

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
Факультет вычислительной математики и кибернетики

**Образовательный комплекс
«Параллельные численные методы»**

Лекционные материалы

Баркалов К.А.

При поддержке компании Intel

Нижний Новгород

2011

Содержание

6. РЕШЕНИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ.....	3
6.1. РЕШЕНИЕ ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ.....	7
6.1.1. ЯВНАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА.....	9
6.1.2. ОРГАНИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ	10
6.1.3. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ.....	10
6.2. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ.....	13
6.2.1. ЯВНАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА.....	14
6.2.2. НЕЯВНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ	15
6.2.3. ОРГАНИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ	17
6.2.4. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ.....	18
6.3. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА.....	19
6.3.1. ПОСТРОЕНИЕ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ.....	19
6.3.2. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ВЕРХНЕЙ РЕЛАКСАЦИИ	22
6.3.3. ОРГАНИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ	24
6.3.4. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ.....	26
ЛИТЕРАТУРА.....	30
ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ ИНФОРМАЦИИ	30
ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА.....	31
ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ СЕТИ ИНТЕРНЕТ.....	31

6. Решение дифференциальных уравнений в частных производных

Уравнение, связывающее неизвестную функцию $u(x_1, \dots, x_n)$, независимые переменные x_1, \dots, x_n и частные производные от неизвестной функции, называется *дифференциальным уравнением в частных производных*. В общем случае оно имеет вид

$$F\left(x_1, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \dots, \frac{\partial^k u}{\partial x_1^{k_1} \dots \partial x_n^{k_n}}\right) = 0,$$

где F – заданная функция своих аргументов. Порядок старшей частной производной, входящей в уравнение, называют *порядком уравнения в частных производных*.

Например, наиболее общее уравнение в частных производных второго порядка имеет вид

$$F\left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = 0.$$

Уравнение в частных производных называется *квазилинейным*, если оно линейно относительно всех старших производных от неизвестной функции. Так, например, уравнение

$$A(x, y, u, u_x, u_y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B(\dots) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(\dots) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f(\dots) = 0$$

есть квазилинейное уравнение второго порядка.

Уравнение в частных производных называется *линейным*, если оно линейно относительно неизвестной функции и ее частных производных. Так, например, уравнение

$$\begin{aligned} A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \\ + D(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + G(x, y) u = f(x, y) \end{aligned}$$

есть линейное уравнение второго порядка относительно неизвестной функции $u(x, y)$.

Решением уравнения в частных производных называется всякая функция $u=u(x_1, \dots, x_n)$, которая, будучи подставлена в уравнение вместо неизвестной функции и ее частных производных, обращает это уравнение в тождество по независимым переменным.

Объектом нашего рассмотрения будут являться дифференциальные уравнения второго порядка, и параллельные численные методы их решения. Важность данного класса задач обусловлена тем фактом, что математическими моделями многих процессов механики (колебания струн, стержней, мембран и трехмерных объемов), физики (электромагнитные колебания, распространение тепла или диффузия частиц в среде), гидро- и газодинамики (различные виды течений) являются уравнения именно второго порядка. В качестве примера рассмотрим общий вид уравнений колебаний и диффузии.

Уравнение колебаний в общем виде можно записать как

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(p \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) - qu + F(x, t),$$

где неизвестная функция $u(x, t)$ зависит от n ($n=1, 2, 3$) пространственных переменных $x=(x_1, \dots, x_n)$ и времени t ; коэффициенты ρ , p и q определяются свойствами среды; а $F(x, t)$ – плотность внешнего возмущения.

В частном случае, уравнение малых поперечных колебаний струны (или же малых продольных колебаний стержня) постоянной плотности примет вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t), \quad (6.1)$$

где α^2 – положительная константа, зависящая от свойств струны (или стержня). Уравнение (6.1) обычно называют *волновым уравнением*.

Аналогично записывается уравнение поперечных колебаний мембраны

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \alpha^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, y, t).$$

Трехмерное волновое уравнение

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \alpha^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + f(x, y, z, t)$$

описывает процессы распространения звука в однородной среде и электромагнитных волн в однородной непроводящей среде. Этому уравнению удовлетворяет плотность газа, его давление и потенциал скоростей, а также

составляющие напряженности электрического и магнитного полей и соответствующие потенциалы.

В дальнейшем мы будем записывать волновые уравнения единой формулой

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \alpha^2 \Delta u + f,$$

где Δ – оператор Лапласа

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^2}.$$

Процессы распространения тепла или диффузии частиц в среде описываются следующим общим уравнением теплопроводности

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(p \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) - qu + F(x, t).$$

Если среда – однородная, то уравнение теплопроводности приобретает вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha^2 \Delta u + f(x, t),$$

где положительная константа α^2 зависит от свойств среды.

Для стационарных процессов (т.е. в случае $u(x, t) = u(x)$ и $F(x, t) = F(x)$) уравнения колебаний и диффузии приобретают вид

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(p \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) - qu = -F(x). \quad (6.2)$$

При $p = \text{const}$, $q = 0$ уравнение называется уравнением Пуассона

$$\Delta u = -f(x), \quad (6.3)$$

при $f(x) = 0$ уравнение (6.3) называется уравнением Лапласа

$$\Delta u = 0.$$

Известно, например, что безвихревое стационарное течение несжимаемой жидкости описывается уравнением Лапласа, где u – скалярная функция, называемая потенциалом скорости, а скорость \vec{v} течения жидкости связана с u как

$$\vec{v} = \text{grad}(u).$$

Для однозначности решения дифференциальных уравнений необходимо наложение дополнительных условий.

Начальные условия – условия, определяющие значения искомой функции (и, возможно, некоторых ее производных) при одном значении независимой переменной (например, в начальный момент времени, т.е. при $t=0$). Если в уравнении присутствует только первая производная по времени (как в уравнении теплопроводности), то достаточно задать одно начальное условие на значение функции. Физической интерпретацией будет являться распределение температуры в теле в начальный момент. Если же в уравнении присутствует вторая производная по времени (волновое уравнение), то необходимы два начальных условия – на значение функции и ее первой производной. Физической интерпретацией будут являться положение струны в начальный момент и скорость движения ее точек.

Граничные условия – условия, определяющие значения искомой функции (и, возможно, некоторых ее производных) на границе пространственной области, внутри которой ищется решение (при различных значениях независимых переменных). Выделяют три типа граничных условий:

- известны значения функции на границе (*задача Дирихле*);
- известны значения производной функции по нормали к границе (*задача Неймана*);
- известна линейная комбинация значений функции и ее производной по нормали к границе (*задача Робена*).

Следует отметить, что только некоторый узкий класс поставленных задач можно решить аналитически (например, в случае постоянных коэффициентов). Большинство же задач, которые описывают явления и процессы окружающего нас мира, допускают лишь численное решение.

Универсальным численным методом решения рассмотренных дифференциальных уравнений является *метод конечных разностей*, при котором решение дифференциального уравнения сводится к решению разностных уравнений. Для получения разностного уравнения вместо дифференциального следует:

- заменить область непрерывного изменения аргументов дискретным множеством точек (*сеткой*);
- заменить (*аппроксимировать на сетке*) дифференциальное уравнение разностным уравнением.

Сетка, как правило, выбирается равномерная. Например, равномерная сетка в двумерной прямоугольной области $D=\{(x,y): 0\leq x,y\leq 1\}$ может быть задана в виде

$$D_h = \{(x_i, y_j) : x_i = ih, y_j = jh, 0 \leq i, j \leq n, h = 1/n\}.$$

где величина N задает количество узлов по каждой из координат области D .

Используя значения функции в узлах сетки, можно аппроксимировать значения первой и второй производных, используя следующие формулы:

$$u'(x_i) = \frac{u(x_i) - u(x_{i-1}))}{h} + O(h)$$

$$u'(x_i) = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h} + O(h)$$

$$u'(x_i) = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h} + O(h^2)$$

$$u''(x_i) = \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2} + O(h^2)$$

В связи с построением разностной схемы возникают следующие проблемы, которые типичны для разностных методов вообще. Во-первых, необходимо убедиться, что система линейных алгебраических уравнений имеет единственное решение, и указать алгоритм, позволяющий получить это решение. И, во-вторых, надо показать, что при стремлении шага сетки h к нулю решение разностной задачи будет сходиться к решению исходной дифференциальной задачи. Вопросы разрешимости и сходимости разностных схем выходят за рамки данного пособия; им посвящена обширная литература, среди которой можно отметить книги [2, 4].

6.1. Решение волнового уравнения

Рассмотрим первую краевую задачу для одномерного волнового уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq T, \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = \bar{u}_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \end{aligned} \tag{6.4}$$

$$u(0, t) = \mu_1(t), \quad u(1, t) = \mu_2(t), \quad 0 \leq t \leq T.$$

Известно [3], что эта задача поставлена корректно, т.е. ее решение существует, оно единственно и непрерывно зависит от начальных и граничных данных.

С целью построения разностной схемы введем сетку

$$\omega_{h\tau} = \{(x_i, t_j) : x_i = ih, 0 \leq i \leq N, h = 1/N, t_j = j\tau, 0 \leq j \leq L, \tau = T/L\}.$$

с шагами h по x и τ по t .

Очевидно, минимальный шаблон, на котором можно аппроксимировать уравнение (6.4), это пятиточечный шаблон, изображенный на рис. 6.1.

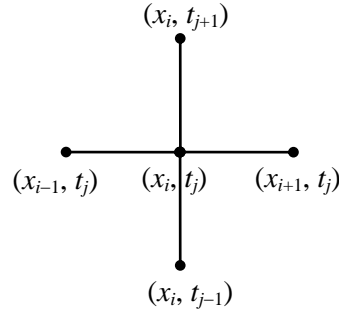


Рис. 6.1. Шаблоны трехслойной разностной схемы

В отличие от схем для уравнения теплопроводности, в которых используются только два временных слоя (слои n и $n+1$), здесь требуется использовать три слоя: $n-1$, n и $n+1$. Такие схемы называются *трехслойными*. Используя на данном шаблоне приближенные формулы вычисления производных

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_{ij} \approx \frac{u_i^{j+1} - 2u_i^j + u_i^{j-1}}{\tau^2}, \quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{ij} \approx \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{h^2},$$

можно записать разностную аппроксимацию уравнения и граничных условий

$$\frac{v_i^{j+1} - 2v_i^j + v_i^{j-1}}{\tau^2} = \alpha^2 \frac{v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j}{h^2} + f_i^j, \quad 1 \leq i \leq N-1, 1 \leq j \leq L-1, \quad (6.5)$$

$$v_0^j = \mu_1(t_j), v_N^j = \mu_2(t_j), \quad 0 \leq j \leq L,$$

где v_i^j – сеточная функция, аппроксимирующая точное решение дифференциального уравнения в узлах сетки. Затем, используя первое начальное условие из (6.4) сразу получаем

$$v_i^0 = u_0(x_i), \quad 1 \leq i \leq N-1.$$

Простейшая замена второго начального условия в (6.4) уравнением

$$\frac{v_i^1 - v_i^0}{\tau} = \bar{u}_0(x_i), 1 \leq i \leq N-1,$$

имеет лишь первый порядок аппроксимации по τ , тогда как разностное уравнение (6.5) второй порядок погрешности аппроксимации по τ по h . Однако известно [4], что разностное уравнение

$$\frac{v_i^1 - v_i^0}{\tau} = \bar{u}_0(x_i) + \frac{\tau}{2} \left(\alpha^2 \frac{v_{i+1}^0 - 2v_i^0 + v_{i-1}^0}{h^2} + f_i^0 \right), 1 \leq i \leq N-1,$$

аппроксимирует второе начальное условие из (6.4) со вторым порядком по τ и по h .

6.1.1. Явная разностная схема

Итак, совокупность уравнений

$$\frac{v_i^{j+1} - 2v_i^j + v_i^{j-1}}{\tau^2} = \alpha^2 \frac{v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j}{h^2} + f_i^j, 1 \leq i \leq N-1, 1 \leq j \leq L-1,$$

$$v_0^j = \mu_1(t_j), v_N^j = \mu_2(t_j), 0 \leq j \leq L,$$

$$v_i^0 = u_0(x_i), v_i^1 = v_i^0 + \bar{u}_0(x_i) + \frac{\tau^2}{2} \left(\frac{v_{i+1}^0 - 2v_i^0 + v_{i-1}^0}{h^2} + f_i^0 \right), 1 \leq i \leq N-1,$$

составляет разностную схему, аппроксимирующую исходную задачу (6.4). Известно [6], что для вычислительной устойчивости данной разностной схемы необходимо и достаточно выполнения условия Куранта

$$\alpha\tau < h. \tag{6.6}$$

Решение находится по слоям: значения сеточной функции на новом слое выражается явным образом через значения на предыдущих слоях. Действительно, разностное уравнение (6.5) содержит только одну неизвестную v_i^{j+1} , значения которой можно выразить как

$$v_i^{j+1} = 2v_i^j - v_i^{j-1} + \left(\frac{\alpha\tau}{h} \right)^2 (v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j) + \tau^2 f_i^j, 1 \leq i \leq N-1, 1 \leq j \leq L-1;$$

при этом значения на нулевом и первом слоях находятся непосредственно из начальных условий.

6.1.2. Организация параллельных вычислений

Анализ последовательного алгоритма показывает, что вычисления проводятся «по слоям», и вычислить значения сеточной функции на $(j+1)$ -м слое можно лишь вычислив значения на j -м слое. Таким образом, в качестве подзадачи, допускающей распараллеливание, можно рассмотреть вычисление значений на очередном слое. Каждый поток получает свою полосу данных, и проводит вычисление значений $(j+1)$ -м слое лишь в пределах своей полосы.

Ниже приведен рисунок, иллюстрирующий процесс разделения данных для явной схемы. Светлые точки соответствуют узлам сетки, значения в которых могут быть получены из начальных и граничных условий, темные точки соответствуют узлам, значения в которых предстоит вычислить, пунктиром изображен шаблон разностной схемы. Стрелками указано направление обхода узлов сетки в пределах каждой полосы.

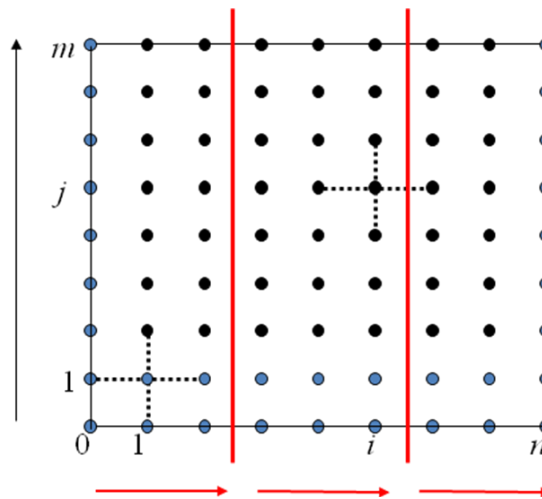


Рис. 6.2. Схема разделения данных

Следует отметить, что в отличие от систем с распределенной памятью, для систем с общей памятью снимается проблема пересылки узлов на границах полос разделения данных.

6.1.3. Результаты вычислительных экспериментов

Для проведения вычислительных экспериментов была сформирована тестовая задача

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, x \in [0,1], t \in [0,2];$$

$$u(0,t) = u(1,t) = 0;$$

$$u(x,0) = 0.1 \sin(\pi x), \frac{\partial u}{\partial x}(x,0) = 0.$$

Нетрудно видеть, что данная задача имеет решение

$$u(x,t) = 0.1 \sin(\pi x) \cos(\pi t).$$

Для выполнения условия (6.6) вычислительной устойчивости было выбрано фиксированное число разбиений $m=25000$ по переменной t , число разбиений n по переменной x варьировалось от 2500 до 10000.

Вычислительные эксперименты для оценки эффективности параллельного алгоритма решения волнового уравнения проводились на аппаратуре, технические характеристики которой указаны во введении. Результаты вычислительных экспериментов приведены в таблице (время работы алгоритмов указано в секундах).

Табл. 6.1. Экспериментальная оценка ускорения

n	1 поток	Параллельный алгоритм							
		2 потока		4 потока		6 потоков		8 потоков	
		T	S	T	S	T	S	T	S
2500	1,49	0,72	2,05	0,36	4,14	0,41	3,61	0,48	3,07
5000	3,22	1,57	2,04	1,01	3,18	0,92	3,51	1,03	3,12
7500	5,08	2,59	1,96	1,56	3,26	1,50	3,39	1,73	2,93
10000	6,72	3,76	1,79	2,23	3,01	2,25	2,99	2,50	2,69

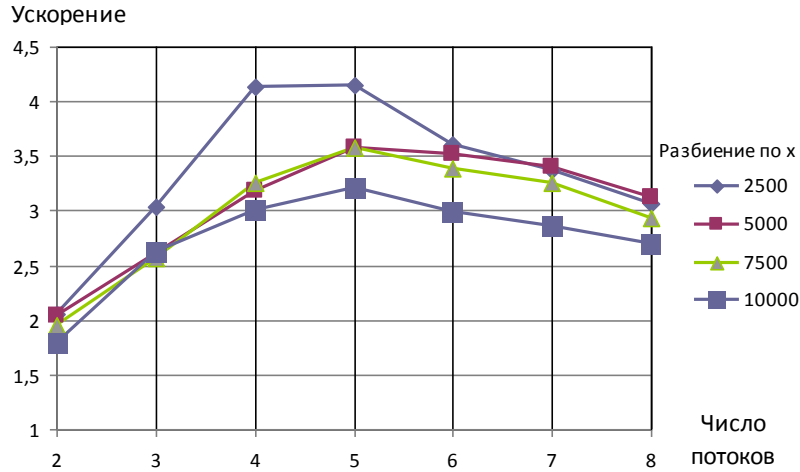


Рис. 6.3. Зависимость ускорения от числа потоков

Эксперименты показывают падение ускорения при числе потоков, большем пяти. Данный факт объясняется низкой трудоемкостью операций, выполняемых каждым потоком. В этом случае накладные расходы (время δ , требуемое для создания и закрытия параллельной секции) превышают выигрыш от распараллеливания. Чтобы подтвердить наше предположение, проведем еще один эксперимент с большей вычислительной нагрузкой на поток.

С этой целью сформируем вторую тестовую задачу

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\exp(\cos(x))}{10} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, x \in [0,1], t \in [0,2];$$

$$u(0,t) = u(1,t) = 0;$$

$$u(x,0) = 0.1 \sin(\pi x), \frac{\partial u}{\partial x}(x,0) = 0.$$

При аналогичном выборе числа разбиений $L=25000$ по переменной t , и варьировании числа разбиений N по переменной x от 2500 до 10000 условие (6.6) вычислительной устойчивости будет выполняться. Результаты эксперимента приведены ниже, время работы алгоритмов указано в секундах.

Табл. 6.2. Ускорение с вычислительной нагрузкой

n	1 поток	Параллельный алгоритм			
		2 потока	4 потока	6 потоков	8 потоков

		<i>T</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	<i>S</i>
2500	5,43	2,56	2,12	1,20	4,52	0,84	6,45	0,81	6,69
5000	11,20	5,48	2,05	2,73	4,10	1,81	6,19	1,67	6,71
7500	16,83	8,41	2,00	4,26	3,95	2,89	5,83	2,65	6,35
10000	22,64	11,34	2,00	5,77	3,92	3,96	5,71	3,70	6,12

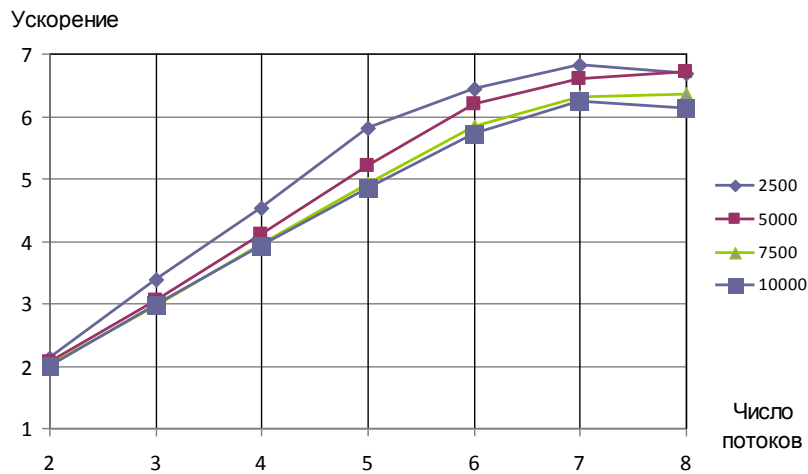


Рис. 6.4. Ускорение с вычислительной нагрузкой

Приведенные результаты подтверждают наше предположение: в случае большей вычислительной нагрузки на поток ускорение становится практически линейным до 7 потоков.

6.2. Решение задачи теплопроводности

Процесс распространения тепла в одномерном однородном стержне $0 < x < l$ описывается уравнением

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

Без ограничения общности можно считать $l=1, \alpha^2=1$. Мы будем рассматривать первую краевую задачу в области

$$D = \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T\}.$$

Требуется найти непрерывное в D решение $u=u(x, t)$ задачи

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq T,$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad u(0, t) = u_1(t), \quad u(1, t) = u_2(t), \quad 0 \leq t \leq T.$$

С целью построения разностной схемы в области D введем сетку

$$\omega_{h\tau} = \{(x_i, t_j): x_i = ih, \quad 0 \leq i \leq n, \quad h = 1/n, \quad t_j = j\tau, \quad 0 \leq j \leq m, \quad \tau = T/m\}.$$

с шагами h по x и τ по t . Используя приближенные формулы вычисления производных

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{ij} \approx \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau}, \quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{ij} \approx \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{h^2},$$

можно записать разностную схему вида

$$\frac{v_i^{j+1} - v_i^j}{\tau} = \sigma \frac{v_{i+1}^{j+1} - 2v_i^{j+1} + v_{i-1}^{j+1}}{h^2} + (1 - \sigma) \frac{v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j}{h^2} + \varphi_i^j, \quad (6.7)$$

$$v_i^0 = u_0(x_i), \quad v_0^j = u_1(t_j), \quad v_n^j = u_2(t_j), \quad 0 \leq i \leq n, \quad 0 \leq j \leq m.$$

где v_i^j – сеточная функция, являющаяся точным решением разностной схемы и аппроксимирующая точное решение дифференциального уравнения в узлах сетки; σ – параметр, называемый весом, а φ_i^j – некоторая правая часть, например, $\varphi_i^j = f_i^j$. В общем случае схема (6.7) определена на шеститочечном шаблоне, изображенном на рис. 6.5.

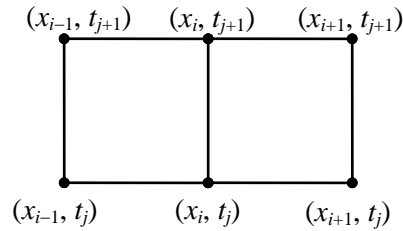


Рис. 6.5. Шаблон схемы с весом

Далее рассмотрим важные частные случаи схемы (6.7).

6.2.1. Явная разностная схема

В случае $\sigma=0$ схема (6.7) приобретет вид

$$\frac{v_i^{j+1} - v_i^j}{\tau} = \frac{v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j}{h^2} + \varphi_i^j, \quad (6.8)$$

где $\varphi_i^j = f_i^j$; граничные условия при этом останутся неизменными. Шаблон схемы 6.6 представлен на рис. 6.6.

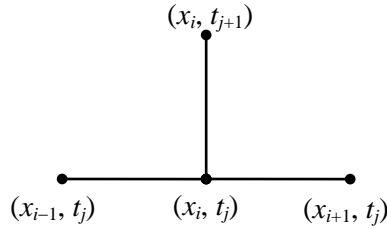


Рис. 6.6. Шаблон явной схемы

Данная схема является явной. Действительно, значения сеточной функции на $(j+1)$ -м слое можно найти по явной формуле

$$v_i^{j+1} = \left(1 - \frac{2\tau}{h^2}\right)v_i^j + \frac{\tau}{h^2}(v_{i+1}^j + v_{i-1}^j) + \tau\varphi_i^j, 0 \leq j \leq L-1 \quad (6.9)$$

используя известные значения на j -м слое.

Известно [4], что явная разностная схема будет вычислительно устойчива лишь при выполнении условия

$$\tau \leq h^2/2.$$

т.е. схема является условно устойчивой. При этом схема аппроксимирует исходное уравнение с порядком $O(\tau+h^2)$.

Условие вычислительной устойчивости налагает существенные требования на шаг по времени, поэтому данная вычислительная схема требует существенных вычислительных затрат. Применение явных разностных схем оправдано лишь в случае более слабых ограничений на шаг τ (см. п. 6.1.1).

6.2.2. Неявные разностные схемы

В случае $\sigma=1$ схема (6.7) приобретет вид

$$\frac{v_i^{j+1} - v_i^j}{\tau} = \frac{v_{i+1}^{j+1} - 2v_i^{j+1} + v_{i-1}^{j+1}}{h^2} + f_i^{j+1}, \quad (6.10)$$

$$v_i^0 = u_0(x_i), v_0^j = u_1(t_j), v_n^j = u_2(t_j), 0 \leq i \leq n, 0 \leq j \leq m.$$

Данная схема определена на четырехточечном шаблоне (см. рис. 6.7) и является *неявной*.

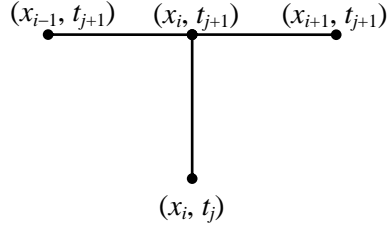


Рис. 6.7. Шаблон неявной схемы

В данном случае для определения v_i^{j+1} получаем систему уравнений вида

$$\frac{\tau}{h^2} v_{i-1}^{j+1} - \left(1 + \frac{2\tau}{h^2}\right) v_i^{j+1} + \frac{\tau}{h^2} v_{i+1}^{j+1} = v_i^j + \mathcal{F}_i^{j+1}, 0 < i < n, \quad (6.11)$$

$$v_0^{j+1} = u_1(t_{j+1}), v_n^{j+1} = u_2(t_{j+1}).$$

Система уравнений является трехдиагональной, и может быть решена методом прогонки.

Известно [4], что неявная разностная схема будет вычислительно устойчива при любом соотношении шагов τ и h (абсолютная устойчивость). Погрешность аппроксимации составит также $O(\tau+h^2)$.

В случае $0 < \sigma < 1$ говорят о схеме с весом σ (шаблон представлен на рис. 6.5). Очевидно, что схема с весом тоже будет неявной схемой. Особо отметим случай $\sigma = 1/2$ (данная схема также называется *схемой Кранка-Николсона*), который приводит к виду

$$\frac{v_i^{j+1} - v_i^j}{\tau} = \frac{1}{2} \left[\frac{v_{i+1}^{j+1} - 2v_i^{j+1} + v_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j}{h^2} \right] + f_i^{j+1/2}, \quad (6.12)$$

$$v_i^0 = u_0(x_i), v_0^j = u_1(t_j), v_n^j = u_2(t_j), 0 \leq i \leq n, 0 \leq j \leq m.$$

Значения на новом слое также находятся методом прогонки для системы уравнений

$$\frac{\tau}{2h^2} v_{i-1}^{j+1} - \left(1 + \frac{\tau}{h^2}\right) v_i^{j+1} + \frac{\tau}{2h^2} v_{i+1}^{j+1} =$$

$$= \left(1 - \frac{\tau}{h^2}\right) v_i^j + \frac{\tau}{2h^2} (v_{i-1}^j + v_{i+1}^j) + \mathcal{F}_i^{j+1/2}, 0 < i < N, \quad (6.13)$$

$$v_0^{j+1} = u_1(t_{j+1}), v_n^{j+1} = u_2(t_{j+1}).$$

Известно [4], что симметричная разностная схема с весом $\frac{1}{2}$ будет абсолютно устойчива, а ее погрешность аппроксимации составит $O(\tau^2 + h^2)$. Данные свойства делают схему с весом $\frac{1}{2}$ предпочтительной для проведения расчетов, т.к. она обеспечивает хорошую точность при не слишком малых шагах сетки.

6.2.3. Организация параллельных вычислений

Анализ последовательного алгоритма показывает, что вычисления проводятся «по слоям», и вычислить значения сеточной функции на $(j+1)$ -м слое можно лишь вычислив значения на j -м слое. Таким образом, в качестве подзадачи, допускающей распараллеливание, можно рассмотреть вычисление значений на очередном слое.

В случае использования чисто неявной разностной схемы или же схемы Кранка-Николсона вычисление значений сеточной функции на $(j+1)$ -м слое соответствует решению системы линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей, и можно применить метод прогонки в его параллельном варианте (см. п. **Ошибка! Источник ссылки не найден.**).

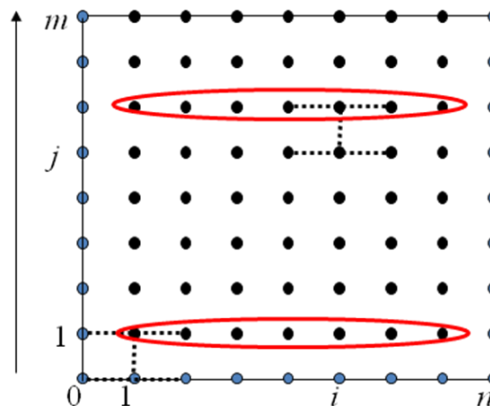


Рис. 6.8. Распараллеливание схемы Кранка-Николсона

На рисунке 6.8 проиллюстрирован процесс решения задачи. Светлые точки соответствуют узлам сетки, значения в которых могут быть получены из начальных и граничных условий, темные точки соответствуют узлам, значения в которых предстоит вычислить, пунктиром изображен шаблон разностной схемы. Обведены узлы, решение которых может быть найдено параллельным методом прогонки.

6.2.4. Результаты вычислительных экспериментов

В качестве иллюстрации рассмотрим решение дифференциального уравнения вида

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{2} \sigma^2 \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \left(r - D - \frac{1}{2} \sigma^2 \right) \frac{\partial C}{\partial z} - rC = 0.$$

Уравнение такого вида возникает в задачах финансовой математики при определении цены конвертируемой облигации (здесь $C(z, t)$ – цена конвертируемой облигации в момент времени t). Подробная содержательная постановка задачи и разностная схема для ее численного решения приведены в лабораторной работе «Решение дифференциальных уравнений в частных производных».

Здесь же отметим, что задача решалась с использованием схемы Кранка-Николсона, число разбиений по t было равно 100, число разбиений по z варьировалось в диапазоне от 256 до 32768. Возникающая при этом трехдиагональная система уравнений решалась методами прогонки и параллельной встречной прогонки. Ниже в таблице приведено время работы (в секундах) указанных методов, а также ускорение параллельной встречной прогонки относительно последовательной.

Табл. 6.3. Экспериментальная оценка ускорения

Число разбиений	Прогонка	Встречная прогонка	Ускорение
256	0,08	0,08	1,00
512	0,14	0,16	0,90
1024	0,28	0,16	1,79
2048	0,51	0,36	1,44
4096	1,03	0,56	1,83
8192	2,03	1,72	1,18
16384	4,07	2,20	1,85
32768	8,16	5,63	1,45

Результаты показывают, что использование метода встречной прогонки дает ускорение до 1.85 раза при решении задачи. Следует отметить, что при решении задачи не учитывалась специфика трехдиагональной системы уравнений: в ней на диагоналях стоят одинаковые числа. Учет данной специфики может дать еще большее ускорение.

6.3. Решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона

В данном разделе мы рассмотрим решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона

$$\begin{aligned} \Delta u(x,y) &= -f(x,y), \quad x \in (a,b), \quad y \in (c,d); \\ u(a,y) &= \psi_1(y), \quad u(b,y) = \psi_2(y), \\ u(x,c) &= \psi_3(x), \quad u(x,d) = \psi_4(x). \end{aligned} \quad (6.14)$$

Величины a, b, c, d и функции $f(x, y)$, ψ_i , $i=1, \dots, 4$, - известны, функция $u(x, y)$ - искомая. Не ограничивая общности, будем считать в дальнейшем $a=c=0$, $b=d=1$. Задача (6.14) может рассматриваться как задача на отыскание деформации упругой мембраны, находящейся под внешним воздействием, края которой закреплены по заданному закону, либо как задача об отыскании стационарного распределения температур на квадратной пластине с внешними источниками тепла, на краях которой поддерживается заданный температурный режим.

6.3.1. Построение разностной схемы

Для отыскания численного решения дифференциальной задачи (6.14) в области задания уравнения вводится равномерная прямоугольная сетка и используется разностная схема второго порядка аппроксимации. Сеточная функция $v(x, y)$, являющаяся точным решением разностной схемы, трактуется как приближенное (численное) решение исходной задачи (6.14).

Для задания сетки необходимо указать два положительных целых числа n и m , определяющих число разбиений по оси x и y соответственно. Шаг сетки по оси x обозначим через h , по оси y - через k ,

$$h = 1/n, \quad k = 1/m. \quad (6.15)$$

Узлы сетки обозначим через (x_i, y_j) , $i=0, \dots, n, j=0, \dots, m$, где

$$x_i = ih, \quad i=0, \dots, n; \quad y_j = jk, \quad j=0, \dots, m.$$

Узлы с координатами (x_i, y_j) , где $i=1, \dots, n-1, j=1, \dots, m-1$, называются внутренними, остальные узлы - граничными. Узлы с координатами (x_0, y_0) , (x_n, y_0) , (x_0, y_m) , (x_n, y_m) называются угловыми.

Численное (приближенное) решение задачи (6.14) обозначим через $v(x, y)$. Значение сеточной функции $v(x, y)$ в узле (x_i, y_j) - внутреннем или граничном - обозначим через v_{ij} :

$$v_{ij} = v(x_i, y_j), \quad i=0, \dots, n, \quad j=0, \dots, m.$$

Значения функции $f(x, y)$ во внутреннем узле с координатами (x_i, y_j) обозначим через f_{ij} :

$$f_{ij} = f(x_i, y_j), \quad i=1, \dots, n-1, \quad j=1, \dots, m-1.$$

Значения функций граничных условий в соответствующих граничных узлах обозначим через $\psi_{1j}, \psi_{2j}, \psi_{3i}, \psi_{4j}$:

$$\psi_1(y_j) = \psi_{1j}, \quad \psi_2(y_j) = \psi_{2j}, \quad j = 0, \dots, m;$$

$$\psi_3(x_i) = \psi_{3i}, \quad \psi_4(x_i) = \psi_{4i}, \quad i = 0, \dots, n.$$

Разностная схема, т.е. система уравнений для отыскания сеточной функции $v(x, y)$, принимает вид

$$\begin{cases} \frac{v_{i-1,j} - 2v_{ij} + v_{i+1,j}}{h^2} + \frac{v_{i,j-1} - 2v_{ij} + v_{i,j+1}}{k^2} = -f_{ij} \\ i = 1, \dots, n-1; \quad j = 1, \dots, m-1; \\ v_{0j} = \psi_{1j} \quad v_{nj} = \psi_{2j} \quad j = 1, \dots, m-1; \\ v_{i0} = \psi_{3i} \quad v_{im} = \psi_{4i} \quad i = 1, \dots, n-1. \end{cases} \quad (6.16)$$

Заметим, что значения граничных функций $\psi_i, i=1, \dots, 4$, в угловых узлах разностной схемой (6.16) не используются.

Уравнения разностной схемы (6.16) построены на основе аппроксимации дифференциального уравнения (6.14) во внутренних узлах сетки с помощью формул приближенного вычисления вторых частных производных

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx u_{xx_{ij}} = \frac{u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j}}{h^2},$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx u_{yy_{ij}} = \frac{u_{i,j-1} - 2u_{ij} + u_{i,j+1}}{k^2}.$$

Эти формулы аппроксимируют вторые частные производные по x и по y с погрешностью второго порядка по h и k соответственно

$$u_{xx_{ij}} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{h^2}{12} \cdot \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i, y_j) + o(h^2)$$

$$u_{yy_{ij}} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{k^2}{12} \cdot \frac{\partial^4 u}{\partial y^4}(x_i, y_j) + o(k^2)$$

Остальные уравнения разностной схемы (6.16) определяются граничными условиями задачи (6.14).

Разностная схема (6.16) представляет собой линейную систему уравнений относительно неизвестного вектора v размерности $(n+1) \cdot (m+1)$, компоненты которого имеют вид

$$v = (v_{00}, v_{10}, \dots, v_{n0}, v_{01}, v_{11}, \dots, v_{n1}, \dots, v_{0m}, v_{1m}, \dots, v_{nm}).$$

В связи с тем, что значения искомой сеточной функции $v(x,y)$ в граничных узлах известны, разностную схему (6.16) допустимо трактовать как систему линейных уравнений размерности $(n-1) \cdot (m-1)$ относительно неизвестного вектора v с компонентами

$$v = (v_{11}, \dots, v_{n-1,1}, v_{11}, \dots, v_{n-1,2}, \dots, v_{1,m-1}, v_{2,m-1}, \dots, v_{n-1,m-1}).$$

Запись разностной схемы в матричном виде для сетки с параметрами $n=5$, $m=5$ приведена на рис. 6.9. Матрица имеет блочно-диагональную структуру и является разреженной.

$$\begin{pmatrix} A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{h^2} & A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{h^2} & A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & A & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & A & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & 0 & A & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & A & \frac{1}{h^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & A & \frac{1}{h^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{k^2} & 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{21} \\ v_{31} \\ v_{41} \\ v_{12} \\ v_{22} \\ v_{32} \\ v_{42} \\ v_{13} \\ v_{23} \\ v_{33} \\ v_{43} \\ v_{14} \\ v_{24} \\ v_{34} \\ v_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -f_{11} - \frac{1}{h^2} \mu_{11} - \frac{1}{k^2} \mu_{31} \\ -f_{21} - \frac{1}{k^2} \mu_{32} \\ -f_{31} - \frac{1}{k^2} \mu_{33} \\ -f_{41} - \frac{1}{h^2} \mu_{21} - \frac{1}{k^2} \mu_{34} \\ -f_{12} - \frac{1}{h^2} \mu_{12} \\ -f_{22} \\ -f_{32} \\ -f_{42} - \frac{1}{h^2} \mu_{22} \\ -f_{13} - \frac{1}{h^2} \mu_{13} \\ -f_{23} \\ -f_{33} \\ -f_{43} - \frac{1}{h^2} \mu_{23} \\ -f_{14} - \frac{1}{h^2} \mu_{14} - \frac{1}{k^2} \mu_{41} \\ -f_{24} - \frac{1}{k^2} \mu_{42} \\ -f_{34} - \frac{1}{k^2} \mu_{43} \\ -f_{44} - \frac{1}{h^2} \mu_{24} - \frac{1}{k^2} \mu_{44} \end{pmatrix}$$

Рис. 6.9 Матрица разностной схемы

На ее главной диагонали расположены числа вида $A = -2(1/h^2 + 1/k^2)$, остальные ненулевые элементы могут принимать либо значение $1/h^2$, либо значение $1/k^2$ (здесь h и k – шаги сетки из (6.15)).

Матрица, частный случай которой приведен на рис. 6.9, является симметричной, невырожденной и *отрицательно определенной*. Умножив уравнения системы на -1 , разностную схему (6.16) можно записать как линейную систему уравнений с симметричной положительно определенной матрицей. Известно, что собственные числа данной матрицы будут определяться соотношением

$$\lambda_{ij} = \left(\frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{\pi i}{2n} + \frac{4}{k^2} \sin^2 \frac{\pi j}{2m} \right), \quad i=1, \dots, n-1, j=1, \dots, m-1.$$

Отметим, что в силу специфики матрицы системы (6.16) ее можно не хранить целиком, а вычислять ее коэффициенты в зависимости от позиции. Это позволяет применять итерационные методы, запоминая лишь значения сеточной функции на очередной итерации. Ниже приведена запись метода верхней релаксации с учетом специфики системы (6.16).

6.3.2. Применение метода верхней релаксации

При изучении свойств итерационных методов следует иметь в виду, что минимальное и максимальное собственные числа системы уравнений, соответствующей разностной схеме (6.16), составят

$$\lambda_{\min} = \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{\pi}{2n} + \frac{4}{k^2} \sin^2 \frac{\pi}{2m}, \quad (6.17)$$

$$\lambda_{\max} = \frac{4}{h^2} \cos^2 \frac{\pi}{2n} + \frac{4}{k^2} \cos^2 \frac{\pi}{2m} \quad (6.18)$$

Следовательно, спектральное число обусловленности μ_A матрицы A , вычисляемое в соответствии с формулой

$$\mu_A = \lambda_{\max} / \lambda_{\min}, \quad (6.19)$$

с уменьшением шагов сетки h и k возрастает.

Поскольку скорость сходимости итерационных методов существенно зависит от числа обусловленности (чем больше μ_A , тем ниже скорость сходимости), при использовании любого итерационного метода с уменьшением шагов сетки скорость решения разностной схемы (6.16) замедляется. Кроме того, с возрастанием числа обусловленности возрастает чувствительность системы к вычислительным погрешностям. Именно в этом состоит одна из основных проблем численного решения дифференциального уравнения: разностная схема (6.16) хорошо аппроксимирует дифференциальную задачу (6.14) на сетке с малым шагом, но на сетке с малым шагом решение задачи (6.16) требует больших вычислительных ресурсов. Следует отметить, что использование многих итерационных методов линейной ал-

гебры предполагает, что границы спектра матрицы A исследователю известны, что позволяет подбирать параметры итерационного процесса оптимальным образом.

В частности, для рассматриваемой системы линейных уравнений (6.16) оптимальный параметр ω метода верхней релаксации известен [4] и в случае одинаковых шагов сетки h и k равен

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + 2\sin(\pi h/2)}. \quad (6.20)$$

Получим расчетные формулы метода верхней релаксации с учетом специфики разностной схемы (6.16), построенной для решения задачи Дирихле (6.14). Уравнения разностной схемы можно записать в виде

$$2 \cdot \left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{k^2} \right) \cdot v_{ij} - \frac{1}{h^2} v_{i-1,j} - \frac{1}{k^2} v_{i,j-1} - \frac{1}{h^2} v_{i+1,j} - \frac{1}{k^2} v_{i,j+1} = f_{ij}, \quad (6.21)$$

$$i = \overline{1, n-1} \quad j = \overline{1, m-1}.$$

Запись (6.21) соответствует записи разностной схемы (6.16) как системы линейных уравнений относительно неизвестного вектора v размерности $(n-1) \cdot (m-1)$ с компонентами

$$v = (v_{11}, \dots, v_{n-1,1}, v_{11}, \dots, v_{n-1,2}, \dots, v_{1,m-1}, v_{2,m-1}, \dots, v_{n-1,m-1})$$

и с симметричной, положительно определенной матрицей. Слагаемые вида v_{ij} , соответствующие граничным узлам, являются известными.

Запишем указанные уравнения так, чтобы диагональный элемент матрицы системы (6.21), умноженный на соответствующую компоненту неизвестного вектора v , оставался слева, а остальные слагаемые уравнения и его правая часть – справа:

$$av_{ij} = \frac{1}{h^2} v_{i-1,j} + \frac{1}{h^2} v_{i+1,j} + \frac{1}{k^2} v_{i,j-1} + \frac{1}{k^2} v_{i,j+1} + f_{ij}, \quad (6.22)$$

$$a = 2(1/h^2 + 1/k^2), \quad i = \overline{1, n-1}, \quad j = \overline{1, m-1}.$$

Чтобы получить формулы итерационного процесса необходимо выяснить, какие компоненты вектора v встречаются раньше, чем компонента v_{ij} , и какие – позже, чем v_{ij} . «Ранние» компоненты необходимо брать из нового приближения, умножая их на ω . «Поздние» компоненты необходимо брать из старого приближения, также умножая их на ω . Кроме того, в правую часть нужно добавить слагаемое вида $(1 - \omega)Av_{ij}^{(s)}$, согласно общей форму-

ле. Нетрудно видеть, что $v_{i-1,j}$ и $v_{i,j-1}$ встречаются в векторе v раньше, чем v_{ij} , а $v_{i+1,j}$ и $v_{i,j+1}$ – позже. Окончательно для отыскания компонент нового приближения $v^{(s+1)}$ по компонентам старого приближения $v^{(s)}$ получим следующие расчетные формулы:

$$av_{ij}^{(s+1)} = \frac{\omega}{h^2} v_{i-1,j}^{(s+1)} + \frac{\omega}{k^2} v_{i,j-1}^{(s+1)} + \frac{\omega}{h^2} v_{i+1,j}^{(s)} + \frac{\omega}{k^2} v_{i,j+1}^{(s)} + (1-\omega)av_{ij}^{(s)} + \omega f_{ij}, \quad (6.23)$$

$$a = 2\left(1/h^2 + 1/k^2\right), \quad i = \overline{1, n-1}, \quad j = \overline{1, m-1}$$

При программной реализации метода формула (6.23) используется во внешнем цикле по j от 1 до $m-1$ и внутреннем цикле по i от 1 до $n-1$. Порядок циклов изменять нельзя, иначе компоненты приближения будут меняться не в том порядке, в каком они следуют друг за другом в векторе v .

6.3.3. Организация параллельных вычислений

Рассмотрим способ построения параллельного алгоритма, который выполнял бы только те вычислительные действия, что и последовательный метод (быть может в некотором ином порядке) и, как результат, обеспечивал бы получение точно таких же решений исходной вычислительной задачи. Как уже было отмечено выше, в последовательном алгоритме каждое очередное k -ое приближение значения v_{ij} вычисляется по последнему k -ому приближению значений $v_{i-1,j}$ и $v_{i,j-1}$ и предпоследнему $(k-1)$ -ому приближению значений $v_{i+1,j}$ и $v_{i,j+1}$. При требовании совпадения результатов вычислений последовательных и параллельных вычислительных схем в начале каждой итерации метода только одно значение v_{11} может быть пересчитано (возможности для распараллеливания нет). Но далее после пересчета v_{11} вычисления могут выполняться уже в двух узлах сетки v_{12} и v_{21} (в этих узлах выполняются условия последовательной схемы), затем после пересчета узлов v_{12} и v_{21} – в узлах v_{31} , v_{22} и v_{13} и т.д.

Обобщая сказанное, можно увидеть, что выполнение итерации метода можно разбить на последовательность шагов, на каждом из которых к вычислениям окажутся подготовленными узлы вспомогательной диагонали сетки с номером, определяемом номером этапа. Иллюстрация данного процесса приведена на рис. 6.10.

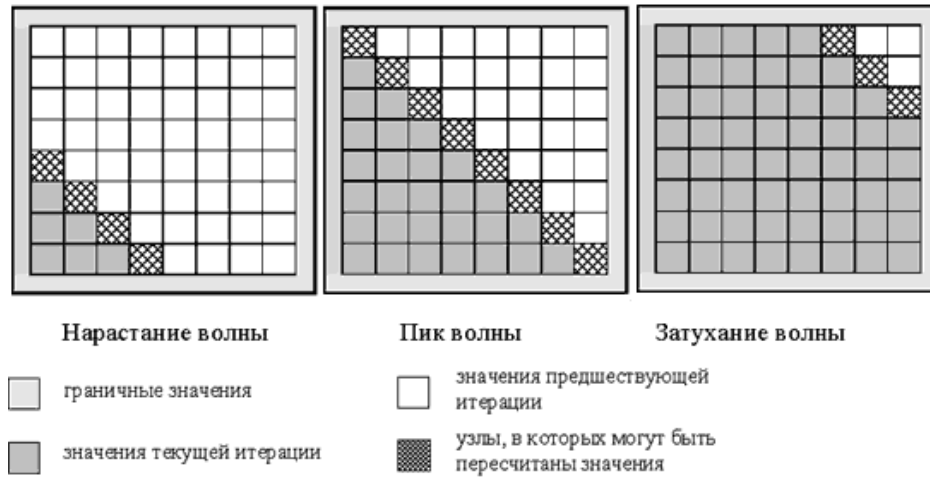


Рис. 6.10. Движение фронта волны вычислений

Получаемая в результате вычислительная схема получила наименование волны или фронта вычислений, а алгоритмы, получаемые на ее основе, – методами волновой обработки данных. В нашем случае размер волны (степень возможного параллелизма) динамически изменяется в ходе вычислений – волна нарастает до своего пика, а затем затухает при приближении к правому нижнему узлу сетки.

Следует обратить внимание на важный момент при анализе эффективности разработанного параллельного алгоритма. Фронт волны вычислений плохо соответствует правилам использования кэша процессора. В рассматриваемом нами алгоритме размещение данных в памяти осуществляется по строкам, а фронт волны вычислений располагается по диагонали сетки, и это приводит к низкой эффективности использования кэша. Один из способов улучшения ситуации – укрупнение вычислительных операций и рассмотрение в качестве распределяемых между потоками действий процедуру обработки некоторой прямоугольной подобласти (блока) сетки области расчетов. Иллюстрация приведена на рис. 6.11.

Вычисления в предлагаемом алгоритме происходят в соответствии с волновой схемой обработки данных – вначале вычисления выполняются только в левом верхнем блоке с координатами $(0,0)$, далее для обработки становятся доступными блоки с координатами $(0,1)$ и $(1,0)$ и т.д.

Блочный подход к методу волновой обработки данных существенным образом меняет состояние дел – обработку узлов можно организовать построчно, доступ к данным осуществляется последовательно по элементам памяти, перемещенные в кэш значения используются многократно.

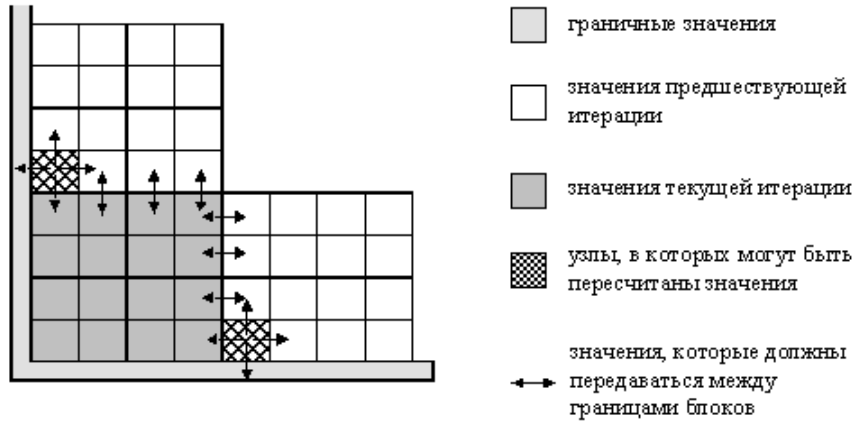


Рис. 6.11. Блочное представление волны

6.3.4. Результаты вычислительных экспериментов

Для проведения вычислительных экспериментов была сформирована тестовая задача

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 4, x \in [1,2], y \in [2,3];$$

$$u(1, y) = 1 + y^2, \quad u(2, y) = 4 + y^2;$$

$$u(x, 2) = x^2 + 4, \quad u(x, 3) = x^2 + 9.$$

Нетрудно видеть, что данная задача имеет решение

$$u(x, y) = x^2 + y^2.$$

В соответствии с описанным алгоритмом была построена разностная схема (6.16), число разбиений по x и по y выбиралось одинаковым, и варьировалось в диапазоне от 250 до 1500. Отметим, что при числе разбиений 1000 система уравнений, которая соответствует данной разностной схеме, будет содержать ≈ 1 млн. уравнений, а коэффициент заполнения матрицы будет $\approx 10^{-6}$.

Для поиска решения построенной разностной схемы использовался метод верхней релаксации с оптимальным параметром, который вычислялся для каждой сетки в соответствии с (6.20), использовался критерий остановки по точности с параметром $\varepsilon = 10^{-6}$.

В таблице приведены данные, характеризующие работу последовательного алгоритма: число итераций s , время работы t метода и погрешность полученного решения ε в зависимости от числа разбиений n .

Табл. 6.4. Время решения задачи Дирихле последовательным алгоритмом

n	t , сек	s	ε
250	0,36	597	0,00048
500	2,95	1201	0,00045
750	10,30	1812	0,00042
1000	27,18	2424	0,00041
1250	53,65	3037	0,00040
1500	103,21	3651	0,00039

Результаты параллельных вычислительных экспериментов приведены в таблице, указано время работы T (в секундах) и ускорение S .

Табл. 6.5. Экспериментальная оценка ускорения

n	1 поток	Параллельный алгоритм							
		2 потока		4 потока		6 потоков		8 потоков	
		T	S	T	S	T	S	T	S
250	0,36	0,39	0,92	0,55	0,66	0,78	0,46	0,89	0,40
500	2,95	2,18	1,35	2,17	1,36	3,53	0,84	3,67	0,80
750	10,30	6,54	1,58	6,57	1,57	8,28	1,24	8,77	1,17
1000	27,18	16,24	1,67	14,79	1,84	16,04	1,69	16,41	1,66
1250	53,65	31,67	1,69	26,33	2,04	26,72	2,01	26,44	2,03
1500	103,21	57,06	1,81	44,65	2,31	44,85	2,30	43,27	2,39

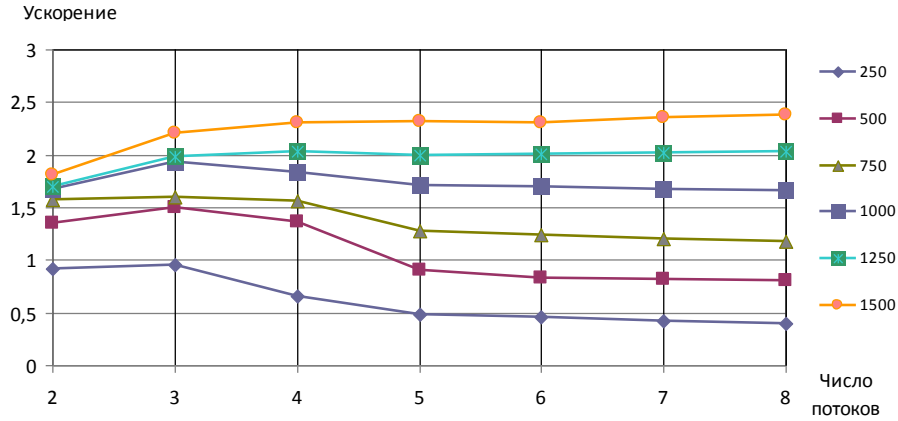


Рис. 6.12. Зависимость ускорения от числа потоков

Результаты проведенных экспериментов показывают замедление практически для всех сеток при любом числе потоков. Данный факт можно объяснить низкой трудоемкостью операций, выполняемых каждым потоком при волновой схеме вычислений. В этом случае накладные расходы (время δ , требуемое для создания и закрытия параллельной секции) превышают выигрыш от распараллеливания. Чтобы подтвердить наше предположение, проведем еще один эксперимент с большей вычислительной нагрузкой на поток.

С этой целью сформируем и решим вторую тестовую задачу

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = e^{(\sin(x) + \cos(x))} \ln(|\sin(x) + \cos(x)|), x \in [1, 2], y \in [2, 3];$$

$$u(1, y) = 1 + y^2, \quad u(2, y) = 4 + y^2;$$

$$u(x, 2) = x^2 + 4, \quad u(x, 3) = x^2 + 9.$$

В соответствии с описанным алгоритмом для численного решения задачи была построена разностная схема (6.16), число разбиений по x и по y выбиралось одинаковым, и варьировалось в диапазоне от 250 до 1500. Для решения разностной схемы использовался метод верхней релаксации с параметрами, аналогичными предыдущему эксперименту. Время работы метода T и ускорение S , полученные при решении второй тестовой задачи, приведены ниже, время работы указано в секундах.

Табл. 6.6. Ускорение с вычислительной нагрузкой

n	1 поток	Параллельный алгоритм							
		2 потока		4 потока		6 потоков		8 потоков	
		T	S	T	S	T	S	T	S
250	2,52	1,44	1,75	1,07	2,36	1,23	2,04	1,22	2,07
500	20,78	11,11	1,87	7,54	2,76	6,68	3,11	6,16	3,37
750	72,03	37,49	1,92	23,97	3,00	19,31	3,73	17,05	4,22
1000	176,98	91,84	1,93	53,61	3,30	42,09	4,20	35,83	4,94
1250	351,10	182,37	1,93	108,12	3,25	80,59	4,36	65,08	5,39
1500	629,50	324,86	1,94	184,53	3,41	137,81	4,57	115,64	5,44

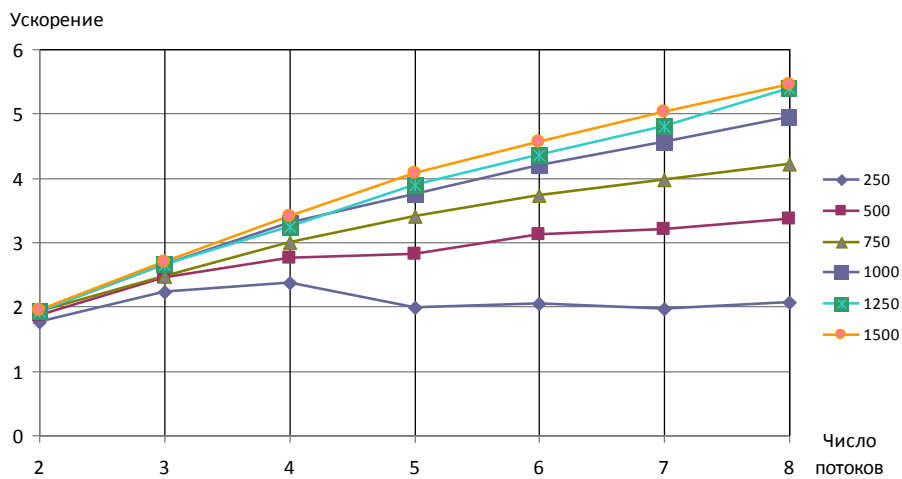


Рис. 6.13. Ускорение с вычислительной нагрузкой

Результаты проведенного эксперимента показывают, что ускорение будет практически линейным для больших сеток (при $n > 500$), при меньших размерах все еще будет сказываться малая вычислительная нагрузка на поток, что может привести или к слабому росту ускорения (как в случае $n=500$), или даже к замедлению процесса решения (при $n=250$). Следует отметить, что данный эффект может быть сглажен при применении блочной схемы в соответствии с (6.11).

Литература

Использованные источники информации

1. Вержбицкий В.М. Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения). – М.: Высшая школа, 2001.
2. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: Наука, 1987.
3. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1977.
4. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989.
5. Самарский А.А. Введение численные методы. – СПб.: Лань, 2005.
6. Калиткин Н.Н. Численные методы. – М.: Наука, 1978
7. Хамахер К., Вранешич З., Заки С. Организация ЭВМ. –СПб: Питер, 2003.
8. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. – М.: Мир, 1999.
9. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. – М.: Мир, 1984.
10. Писсанецки С. Технология разреженных матриц. — М.: Мир, 1988.
11. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука, 1973.
12. Соболев И.М. Точки, равномерно заполняющие многомерный куб. – М.: Знание, 1985.
13. Д. Кнут. Искусство программирования. Том 2: получисленные алгоритмы. – М.: «Вильямс», 2007.
14. Гергель В.П., Стронгин Р.Г. Основы параллельных вычислений для многопроцессорных вычислительных систем. – Н.Новгород, Изд-во ННГУ, 2003.
15. Гергель В.П. Теория и практика параллельных вычислений. – М.: БИНОМ, 2007.
16. Белов С.А., Золотых Н.Ю. Численные методы линейной алгебры. – Н.Новгород, Изд-во ННГУ, 2005.
17. J. Dongarra et al. Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods. SIAM, 1994.

18. G. Karniadakis, R. Kirby. *Parallel scientific computing in C++ and MPI*. Cambridge university press, 2003.
19. M. Quinn. *Parallel programming in C with MPI and OpenMP*. McGraw-Hill, 2004.

Дополнительная литература

20. Ширяев А. Н. *Вероятность*, – М.: Наука. 1989.
21. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method, *J. Amer. statistical assoc.*, 1949, 44, N247, 335-341.
22. O. Percus, M. Kalos. Random number generators for MIMD parallel processors// *Journal of parallel and distributed computing*, v.6, 1989. pp. 477–479.
23. M. Matsumoto, T. Nishimura (1998). «Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator». *ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations* v. 8(1).
24. M. Mascagni, A. Srinivasan. Algorithm 806: SPRNG: A scalable library for pseudorandom number generation. *ACM Transactions on Mathematical Software*, v. 26, № 3, 2000. pp. 436–461.
25. Niederreiter H. *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods*. – SIAM, 1992. – 247 p.

Информационные ресурсы сети Интернет

26. Intel Math Kernel Library Reference Manual.

[<http://software.intel.com/sites/products/documentation/hpc/mkl/mklman.pdf>].