вимог щодо точності, до розрахункових схем додаються додаткові розрахункові або опорні точки, що тягне за собою збільшення кількості невідомих коефіцієнтів, і, як наслідок, збільшення ступеня полінома та зростання розмірності системи рівнянь. Якщо в розрахункову схему високого порядку додатково вводяться ще й похідні вищих порядків, теоретичне виведення розрахункових формул стає неможливим. Саме тому була розроблена програмна система, яка, використовуючи символьні перетворення, дозволяє згенерувати різницеві схеми під довільну конфігурацію процесорного поля із заданим порядком точності. Продемонструвати роботу програмної системи можна на конкретних значеннях параметрів розмірностей розрахункових і опорних (у разі необхідності) одно- і багатокрокових методів.

Використовуючи s послідовних вузлів основної сітки, побудуємо по них інтерполяційний багаточлен і отримаємо відповідну систему різницевих рівнянь виду (5). Наведемо різницеві рівняння однокрокового триточкового методу, побудовані за вузлами $i = 1,2,3$. Тоді на множині точок коллокації $\{t_{n,1} = t_n + \tau, t_{n,2} = t_n + 2\tau, t_{n,3} = t_n + 3\tau\}$, і відповідних правих частин рівняння (1) $\{F_{n,1} = f(t_{n,1}, u_{n,1}), F_{n,2} = f(t_{n,2}, u_{n,2}), F_{n,3} = f(t_{n,3}, u_{n,3})\}$ з початковою (опорною) точкою $\{t_{n,0}, F_{n,0}\}$ система різницевих рівнянь набуде вигляду

$$u_{n,1} = u_{n,0} + \frac{1}{24}\tau\left(9F_{n,0} + 19F_{n,1} - 5F_{n,2} + F_{n,3}\right), \tag{8}$$

$$u_{n,2} = u_{n,0} + \frac{1}{3}\tau\left(F_{n,0} + 4F_{n,1} + F_{n,2}\right), \quad (8)$$

ISSN 2079-0031 (Print) ISSN 2411-0558 (Online)

$$u_{n,3}{=}u_{n,0}+\frac{3}{8}\tau\big(F_{n,0}+3F_{n,1}+3F_{n,2}+F_{n,3}\big). \tag{8}$$

Порядок точності різницевого однокрокового методу (8) можна оцінити, розкладаючи точні значення $x\big(t_{n,0}+i\tau\big)$, $f\Big(t_{n,0}+i\tau, x\big(t_{n,0}+ +i\tau\big)\Big), i=1,\dots,s$ в ряди Тейлора в околі точки $t_{n,0}$, та визначаючи відповідні порядки нев'язків $r_{n,i}, i=1,\dots,s$ у кожній з точок колокації. Такі обчислення також виконуються за допомогою розробленого програмного забезпечення. Остаточне подання нев'язків для кожної розрахункової точки в різницевій схемі (8) буде мати вигляд:

$$\begin{aligned} r_{n,1} &= \frac{19}{30}x^{(5)}[0]\tau^4+O[\tau]^5,\\ r_{n,2} &= \frac{1}{30}x^{(5)}[0]\tau^4+O[\tau]^5,\\ r_{n,3} &= \frac{1}{10}x^{(5)}[0]\tau^4+O[\tau]^5. \end{aligned} \tag{9}$$

Отже, можна стверджувати, що схема (8) апроксимує початкове рівняння (1) з порядком точності $O[\tau]^4$, такий факт погоджується з твердженням про порядок точності однокрокових багатоточкових колокаційних методів [15], який дорівнює $O[\tau]^{s+1}$. Розроблена програмна система дозволяє отримати розрахункові коефіцієнти, ґрунтуючись на побудові інтерполяційних поліномів для багатокрокових багатоточкових блокових методів (6).

Оберемо в якості точок колокації множину $\{\,t_{n,1}=t_n+\tau,\ t_{n,2}= =\ t_n+2\tau,\ t_{n,3}=t_n+3\tau,\ t_{n,4}=t_n+4\tau\}$, додатково залучимо до схеми множину опорних точок $\{\,t_{n,-2}=t_n-2\tau,\ t_{n,-1}=t_n-\tau, t_{n,0}=\ t_n\}$ і відповідних правих частин рівняння (1) у кожній з точок колокації: $\{F_{n,1}=f\big(t_{n,1},u_{n,1}\big),\quad F_{n,2}=f\big(t_{n,2},u_{n,2}\big), F_{n,3}=f\big(t_{n,3},u_{n,3}\big),\quad F_{n,4}= =\ f\big(t_{n,4},u_{n,4}\big)\}$. Через громіздкість системи різницевих рівнянь для такого випадку можна навести лише шукані матриці коефіцієнтів A і B з подання (6), що повністю визначають різницеву розрахункову схему:

ISSN 2079-0031 (Print) ISSN 2411-0558 (Online)

$$B=\begin{pmatrix} \frac{271}{60480} & -\frac{23}{504} & \frac{10273}{20160} \\ \frac{1}{756} & -\frac{2}{105} & \frac{167}{420} \\ \frac{13}{2240} & -\frac{3}{56} & \frac{1161}{2240} \\ -\frac{8}{945} & \frac{16}{315} & \frac{58}{315} \end{pmatrix},\ A=\begin{pmatrix} \frac{586}{945} & -\frac{2257}{20160} & \frac{67}{2520} & -\frac{191}{60480} \\ \frac{1172}{945} & \frac{167}{420} & -\frac{2}{105} & \frac{1}{756} \\ \frac{34}{35} & \frac{2631}{2240} & \frac{111}{280} & -\frac{29}{2240} \\ \frac{1504}{945} & \frac{128}{315} & \frac{464}{315} & \frac{286}{945} \end{pmatrix}.$$

Відповідні нев'язки для кожної розрахункової точки в отриманій різницевій схемі будуть мати вигляд:

$$r_{n,1}=-\tfrac{191}{2}x^{(8)}[t_n]\tau^7+O[\tau]^8,\ r_{n,2}=O[\tau]^8,$$

$$r_{n,3}=-\frac{13}{2}x^{(8)}[t_n]\tau^7+O[\tau]^8,\ \ r_{n,4}=-4x^{(8)}[t_n]\tau^7+O[\tau]^8.$$

Отже, порядок апроксимації отриманої різницевої схеми дорівнює $O[\tau]^7$.

Генерування коефіцієнтів колокаційних різницевих схем з залученням похідних вищих порядків. Побудовані на інтерполяційних поліномах Ерміта розрахункові схеми однокрокових (10) та багатокрокових (11) багатоточкових блокових методів з похідними старших порядків мають вигляд [12, 14]:

$$u_{n,i}=u_{n,0}+\tau\left(d_iF_{n,0}+\sum_{j=1}^{s}\sum_{l=0}^{p_j}\tau^l a_{ij}^{(l)}F_{n,j}^{(l)}\right)\sum_{j=1}^{s}\sum_{l=0}^{p_j}\tau^l a_{ij}^{(l)}F_{n,j}^{(l)},$$

$$i=1,2,\dots,s,n=1,2,\dots,N, \qquad (10)$$

$$u_{n,i}=u_{n,0}+\tau\left(\sum_{j=1}^{m}b_{ij}F_{n-1,j}^{(0)}+\sum_{j=1}^{s}a_{ij}^{(0)}F_{n,j}^{(0)}\right)+\tau^2\sum_{j=1}^{s}a_{ij}^{(1)}F_{n,j}^{(1)}+\cdots$$

$$+\tau^l\sum_{j=1}^{s}a_{ij}^{(l)}F_{n,j}^{(l)},\qquad i=1,2,\dots,s,\qquad n=1,2,\dots,N, \qquad (11)$$

де $u_{n,i}$ – наближені значення розв’язання завдання Коші (1) в точках $t_{n,i}$, $i=0,1,2,\dots,s$,

τ – крок інтегрування,

$F_{n,j}^{(0)}=f\left(t_n+j\tau,u_{n,j}\right)$ – праві частини рівняння (1) у відповідних точках, $j=-(m-1),-(m-2),\dots,0,1,\dots,s$,

ISSN 2079-0031 (Print) ISSN 2411-0558 (Online)

$F_{n,j}^{(l)} = f^{(l)}(t_n + j\tau, u_{n,j})$ – похідні порядку l правих частин рівняння (1) у відповідних точках, $l = 1,2,\ldots,\leq s$

d_i, $b_{i,j}$, $a_{ij}^{(l)}$ і – коефіцієнти розрахункових схем, $i = 1,2,\ldots,s$, $j = -(m-1), -(m-2),\ldots,0,1,\ldots,s$, $l = 1,2,\ldots,\leq s$.

Векторне подання (10)-(11) можна навести в наступному вигляді

$$U_{n+1} = U_n + \tau\left(BF_n + A^{(1)}F_{n+1}\right) + \tau^2 A^{(2)} F_{n+1}^{(1)} + \cdots + \tau^l A^{(l)} F_{n+1}^{(l)}. \quad (12)$$

Тут позначення $U_{n+1}, U_n, B, F_n, F_{n+1}$ мають такий же сенс, що і в опису векторного подання (7).

$F_{n+1}^{(l)} = f^{(l)}(t_n + j\tau, u_{n,j})$, $n = 1,2,\ldots,N, j = 1,\ldots, s$, $l = 1,2,\ldots,\leq s$ – відповідні похідні правих частин рівнянь (10) – (11) в шуканих точках.

Матриця $A^{(1)}$ в (12) означає матрицю коефіцієнтів $\{a_{i,j}\}, i,j = 1,2,\ldots,s$ при правих частинах F_{n+1}, що розраховуються, як і матриця A в поданні (7). Додаткові матриці $A^{(2)},\ldots,A^{(l)}$ – матриці коефіцієнтів при похідних правих частин старших порядків.

Введення в розрахункову схему похідних старших порядків у вигляді (10) – (11) дозволяє значно підвищити порядок апроксимації, в той час, як обчислювальна складність таких різницевих схем зростає несуттєво, бо не зростає розмірність системи рівнянь, яка підлягає розв'язанню. Єдиною складністю є отримання матриць коефіцієнтів розрахункових схем, бо число таких матриць і, відповідно, складність генерування різницевих схем зростає з введенням додаткових похідних. Саме тому і знадобилася розробка програмного продукту, який дозволяє генерувати розрахункові схеми і визначати порядок точності таких схем. Для порівняння точності обчислень можна згенерувати розрахункову схему по точках, які були задіяні для різницевої схеми (8), але з введенням на тих же розрахункових точках похідних першого порядку. Оскільки схема (8) однокрокова триточкова, то в якості результату необхідно отримати вектор коефіцієнтів B і матриці $A^{(1)}, A^{(2)}$.

$$B = \begin{pmatrix} \frac{212}{945} \\ \frac{214}{945} \\ \frac{8}{35} \end{pmatrix}, \quad A^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{47}{560} & \frac{18}{35} & \frac{2683}{15120} \\ \frac{19}{35} & \frac{36}{35} & \frac{191}{945} \\ \frac{351}{560} & \frac{54}{35} & \frac{337}{560} \end{pmatrix}, \quad (13)$$

ISSN 2079-0031 (Print) ISSN 2411-0558 (Online)

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{1067}{1680} & -\frac{97}{210} & -\frac{241}{5040} \\ -\frac{59}{105} & -\frac{62}{105} & -\frac{17}{315} \\ -\frac{297}{560} & -\frac{27}{70} & -\frac{57}{560} \end{pmatrix}.$$

Відповідні нев'язки для кожної розрахункової точки в згенерованій різницевій схемі будуть мати вигляд:

$$r_{n,1} = -\frac{1283x^{(8)}[0]\tau^8}{4233600} + O[\tau]^9,$$
$$r_{n,2} = -\frac{43x^{(8)}[0]\tau^8}{132300} + O[\tau]^9, \qquad (14)$$
$$r_{n,3} = -\frac{57x^{(8)}[0]\tau^8}{156800} + O[\tau]^9.$$

Якщо збільшити порядок додатково залучених до попередньої схеми (13) похідних до другого, необхідно буде отримати нові вектор B і матриці коефіцієнтів $A^{(1)}, A^{(2)}, A^{(3)}$. Через громіздкість подання шуканих коефіцієнтів можна привести лише нев’язкі для тих же розрахункових точок:

$$r_{n,1} = \frac{22471x^{(11)}[0]\tau^{11}}{16765056000} + O[\tau]^{12},$$
$$r_{n,2} = \frac{697x^{(11)}[0]\tau^{11}}{523908000} + O[\tau]^{12}, \qquad (15)$$
$$r_{n,3} = \frac{93x^{(11)}[0]\tau^{11}}{68992000} + O[\tau]^{12}.$$

Якщо провести порівняння з оцінками порядків апроксимації (9), які було отримано для різницевої схеми (8), можна стверджувати, що введення похідних значно підвищує порядок апроксимації (14), (15), не приводячи до зростання розмірності системи, що обчислюється на кожному кроці. А беручі до уваги можливості значного збільшення кроку інтегрування при фіксованій заданій точності розв’язань, навіть при послідовній реалізації розрахунків, методи типу (12) мають значні переваги. В той же час, основна складність застосування схем (12) через проблематичність визначення розрахункових коефіцієнтів долається застосуванням розробленої програмної системи.

Висновки. Різницеві схеми, що пропонуються, сприяють підвищенню ефективності паралельного моделювання та оптимізації динамічних процесів, які описуються еволюційними рівняннями і характеризуються відсутністю аналітичних розв’язань. Такі рівняння застосовуються при моделюванні поведінки динамічних процесів із сконцентрованими та розподіленими параметрами. Отримані на основі запропонованого підходу розрахункові формули мають меншу обчислювальну складність і є ефективними при розв’язанні жорстких рівнянь або їх систем.

В якості наукової новизни слід відзначити обґрунтування і узагальнення застосування інтегро-інтерполяційного підходу, спрямованого на отримання розрахункових різницевих схем для багатоточкових блокових методів з підтриманням заданого порядку точності для всіх розрахункових точок у блоці. У разі неможливості забезпечення заданої точності в черговому розрахунковому блоці передбачено формування нового опорного блоку, який складається з уже порахованих точок, що надає можливість локального підвищення порядку точності апроксимації без додаткових обчислювальних витрат.

В якості переваг практичного застосування пропонованих схем є менша обчислювальна складність і орієнтованість на реалізацію в обчислювальних системах з паралельною архітектурою. При цьому характеристики паралелізму суттєво залежатимуть від кількості доступних процесорів для розрахунку.

Список літератури:

1. *Yoro K.O.* Update on current approaches, challenges, and prospects of modeling and simulation in renewable and sustainable energy systems / *K.O. Yoro, M. O. Daramola* // Renewable and Sustainable Energy. – 2021,Vol. 150 (111506). – P. 1364-1371.

2. *Zhu Q.* Complex Dynamic System Modelling, Identification and Control / *Q. Zhu, G. Fusco, J. Na* // Entropy. – 2022, Vol. 24 (3). – P. 380-389.

3. *Ajagekar A.* Quantum computing and quantum artificial intelligence for renewable and sustainable energy: A emerging prospect towards climate neutrality / *A. Ajagekar, F. You* // Renewable and Sustainable Energy. – 2022, Vol. 165 (112493). – P. 493-501.

4. The Net working and Information Technology Research and Development Program fy 2020. [Електронний ресурс]. – 2022. – Режим доступу: https://www.nitrd.gov/pubs/FY2022-NITRD-NAIIO-Supplement.pdf.

5. *Zhang Y.* Application of Efficient Numerical Methods in Solution of Ordinary Differential Equations for Modeling Electrical Activity in Cardiac Cells / *Y. Zhang, L. Xia, Y. Gong* // Advanced Intelligent Computing Theories and Applications. – 2007, Vol. 2. – P. 78-88.

6. *Pinto S.* PDE-W-methods for parabolic problems with mixed derivatives / *S. Pinto, E. Hairer, D. Hernandez-Abreu* // Numerical Algorithms. – 2018, Vol. 78 (3). – P. 957-981.

7. *Delkhosh M.* A hybrid numerical method to solve nonlinear parabolic partial differential equations of time-arbitrary order / *M. Delkhosh,, K. Parand* // Computational and Applied Mathematics. – 2019, Vol. 38 (76).

8. *Latifi S.* Generalized Lagrange–Jacobi–Gauss–Radau collocation method for solving a nonlinear optimal control problem with the classical diffusion equation / *S Latifi, K. Parand,*

M. Delkhosh // The European Physical Journal Plus. – 2020, Vol. 135(10). – P. 1-19.
9. *Pinto S.* AMF-type W-methods for parabolic problems with mixed derivatives / *S Pinto, E Hairer, D. Abreu* // SIAM Journal on Scientific Computing. – 2018, Vol. 40 (5). – P. 2905-2929.
10. *Schiesser W.* Method of Lines Analysis of Turing Models / *W. Schiesser*. – 2017. – Published. – 268 p.
11. *Dhamacharoen A.* Efficient Numerical Methods for Solving Differential Algebraic Equations / *A. Dhamacharoen* // Journal of Applied Mathematics and Physics. – 2016, Vol. 4. – P. 39-47.
12. *Дмитрієва О.А.* Числові методи моделювання динамічних об’єктів в мультипроцесорних системах / *О.А. Дмитрієва, Н.Г. Гуськова, Є.О. Башков*. – Покровськ: ДонНТУ, 2020. – 268 с.
13. *Фельдман Л.П.* Розробка та дослідження паралельних колокаційних блокових методів / *Л.П. Фельдман, О.А. Дмитрієва* // Наукові праці Донецького національного технічного університету. – 2012, № 16 (204). – С. 28-35.
14. *Дмитрієва О.А.* Паралельні чисельні методи моделювання динамічних об’єктів / *О.А. Дмитрієва.* – Покровськ: ДонНТУ, 2016. – 384 с.
15. *Дмитрієва О.А.* Паралельні однокрокові колокаційні схеми дискретизації методом прямих для моделювання об’єктів з розподіленими параметрами / *О.А. Дмитрієва* // Наукові праці Донецького національного технічного університету. – 2019, №1 (28)-2(29). – С. 33-41.

References:

1. Yoro, K., Daramola, M. (2021). "Update on current approaches, challenges, and prospects of modeling and simulation in renewable and sustainable energy systems", *Renewable and Sustainable Energy*, Vol.150(111506), P. 1364-1371.
2. Zhu, Q., Fusco, G., Na, J. (2022). "Complex Dynamic System Modelling, Identification and Control", *Entropy*, Vol. 24(3), P. 380-389.
3. Ajagekar, A., You, F. (2022). "Quantum computing and quantum artificial intelligence for renewable and sustainable energy: A emerging prospect towards climate neutrality", *Renewable and Sustainable Energy*, Vol. 165(112493), P. 493-501.
4. "The Net working and Information Technology Research and Development Program", available at: www.nitrd.gov/pubs/FY2022-NITRD-NAIIO-Supplement.pdf.
5. Zhang, Y., Xia, L., Gong, Y. (2007). "Application of Efficient Numerical Methods in Solution of Ordinary Differential Equations for Modeling Electrical Activity in Cardiac Cells", *Advanced Intelligent Computing Theories and Applications*, Vol. 2, P. 78-88.
6. Pinto, S., Hairer, E., Hernandez-Abreu, D. (2018). "PDE-W-methods for parabolic problems with mixed derivatives", *Numerical Algorithms*, Vol. 78(3), P. 957-981.
7. Delkhosh, M., Parand, K. (2019). "A hybrid numerical method to solve nonlinear parabolic partial differential equations of time-arbitrary order", *Computational and Applied Mathematics*, Vol. 38(76).
8. Latifi, S., Parand, K., Delkhosh, M. (2020). "Generalized Lagrange–Jacobi–Gauss–Radau collocation method for solving a nonlinear optimal control problem with the classical diffusion equation", *The European Physical Journal Plus*, Vol. 135(10), P. 1-19.
9. Pinto, S. Hairer, E., Abreu, D. (2018). "AMF-type W-methods for parabolic problems with mixed derivatives", *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 40(5), P. 2905-2929.
10. Schiesser, W. (2017). *Method of Lines Analysis of Turing Models,* Published, 268 p.

11. Dhamacharoen, A. (2016). "Efficient Numerical Methods for Solving Differential Algebraic Equations", *Journal of Applied Mathematics and Physics*, Vol. 4., P. 39-47.
12. Dmitrieva, O., Huskova, N., Bashkov, Y., (2020). *Numerical methods and modeling of dynamic objects in multiprocessor systems*, Pokrovsk, DonNTU, 268 p.
13. Feldman, L., Dmitrieva, O. (2012). "Development and research of parallel collocation block methods", *Science practices of Donetsk National Technical University*, Vol. 16(204), P. 28-35.
14. Dmitrieva, O. (2016). *Parallel numerical methods for modeling dynamic objects,* Pokrovsk, DonNTU, 384 p.
15. Dmitrieva, O. (2019). "Parallel single-scale collocation schemes of discretization by the method of lines for modeling objects with different parameters", *Scientific practices of the Donetsk National Technical University*, Vol. 1(28)-2(29), P. 33-41.

Статтю представив д.т.н., проф. Національного технічного університету "Харківський політехнічний інститут" С.Ю. Леонов.

Надійшла (received) 02.12.2022

Dmitrieva Olga[1,2], Dr.Sci.Tech, Professor
[1]National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute",
av. Peremogy, 37, Kyiv, Ukraine, 03056
[2]Institute for modelling hydraulic and environmental systems, University of Stuttgart,
Pfaffenwaldring 61, Stuttgart, Germany, 70049
Tel.: +49 (160) 598-72-88, e-mail: olga.dmytriyeva@iws.uni-stuttgart.de
ORCID ID: 0000-0001-8921-8433

Huskova Vira, PhD Tech., Senior Lecturer
National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute",
av. Peremogy, 37, Kyiv, Ukraine, 03056
Tel.: +38 (050) 626-65-80, e-mail: guskovavera2009@gmail.com
ORCID ID: 0000-0001-7637-201X

УДК 004.272.2:519.63

Генерування паралельних колокаційних різницевих схем з використанням інтегро-інтерполяційного підходу / Дмитрієва О.А., Гуськова В.Г. // Вісник НТУ "ХПІ". Серія: Інформатика та моделювання. – Харків: НТУ "ХПІ". – 2022. – № 1 – 2 (7 – 8). – С. 78 – 91.

Розглянуто питання розробки стійких паралельних різницевих схем заданого порядку точності, орієнтованих на дискретизацію диференційних рівнянь або їх систем зі сконцентрованими та розподіленими параметрами, з використанням інтегро-інтерполяційного підходу до генерації розрахункових коефіцієнтів. Різницеві схеми, що пропонуються, сприяють підвищенню ефективності паралельного моделювання та оптимізації динамічних процесів, що описуються еволюційними рівняннями з розподіленими параметрами і характеризуються відсутністю аналітичних розв'язків. Введення в різницеві схеми похідних вищих порядків сприяє підвищенню точності отриманих результатів і вирівнюванню порядків апроксимації для всіх розрахункових точок у блоці.Пропонований підхід є універсальним для отримання різницевих рівнянь різних видів. Отримані на основі такого підходу розрахункові формули для багатоточкових різницевих рівнянь мають меншу обчислювальну складність і орієнтовані на реалізацію в обчислювальних системах з паралельною архітектурою. Бібліогр.: 15 назв.

Ключові слова: інтегро-інтерполяційний підхід; різницеві схеми; колокаційні блокові методи; паралельні обчислення.

UDC 004.272.2:519.63

Generation of parallel colocation difference schemes using the integro-interpolation approach/ Dmitrieva O., Huskova V. // Herald of the National Technical University "KhPI". Series of "Informatics and Modeling". – Kharkov: NTU "KhPI". – 2022. – № 1 – 2 (7 – 8). – P. 78 – 91.

The issues of development of stable parallel difference schemes of a given order of accuracy, focused on the discretization of differential equations or their systems with concentrated and distributed parameters using an integro-interpolation approach to the generation of calculation coefficients, are considered. The proposed difference schemes improve the efficiency of parallel simulation and optimization of dynamic processes described by evolution equations with distributed parameters. Such equations are characterized by the absence of analytical solutions. The introduction of higher-order derivatives into difference schemes improves the accuracy of the obtained results and equalizes the approximation orders for all calculation points in the block.The proposed approach is universal for obtaining difference equations of various types. The computational formulas obtained on the basis of this approach for multipoint difference equations have less computational complexity and are oriented to implementation in computing systems with a parallel architecture. Refs.: 15 titles.

Keywords: integro-interpolation approach; difference schemes; colocation block methods; parallel computing.