

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное агентство по образованию  
Томский государственный университет

Утверждаю  
Декан Механико-математического  
факультета, профессор  
\_\_\_\_\_ Старченко А.В.  
“ \_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2014 г.

### Методические указания

Распараллеливание явных и неявных разностных схем, эффективность  
параллельных и последовательных программ

Томск 2014

РАССМОТРЕНЫ И УТВЕРЖДЕНЫ  
Методической комиссией механико-математического факультета

Протокол от \_\_\_\_\_  
Председатель комиссии \_\_О.П. Федорова

В методических указаниях рассматриваются методы численного решения уравнения теплопроводности на многопроцессорной ЭВМ. Подробно описывается распараллеливание явных и неявных разностных схем. Для случая неявной разностной схемы описывается распараллеливание и применение для решения систем линейных алгебраических уравнений двух методов: метода Зейделя и метода сопряженных градиентов. Так же обсуждаются другие возможности ускорения вычислений, учитывающие особенности языка программирования и используемой вычислительной техники.

Методические указания разработаны для студентов и аспирантов механико-математического факультета.

## Оглавление:

<b>Распараллеливание явных и неявных разностных схем.....</b>	<b>4</b>
Явная схема.....	7
Неявная схема.....	12
Метод Зейделя.....	14
Метод сопряженных градиентов.....	20
Выводы.....	30
2D декомпозиция.....	33
<b>Эффективность параллельных и последовательных программ.....</b>	<b>34</b>
<b>Литература.....</b>	<b>41</b>

## Распараллеливание явных и неявных разностных схем.

Задачи математического моделирования требуют большого количества компьютерного времени. Одним из способов преодоления этой трудности является использование многопроцессорных вычислительных систем. В данном методическом пособии будут рассматриваться многопроцессорные вычислительные системы с распределенной памятью, так как в настоящее время супер-ЭВМ, которыми мы располагаем, построены именно по такому принципу. Если говорить о списке самых мощных компьютеров Top-500, то 72% от общего числа суперкомпьютеров составляют именно кластерные системы. Это связано с сравнительно небольшой стоимостью высокопроизводительных систем, построенных по данному принципу.

Наиболее общим подходом распределения вычислительной загрузки между вычислительными узлами является распределение вычислительных областей на подобласти. Так называемый принцип геометрической декомпозиции. Причем самым простым способом решения этих разделенных на подобласти задач является применение явных разностных схем. Однако такие схемы отличаются медленной скоростью сходимости для стационарных краевых задач и малым шагом интегрирования – для нестационарных задач, ограничения на который накладывает условие устойчивости.

Неявные схемы относительно свободны от этого недостатка. Однако распараллеливание неявных схем с глобальной пространственной связанностью данных и требованием решения линейных систем большой размерности становится весьма нетривиальной задачей. Для решения системы линейных алгебраических уравнений необходимо выбрать алгоритм, который при распараллеливании сохранит свойства последовательного и покажет хорошие результаты (высокую эффективность). Конечно решение СЛАУ требует больших вычислительных затрат, однако выигрыш проявляется в свойствах неявных схем. Как правило, все неявные схемы абсолютно устойчивы и поэтому шаг по времени можно взять довольно большой. В то время как при использовании явных схем встречаются серьезные ограничения на шаг по времени.

Распараллеливание и само знакомство с явными и неявными схемами будет осуществляться на примере численного решения уравнения теплопроводности в единичном квадрате с граничными условиями первого рода и заданными начальными условиями. Задача состоит в следующем: определить распределение скалярной величины  $T(t, x, y)$  для случая установления процесса теплопередачи ( $t \rightarrow \infty$ ):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right); \quad (1)$$

$$\begin{aligned} T|_G &= T_b(x, y); T|_{t=0} = 0; \\ 0 &\leq x, y \leq 1; 0 \leq t \leq T; \end{aligned} \quad (2)$$

Численное решение данной задачи будем искать с использованием метода конечных разностей. Для области исследования построим равномерную сетку. Будут использоваться следующие обозначения  $T(t_n, x_i, y_j) = T_{i,j}^n$ . Верхний индекс определяет принадлежность временному слою, а нижние принадлежность к  $(i, j)$ -ому узлу сетки [5].

Приведем конечно-разностные формулы для аппроксимации дифференциальных операторов:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial T}{\partial t} \right)_{i,j}^n &\approx \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\tau}; \\ \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right)_{i,j}^n &\approx \lambda \left( \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2 \cdot T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{h_x^2} \right) + (1 - \lambda) \left( \frac{T_{i+1,j}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{h_x^2} \right); \\ \left( \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)_{i,j}^n &\approx \lambda \left( \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2 \cdot T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{h_y^2} \right) + (1 - \lambda) \left( \frac{T_{i,j+1}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{h_y^2} \right); \end{aligned}$$

Здесь  $\lambda$  - коэффициент определяющий вид схемы ( $0 \leq \lambda \leq 1$ ), если  $\lambda = 0$  схема явная, если  $\lambda = 1$  схема неявная. Это два крайних случая, при  $0 < \lambda < 1$  получаем смешанные схемы. Особого внимания заслуживает схема Кранка-Николсона, для которой  $\lambda = 0.5$  [6].

Далее применив, эти конечно разностные формулы к дифференциальному уравнению получим конечно-разностный аналог дифференциального уравнения – систему линейных алгебраических уравнений. Начальные и граничные условия на используемой равномерной сетке аппроксимируются точно.

$$\left\{ \begin{array}{l}
\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\tau} = \alpha \left( \begin{array}{l}
\lambda \left( \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2 \cdot T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{h_x^2} \right) + \\
(1-\lambda) \left( \frac{T_{i+1,j}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{h_x^2} \right) + \\
\lambda \left( \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2 \cdot T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{h_y^2} \right) + \\
(1-\lambda) \left( \frac{T_{i,j+1}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{h_y^2} \right)
\end{array} \right) \\
i = 1, Nx - 1; \quad j = 1, Ny - 1 \\
T_{0,j}^n = T_b(x_0, y_j); \quad T_{Nx,j}^n = T_b(x_{Nx}, y_j); \quad j = 0, Ny; \\
T_{i,0}^n = T_b(x_i, y_0); \quad T_{i,Ny}^n = T_b(x_i, y_{Ny}); \quad i = 0, Nx; \\
T_{i,j}^0 = 0; \quad i = 0, Nx; \quad j = 0, Ny;
\end{array} \right. \quad (3)$$

Далее необходимо определиться, какую схему применять для решения задачи. Если используется грубая сетка с большим шагом по координатам и ограничение на шаг по времени накладываемое условием устойчивости позволяет делать достаточно крупные шаги по времени, то выгодно применять явную разностную схему, которая очень проста в своей реализации. Если же сетка мелкая и из условной устойчивости требуется небольшой шаг по времени, то выгодно применять неявные схемы [6].

Какую разностную схему получим после аппроксимации, явную неявную или смешанную, зависит от того, чему равен коэффициент  $\lambda$  при аппроксимации производных по пространству [6].

Далее будет рассмотрена параллельная реализация явной разностной схемы для решения задачи теплопроводности.

### Явная схема.

Пусть  $\lambda = 0$ . То есть для аппроксимации производных по пространству используются значения переменной  $T_{i,j}$  с  $n$ -го временного слоя. Тогда из (3):

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n + \alpha \left( \frac{T_{i+1,j}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{h_x^2} \right) + \left( \frac{T_{i,j+1}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{h_y^2} \right) \\ T_{0,j}^n = T_b(x_0, y_j); \quad T_{Nx,j}^n = T_b(x_{Nx}, y_j); \quad j = 0, Ny; \\ T_{i,0}^n = T_b(x_i, y_0); \quad T_{i,Ny}^n = T_b(x_i, y_{Ny}); \quad i = 0, Nx; \\ T_{i,j}^0 = 0; \quad i = 0, Nx; \quad j = 0, Ny; \end{array} \right. \quad (4)$$

Таким образом, получена явная формула для вычислений значений неизвестной функции на новом временном слое. Для дальнейшего понимания перепишем полученную формулу в следующем виде:

$$T_{i,j}^{n+1} = (1 + ap)T_{i,j}^n + ae \cdot T_{i+1,j}^n + aw \cdot T_{i-1,j}^n + an \cdot T_{i,j+1}^n + as \cdot T_{i,j-1}^n; \quad (5)$$

Коэффициенты  $ap$ ,  $ae$ ,  $aw$ ,  $an$ ,  $as$  легко определяются из формулы (4).

$$ae = \frac{\lambda \cdot \tau}{h_x^2}; \quad aw = \frac{\lambda \cdot \tau}{h_x^2}; \quad an = \frac{\lambda \cdot \tau}{h_y^2}; \quad as = \frac{\lambda \cdot \tau}{h_y^2};$$

$$ap = -(ae + aw + an + as); \quad i = 1, Nx - 1; \quad j = 1, Ny - 1;$$

Эта формула легко программируется и очень проста для применения:

```

Do i=1,Nx-1
  Do j=1,Ny-1
    Tnew(i,j)=(1+ap)*T(i,j)+ae*T(i+1,j)+aw*T(i-1,j)+an*T(i,j+1)+as*T(i,j-1)
  End do
End do

```

Далее обсудим возможности распараллеливания решения поставленной задачи. В рассматриваемом примере возможны два различных способа разделения данных – *одномерная* или *ленточная* схема

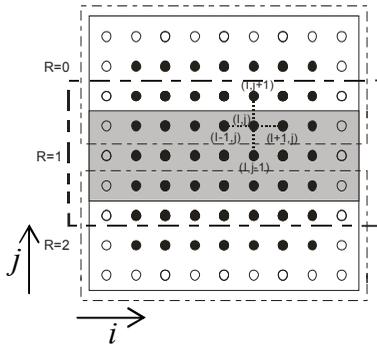


Рис. 1. Одномерная декомпозиция расчетной области (кружки представляют граничные узлы сетки).

направления. Для определенности декомпозицию расчетной области проведем по индексу  $j$  (рис. 1), хотя на практике выбор координаты для разбиения определяется особенностями языка программирования или способом хранения данных в оперативной памяти. Совокупность узлов

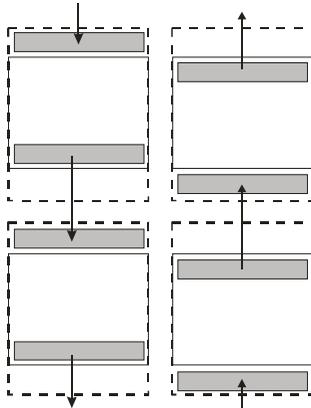


Рис. 2. Схема обменов между вычислительными узлами.

на соседних вычислительных

или *двухмерное* или *блочное* разбиение вычислительной сетки. Из практики параллельных вычислений хорошо известно, что, в целом, более эффективная двумерная декомпозиция расчетной области теряет свои преимущества перед одномерной в том случае, если число процессоров параллельного компьютера не велико. А так как рассматривается случай кластерной системы с малым числом процессоров, то внимание уделим одномерной декомпозиции по одному из координатных направлений. Для определенности декомпозицию расчетной области проведем по индексу  $j$  (рис. 1), хотя на практике выбор координаты для разбиения определяется особенностями языка программирования или способом хранения данных в оперативной памяти. Совокупность узлов расчетной сетки, попавших на один процессорный элемент, будем называть полосой.

Данные распределены, следующий этап построения параллельной программы – проектирование коммуникаций. При аппроксимации дифференциальной задачи использовался шаблон крест (рис. 1), поэтому для организации вычислений в приграничных узлах каждого процессорного элемента требуется продублировать граничные строки предшествующей и следующей полосы вычислительной сетки, которые по определению полосы располагаются на соседних вычислительных узлах. Продублированные граничные строки полос используются только при проведении расчетов, пересчет же

этих строк происходит в полосах своего исходного месторасположения. Тем самым дублирование граничных строк должно осуществляться перед началом выполнения каждой очередной итерации метода. [1]

Процедура обмена сеточных значений граничных строк между соседними процессорами может быть разделена на две последовательные операции, во время первой из которых каждый процессор передает свою нижнюю граничную строку следующему процессору и принимает такую же строку от предыдущего процессора (рис. 2). Вторая часть передачи строк выполняется в обратном направлении: процессоры передают свои верхние граничные строки своим предыдущим соседям и принимают переданные строки от следующих процессоров [1].

```
PROGRAM Example1
с Решение двумерного уравнения теплопроводности в единичном
с квадрате с использованием явной разностной схемы.
  Implicit none
  Include 'mpif.h'
с Параметры:
с Nx,Ny - количество точек области в каждом направлении,
с m - количество точек на процессор.
с T,Tnew - численное решение задачи.
  Integer i,j,Ny,Nx,m
  Integer comm,ierr,size,rank,left,right>tag,status(100)
  Parameter (Nx=720,Ny=Nx)
  Double precision ap,ae,aw,an,as,hx,hy,Lx,Ly,
  1 T(0:Nx,0:Ny),Tnew(0:Nx,0:Ny),alfa,
  2 tau,time,timefin,timeStart,timeStop
  3 timeStart1,timeStop1
  Parameter (timefin=1.0d3,Lx=1.0d0,Ly=1.0d0,
  1 hx=Lx/Nx,hy=Ly/Ny,alfa=1.0d-5)
с Инициализация, определение числа выделенных процессоров (size)
с и номера текущего процесса (rank)
  Call MPI_INIT(ierr)
  Call MPI_comm_size(mpi_comm_world,size,ierr)
  Call MPI_comm_rank(mpi_comm_world,rank,ierr)
  comm = mpi_comm_world
с Определение номеров процессоров (соседей) сверху и снизу.
с Если таковые отсутствуют то им присваивается значение
с MPI_PROC_NULL (для них коммуникационные операции игнорируются)
  If (rank.eq.0) then
    left=MPI_PROC_NULL
  Else
    left=rank-1
  End if
  If (rank.eq.size-1) then
    right=MPI_PROC_NULL
  Else
    right=rank+1
```

```

End if
c Определение числа элементов обрабатываемых одним процессором.
m=Ny/size
If (rank.lt.(Nx-size*m)) then
  m=m+1
End if
c Задание начальных значений.
Do i=0,Nx
  Do j=0,m
    T(i,j)=100.0d0
    Tnew(i,j)=100.0d0
  End do
End do
c Задание граничных условий.
If (rank.eq.0) then
  Do i=0,Nx
    T(i,0)=10.0d0
  End do
End if
If (rank.eq.size-1) then
  Do i=0,Nx
    T(i,m)=10.0d0
  End do
End if
Do j=0,m
  T(0,j)=1.0d0
  T(Nx,j)=10.0d0
End do
c Подготовка к расчетам.
tau = 0.2*(2*alfa*(1/hx**2+1/hy**2))
ae=alfa*tau/(hx*hx)
aw=alfa*tau/(hx*hx)
an=alfa*tau/(hy*hy)
as=alfa*tau/(hy*hy)
ap=- (ae+aw+an+as)
time = 0
If (rank.eq.0) then
  open (2,file='rezult1.dat')
  timeStart = MPI_wtime()
  timeStop1=0.0
End if
c Движение по временной оси.
Do while (time.lt.timefin)
c Расчет значений с нового временного слоя.
  Do i=1,Nx-1
    Do j=1,m-1
      Tnew(i,j) = T(i,j)*(1+ap) + T(i+1,j)*ae + T(i-1,j)*aw
1      + T(i,j+1)*an + T(i,j-1)*as
    End do
  End do
  time =time + tau
c Переприсваивание внутренних узлов области.
  Do i=1,Nx-1

```

```

        Do j=1,m-1
            T(i,j)=Tnew(i,j)
        End do
    End do
c Пересылка граничных значений на соседние процессоры.
    tag =100
    If (rank.eq.0) timeStart1 = MPI_Wtime()
    Call MPI_SENDRECV(T(0,1),Nx+1,MPI_double_precision,
1                left,tag,
2                T(0,0),Nx+1,MPI_double_precision,
3                left,tag,comm,status,ierr)
    Call MPI_SENDRECV (T(0,m-1),Nx+1,MPI_double_precision,
1                right,tag,
2                T(0,m),Nx+1,MPI_double_precision,
3                right, tag,comm,status,ierr)
    If (rank.eq.0) timeStop1= timeStop1+MPI_Wtime()-timeStart1
    End do
c Фиксация времени окончания расчетов.
    If (rank.eq.0) timeStop=MPI_Wtime()-timeStart
c Сбор результатов на нулевом процессоре.
    Call MPI_GATHER( T(0,1), (m)*(Nx+1),MPI_DOUBLE_PRECISION,
1                T(0,1), (m)*(Nx+1),MPI_DOUBLE_PRECISION,
2                0,comm,ierr)
    If (rank.eq.0) then
        Do i=0,Nx
            write (2,'(560f15.4)') (T(i,j),j=0,Ny)
        End do
        Write (2,'(a,i15,a,f15.9)') 'Size=',size,' Tame=',TimeStop
        Write (2,'(a,f15.9,a,f15.9)') ' FTame=',time, ' tau=',tau
        Write (2,'(a,f15.9,a,f15.9)') ' Tsch=',TimeStop-TimeStop1,
1                ' Tobm=',TimeStop1
    End if
    Call MPI_FINALIZE(ierr)
    End

```

В таблице приведено время работы программы, для разного числа процессоров при значении коэффициента теплопроводности  $\alpha = 10^{-5}$ . Расчеты проводились на равномерной сетке 720 на 720 (время приведено в секундах).

Число проц-в Кэф-т тепл-ти	1	2	3	4	5	6	8
$\alpha = 10^{-5}, \tau = 0.039$	7136	3644	2434	1943	1591	1249	981
Время счета	7135	3541	2365	1881	1504	1129	834
Время пересылок	0,66	102	67	61	86	119	146

Тестовые расчеты, проведенные для различных значений коэффициента теплопроводности, показали значительное увеличение времени счета при увеличении  $\alpha$ . Увеличение коэффициента теплопроводности на порядок влечет за собой десятикратное увеличение времени счета. Это объясняется уменьшением шага по времени, который

вычисляется по формуле  $\tau = \frac{0.2}{2 \cdot \alpha \left( \frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} \right)}$ , которая выбрана так, что

бы всегда выполнялось условие устойчивости.

Далее приводится график ускорения для значения коэффициента теплопроводности  $\alpha = 10^{-5}$ .



Видно, что ускорение меняется по линейному закону, что присуще всем явным разностным схемам.

### Неявная схема.

Пусть  $\lambda = 1$ . То есть для аппроксимации производных по пространству используются значения переменной  $T_{i,j}$  с  $n+1$ -го временного слоя. Тогда получаем:

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n + \frac{\alpha}{\tau} \left( \frac{(T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1})}{hx^2} + \frac{(T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1})}{hy^2} \right); \\ T_{0,j}^n = T_b(x_0, y_j); \quad T_{Nx,j}^n = T_b(x_{Nx}, y_j); \quad j = 0, Ny; \\ T_{i,0}^n = T_b(x_i, y_0); \quad T_{i,Ny}^n = T_b(x_i, y_{Ny}); \quad i = 0, Nx; \\ T_{i,j}^0 = 0; \quad i = 0, Nx; \quad j = 0, Ny; \end{array} \right. \quad (6)$$

Для большей наглядности перепишем полученные формулы в следующем виде

$$(1 - ap)T_{i,j}^{n+1} = ae \cdot T_{i+1,j}^{n+1} + aw \cdot T_{i-1,j}^{n+1} + an \cdot T_{i,j+1}^{n+1} + as \cdot T_{i,j-1}^{n+1} + b_{i,j}; \quad (7)$$

Коэффициенты  $ap, ae, aw, an, as, b_{i,j}$  легко определяются из формулы (6).

$$\begin{aligned} ae &= \frac{\lambda \cdot \tau}{h_x^2}; \quad aw = \frac{\lambda \cdot \tau}{h_x^2}; \quad an = \frac{\lambda \cdot \tau}{h_y^2}; \quad as = \frac{\lambda \cdot \tau}{h_y^2}; \quad b_{i,j} = T_{i,j}^n \\ ap &= -(ae + aw + an + as); \quad i = 1, Nx - 1; \quad j = 1, Ny - 1; \\ i = 0; \quad ap &= 1; \quad b_{i,j} = T_b(x_0, y_j); \quad ae = aw = as = an = 0; \\ i = Nx; \quad ap &= 1; \quad b_{i,j} = T_b(x_{Nx}, y_j); \quad ae = aw = as = an = 0; \\ j = 0; \quad ap &= 1; \quad b_{i,j} = T_b(x_i, y_0); \quad ae = aw = as = an = 0; \\ j = Ny; \quad ap &= 1; \quad b_{i,j} = T_b(x_i, y_{Ny}); \quad ae = aw = as = an = 0; \end{aligned}$$

В случае неявной разностной схемы вместо организации вычислений по готовой формуле необходимо решение системы линейных

алгебраических уравнений большой размерности с разреженной матрицей. Преимущества этого подхода были описаны выше, теперь непосредственно перейдем к выбору метода решения системы линейных алгебраических уравнений.

Прямые методы, как правило, не используются для решения систем линейных алгебраических уравнений, полученных после аппроксимации дифференциальной задачи, так как они имеют ряд существенных недостатков: вынуждают целиком хранить матрицу в оперативной памяти, что делает ее использование нерациональным, не уменьшают влияние погрешности округления, что становится неприемлемым при решении плохообусловленных задач большой размерности. Поэтому, будем рассматривать итерационные методы решения СЛАУ. А именно, будет рассмотрено два метода, относящихся к различным классам, метод Зейделя и метод сопряженных градиентов [3,5].

### Метод Зейделя.

Для рассматриваемой задачи формулы метода Зейделя примут следующий вид

$$\left( T_{i,j}^{n+1} \right)^{k+1} = \frac{1}{ap} \begin{pmatrix} b_{i,j} - ae \cdot \left( T_{i+1,j}^{n+1} \right)^{k+1} - aw \cdot \left( T_{i-1,j}^{n+1} \right)^k \\ - an \cdot \left( T_{i,j-1}^{n+1} \right)^k - as \cdot \left( T_{i,j+1}^{n+1} \right)^{k+1} \end{pmatrix};$$

$$i = 0, \dots, Nx; \quad j = 0, \dots, Ny; \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Где  $n$  - номер временного слоя, а  $k$  - номер итерации метода на  $n$ -ом временном слое.

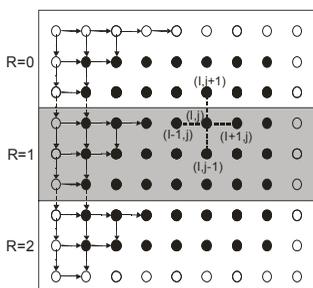


Рис. 3. Связи между узлами сетки в методе Гаусса-Зейделя.

Этот метод относится к классу треугольных методов. В [5] показано, что метод Зейделя всегда сходится, если  $A$  - симметричная, положительно определенная матрица. Причем можно утверждать, что метод Зейделя сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем  $q < 1$ , если выполняется условие диагонального преобладания, т.е.

$$|ae| + |aw| + |an| + |as| \leq q|ap|, \quad q < 1;$$

Использование последних рассчитанных значений в методе Гаусса-

Зейделя увеличивает скорость сходимости, но ограничивает параллелизм алгоритма и требует синхронизации параллельных вычислений. На рис. 3 показаны связи, наложенные на узлы сетки в методе Гаусса-Зейделя. Получается, что второй процессор ( $R=1$ ) будет простаивать, пока не получит необходимые ему значения от первого, а последний процессор будет дожидаться пока все предыдущие не вычислят значения неизвестных из первого столбца (рис. 3). Та же неравномерность загрузки проявится и в конце итерации, когда первый процессор раньше остальных закончит вычислительную работу. Описанный процесс носит название волновой обработки данных [1].

Альтернативным подходом при расчете следующей итерации является ситуация, когда каждый процесс использует последующие

значения  $(T_{i,j}^{n+1})^{k+1}$ , которыми он сам располагает, и не дожидается когда ему будут присланы последние рассчитанные значения. Такой подход называют асинхронным. Он часто бывает эффективен, но при его использовании не представляется возможным проведение анализа сходимости численного метода. Если отвлечься от упорядоченного обхода узлов и выбрать какой-либо другой способ обхода, то также будет реализовываться метод Зейделя. Перспективным стал способ обхода узлов, который носит название красно-черное упорядочивание [1]. Он предполагает

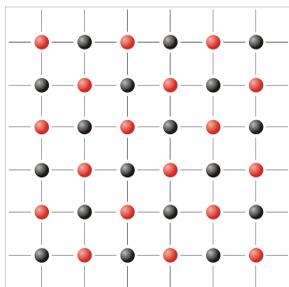


Рис. 4. Красно-черное упорядочивание.

разделение всех узлов на 2 вида – красные и черные в шахматном порядке. Выбор такого способа разделения обусловлен выбором используемого шаблона, в соответствии с которым для расчета в красных узлах нужны значения в черных узлах и наоборот. И второе, этот вид упорядочивания дает наиболее сильные результаты сходимости [2]. На идейном уровне красно-черное упорядочивание обеспечивает перевод рекуррентных формул метода Зейделя в двухшаговое использование формул Якоби.

```
PROGRAM Example2
с Решение двумерного уравнения теплопроводности в единичном
с квадрате по методу Зейделя с красно-черным упорядочиванием.
  Implicit none
  Include 'mpif.h'
```

```

c  Параметры:
c  Nx,Ny - количество точек области в каждом направлении,
c  m - количество точек на процессор.
c  T,Tnew - численное решение задачи.
      Integer i,j,k,Ny,Nx,m
      Integer comm,ierr,size,rank,left,right,tag,status(100)
      Parameter (Nx=720,Ny=Nx)
      Double precision ap,ae,aw,an,as,b(0:Nx,0:Ny),err,gerr,re
      2      T(0:Nx,0:Ny),Tnew(0:Nx,0:Ny),alfa,hx,hy,Lx,Ly,
      3      tau,time,timefin,timeStart,timeStop,rez,grez,
      4      timeStart1,timeStop1
      Parameter (timefin=1.0d3,Lx=1.0d0,Ly=1.0d0,
      1      hx=Lx/Nx,hy=Ly/Ny,alfa=1.0d-5)
c  Инициализация, определение числа выделенных процессоров (size)
c  и номера текущего процесса (rank).
      Call MPI_INIT(ierr)
      Call MPI_comm_size(mpi_comm_world,size,ierr)
      Call MPI_comm_rank(mpi_comm_world,rank,ierr)
      comm = mpi_comm_world
c  Определение номеров процессоров (соседей) сверху и снизу.
c  Если таковые отсутствуют то им присваивается значение
c  MPI_PROC_NULL (для них коммуникационные операции игнорируются)
      If (rank.eq.0) then
        left=MPI_PROC_NULL
      Else
        left=rank-1
      End if
      If (rank.eq.size-1) then
        right=MPI_PROC_NULL
      Else
        right=rank+1
      End if
c  Определение числа элементов обрабатываемых одним процессором.
      m=Ny/size
      If (rank.lt.(Nx-size*m)) then
        m=m+1
      End if
c  Задание начальных значений.
      Do i=0,Nx
        Do j=0,m
          T(i,j)=100.0d0
          Tnew(i,j)=100.0d0
          b(i,j)=0.0d0
        End do
      End do
c  Задание граничных условий.
      If (rank.eq.0) then
        Do i=0,Nx
          T(i,0)=10.0d0
        End do
      End if
      If (rank.eq.size-1) then
        Do i=0,Nx

```

```

        T(i,m)=10.0d0
    End do
End if
Do j=0,m
    T(0,j)=1.0d0
    T(Nx,j)=10.0d0
End do
c Подготовка к расчетам.
tau=2.0d0
Do i=1,Nx-1
    Do j=1,m-1
        b(i,j)=T(i,j)
    End do
End do
ae=alfa*tau/(hx*hx)
aw=alfa*tau/(hx*hx)
an=alfa*tau/(hy*hy)
as=alfa*tau/(hy*hy)
ap=ae+aw+an+as

If (rank.eq.0) then
    open (2,file='rezult1.dat')
    timeStart = MPI_Wtime()
    timeStop1 = 0.0
End if
c Движение по временной оси.
Do while (time.lt.timefin)
    If (rank.eq.0) timeStart1 = MPI_Wtime()
    time =time + tau
    k=0
    gerr=10
    grez=10
c Расчет значений с нового временного слоя.
c На каждом временном шаге для уменьшения погрешности численного
c метода реализуется несколько итераций.
    Do While ((gerr.gt.1.0d-5).or.( grez.gt.1.0d-5))
        k=k+1
        gerr=0.0d0
        err=0.0d0
        gerr=0.0d0
        err=0.0d0
c Вычисление новых значений функции в "красных" узлах
c по пятиточечной схеме.
        Do i=1,Nx-1
            Do j=1,m-1
                If (mod(i+j,2).eq.0) then
                    Tnew(i,j) = (b(i,j)+ae*T(i+1,j)+aw*T(i-1,j)
1
                    +an*T(i,j+1)+as*T(i,j-1))/(1.0+ap)
                End if
            End do
        End do
c Переприсваивание для внутренних "красных" узлов области.
        Do i=1,Nx-1

```

```

        Do j=1,m-1
            If (mod(i+j,2).eq.0) then
                err=err+abs(T(i,j)-Tnew(i,j))
                re=((1.0+ap)*Tnew(i,j)-ae*Tnew(i+1,j)-aw*Tnew(i-1,j)
1                 -b(i,j) -an*Tnew(i,j+1)-as*Tnew(i,j-1))
                T(i,j)=Tnew(i,j)
                rez=re*re
            End if
        End do
    End do
c Пересылка граничных значений на соседние процессоры.
    If (rank.eq.0) timeStart1 = MPI_Wtime()
    tag=10
    Call MPI_SENDRECV ( T(0,1),Nx+1,MPI_double_precision,
1                     left,tag,
2                     T(0,0),Nx+1,MPI_double_precision,
3                     left,tag,comm,status,ierr)

    Call MPI_SENDRECV ( T(0,m-1),Nx+1,MPI_double_precision,
1                     right,tag,
2                     T(0,m),Nx+1,MPI_double_precision,
3                     right,tag,comm,status,ierr)
    If (rank.eq.0) timeStop1=timeStop1+MPI_Wtime()-timeStart1
c Вычисление новых значений функции в "черных" узлах
c по пятиточечной схеме.
    Do i=1,Nx-1
        Do j=1,m-1
            If (mod(i+j,2).ne.0) then
                Tnew(i,j) = (b(i,j)+ae*T(i+1,j)+aw*T(i-1,j)
1                 +an*T(i,j+1)+as*T(i,j-1))/(1.0+ap)
            End if
        End do
    End do
c Переприсваивание для внутренних "красных" узлов области.
    Do i=1,Nx-1
        Do j=1,m-1
            If (mod(i+j,2).ne.0) then
                err=err+abs(T(i,j)-Tnew(i,j))
                re=((1.0+ap)*Tnew(i,j)-ae*Tnew(i+1,j)-aw*Tnew(i-1,j)
1                 -b(i,j) -an*Tnew(i,j+1)-as*Tnew(i,j-1))
                T(i,j)=Tnew(i,j)
                rez=re*re
            End if
        End do
    End do
    If (rank.eq.0) timeStart1 = MPI_Wtime()
    Call MPI_ALLREDUCE( err,gerr,1,MPI_DOUBLE_PRECISION,
1                     MPI_SUM,comm,ierr )
    Call MPI_ALLREDUCE( rez,grez,1,MPI_DOUBLE_PRECISION,
1                     MPI_SUM,comm,ierr )
c Пересылка граничных значений на соседние процессоры.
    Call MPI_SENDRECV ( T(0,1),Nx+1,MPI_double_precision,
1                     left,tag,

```

```

2          T(0,0),Nx+1,MPI_double_precision,
3          left,tag,comm,status,ierr)

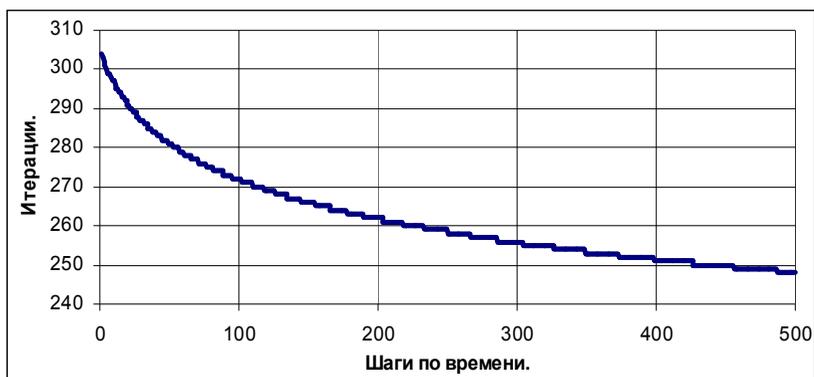
      Call MPI_SENDRECV (T(0,m-1),Nx+1,MPI_double_precision,
1          right,tag,
2          T(0,m),Nx+1,MPI_double_precision,
3          right,tag,comm,status,ierr)
      If (rank.eq.0) timeStop1=timeStop1+MPI_Wtime()-timeStart1
      End do
c   Пересчет правой части.
      Do i=1,Nx-1
        Do j=1,m-1
          b(i,j)=T(i,j)
        End do
      End do
c   Фиксация времени окончания расчетов.
      If (rank.eq.0) timeStop=MPI_Wtime()-timeStart
c   Сбор результатов на нулевом процессоре.
      Call MPI_GATHER( T(0,1), (m) * (Nx+1),MPI_DOUBLE_PRECISION,
1          T(0,1), (m) * (Nx+1),MPI_DOUBLE_PRECISION,
2          0,comm,ierr)
      If (rank.eq.0) then
        Do i=0,Nx
          write (2,'(560f15.4)') (T(i,j),j=0,Ny)
        End do
        Write(2,'(a,i15,a,f15.9)') 'Size=',size,'Tame=',timeStop
        Write(2,'(a,f15.9,a,f15.9)') ' FTame=', time, 'tau=',tau
        Write (2,'(a,f15.9,a,f15.9)') ' Tsch=',timeStop-TimeStop1,
1          ' Tobm=',TimeStop1
      End if
      Call MPI_FINALIZE(ierr)
End

```

В таблице приведено время работы программы, для разного числа процессоров и коэффициента теплопроводности  $\alpha = 10^{-5}$ . Расчеты проводились на равномерной сетке 720 на 720 (время приведено в секундах).

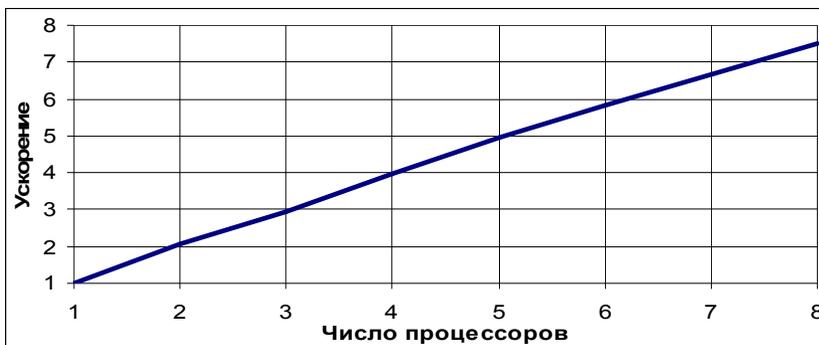
Число проц-в Кэф-т тепл-ти	1	2	3	4	5	6	8
$\alpha = 10^{-5}, \tau = 2.0$	24890	13153	8732	6612	5376	4555	3550
Время счета	24884	12927	8497	6316	5056	4195	3155
Время пересылок	6	208	235	296	320	360	395

Тестовые расчеты, проведенные для различных значений коэффициента теплопроводности, показали значительное увеличение времени счета при увеличении  $\alpha$ . Это объясняется увеличением числа итераций, требуемых для сходимости итерационного метода на каждом временном шаге, при уменьшении коэффициента теплопроводности  $\alpha = 10^{-5}$ ,  $\alpha = 10^{-4}$ ,  $\alpha = 10^{-3}$ . Следующий график показывает, сколько итераций метода необходимо для сходимости на каждом временном шаге, для  $\alpha = 10^{-5}$



Метод Зейделя распараллеленный по методу красно-черного упорядочивания превращается в два шага метода Якоби, а этот метод эквивалентен вычислению с использованием явной схемы.

Далее приводится график ускорения для  $\alpha = 10^{-5}$ .



Ускорение, как и в случае с явной схемой, близко к линейному.

## Метод сопряженных градиентов.

Альтернативными к треугольным методам [7] решения систем  $Ax = b$  являются алгоритмы ускорения итерационных процессов на основе выбора итерационных параметров из условия минимизации функционалов, определяющих точность текущих последовательных приближений.

В дальнейшем будут использованы следующие обозначения:  $r^k = b - Ax^k$  - невязка,  $\omega^k = B^{-1}r^k$  - поправка и  $z^k = x^k - x$  - погрешность (ошибка). Здесь  $x$  точное решение системы  $Ax = b$ ,  $x^k$  -  $k$ -ое приближение к точному решению.  $B$  в терминологии [3] предобуславливающая матрица.

К открытию нового метода независимо пришли М. Хестенес и Э. Штифель [3]. Алгоритм называется методом сопряженных градиентов (CG). Он является наиболее предпочтительным для симметричных положительно определенных систем. Формулы классического метода сопряженных градиентов имеют следующий вид:

$$p = x;$$

$$v = Ap;$$

$$p = b - v;$$

$$r = p;$$

$$\alpha = (\|r\|_2)^2;$$

for (  $i < i_{\max}$  ) and (  $\alpha > \varepsilon$  )

$$v = Ap;$$

$$\lambda = \frac{\alpha}{(v, p)_2};$$

$$x = x + \lambda p;$$

$$r = r - \lambda v;$$

$$\alpha_{\text{new}} = (\|r\|_2)^2;$$

$$p = r + \left( \frac{\alpha_{\text{new}}}{\alpha} \right) p;$$

$$\alpha = \alpha_{\text{new}};$$

end do.

Достаточным условием сходимости метода сопряженных градиентов является симметричность и положительная определенность матрицы  $A$ , при этом на спектр матрицы накладывается условие  $0 < m \leq \gamma(A) \leq M$ . При этом скорость сходимости можно определить по формуле

$$\phi(x^n) \leq \left( \frac{2 \cdot \gamma^n}{1 + \gamma^{2n}} \right) \phi(x^0);$$

$$\gamma = \frac{1 - \sqrt{m/M}}{1 + \sqrt{m/M}};$$

Скорость сходимости метода сопряженных градиентов выше, чем скорость сходимости метода Зейделя [5].

Мы видим, что CG имеет то особенно привлекательное свойство, что в его реализации предусмотрено одновременное хранение в памяти лишь четырех векторов. Кроме того, в его внутреннем цикле, помимо матрично-векторного произведения, вычисляются только два скалярных

произведения, три операции типа «сахру» (сложение вектора, умноженного на число, с другим вектором) и небольшое количество скалярных операций. Таким образом, и необходимая память, и вычислительная работа в методе не очень велики. В алгоритме  $x^{k+1}$  вычисляется используя рекуррентные соотношения для трех групп векторов. Одновременно в памяти требуется хранить лишь самые последние векторы их каждой группы, записываемые на места своих предшественников [1]. Первая группа векторов – это приближенные решения  $x^k$ . Вторая группа – это невязки  $r^k = b - Ax^k$ . Третья группа – это сопряженные градиенты  $p^k$ . Эти вектора называют градиентами по следующей причине: шаг метода CG можно рассматривать как выбор числа  $a_{new}/a$  из условия, чтобы новое приближенное решение  $x^{k+1} = x^k + a_{new}/a \cdot p^k$  минимизировало норму невязки  $\|r_k\|_{A^{-1}} = (r_k^T A^{-1} r_k)^{1/2}$ . Иными словами,  $p^k$  используется как направление градиентного поиска. Они называются сопряженными, или, точнее, A-сопряженными, потому что  $p_k^T A p_j = 0$  при  $j \neq k$ .

Параллельную реализацию рассмотрим на примере неявного метода решения уравнения теплопроводности. Чтобы яснее представить себе процесс распараллеливания и связанные с ним изменения в алгоритме, разберем отдельно каждую алгебраическую операцию, которая имеет место быть в изложенном методе.

Первая операция это матрично-векторное произведение  $y = Ax$ .

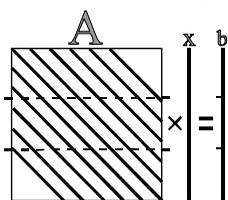


Рис. 5. Строчное распределение.

Известно, что в общем случае при умножение матрицы на вектор возможны два способа распределения данных. В первом случае каждому процессору назначается определенное количество строк матрицы  $A$  и целиком вектор  $x$  (рис. 5), каждый процессор реализует умножение распределенных ему строк матрицы  $A$  на вектор  $x$  (число вычислительных узлов меньше или равно числу строк). Получаем абсолютно не связанные подзадачи, однако

предложенный алгоритм не лишен и недостатков. Дело в том, что компоненты результирующего вектора  $y$  оказывается разбросанными по всем процессорам и для старта следующей итерации необходимо собрать вектор  $y$  на каждом процессорном элементе.

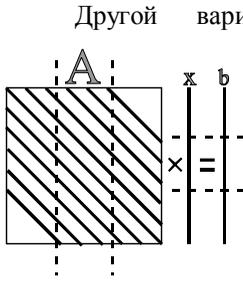


Рис. 6. Столбцовое распределение.

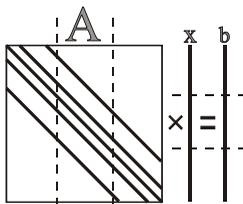


Рис. 7. Случай разреженной матрицы.

Следующие две операции — это вычисление скалярного произведения и векторная операция saxru. При сложении векторов, каждый процессор выполняет действия над распределенными ему компонентами векторов, эта операция

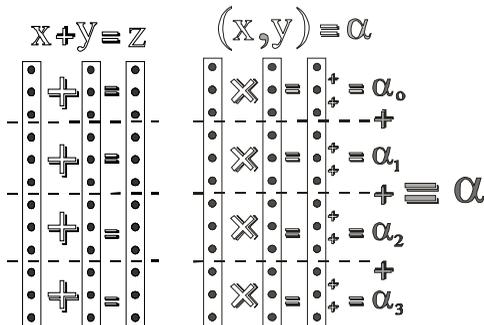


Рис. 8. Схема операций saxru и скалярного произведения.

произведения первый этап – покомпонентное умножение векторов, в результате которого получается вектор – происходит независимо на каждом процессоре подобно сложению векторов. Затем необходимо просуммировать все компоненты полученного вектора. Сначала на каждом процессорном элементе выполняется суммирование принадлежащих ему компонент полученного вектора, затем результаты суммирования на каждом процессоре собираются и суммируются на одном из процессоров, полученный результат рассылается остальным вычислительным узлам.

Таким образом рассмотрена параллельная реализация каждой процедуры метода сопряженных градиентов, далее приводиться параллельная программа реализующая этот метод.

```

PROGRAM Example3
c Решение двумерного уравнения Пуассона в единичном квадрате
c по методу сопряженных градиентов.
  Implicit none
  Include 'mpif.h'
c   Параметры:
c   Nx,Ny - количество точек области в каждом направлении,
c   m - количество точек на процессор.
c   T,Tnew - численное решение задачи.
  Integer i,j,k,Nx,Ny,m
  Integer comm,ierr,size,rank,left,right,tag,status(100)
  Parameter (Nx=720,Ny=Nx)
  Double precision ap,ae,aw,an,as,b(0:Nx,0:Ny),err,gerr,
1      T(0:Nx,0:Ny),Tnew(0:Nx,0:Ny),alfa,hx,hy,Lx,Ly,
2      tau,time,timefin,timeStart,timeStop,rez,grez
3      timeStart1,timeStop1
  Parameter (timefin=1.0d3,Lx=1.0d0,Ly=1.0d0,
1      hx=Lx/Nx,hy=Ly/Ny,alfa=1.0d-5)
c   Параметры для метода сопряженных градиентов
  Double precision r(0:Nx,0:Ny),p(0:Nx,0:Ny),al,be,lay,alNew,
1      v(0:Nx,0:Ny),scalmult
  Common /setka / m,comm,rank,size,left,right
  Common /tim / timeStart1,timeStop1
c   Инициализация, определение числа выделенных процессоров (size)
c   и номера текущего процесса (rank).
  Call MPI_INIT(ierr)
  Call MPI_comm_size(mpi_comm_world,size,ierr)
  Call MPI_comm_rank(mpi_comm_world,rank,ierr)
  comm = mpi_comm_world
c   Определение номеров процессоров (соседей) сверху и снизу.
c   Если таковые отсутствуют то им присваивается значение
c   MPI_PROC_NULL (для них коммуникационные операции игнорируются)
  If (rank.eq.0) then
    left=MPI_PROC_NULL
  Else

```

```

        left=rank-1
    End if
    If (rank.eq.size-1) then
        right=MPI_PROC_NULL
    Else
        right=rank+1
    End if
c   Определение числа элементов обрабатываемых одним процессором.
    m=Ny/size
    If (rank.lt.(Nx-size*m)) then
        m=m+1
    End if
c   Задание начальных значений.
    Do i=0,Nx
        Do j=0,m
            T(i,j)=100.0d0
            Tnew(i,j)=100.0d0
            b(i,j)=0.0d0
        End do
    End do
c   Задание граничных условий.
    If (rank.eq.0) then
        Do i=0,Nx
            T(i,0)=10.0d0
        End do
    End if
    If (rank.eq.size-1) then
        Do i=0,Nx
            T(i,m)=10.0d0
        End do
    End if
    Do j=0,m
        T(0,j)=1.0d0
        T(Nx,j)=10.0d0
    End do
c   Подготовка к расчетам.
    tau=2.0d0
    Do i=1,Nx-1
        Do j=1,m-1
            b(i,j)=T(i,j)
        End do
    End do
    ae=alfa*tau/(hx*hx)
    aw=alfa*tau/(hx*hx)
    an=alfa*tau/(hy*hy)
    as=alfa*tau/(hy*hy)
    ap=ae+aw+an+as
    If (rank.eq.0) then
        open (2,file='rezult1.dat')
        timeStart = MPI_Wtime()
        timeStop1 = 0.0
    End if
c   Движение по временной оси.

```

```

        Do while (time.lt.timefin)
            time =time + tau
c Расчет значений с нового временного слоя.
c На каждом временном шаге для уменьшения погрешности численного
c метода реализуется несколько итераций.
            Do i=0,Nx
                Do j=0,Ny
                    v(i,j)=0.0d0
                    p(i,j)=0.0d0
                    r(i,j)=0.0d0
                End do
            End do
            Call sumvv(T,T,0.0d0,p)
            Call multmv(ap,ae,aw,an,as,p,v)
            Call sumvv(b,v,-1.0d0,p)
            Call sumvv(p,T,0.0d0,r)
            al=scalmult(r,r)
            gerr=1.0d0
            grez=1.0d0
            Do While ((gerr.gt.1.0d-5).or.(gerr.gt.1.0d-5))
                err=0.0d0
                rez=0.0d0
                Call multmv(ap,ae,aw,an,as,p,v)
                lay=al/scalmult(v,p)
                Call sumvv(T,p,lay,Tnew)
                Call sumvv(r,v,-lay,r)
                alNew=scalmult(r,r)
                Call sumvv(r,p,alNew/al,p)
                al=alNew
                Do i=0,Ny
                    Do j=0,Ny
                        err=err+abs(T(i,j)-Tnew(i,j))
                        T(i,j)=Tnew(i,j)
                    End do
                End do
                rez=sqrt(al)
                If (rank.eq.0) timeStart1 = MPI_Wtime()
                call MPI_ALLREDUCE(err,gerr,1,MPI_DOUBLE_PRECISION,
1 MPI_SUM,comm,ierr )
                call MPI_ALLREDUCE(rez,grez,1,MPI_DOUBLE_PRECISION,
1 MPI_SUM,comm,ierr )
                If (rank.eq.0) timeStop1=timeStop1+MPI_Wtime()-timeStart1
            End do
c Пересчет правой части.
            Do i=1,Nx-1
                Do j=1,m-1
                    b(i,j)=T(i,j)
                End do
            End do
            End do
c Фиксация времени окончания расчетов.
            If (rank.eq.0) timeStop=MPI_Wtime()-timeStart
c Сбор результатов на нулевом процессоре.

```

```

Call MPI_GATHER(T(0,1), (m)*(Nx+1), MPI_DOUBLE_PRECISION,
1          T(0,1), (m)*(Nx+1), MPI_DOUBLE_PRECISION,
2          0, comm, ierr)
If (rank.eq.0) then
  Do i=0, Nx
    write (2, '(560f15.4)') (T(i,j), j=0, Ny)
  End do
  Write(2, '(a, i15, a, f15.9)') ' Size=', size, 'Tame=', timeStop
  Write(2, '(a, f15.9, a, f15.9)') ' FTame=', time, ' tau=', tau
  Write (2, '(a, f15.9, a, f15.9)') ' Tsch=', TimeStop-TimeStop1,
1          ' Tobm=', TimeStop1
  End if
  Call MPI_FINALIZE(ierr)
  End
c ----- 1111 -----
Function scalmult(x,y)
  Implicit none
  Include 'mpif.h'
  Integer i, j, Nx, Ny, m, ierr, comm, rank,
1      size, jbeg, jend, left, right
  Parameter (Nx=720, Ny=Nx)
  Double precision z, gz, scalmult,
1      x(0:Nx, 0:Ny), y(0:Nx, 0:Ny)
2      timeStart1, timeStop1
  Common /setka / m, comm, rank, size, left, right
  Common /tim / timeStart1, timeStop1
  z=0.0d0
  gz=0.0d0
  If (rank.eq.0) then
    jbeg=0
  Else
    jbeg=1
  End if
  If (rank.eq.size-1) then
    jend=m
  Else
    jend=m-1
  End if
  Do j=jbeg, jend
    Do i=0, Nx
      z=z+x(i, j)*y(i, j)
    End do
  End do
  If (rank.eq.0) timeStart1 = MPI_Wtime()
  call MPI_ALLREDUCE( z, gz, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION,
1      MPI_SUM, comm, ierr )
  If (rank.eq.0) timeStop1=timeStop1+MPI_Wtime()-timeStart1
  scalmult=gz
  return
  End
c ----- 2222 -----
Subroutine sumvv(x,y,sig,z)
  Implicit none

```

```

        Include 'mpif.h'
        Integer i, j, Nx, Ny, m, rank, size, comm, left, right
        Parameter (Nx=720, Ny=Nx)
        Double precision sig, z(0:Nx, 0:Ny)
        Double precision x(0:Nx, 0:Ny), y(0:Nx, 0:Ny)
        Common /setka / m, comm, rank, size, left, right
        Do j=0, m
            Do i=0, Nx
                z(i, j)=x(i, j)+sig*y(i, j)
            End do
        End do
        return
    End
c ----- 3333 -----
    Subroutine multmv(ap, ae, aw, an, as, x, y)
        Implicit none
        Include 'mpif.h'
        Integer i, j, Nx, Ny, m, tag, rank, size, comm,
1         left, right, status(100), ierr
        Parameter (Nx=720, Ny=Nx)
        Double precision x(0:Nx, 0:Ny), y(0:Nx, 0:Ny),
1         z(0:Nx, 0:Ny), sum
        Double precision ap(0:Nx, 0:Ny), ae(0:Nx, 0:Ny),
1         aw(0:Nx, 0:Ny), an(0:Nx, 0:Ny),
2         as(0:Nx, 0:Ny), b(0:Nx, 0:Ny),
3         timeStart1, timeStop1
        Common /setka / m, comm, rank, size, left, right
        Common /tim / timeStart1, timeStop1
c Пересылка граничных значений на соседние процессоры.
        If (rank.eq.0) timeStart1 = MPI_Wtime()
        tag=10
        Call MPI_SENDRECV(x(0,1), Nx+1, MPI_double_precision,
1         left, tag,
2         x(0,0), Nx+1, MPI_double_precision,
3         left, tag, comm, status, ierr)
        Call MPI_SENDRECV(x(0,m-1), Nx+1, MPI_double_precision,
1         right, tag,
2         x(0,m), Nx+1, MPI_double_precision,
3         right, tag, comm, status, ierr)
        If (rank.eq.0) timeStop1=timeStop1+MPI_Wtime()-timeStart1
        Do j=0, m
            Do i=0, Nx
                If ((i.gt.0).and.(j.gt.0).and.(i.lt.Nx).and.(j.lt.m))
                    then
                        y(i, j)=(1.0+ap)*x(i, j)-ae*x(i+1, j)
1                         -aw*x(i-1, j)
2                         -an*x(i, j+1)
3                         -as*x(i, j-1)
                    Else
                        End do
                End do
            End do
        return
    End

```

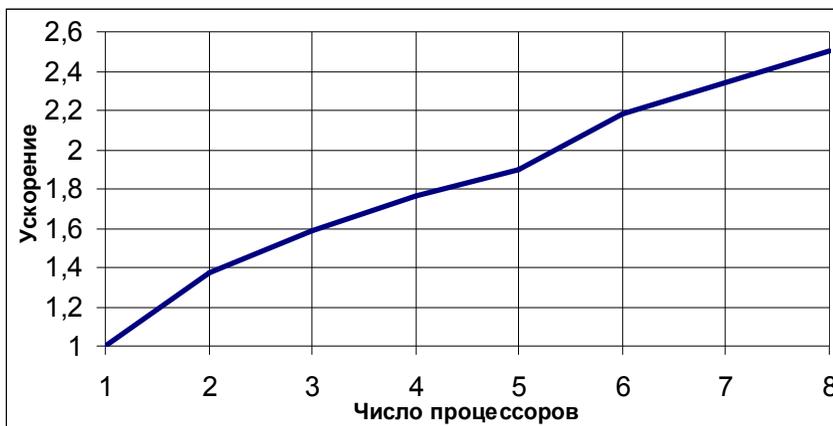
В таблице приведено время работы программы, для разного числа процессоров и для коэффициента теплопроводности  $\alpha = 10^{-5}$ . Расчеты проводились на равномерной сетке 720 на 720 (время приведено в секундах).

Коэф-т тепл-ти \ Число проц-в	1	2	3	4	5	6	8
$\alpha = 10^{-5}, \tau = 2.0$	3378	2463	2137	1922	1787	1555	1353
Время счета	3376	2217	1970	1884	1739	1488	1262
Время пересылок	2	246	167	38	48	67	91

Тестовые расчеты, проведенные для различных значений коэффициента теплопроводности, показали незначительное увеличение времени счета при увеличении  $\alpha$  (в сравнении с методом Зейделя, где время счета увеличивалось на порядок). Это объясняется уменьшением числа итераций, требуемых для сходимости итерационного метода на каждом временном шаге. Следующий график показывает, сколько итераций метода необходимо для сходимости на каждом временном шаге (для метода Зейделя эта величина составляла 250-310 итераций на один шаг по времени).



Далее приводиться график ускорения для значения  $\alpha = 10^{-5}$ .

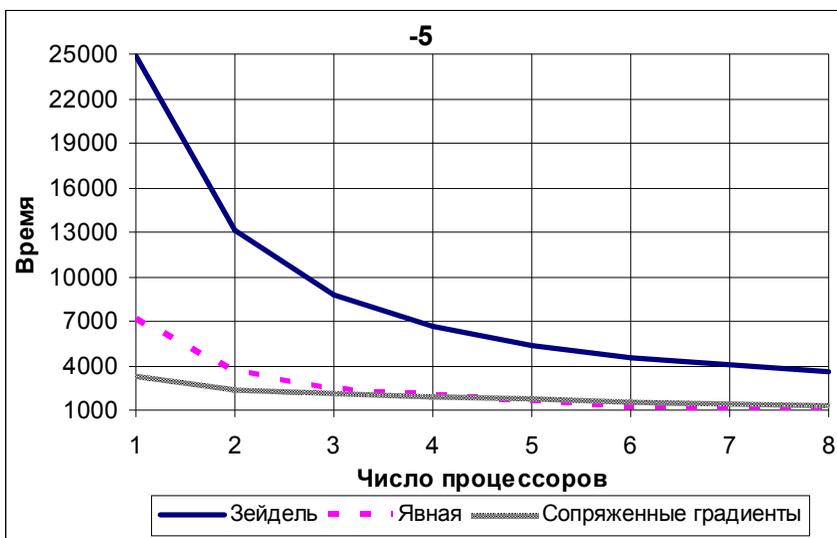
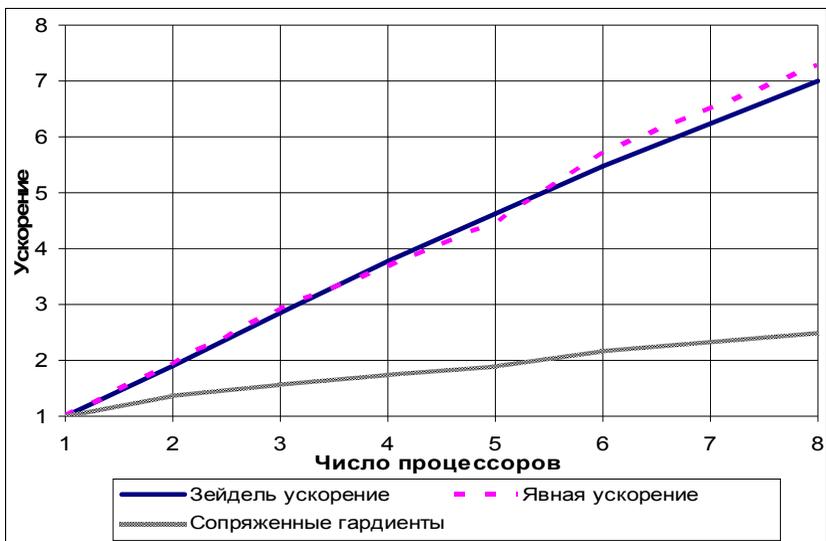


Видно, что ускорение на восьми процессорах не превышает 3.

### **Выводы.**

При аппроксимации дифференциальной задачи используется один и тот же пятиточечный шаблон, поэтому при организации параллельных вычислений, как в случае явной схемы, так и в случае неявной требуется организация обменов частями решения. Из приведенных примеров видно, что обмены реализуются одинаково и требуются после каждой итерации метода. А если шаг по времени при использовании неявной схемы много больше шага по времени используемого при реализации явной схемы, то количество обменов для случая неявной схемы будут много меньше. И как следствие при увеличении числа процессоров использование неявной разностной схемы даст лучшие результаты.

Разберем полученные результаты. Для этого сравним ускорение, которое дают изученные методы для  $\alpha = 10^{-5}$ . Видно, что ускорение для явной схемы и для метода Зейделя совпадает и близко к линейному. Что касается метода сопряженных градиентов, то он даже на восьми процессорах дает ускорение не более чем в три раза. Но ускорения является весьма относительной оценкой и большее значение имеет сравнить время работы вычислительной машины для каждого метода для разного числа процессоров.



Из этого графика видно, что по времени самой экономичной является явная схема, затем идет метод сопряженных градиентов и самый плохой результат у метода Зейделя.

Из приведенных примеров видно, что для данной задачи (для данной сетки) наиболее подходит неявная схема в сочетании с методом сопряженных градиентов, демонстрирующие минимальное время работы.



## 2D декомпозиция.

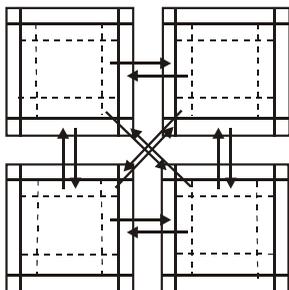


Рис. 9. Схема обменов при двумерной декомпозиции.

При большом числе процессоров необходимо использовать двумерную декомпозицию. При этом по-прежнему необходимо на каждом процессоре создавать фиктивные ячейки. Операции обменов схематически изображены на рисунке 9. На первый взгляд может показаться, что обменов стало больше. Проверим, что происходит на самом деле. Посчитав число пересылаемых элементов при каждом способе декомпозиции.

- 1d декомпозиция, число обменов есть величина  $2n$ , где  $n$  -размерность задачи.

- 2d декомпозиция, число обменов

есть величина  $\frac{4n}{\sqrt{p}}$ , где  $n$  -размерность задачи,  $p$  - число вычислительных узлов. (формулы приведены для решения двумерной задачи).

Таким образом, видим, что при  $p > 5$  двумерная декомпозиция является более перспективной для распараллеливания. Реализация 2d декомпозиции является более трудоемким процессом в сравнении с реализацией 1d декомпозиции и в данных методических указаниях, приводиться не будет. Основная возникающая сложность при ее реализации состоит в организации межпроцессорных обменов. Так как изложенные численные методы, сведены к набору матрично-векторных операций, которые последовательно применяются к каждому новому полученному приближению и не требуют не чего кроме знания значения содержимого соседней ячейки, то есть правильной организации обменов.

## Эффективность параллельных и последовательных программ.

Параллельные компьютеры используют для получения выигрыша во времени за счет использования дополнительных узлов. При этом помимо минимизации обменов между процессорами необходимо, чтобы максимальную производительность показывал каждый вычислительный узел. Эта глава будет обсуждать вопросы организации эффективных вычислений на каждом отдельном вычислительном узле. Оказывается, для этого необходимо [2]:

- учитывать организацию подсистем памяти (доступ к элементам матриц, эффекты КЭШ памяти).
- использовать оптимизирующие компиляторы (o1, o2, o3, intel).
- использовать специализированные библиотеки (blas).

Все эти вопросы будут рассмотрены на примере задачи умножения матриц. Хотя математически эта задача очень проста, она таит немало богатств с математической точки зрения.

Рассмотрим следующий вопрос, как организованы вычисления в компьютере? Прежде чем компьютер выполнит операцию, операнды должны находиться «в нужном месте», а за доставку в нужное место приходится платить. Проблема в том, что память обычно организована иерархическим образом. Между функциональными устройствами, выполняющими арифметические операции, и основной памятью, в которой лежат данные, может располагаться относительно небольших размеров высокопроизводительная кэш-память. Детали могут меняться от машины к машине, но вот две вещи, о которых необходимо постоянно помнить при работе в условиях многоуровневой памяти:

- объем памяти на каждом уровне иерархии ограничен по экономическим причинам и уменьшается при повышении уровня иерархии.
- обмен данными между уровнями иерархии сопряжен с затратами, иногда сравнительно большими.

Выходы из этого очевидны. Если мы хотим эффективные матричные алгоритмы для типичного компьютера, мы должны постоянно держать в поле зрения передвижение данных по уровням иерархии памяти. Многоуровневая память налагает на разработчика алгоритмов специфические требования, побуждая его мыслить в определенном ключе. Писать программы так, чтобы данные, попавшие в КЭШ-память, использовались с максимальной эффективностью. В современных компьютерах при вычислениях в КЭШ-память помещаются наиболее часто используемые участки кода, плюс происходит прогнозирование

возможно используемых, в дальнейшем данных, которые непосредственно во время вычисления переносятся в КЭШ.

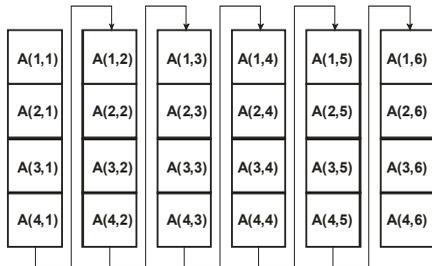
В качестве иллюстрационного примера часто используется задача перемножения матриц большой размерности. Имеются 6 вариантов упорядочивания тройного цикла в алгоритме умножения матриц, какой вариант предпочтительней [2]. Ответ на этот вопрос зависит от архитектуры компьютера, на котором будет реализован алгоритм.

```

Do i=1,N
  Do j=1,N
    Do k=1,N
      C(i,j) = C(i,j) + A(i,k)*B(k,j)
    End do
  End do
End do

```

Будем исходить из того, что мы программируем на фортране. Массивы в фортране хранятся по столбцам.



Это означает, что элементы матрицы, находящиеся в одном и том же столбце, занимают последовательные ячейки памяти. Так, если для хранения матрицы  $A \in R^{4 \times 6}$  было бы отведено 24 ячейки памяти, то при программировании по фортране элементы матрицы выстраиваются в памяти, как показано на рис. 10.

Рис. 10. Представление данных в языке фортран.

Рассмотрим подробно один из вариантов циклов, например *jki*.  $C(\underline{i},j) = C(\underline{i},j) + A(\underline{i},k)*B(\underline{k},j)$  видно, что доступ к элементам всех матриц осуществляется по столбцам. Что и даст на практике существенный выигрыш во времени при использовании данной последовательности циклов. Далее приведены тестовые расчеты для различных последовательностей циклов. Для различных компиляторов, архитектур и размерностей.

Но сначала несколько слов о компиляторах (ключач компилятора) Release и Debug. Компилятор Debug оптимизирует программный код с точки зрения максимального экономия использования оперативной памяти, компилятор Release оптимизирует программный код с точки зрения достижения максимального быстродействия.

Время перемножения матриц 1400x1400 Debug компилятор						
Процессор	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$
AMD Sempron 2500+	159	311	540	131	322	132
AMD AthlonXP 1800+	172	269	516	110	275	110
Intel Celron 3000	300	514	844	60	514	61
Intel Pentium 3000	114	130	283	62	133	62

Время перемножения матриц 700x700 Debug компилятор						
Процессор	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$
AMD Sempron 2500+	17	27	53	16	28	16
AMD AthlonXP 1800+	19	31	61	13	31	13
Intel Celron 3000	16	49	70	7	50	7
Intel Pentium 3000	13	15	34	7	16	7

Время перемножения матриц 1400x1400 Release компилятор						
Процессор	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$
AMD Sempron 2500+	65	184	263	14	197	31
AMD AthlonXP 1800+	74	172	254	34	172	40
Intel Celron 3000	115	459	577	6	462	14
Intel Pentium 3000	30	65	100	6	74	11

Время перемножения матриц 700x700 Release компилятор						
Процессор	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$
AMD Sempron 2500+	4	16	22	2	17	4
AMD AthlonXP 1800+	7	18	26	4	18	5
Intel Celron 3000	3	34	38	1	34	1
Intel Pentium 3000	3	7	10	1	7	1

Видно, что вне зависимости от архитектуры процессора, используемого компилятора и размерности, последовательность циклов  $jki$  является наиболее выигрышной. Это объясняется, что при данной последовательности циклов доступ к элементам каждой из матриц осуществляется по столбцам.

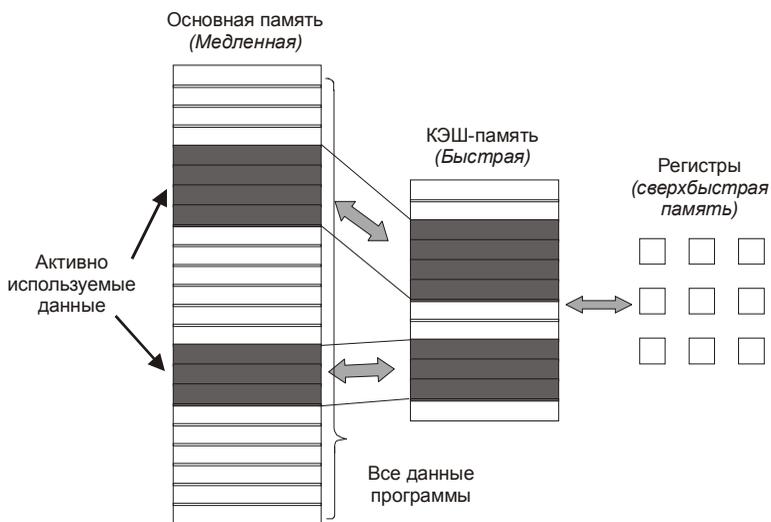
Далее будут представлены результаты использования специализированных библиотек, на примере библиотеки BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms). Эта библиотека реализует операции трех уровней:

- 1 уровень: это векторные операции.
- 2 уровень: это матрично-векторные операции.
- 3 уровень: это процедуры реализующие умножение матриц.

При реализации этих процедур используются все возможности оптимизации расчетов.

Следующий важный вопрос это влияние размера КЭШа.

Прежде чем обсуждать влияние размера КЭШ памяти на эффективность вычислений остановимся на вопросе блочного умножения матриц. Умение непринужденно работать с блочными матрицами крайне необходимо для матричных вычислений. Использование блочных обозначений упрощает вывод многих важных алгоритмов. Кроме того, все более возрастает роль блочных алгоритмов в вычислениях на суперкомпьютерах. Здесь под блочными алгоритмами мы подразумеваем по существу такие алгоритмы, которые содержат много операций умножения матрицы на матрицу.



Можно рассматривать два варианта блочного произведения матриц. Первое, когда блоки создаются по средству перемены индексов, при этом матрицы остаются неизменными и меняется лишь способ обхода элементов матрицы

```

Do ib=0,m
  Do i=(ib-1)*a+1,ib*a
    Do jb=0,m
      Do j=(jb-1)*a+1,jb*a
        Do kb=1,m
          Do k=(kb-1)*a+1,kb*a
            C(i,j) = C(i,j) +A(i,k)*B(k,j)
          End do
        End do
      End do
    End do
  End do
End do

```

Связи на элементы матрицы представлены на рисунке 10.

И второй способ, когда от двумерных матриц осуществляется переход к четырехмерным матрицам. При этом алгоритм принимает следующий вид

```

Do ib=0,m
  Do i=(ib-1)*a+1,ib*a
    Do jb=0,m
      Do j=(jb-1)*a+1,jb*a
        Do kb=1,m
          Do k=(kb-1)*a+1,kb*a
            C(ib,ib,i,j) = C(ib,jb,i,j) +A(ib,kb,i,k)*B(kb,jb,k,j)
          End do
        End do
      End do
    End do
  End do
End do

```

Тогда элементы матрицы в памяти компьютера хранятся следующим образом (см. рис. 11).

Теперь перейдем непосредственно к обсуждению эффекта КЭШ-памяти. Под этим понимают следующие, так оптимально подобрать размер блока матрицы, так что бы он целиком уместился в КЭШ памяти. То есть случай максимально рационального использования КЭШ-памяти.

Если для предыдущего случая было 6 (3!) вариантов последовательностей циклов, то теперь мы имеем набор из 6 индексов  $i, j, k, ib, jb, kb$  и  $6! = 720$  вариантов последовательностей циклов, перебрать все эти варианты довольно проблематично, и не имеет глубокого смысла. Поэтому, уже обладая некоторым набором знаний,

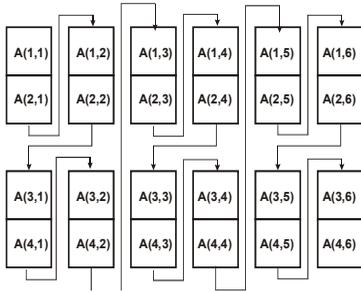


Рис. 11 Представление данных при блочном распределении.

полученных при простом перемножении матриц, можно сделать предположение о наиболее выигрышных вариантах последовательностей циклов.

Наиболее естественными кажутся следующие последовательности:

Для двумерных матриц  $jb, kb, ib, j, k, j$  где  $j$  меняется последовательность 3 последних индексов.

Для четырех мерных матриц  $j, k, i, jb, kb, ib$  где так же меняется последовательность 3-х последних индексов.

Следующий тест проводился на интеловском процессоре для размерностей матриц 1400 на 1400 и 700 на 700. Здесь сравнивались два компилятора f77 и Intel, и изучалось влияние использования блочных алгоритмов на время выполнения поставленной задачи. Так же приведен результат работы процедуры Dgemm при использовании различных компиляторов.

Время перемножения матриц 1400x1400 (16 блоков) f77 компилятор.							
Процессор Intel Pentium III 650	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$	dgemm
без блоков	132	339	454	118	358	117	130
двумерные матрицы	113	136	233	122	148	123	-----
четырёхмерные матрицы	67	95	192	78	95	79	-----
Время перемножения матриц 1400x1400 (16 блоков) Intel компилятор.							
Процессор Intel Pentium III 650	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$	dgemm
без блоков	80	195	278	57	266	79	57
двумерные матрицы	62	102	165	59	155	81	-----
четырёхмерные матрицы	22	29	55	30	37	40	-----
Время перемножения матриц 1400x1400 (100 блоков) f77 компилятор.							
Процессор Intel Pentium III 650	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$	dgemm
без блоков	132	339	454	118	358	117	130
двумерные матрицы	55	96	165	61	99	63	-----
четырёхмерные матрицы	90	108	218	109	107	109	-----

Время перемножения матриц 1400x1400 (100 блоков) Intel компилятор.							
Процессор Intel Pentium III 650	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$	dgemm
без блоков	80	195	278	57	266	79	57
двумерные матрицы	63	104	169	61	154	79	-----
четырёхмерные матрицы	21	29	51	30	37	40	-----

Есть мнение, что блочное умножение дает больший выигрыш во времени при использовании четырехмерных матриц. Так как лишь в этом случае мы получаем связанность, показанную на рисунке 11., И лишь в этом случае в КЭШ-память будут загружаться именно блоки, в то время как для двумерных матриц меняется только порядок обхода элементов матрицы.

Тестовые расчеты показали, что использование блочных алгоритмов является более предпочтительным с точки зрения экономии времени. Компилятор Intel оказывается более эффективным в сравнении с компилятором f77. Особенно наглядно это выражается при умножении четырех мерных матриц.

Время перемножения матриц 1400x1400 (16 блоков) Debug компилятор.						
Процессор Intel Pentium 3000	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$
без блоков	114	130	283	62	133	62
двумерные матрицы	113	114	249	61	113	61
четырёхмерные матрицы	129	129	307	129	129	129
Время перемножения матриц 1400x1400 (16 блоков) Release компилятор.						
Процессор Intel Pentium 3000	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$
без блоков	30	65	100	6	74	11
двумерные матрицы	30	63	94	4	63	5
четырёхмерные матрицы	4	3	9	3	4	4

Время перемножения матриц 1400x1400 (16 блоков) Debug компилятор.						
Процессор AMD Sempron 2500+	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$
без блоков	159	311	540	131	322	132
двумерные матрицы	132	182	384	133	188	123
четырёхмерные матрицы	213	218	501	218	217	215

Время перемножения матриц 1400x1400 (16 блоков) Release компилятор.						
Процессор AMD Sempron 2500+	$(i,j,k)$	$(i,k,j)$	$(j,i,k)$	$(j,k,i)$	$(k,i,j)$	$(k,j,i)$
без блоков	65	184	263	14	197	31
двумерные матрицы	19	78	113	16	99	36
четырёхмерные матрицы	5	5	11	5	6	5

Из представленных результатов видно, что использование четырех мерных матриц дает потрясающие результаты в случае использования компилятора Release, однако при использовании этого компилятора необходимо проявлять особую осторожность, так как велика возможность возникновения ошибки вычислений, за счет высокой скорости выполнения алгебраических операций.

### Литература

1. Гергель В.П., Стронгин Р.Г. Основы параллельных вычислений для многопроцессорных вычислительных систем. – Нижний Новгород.: издательство Нижегородского госуниверситета, 2003. [http://www.software.unn.ac.ru/ccam/files/HTML\\_Version/index.html#](http://www.software.unn.ac.ru/ccam/files/HTML_Version/index.html#)
2. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. – М.: Мир, 2001. – 430 с.
3. Ильин В.П.. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. – М.: Наука, 1995. – 287 с.
4. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. – М.: Мир, 1991. – 364 с.
5. Самарский А.А. Введение в численные методы. – М.: Наука, 1987. – 288 с.
6. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989. – 614 с.
7. Самарский А.А., Николаев Е.С.. Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1987. – 601 с.