



doi 10.26089/NumMet.v23r417

УДК 517.958; 004.021

Алгоритм параллельной прогонки для решения прямой и обратной задач дробного уравнения диффузии

Е. Н. Акимова

Институт математики и механики имени Н. Н. Красовского УрО РАН, Екатеринбург, Россия
Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
ORCID: 0000-0002-4462-5817, e-mail: aen15@yandex.ru

М. А. Султанов

Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмеда Ясави,
Туркестан, Казахстан
ORCID: 0000-0002-0068-0996, e-mail: murat.sultanov@ayu.edu.kz

В. Е. Мисилов

Институт математики и механики имени Н. Н. Красовского УрО РАН, Екатеринбург, Россия
Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
ORCID: 0000-0002-5565-0583, e-mail: v.e.misilov@urfu.ru

Е. Нурланулы

Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмеда Ясави,
Туркестан, Казахстан
ORCID: 0000-0003-1557-6857, e-mail: yerkebulan.nurlanuly@ayu.edu.kz

Аннотация: Работа посвящена построению параллельных алгоритмов решения прямой начально-краевой задачи и обратной задачи о восстановлении правой части для уравнения диффузии с дробной производной по времени. При использовании дополнительной информации о решении в некоторой внутренней точке обратная задача сводится к прямой задаче для вспомогательного уравнения. После применения конечно-разностных схем задачи сводятся к решению систем линейных алгебраических уравнений. Разработанные алгоритмы основаны на методе параллельной прогонки и реализованы для многоядерных процессоров с использованием технологии OpenMP. Проведены численные эксперименты для исследования производительности разработанных алгоритмов.

Ключевые слова: дробное уравнение диффузии, производная Капуто, начально-краевая задача, обратная задача, зависимость от времени правая часть, метод параллельной прогонки, многоядерные процессоры, OpenMP.

Благодарности: Авторы М.А. Султанов и Е. Нурланулы финансово поддержаны Министерством образования и науки Республики Казахстан (проект № AP09258836). Авторы Е.Н. Акимова и В.Е. Мисилов финансово поддержаны Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства “Приоритет–2030”.

Для цитирования: Акимова Е.Н., Султанов М.А., Мисилов В.Е., Нурланулы Е. Алгоритм параллельной прогонки для решения прямой и обратной задач дробного уравнения диффузии // Вычислительные методы и программирование. 2022. **23**, № 4. 275–287. doi 10.26089/NumMet.v23r417.



Parallel sweep algorithm for solving direct and inverse problems for time-fractional diffusion equation

Elena N. Akimova

Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of RAS, Ekaterinburg, Russia
Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

ORCID: 0000-0002-4462-5817, e-mail: aen15@yandex.ru

Murat A. Sultanov

Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkestan, Kazakhstan

ORCID: 0000-0002-0068-0996, e-mail: murat.sultanov@ayu.edu.kz

Vladimir E. Misilov

Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of RAS, Ekaterinburg, Russia
Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

ORCID: 0000-0002-5565-0583, e-mail: v.e.misilov@urfu.ru

Yerkebulan Nurlanuly

Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkestan, Kazakhstan

ORCID: 0000-0003-1557-6857, e-mail: yerkebulan.nurlanuly@ayu.edu.kz

Abstract: The work is devoted to construction of parallel algorithm for solving the direct initial boundary and inverse right-hand part identification problems for the time-fractional diffusion equation. Application of a priori information on the solution at the some inner point allows one to reduce the inverse problem to an initial boundary problem for the auxiliary equation. After applying the finite-difference scheme the problems are reduced to solving systems of linear algebraic equations. The developed algorithms are based on the parallel sweep method and implemented for the multicore processor using the OpenMP technology. Numerical experiments were performed to study the performance of the developed algorithms.

Keywords: fractional diffusion equation, Caputo derivative, initial boundary problem, inverse problem, time-dependent right-hand part, parallel sweep method, multicore processors, OpenMP.

Acknowledgements: Authors M. A. Sultanov and Y. Nurlanuly were financially supported by the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (project No.AP09258836). Authors E. N. Akimova and V. E. Misilov were financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Ural Federal University Program of Development within the Priority-2030 Program).

For citation: E. N. Akimova, M. A. Sultanov, V. E. Misilov, and Ye. Nurlanuly, “Parallel sweep algorithm for solving direct and inverse problems for time-fractional diffusion equation,” *Numerical Methods and Programming*. 23 (4), 275–287 (2022). doi 10.26089/NumMet.v23r417.

1. Введение. Дробные дифференциальные уравнения являются математическим аппаратом для описания многих реальных физических процессов. Область их практического применения продолжает расширяться [1–5]. Разработка эффективных численных алгоритмов решения прямых и обратных задач для дифференциальных уравнений с дробными производными представляет на сегодняшний день значительный теоретический и практический интерес. Это обусловлено способностью моделировать с помощью таких уравнений процессы аномальной диффузии [6–8].

Классическая начально-краевая задача для дифференциального уравнения состоит в определении решения из уравнения и дополнительных граничных и начальных условий. Примером обратных задач являются задачи определения неизвестных коэффициентов уравнения или неизвестных граничных или начальных условий [9]. При этом используется некоторая дополнительная априорная информация о решении. Обратные задачи часто являются некорректными, нарушая требования существования, единствен-



ности, а также непрерывной зависимости решения от входных данных. Достижение корректности обычно обеспечивается за счет сужения класса допустимых решений.

Для приближенного решения задач для уравнения диффузии с дробной производной по времени используются различные вычислительные подходы [10–15]. Вычислительные затраты численных методов решения дробных уравнений будут высокими из-за нелокальных свойств дробных производных. Разработка и использование эффективных параллельных численных алгоритмов для решения задач для дробных дифференциальных уравнений становится чрезвычайно важной проблемой. Этой проблеме посвящены работы отечественных и зарубежных авторов [16–24].

Данная работа посвящена построению и реализации параллельных алгоритмов решения начально-краевой задачи и обратной задачи о восстановлении правой части для уравнения диффузии с дробной производной по времени. После применения конечно-разностных схем задачи сводятся к решению систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Для решения систем используется метод параллельной прогонки. Алгоритмы реализованы на многоядерных процессорах с использованием технологии параллельного программирования OpenMP.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 приведены постановки прямой и обратной задач. Раздел 3 содержит метод решения начально-краевой задачи, способ дискретизации и аппроксимации уравнения, разностную схему. В разделе 4 описан подход к решению обратной задачи, построены вспомогательное уравнение и разностная схема для его решения. В разделе 5 описан метод параллельной прогонки. Раздел 6 посвящен параллельной реализации алгоритмов на многоядерном процессоре и проведению численных экспериментов.

2. Постановка задачи. Работа посвящена исследованию дифференциального уравнения с дробной производной по времени

$$\frac{\partial^\alpha U(x, t)}{\partial t^\alpha} = a(x) \frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial x^2} + b(x) \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} + c(x)U(x, t) + d(x, t), \quad (1)$$

где $U(x, t)$ — неизвестная функция, $a(x)$, $b(x)$, $c(x)$ — известные коэффициентные функции, $0 < \alpha < 1$ — порядок дробной производной, $d(x, t)$ — функция правой части.

Производная $\partial^\alpha U(x, t)/\partial t^\alpha$ рассматривается в смысле Капуто [12]:

$$D^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(m - \alpha)} \int_0^t \frac{f^{(m)}(s)}{(t - s)^{\alpha - m + 1}} ds,$$

где $m = [\alpha]$ ($m - 1 < \alpha < m$, $m \in \mathbb{Z}$), $t > 0$.

Задачи рассматриваются на пространственном отрезке $0 \leq x \leq \gamma$ и временном промежутке $0 \leq t \leq T$. Начальные и граничные условия:

$$U(0, t) = g_1(t), \quad U(\gamma, t) = g_2(t), \quad U(x, 0) = g_0(x), \quad (2)$$

где $g_0(x)$, $g_1(t)$, $g_2(t)$ — заданные функции.

Классическая начально-краевая прямая задача состоит в нахождении неизвестной функции $U(x, t)$ уравнения (1) по известной правой части $d(x, t)$ и начальным и граничным условиям (2).

Обратная задача состоит в одновременном нахождении неизвестной функции $U(x, t)$ и правой части $d(x, t)$ по начальным и граничным условиям (2) с использованием априорной информации [9].

Предполагается, что правая часть имеет вид

$$d(x, t) = \eta(t) \cdot \psi(x),$$

где $\psi(x)$ — известная функция, а $\eta(t)$ — искомая зависящая от времени функция.

Известна дополнительная информация о решении в некоторой внутренней точке:

$$U(x^*, t) = \varphi(t), \quad 0 < x^* < \gamma. \quad (3)$$

3. Метод решения прямой задачи. Для дискретизации уравнения (1) на сетке пространственный отрезок $[0, \gamma]$ разбивается равномерно M точками с шагом $h = \Delta x = \gamma/M$. Временной отрезок $[0, T]$ разбивается N точками с шагом $\tau = \Delta t = T/N$. Обозначим узловые точки $x_i = ih$, $i \in \{0, 1, \dots, m\}$ и $t_j = j\tau$, $j \in \{0, 1, \dots, N\}$. Значения функций в узловых точках обозначим как $U_{i,j} = U(x_i, t_j)$.



4. Метод решения обратной задачи. В работе [9] предложен подход к решению обратной задачи восстановления зависимости правой части от времени для классического дифференциального уравнения с целыми производными. Применим данный подход к уравнению с дробной производной по времени.

4.1. Построение вспомогательного уравнения. Решение задачи о восстановлении правой части рассматривается при следующих дополнительных ограничениях на функцию $\psi(x)$:

- 1) $\psi(x^*) \neq 0$ во внутренней точке x^* (см. формулу (3));
- 2) $\psi(x)$ достаточно гладкая функция ($\psi \in C^2[0, \gamma]$);
- 3) $\psi(0) = \psi(\gamma) = 0$.

При данных ограничениях обратная задача является корректной, т.е. решение $[U(x, t), \eta(t)]$ непрерывно зависит от входных данных $g_0(x)$ и $\psi(x)$.

Будем искать решение $U(x, t)$ в виде

$$U(x, t) = \theta(t)\psi(x) + W(x, t), \tag{8}$$

где

$$\frac{\partial^\alpha \theta(t)}{\partial t^\alpha} = \eta(t).$$

Подставив (8) в (3), получаем

$$\theta(t) = \frac{\varphi(t) - W(x^*, t)}{\psi(x^*)}. \tag{9}$$

После подстановки (8) и (9) в уравнение (1) получим *вспомогательное уравнение* для $W(x, t)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\alpha W(x, t)}{\partial t^\alpha} = & a(x) \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} + b(x) \frac{\partial W(x, t)}{\partial x} + c(x)W(x, t) + \\ & + \frac{\varphi(t) - W(x^*, t)}{\psi(x^*)} \left(a(x) \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + b(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} + c(x)\psi(x, t) \right). \end{aligned} \tag{10}$$

Будем рассматривать простейшие граничные условия $g_1(t) = 0, g_2(t) = 0, 0 \leq t \leq T$. Тогда граничные и начальные условия для уравнения (10) примут вид

$$W(0, t) = 0, \quad W(\gamma, t) = 0, \quad W(x, 0) = g_0(x). \tag{11}$$

Таким образом, обратная задача (1)–(2) сводится к прямой начально-краевой задаче (10)–(11).

4.2. Разностная схема для вспомогательного уравнения. Дискретизация и аппроксимация уравнения (10) выполняется аналогичным способом, как и для уравнения (1). Предполагаем, что точка наблюдения соответствует внутреннему узлу с индексом k : $x^* = x_k$.

После преобразований получаем разностные уравнения на временном шаге n для внутренних точек $i \in \{1, \dots, M - 1\}$

$$\begin{aligned} & - p_i W_{i-1, n} + q_i W_{i, n} - r_i W_{i+1, n} + \frac{e_i}{\psi_k} W_{k, n} = \\ & = \sigma_{\alpha, \tau} \left(W_{i, n-1} - \sum_{j=2}^n w_j^{(\alpha)} (W_{i, n-j+1} - W_{i, n-j}) \right) + \frac{\varphi_n e_i}{\psi_k}, \end{aligned}$$

где

$$e_i = a_i \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x_i) + b_i \frac{\partial \psi}{\partial x}(x_i) + c_i \psi(x_i).$$

Отметим, что уравнения содержат нелокальный член $W_{k, n}$.

Будем искать решение в виде

$$W_{i, n} = X_{i, n} + W_{k, n} Z_{i, n}. \tag{12}$$

Алгоритм решения обратной задачи на каждом последовательном временном шаге n имеет следующий вид.

1. Решим две вспомогательные системы для $X_n = [X_{1,n}, \dots, X_{M-1,n}]$ и $Z_n = [Z_{1,n}, \dots, Z_{M-1,n}]$:

$$AX_n = \overline{F}_n, \quad AZ_n = \overline{E}_n, \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} \overline{F}_n &= [\overline{f}_{1,n}, \overline{f}_{2,n}, \dots, \overline{f}_{M-2,n}, \overline{f}_{M-1,n}], \\ \overline{f}_{i,n} &= \sigma_{\alpha,\tau} \left(W_{i,n-1} - \sum_{j=2}^n w_j^{(\alpha)} (W_{i,n-j+1} - W_{i,n-j}) \right) + \frac{\varphi_n e_i}{\psi_k}, \\ \overline{E}_n &= [\overline{e}_{1,n}, \overline{e}_{2,n}, \dots, \overline{e}_{M-2,n}, \overline{e}_{M-1,n}], \\ \overline{e}_{i,n} &= -\frac{e_i}{\psi_k}. \end{aligned}$$

2. Подставив $i = k$ в формулу (12), вычислим нелокальный член $W_{k,n} = X_{k,n}/(1 - Z_{k,n})$ (при условии $1 - Z_{k,n} \neq 0$).
3. По формуле (12) найдем остальные значения $W_{i,n}$.
4. Вычислим $\theta_n = (\varphi_n - W_{k,n})/\psi_k$.
5. Найдем искомые значения $U_{i,n} = \theta_n \psi_i + W_{i,n}$, $\eta_n = D_t^\alpha \theta_n$ по формуле аппроксимации дробной производной Капуто (см. (4)).

5. Метод параллельной прогонки. Отметим, что и начально-краевая задача, и обратная задача восстановления зависимости правой части от времени для уравнения (1) сводятся к решению СЛАУ с трехдиагональной матрицей (система (6) для прямой задачи или пара систем (13) для обратной задачи).

В данной работе для решения СЛАУ на многоядерных процессорах используется эффективный прямой метод параллельной прогонки, предложенный и исследованный в работах [25, 26].

В работе [25] алгоритм параллельной прогонки рассматривается для решения краевой задачи для трехточечного разностного уравнения на интервале $(0, n)$. Идея распараллеливания алгоритма прогонки заключается в разбиении исходного интервала $(0, n)$ на L интервалов распараллеливания $(k, k + m)$, $k = 0, m, \dots, n - m$ так, что $n = L \cdot m$. Точки разбиения $k = 0, m, \dots, n$ выбираются в качестве узлов распараллеливания, а искомые неизвестные в узлах — в качестве параметрических неизвестных — Y_k . Относительно Y_k строится редуцированная система уравнений, после решения которой остальные искомые неизвестные находятся на L интервалах независимо.

В работе [26] алгоритм параллельной прогонки обобщается следующим образом для решения систем уравнений с трехдиагональными матрицами общего вида

$$\begin{cases} C_0 Y_0 - B_0 Y_1 = F_0, & i = 0, \\ -A_i Y_{i-1} + C_i Y_i - B_i Y_{i+1} = F_i, & i = 1, 2, \dots, n-1, \\ -A_n Y_{n-1} + C_n Y_n = F_n, & i = n. \end{cases} \quad (14)$$

Обозначим

$$\Lambda_h Y_i \equiv -A_i Y_{i-1} + C_i Y_i - B_i Y_{i+1}, \quad i = 1, \dots, n-1.$$

На L интервалах рассмотрим следующие задачи:

$$\begin{aligned} \Lambda_h U_i &= 0, & U_k &= 1, & U_{k+m} &= 0, \\ \Lambda_h V_i &= 0, & V_k &= 0, & V_{k+m} &= 1, \\ \Lambda_h W_i &= F_i, & W_k &= 0, & W_{k+m} &= 0, \end{aligned} \quad (15)$$

где $i = k + 1, \dots, k + m - 1$.

Если U_i, V_i, W_i — решения задач (15) на $(k, k + m)$, а Y_i — решение исходной задачи (14) на $(k, k + m)$, то по принципу суперпозиции Y_i на $(k, k + m)$ может быть записано в виде линейной комбинации решений U_i, V_i, W_i

$$Y_i = Y_k U_i + Y_{k+m} V_i + W_i. \quad (16)$$



Подставляя (16) в систему (14) в точках $k = 0, m, \dots, n$, получим редуцированную систему уравнений относительно параметров Y_k

$$\begin{cases} \bar{C}_0 Y_0 - \bar{B}_0 Y_m = \bar{F}_0, & k = 0, \\ -\bar{A}_k Y_{k-m} + \bar{C}_k Y_k - \bar{B}_k Y_{k+m} = \bar{F}_k, & k = m, 2m, \dots, n-m, \\ -\bar{A}_n Y_{n-m} + \bar{C}_n Y_n = \bar{F}_n, & k = n. \end{cases} \quad (17)$$

Коэффициенты системы (17) определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \bar{C}_0 &= C_0 - B_0 U_1, & \bar{B}_0 &= B_0 V_1, & \bar{F}_0 &= F_0 + B_0 W_1, \\ \bar{A}_k &= A_k U_{k-1}, & \bar{C}_k &= C_k - A_k V_{k-1} - B_k U_{k+1}, & & \\ \bar{B}_k &= B_k V_{k+1}, & \bar{F}_k &= F_k + A_k W_{k-1} + B_k W_{k+1}, & & \\ \bar{A}_n &= A_n U_{n-1}, & \bar{C}_n &= C_n - A_n V_{n-1}, & \bar{F}_n &= F_n + A_n W_{n-1}. \end{aligned} \quad (18)$$

После вычисления параметров Y_k остальные искомые неизвестные Y_i находятся из (16) на каждом из L интервалов независимо.

Алгоритм параллельной прогонки состоит из следующих шагов:

$$(15) \rightarrow (18) \rightarrow (17) \rightarrow (16)$$

Заметим, что редуцированная система уравнений (17) и задачи (15) имеют вид системы (14), но меньшую размерность. Для решения задач (15) и (17) используется классический метод прогонки.

6. Численные эксперименты на многоядерном процессоре. Численное моделирование процессов, описываемых дробными уравнениями диффузии, требует значительного времени счета. Это обусловлено нелокальными свойствами дробной производной. Для уравнений с дробной производной по времени вычислительная сложность растет квадратично с увеличением количества временных шагов.

На каждом шаге по времени приходится вычислять значения правой части СЛАУ, а затем решать полученную систему с $(M - 2)$ неизвестными. Вычислительная сложность процедуры вычисления правой части по формуле (7) растет на каждом временном шаге и составляет $O(n \times M)$. Решение СЛАУ прямым методом имеет постоянную сложность $O(M)$.

Одним из способов ускорения решения задач является использование параллельных вычислений. В данной работе для реализации параллельных алгоритмов на многоядерном процессоре с векторной архитектурой использовалась технология OpenMP и средства автоматической векторизации компилятора Intel C++.

В данном разделе описывается применение алгоритма параллельной прогонки к численному решению прямых и обратных задач для уравнения диффузии с дробной производной по времени. Приводятся результаты экспериментов, проведенных на процессоре Intel i9-12900K (8 P-ядер).

В алгоритме параллельной прогонки решение вспомогательных систем (15) классическим методом прогонки и вычисление решения исходной системы по формуле (16) осуществляется независимо на каждом интервале. Работа распределяется по OpenMP-потокам. Для вычисления коэффициентов редуцированной системы (17) по формулам (18) необходимо обеспечить согласование данных на соседних подынтервалах. Это обеспечивается барьерной синхронизацией с использованием директивы `#pragma omp barrier`. Редуцированная система решается в однопоточном режиме классическим методом прогонки.

Вычисление компонент правой части по формуле (7) может осуществляться независимо. Распараллеливание осуществляется разделением интервалов распараллеливания по OpenMP-потокам. Кроме того, используется автоматическая векторизация путем добавления директивы `#pragma vector`.

Для снижения объема вычислений может быть применен принцип логарифмической памяти [27], успешно примененный для решения начально-краевой задачи [24]. Вместо использования равномерной сетки по времени (принцип полной памяти) для вычисления правой части СЛАУ применяется неравномерная сетка. Самый последний шаг по времени имеет размер τ , а по мере удаления в прошлое размер

шага увеличивается. Формула (4) приобретает вид

$$\begin{aligned}
 f_{i,1} &= \sigma_{\alpha,\tau} U_{i,0} + d_{i,0}, \\
 f_{i,n} &= \sigma_{\alpha,\tau} U_{i,n-1} - \sum_{(j,k)} \sigma_{\alpha,\tau}^{(j,k)} w_{j,k}^{(\alpha)} (U_{i,n-j+1} - U_{i,n-k}) + d_{i,n}, \quad n > 1, \\
 (j,k) &\in \left\{ (2, 2 + \theta^0), (2 + \theta^0, 2 + \theta^1), (2 + \theta^1, 2 + \theta^2), \dots, (2 + \theta^{\lfloor \log_\theta n \rfloor}, n) \right\}, \\
 \sigma_{\alpha,\tau}^{(j,k)} &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)(1-\alpha)\theta^{k-j}\tau^\alpha}, \quad w_{j,k}^{(\alpha)} = (k)^{1-\alpha} - (j-1)^{1-\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1,
 \end{aligned}$$

где $\theta \in \mathbb{N}$ – растягивающий коэффициент.

Данный прием позволяет снизить сложность процедуры вычисления правой части с $O(n \times M)$ до $O(\log_\theta n \times M)$.

6.1. Задача 1. Рассматривается прямая начально-краевая задача для уравнения

$$\frac{\partial^\alpha U(x,t)}{\partial t^\alpha} = \frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2} + \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right) \left(\frac{2}{\Gamma(3-\alpha)} t^{2-\alpha} + \frac{\pi^2}{4} t^2 \right), \tag{19}$$

$$0 < \alpha < 1, \quad 0 \leq x \leq 2, \quad 0 \leq t \leq 1,$$

с краевыми условиями $U(0,t) = 0, \quad U(2,t) = 0$, начальным условием $U(x,0) = 0$. Точное решение имеет вид [13]

$$U(x,t) = t^2 \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right).$$

Эксперименты проводились для параметра $\alpha = 0.8$ на сетке размером $M = 32 \times 2^{20}, N = 64$.

Задача 1 решена двумя методами: классическим методом прогонки и методом параллельной прогонки. На рис. 1 а показано точное решение задачи. На рис. 1 б показаны точное $U(x,t)$ и приближенное $\tilde{U}(x,t)$ решения на различных временных шагах.

В табл. 1 и 2 представлены результаты вычислительных экспериментов на многоядерном процессоре. Приводятся время счета T_S для задачи 1 на различном количестве OpenMP-потокосов S .

Применение метода параллельной прогонки снижает время решения СЛАУ в 2 раза по сравнению с методом прогонки (табл. 1). Отметим, что доля вычисления правых частей занимает до 70% времени. При этом погрешность решения методом обычной прогонки $\delta = \|\tilde{U} - U\|_\infty = 0.5 \cdot 10^{-2}$, погрешность решения методом параллельной прогонки $\delta = 0.8 \cdot 10^{-2}$.

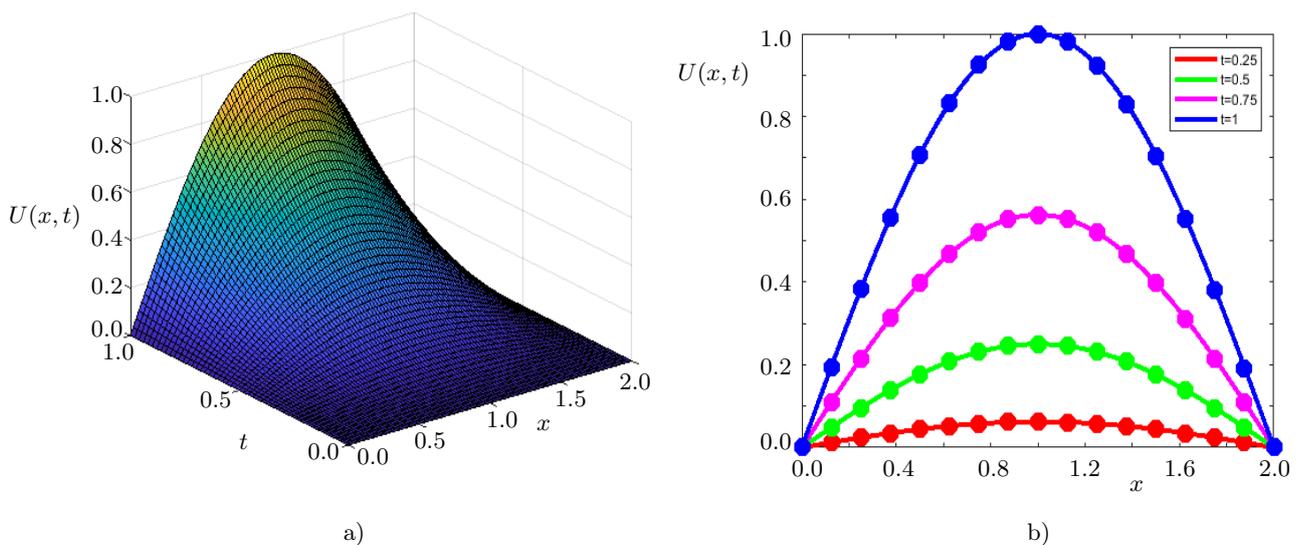


Рис. 1. Решение прямой начально-краевой задачи 1: а) точное решение $U(x,t)$; б) точное $U(x,t)$ (сплошная линия) и приближенное $\tilde{U}(x,t)$ (точки) решения на временных шагах $t = 0.25; t = 0.5; t = 0.75; t = 1$

Fig. 1. Solution of the direct initial boundary value problem 1: а) exact solution of $U(x,t)$; б) exact $U(x,t)$ (solid line) and approximate $\tilde{U}(x,t)$ (points) solutions at time steps $t = 0.25; t = 0.5; t = 0.75; t = 1$



Таблица 1. Время решения задачи 1 с использованием полной памяти на сетке $M = 32 \times 2^{20}$, $N = 64$.

Table 1. Computing time for Problem 1 using full memory on grid $M = 32 \times 2^{20}$, $N = 64$.

Время счета / Computing time	T_1 , с	T_2 , с	T_4 , с	T_8 , с
Метод прогонки / Sweep algorithm (Thomas algorithm)				
Общее время счета / Total computing time	34	25.5	21.6	20.2
Вычисление правых частей / Calculation of the right parts	22	13.6	10	8.4
Решение СЛАУ / SLAE solution	11.5	11.5	11.5	11.5
Метод параллельной прогонки / Parallel sweep algorithm				
Общее время счета / Total computing time	34	20.5	14	11.7
Вычисление правых частей / Calculation of the right parts	22	13.6	10	8.4
Решение СЛАУ / SLAE solution	11.6	6.3	3.8	3

Таблица 2. Время решения задачи 1 с использованием логарифмической памяти на сетке $M = 32 \times 2^{20}$, $N = 64$.

Table 2. Computing time for Problem 1 using logarithmic memory on grid $M = 32 \times 2^{20}$, $N = 64$.

Время счета / Computing time	T_1 , с	T_2 , с	T_4 , с	T_8 , с
Метод прогонки / Sweep algorithm (Thomas algorithm)				
Общее время счета / Total computing time	24.3	19.7	17.5	16.6
Вычисление правых частей / Calculation of the right parts	12	7.8	5.8	5
Решение СЛАУ / SLAE solution	11.5	11.5	11.5	11.5
Метод параллельной прогонки / Parallel sweep algorithm				
Общее время счета / Total computing time	24.4	14.5	10	8.1
Вычисление правых частей / Calculation of the right parts	12	7.8	5.8	5
Решение СЛАУ / SLAE solution	11.6	6.3	3.8	3

Использование логарифмической памяти значительно снижает время вычисления правой части — до 2 раз (табл. 2). Вычисление правых частей теперь занимает меньше времени, чем решение СЛАУ, поэтому эффект от применения метода параллельной прогонки более заметен. Общее время счета на 8 потоках снижается в 3 раза, с 24 до 8 секунд.

6.2. Задача 2. Рассматривается обратная задача восстановления зависимости от времени правой части для уравнения (19) в виде

$$\frac{\partial^\alpha U(x, t)}{\partial t^\alpha} = \frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial x^2} + d(x, t),$$

$$0 < \alpha < 1, \quad 0 \leq x \leq 2, \quad 0 \leq t \leq 1,$$

с краевыми условиями $U(0, t) = 0$, $U(2, t) = 0$, начальным условием $U(x, 0) = 0$ и правой частью $d(x, t) = \eta(t) \cdot \psi(x)$, $\psi(x) = \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right)$. Точное решение имеет вид

$$U(x, t) = t^2 \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right), \quad \eta(t) = \frac{2}{\Gamma(3 - \alpha)} t^{2-\alpha} + \frac{\pi^2}{4} t^2.$$

Эксперименты проводились для параметра $\alpha = 0.8$ на сетке размером $M = 32 \times 2^{20}$, $N = 64$. Использовалась априорная информация о решении в точке $x^* = 1$: $U(x^*, t) = \varphi(t) = t^2$. Задача 2 решена с использованием метода параллельной прогонки и принципа полной памяти. На рис. 2а показаны точное и приближенное решения $U(x, t)$ на различных временных шагах. Погрешность составила менее $1 \cdot 10^{-2}$. На рис. 2б показаны точное и приближенное решения $\eta(t)$, погрешность решения $1 \cdot 10^{-2}$.

В табл. 3 представлено время счета T_S для задачи 2 на различном количестве OpenMP-потоков.

7. Заключение. В данной работе построены параллельные алгоритмы решения начально-краевой задачи и обратной задачи восстановления зависимости правой части от времени для уравнения диффузии с дробной производной по времени. Показано, что обратная задача сводится к начально-краевой задаче

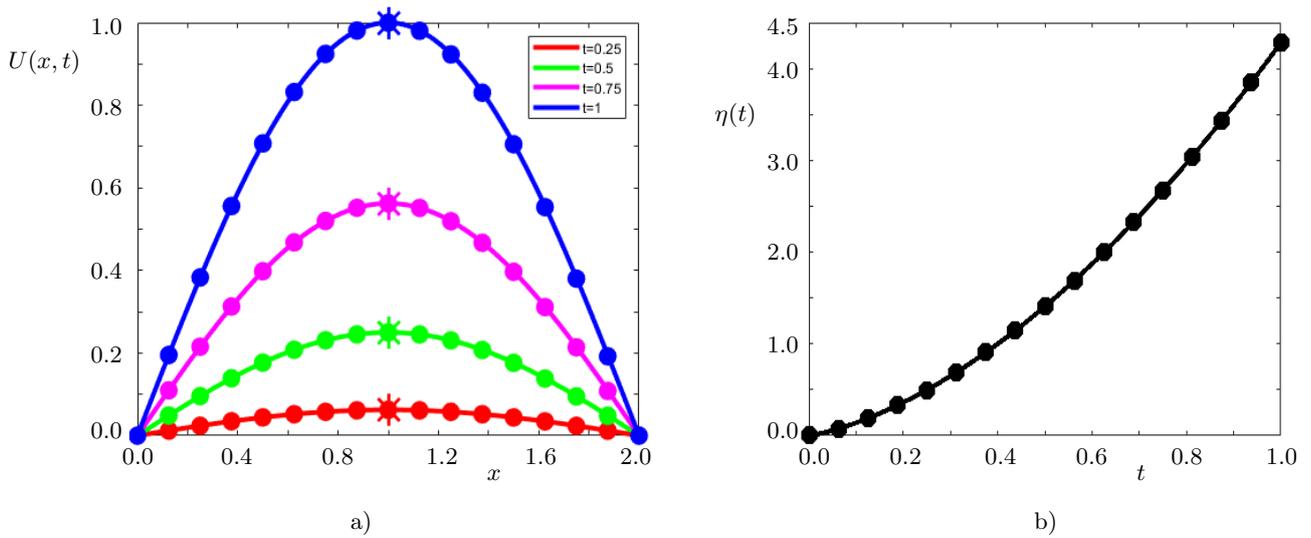


Рис. 2. Точные (сплошная линия) и приближенные (точки) решения обратной задачи 2:
 а) $U(x, t)$ (звездочками обозначены заданные значения решения $U(x^*, t)$); б) $\eta(t)$

Fig. 2. Exact (solid line) and approximate (points) solutions of the inverse problem 2:
 а) $U(x, t)$ (asterisks denote the given values of the solution $U(x^*, t)$); б) $\eta(t)$

Таблица 3. Время решения задачи 2 методом параллельной прогонки на сетке $M = 32 \times 2^{20}$, $N = 64$.

Table 3. Computing time for Problem 2 using the parallel sweep method on grid $M = 32 \times 2^{20}$, $N = 64$.

Время счета / Computing time	T_1 , с	T_2 , с	T_4 , с	T_8 , с
Общее время счета / Total computing time	35	20.4	14.5	11.8
Вычисление правых частей / Calculation of the right parts	22	13.6	10	8.4
Решение СЛАУ / SLAE solution	12	6.5	4	3.2

для вспомогательного уравнения. Алгоритмы решения начально-краевой задачи основаны на использовании неявной конечно-разностной схемы для аппроксимации дифференциального уравнения. После дискретизации и аппроксимации задачи сводятся к решению систем линейных алгебраических уравнений. Вычислительные алгоритмы включают две объемные подзадачи: вычисление правых частей СЛАУ и решение СЛАУ. Для ускорения вычисления правых частей в работе используется принцип логарифмической памяти. Данный прием позволил сократить время вычисления правых частей в 2 раза для модельных задач. Для реализации процедуры решения СЛАУ использован метод параллельной прогонки, позволивший сократить время счета до 4 раз по сравнению с классическим последовательным методом прогонки. Общее ускорение при решении модельных задач с размером пространственной сетки 32×2^{20} точек на 8-ядерном процессоре достигло 4 раз.

Разработанные алгоритмы будут использованы при решении прикладных задач.

Список литературы

1. Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J. (Eds.) Theory and applications of fractional differential equations. Amsterdam: Elsevier, 2006.
2. Cui M. Convergence analysis of high-order compact alternating direction implicit schemes for the two-dimensional time fractional diffusion equation // Numer. Algorithms. 2013. 62, 383–409. doi 10.1007/s11075-012-9589-3.
3. Jin B., Rundell W. A tutorial on inverse problems for anomalous diffusion processes // Inverse Probl. 2015. 31, N 3. doi 10.1088/0266-5611/31/3/035003.
4. Belevtsov N.S., Lukashchuk S.Yu. Lie group analysis of 2-dimensional space-fractional model for flow in porous media // Math. Meth. Appl. Sci. 2018. 41, N 18. 9123–9133. doi 10.1002/ma.5078.



5. Sultanov M.A., Durdiev D.K., Rahmonov A.A. Construction of an explicit solution of a time-fractional multidimensional differential equation // *Mathematics*. 2021. **9**, N 17. doi [10.3390/math9172052](https://doi.org/10.3390/math9172052).
6. Scher H., Montroll E.W. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids // *Phys. Rev. B*. 1975. **12**, N 6. doi [10.1103/PhysRevB.12.2455](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.12.2455).
7. Kou S.C. Stochastic modeling in nanoscale biophysics: subdiffusion within proteins // *Ann. Appl. Stat.* 2008. **2**, N 2. 501–535. doi [10.1214/07-AOAS149](https://doi.org/10.1214/07-AOAS149).
8. Metzler R., Jeon J.-H., Cherstvy A.G., Barkai E. Anomalous diffusion models and their properties: non-stationarity, non-ergodicity, and ageing at the centenary of single particle tracking // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014. **16**. 24128–24164. doi [10.1039/C4CP03465A](https://doi.org/10.1039/C4CP03465A).
9. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. М.: Изд-во ЛКИ, 2009. doi [10.1515/9783110205794](https://doi.org/10.1515/9783110205794).
10. Baleanu D., Diethelm K., Scalas E., Trujillo J.J. *Fractional calculus: models and numerical methods*. Singapore: World Scientific, 2012. doi [10.1142/10044](https://doi.org/10.1142/10044).
11. Li C., Zeng F. *Numerical methods for fractional calculus*. New York: CRC Press, 2015. doi [10.1201/b18503](https://doi.org/10.1201/b18503).
12. Podlubny I. *Fractional differential equations*. New York: Academic Press, 1999.
13. Wei T., Zhang Z.Q. Reconstruction of a time-dependent source term in a time-fractional diffusion equation // *Engineering Analysis with Boundary Elements*. 2013. **37**, N 1. 23–31. doi [10.1016/j.enganabound.2012.08.003](https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2012.08.003).
14. Omran A.K., Zaky M.A., Hendy A.S., Pimenov V.G. An efficient hybrid numerical scheme for nonlinear multiterm Caputo time and Riesz space fractional-order diffusion equations with delay // *Journal of Function Spaces*. 2021. **2021**, Article ID 5922853. doi [10.1155/2021/5922853](https://doi.org/10.1155/2021/5922853).
15. Пименов В.Г., Таширова Е.Е. Численный метод для дробных диффузионно-волновых уравнений с функциональным запаздыванием // *Изв. Ин-та математики и информатики Удмуртского гос. унив.* 2021. **57**. 156–169. doi [10.35634/2226-3594-2021-57-07](https://doi.org/10.35634/2226-3594-2021-57-07).
16. Белевцов Н.С., Лукащук С.Ю. Параллельный алгоритм численного решения дробно-дифференциального обобщения уравнения Пуассона // *Труды Межд. научной конференции “Параллельные вычислительные технологии 2019”*, 2–4 апреля 2019, Калининград. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2019. 165–174.
17. Губайдуллин Р.Р., Лукащук С.Ю., Юлдашев А.В. Параллельные алгоритмы решения начально-краевых задач для дробно-дифференциальных уравнений диффузионного типа на графических процессорах // *Труды Межд. научной конференции “Параллельные вычислительные технологии 2019”*, 2–4 апреля 2019, Калининград. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2019. 232–238.
18. Gong C., Bao W., Tang G., Jiang Y., Liu J. A parallel algorithm for the two-dimensional time fractional diffusion equation with implicit difference method // *Sci. World J.* 2014. Article ID 219580. doi [10.1155/2014/219580](https://doi.org/10.1155/2014/219580).
19. Li X., Su Y. A parallel in time/spectral collocation combined with finite difference method for the time fractional differential equations // *J. Algorithms Comput. Technol.* 2021. **15**. doi [10.1177/17483026211008409](https://doi.org/10.1177/17483026211008409).
20. de Luca P., Galletti A., Ghehsareh H.R., Marcellino L., Raeli M. A GPU-CUDA framework for solving a two-dimensional inverse anomalous diffusion problem // in *Advances in Parallel Computing. Parallel Comput. Technol. Trends* (Amsterdam, IOS Press, 2020), Vol. 36, pp. 311–320. doi [10.3233/APC200056](https://doi.org/10.3233/APC200056).
21. Yang X., Wu L. A new kind of parallel natural difference method for multi-term time fractional diffusion model // *Mathematics*. 2020. **8**, N 4, 596–615. doi [10.3390/math8040596](https://doi.org/10.3390/math8040596).
22. Wang Q., Liu J., Gong C., Tang X., Fu G., Xing Z. An efficient parallel algorithm for Caputo fractional reaction–diffusion equation with implicit finite-difference method // *Adv. Differ. Equ.* 2016. **2016**, Article Number: 207. doi [10.1186/s13662-016-0929-9](https://doi.org/10.1186/s13662-016-0929-9).
23. Alimbekova N., Berdyshev A., Baigereyev D. Parallel implementation of the algorithm for solving a partial differential equation with a fractional derivative in the sense of Riemann–Liouville // *Proc. IEEE Int. Conference on Smart Information Systems and Technologies (SIST)*, April 28–30, 2021, Nur-Sultan, Kazakhstan. doi [10.1109/SIST50301.2021.9465922](https://doi.org/10.1109/SIST50301.2021.9465922).
24. Sultanov M.A., Akimova E.N., Misilov V.E., Nurlanuly Y. Parallel direct and iterative methods for solving the time-fractional diffusion equation on multicore processors // *Mathematics*. 2022. **10**, N 3. Article Number: 323. doi [10.3390/math10030323](https://doi.org/10.3390/math10030323).
25. Яценко Н.Н., Коновалов А.Н., Бугров А.Н., Шустов Г.В. Об организации параллельных вычислений и параллелизации прогонки // *Численные методы механики сплошной среды*. Том 9, вып. 7. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1978. 139–146.

26. Акимова Е.Н. Параллельные алгоритмы решения задач грави-магнитометрии и упругости на многопроцессорных системах с распределенной памятью. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, 2009.
27. Ford N.J., Simpson A.C. The numerical solution of fractional differential equations: speed versus accuracy // Numer. Algorithms. 2001. 26, N 4. 333–346. doi 10.1023/A:1016601312158.

Поступила в редакцию
16 августа 2022 г.

Принята к публикации
14 сентября 2022 г.

Информация об авторах

Елена Николаевна Акимова — д.ф.-м.н., вед. научн. сотр., профессор кафедры Информационных технологий и систем управления; 1) Институт математики и механики имени Н. Н. Красовского УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 16, 620108, Екатеринбург, Россия; 2) Уральский федеральный университет, ул. Мира, 19, 620002, Екатеринбург, Россия.

Мурат Абдукадырович Султанов — к.ф.-м.н., профессор; Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмеда Ясави, пр. Б. Саттарханова, 29, 160200, Туркестан, Казахстан.

Владимир Евгеньевич Мисиллов — к.ф.-м.н., научн. сотр., доцент кафедры Информационных технологий и систем управления; 1) Институт математики и механики имени Н. Н. Красовского УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 16, 620108, Екатеринбург, Россия; 2) Уральский федеральный университет, ул. Мира, 19, 620002, Екатеринбург, Россия.

Еркебулан Нурланулы — докторант; Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмеда Ясави, пр. Б. Саттарханова, 29, 160200, Туркестан, Казахстан.

References

1. A. A. Kilbas, H. M. Srivastava, and J. J. Trujillo (Eds.), *Theory and Applications of Fractional Differential Equations* (Elsevier, Amsterdam, 2006).
2. M. Cui, “Convergence Analysis of High-Order Compact Alternating Direction Implicit Schemes for the Two-Dimensional Time Fractional Diffusion Equation,” Numer. Algor. 62, 383–409 (2013). doi 10.1007/s11075-012-9589-3.
3. B. Jin and W. Rundell, “A Tutorial on Inverse Problems for Anomalous Diffusion Processes,” Inverse Probl. 31 (3) (2015). doi 10.1088/0266-5611/31/3/035003.
4. N. S. Belevtsov and S. Yu. Lukashchuk, “Lie Group Analysis of 2-Dimensional Space-Fractional Model for Flow in Porous Media,” Math. Meth. Appl. Sci. 41 (18), 9123–9133 (2018). doi 10.1002/mma.5078.
5. M. A. Sultanov, D. K. Durdiev, and A. A. Rahmonov, “Construction of an Explicit Solution of a Time-Fractional Multidimensional Differential Equation,” Mathematics. 9 (17) (2021). doi 10.3390/math9172052.
6. H. Scher and E. W. Montroll, “Anomalous Transit-Time Dispersion in Amorphous Solids,” Phys. Rev. B 12 (6) (1975). doi 10.1103/PhysRevB.12.2455.
7. S. C. Kou, “Stochastic Modeling in Nanoscale Biophysics: Subdiffusion within Proteins,” Ann. Appl. Stat. 2 (2), 501–535 (2008). doi 10.1214/07-AOAS149.
8. R. Metzler, J.-H. Jeon, A. G. Cherstvy, and E. Barkai, “Anomalous Diffusion Models and Their Properties: Non-Stationarity, Non-Ergodicity, and Ageing at the Centenary of Single Particle Tracking,” Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 24128–24164 (2014). doi 10.1039/C4CP03465A.
9. A. A. Samarskii and P. N. Vabishchevich, *Numerical Methods for Solving Inverse Problems of Mathematical Physics* (De Gruyter, New York, 2007; LKI, Moscow, 2009). doi 10.1515/9783110205794.
10. D. Baleanu, K. Diethelm, E. Scalas, and J. J. Trujillo, *Fractional Calculus: Models and Numerical Methods* (World Scientific, Singapore, 2012). doi 10.1142/10044.
11. C. Li and F. Zeng, *Numerical Methods for Fractional Calculus* (CRC Press, New York, 2015). doi 10.1201/b18503.
12. I. Podlubny, *Fractional Differential Equations* (Academic Press, New York, 1999).
13. T. Wei and Z. Q. Zhang, “Reconstruction of a Time-Dependent Source Term in a Time-Fractional Diffusion Equation,” Eng. Anal. Bound. Elem. 37 (1), 23–31 (2013). doi 10.1016/j.enganabound.2012.08.003.



14. A. K. Omran, M. A. Zaky, A. S. Hendy, and V. G. Pimenov, “An Efficient Hybrid Numerical Scheme for Nonlinear Multiterm Caputo Time and Riesz Space Fractional-Order Diffusion Equations with Delay,” *J. Funct. Spaces* **2021**, Art. ID 5922853 (2021). doi [10.1155/2021/5922853](https://doi.org/10.1155/2021/5922853).
15. V. G. Pimenov and E. E. Tashirova, “Numerical Method for Fractional Diffusion-Wave Equations with Functional Delay,” *Izv. Inst. Matem. Inform. Udmurt. State Univ.* **57**, 156–169 (2021). doi [10.35634/2226-3594-2021-57-07](https://doi.org/10.35634/2226-3594-2021-57-07).
16. N. S. Belevtsov and S. Yu. Lukashchuk, “Parallel Algorithm for Numerical Solving of Fractional Differential Generalized Poisson Equation,” in *Proc. Int. Conf. on Parallel Computing Technologies, Kaliningrad, Russia, April 2–4, 2019* (South Ural State Univ., Chelyabinsk, 2019), pp. 165–174.
17. R. R. Gubaidullin, S. Yu. Lukashchuk, and A. V. Yuldashev, “Parallel Algorithms for Solving Initial Boundary Problems for Fractional Differential Equations,” in *Proc. Int. Conf. on Parallel Computing Technologies, Kaliningrad, Russia, April 2–4, 2019* (South Ural State Univ., Chelyabinsk, 2019), pp. 232–238.
18. C. Gong, W. Bao, G. Tang, et al., “A Parallel Algorithm for the Two-Dimensional Time Fractional Diffusion Equation with Implicit Difference Method,” *Sci. World J.* **2014**. Article ID 219580 (2014). doi [10.1155/2014/219580](https://doi.org/10.1155/2014/219580).
19. X. Li and Y. Su, “A Parallel in Time/Spectral Collocation Combined with Finite Difference Method for the Time Fractional Differential Equations,” *J. Algorithms Comput. Technol.* **15** (2021). doi [10.1177/17483026211008409](https://doi.org/10.1177/17483026211008409).
20. P. de Luca, A. Galletti, H. R. Ghehsareh, et al., “A GPU-CUDA Framework for Solving a Two-Dimensional Inverse Anomalous Diffusion Problem,” in *Advances in Parallel Computing. Parallel Comput. Technol. Trends* (Amsterdam, IOS Press, 2020), Vol. 36, pp. 311–320. doi [10.3233/APC200056](https://doi.org/10.3233/APC200056).
21. X. Yang and L. Wu, “A New Kind of Parallel Natural Difference Method for Multi-Term Time Fractional Diffusion Model,” *Mathematics* **8** (4), 596–615 (2020). doi [10.3390/math8040596](https://doi.org/10.3390/math8040596).
22. Q. Wang, J. Liu, C. Gong, et al., “An Efficient Parallel Algorithm for Caputo Fractional Reaction–Diffusion Equation with Implicit Finite-Difference Method,” *Adv. Differ. Equ.* **2016**. Article Number: 207 (2016). doi [10.1186/s13662-016-0929-9](https://doi.org/10.1186/s13662-016-0929-9).
23. N. Alimbekova, A. Berdyshev, and D. Baigereyev, “Parallel Implementation of the Algorithm for Solving a Partial Differential Equation with a Fractional Derivative in the Sense of Riemann–Liouville,” in *Proc. IEEE Int. Conf. on Smart Information Systems and Technologies (SIST), Nur-Sultan, Kazakhstan, April 28–30, 2021*. doi [10.1109/SIST50301.2021.9465922](https://doi.org/10.1109/SIST50301.2021.9465922).
24. M. A. Sultanov, E. N. Akimova, V. E. Misilov, and Y. Nurlanuly, “Parallel Direct and Iterative Methods for Solving the Time-Fractional Diffusion Equation on Multicore Processors,” *Mathematics* **10** (3). Article Number: 323 (2022). doi [10.3390/math10030323](https://doi.org/10.3390/math10030323).
25. N. N. Yanenko, A. N. Kononov, A. N. Bugrov, and G. V. Shustov, “Organization of Parallel Computing and the Thomas Algorithm Parallelization,” in *Numerical Methods in Continuum Mechanics* (Comput. Center Sib. Branch of USSR Acad. Sci., Novosibirsk, 1978), Vol. 9, Issue 7, pp. 139–146.
26. E. N. Akimova, *Parallel Algorithms for Solving the Gravimetry, Magnetometry, and Elasticity Problems on Multiprocessor Systems with Distributed Memory*, Doctoral Dissertation in Mathematics and Physics (Institute of Mathematics and Mechanics, Ekaterinburg, 2009).
27. N. J. Ford and A. C. Simpson, “The Numerical Solution of Fractional Differential Equations: Speed Versus Accuracy,” *Numer. Algorithms* **26** (4), 333–346 (2001). doi [10.1023/A:1016601312158](https://doi.org/10.1023/A:1016601312158).

Received
August 16, 2022

Accepted for publication
September 14, 2022

Information about the authors

Elena N. Akimova — Dr. Sci., Leading Researcher, Professor of the Department of Information Technologies and Control Systems; 1) Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of RAS, S. Kovalevskaya ulitsa, 16, 620108, Ekaterinburg, Russia; 2) Ural Federal University, Mira ulitsa, 19, 620002, Ekaterinburg, Russia.

Murat A. Sultanov — Ph.D., Professor; Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, B. Sattarkhanov prospekt, 29, 160200, Turkestan, Kazakhstan.

Vladimir E. Misilov — Ph.D., Researcher, Associate Professor of the Department of Information Technologies and Control Systems; 1) Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of RAS, S. Kovalevskaya ulitsa, 16, 620108, Ekaterinburg, Russia; 2) Ural Federal University, Mira ulitsa, 19, 620002, Ekaterinburg, Russia.

Yerkebulan Nurlanuly — Doctoral Student; Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, B. Sattarkhanov prospekt, 29, 160200, Turkestan, Kazakhstan.