Лекция 9. Математическое моделирование и параллельные вычисления. Основные классы задач. Решение алгебраических уравнений и ОДУ.

1. Вычислительная и прикладная математика.

Вычислительная математика – один из разделов математики, использующий в качестве основного метода решения математических задач приближённые вычисления. Классы задач вычислительной математики фактически совпадают с классами задач аналитической математики:

а) дискретизация объектов, приближение функций (интерполяция, экстраполяция, аппроксимация);

б) дифференцирование и интегрирование функций;

в) решение уравнений различных типов (алгебраических, обыкновенных дифференциальных, в частных производных, интегральных, интегро-дифференциальных) и их систем;

г) нахождение минимумов и максимумов функций и функционалов;

д) решение задач оптимального управления;

е) решение спектральных задач;

ж) решение геометрических задач.

Вычислительная математика условно делится на две части: развитие аппарата численных методов и применение численных методов к решению математических задач.

Прикладная математика – раздел математики, исследующий с помощью аналитических и численных методов математические задачи, возникающие в естественных и гуманитарных науках, а также в инженерных приложениях. В части решения математических задач с помощью численных методов вычислительная и прикладная математика совпадают. Далее будем рассматривать в основном именно эту общую часть.

2. Методология математического моделирования и параллельные вычисления.

Математическое моделирование – современная научная методология исследования объектов, процессов и явлений как окружающего нас мира, так и различных виртуальных абстракций. Основной принцип ММ – замена исходного объекта исследования математической моделью. ММ ***базируется на методах прикладной математики***, однако заключает в себе и другие методики, например, сбор и анализ информации об объектах исследования, развитие аппарата математических описаний и математического анализа конкретных задач, разработку алгоритмов и программ для вычислительных систем, компьютерную обработку данных.

Современная реализация математического моделирования с помощью вычислительной техники есть ***вычислительный (компьютерный) эксперимент***. Последний заключает в себя бесконечно повторяющуюся последовательность следующих этапов исследования объектов (процессов, явлений):

1) сбор информации об объекте;

2) формулирование математических описаний (моделей) объекта;

3) анализ математических описаний объекта;

4) сравнение полученных данных с оригиналом.

Поскольку в настоящее время ни один из этих этапов не обходится без применения компьютерной обработки данных, то и ***параллельные вычисления*** в этом контексте являются одним из этапов и методов математического моделирования.

3. Задачи, требующие применения параллельных вычислений.

Если проанализировать основные классы задач вычислительной и прикладной математики, то окажется, что большинство из них сводится к ***решению уравнений различных типов*** (алгебраических, дифференциальных, интегральных, функциональных, смешанных), а также их систем. При этом в качестве области задания уравнений могут выступать как континуальные, так и дискретные множества и пространства. Наиболее часто при моделировании используются ***уравнения математической физики***.

В узком смысле предмет математической физики – анализ моделей на основе уравнений в частных производных. Чаще всего это уравнения в частных производных 2-го порядка, разделяющиеся на три класса: а) гиперболические; б) параболические; в) эллиптические. ***Почему***: они хорошо описывают большинство процессов и явлений, исследующихся математическими методами.

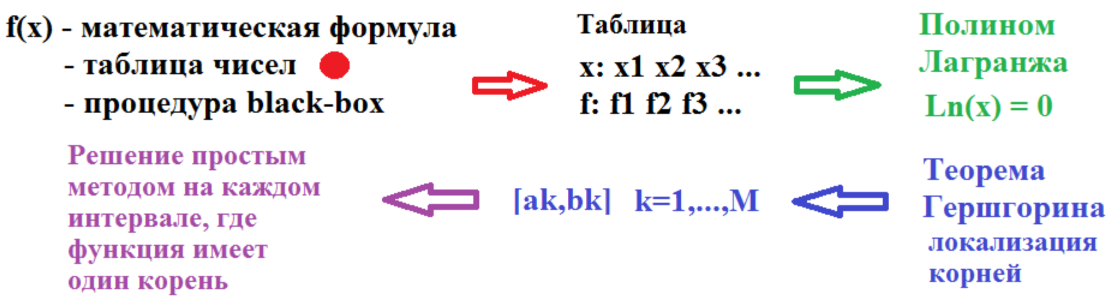
В широком смысле математическая физика имеет дело ***со всеми математическими задачами***, потому что они описывают тот или иной физический процесс или явление.

Параллельные вычисления возникают тогда, когда задачи МФ решаются численно в дискретных пространствах большой размерности. Поэтому предметом дальнейшего рассмотрения будут параллельные алгоритмы и их реализация при численном решении задач МФ или связанных с ними других математических задач.

4. Этапы вычислительного эксперимента применительно к задачам математической физики.
1) дискретизация непрерывного объекта;
2) построение численной схемы;
3) реализация численной схемы (алгоритм решения);
4) параллельный алгоритм решения;
5) параллельная программа;
6) расчеты на МВС;
7) обработка результатов вычислений.

5. Решение алгебраических уравнений.
5.1. Случай одного уравнения.
Поиск корней уравнения $f(x)=0$ сопровождается множественным вычислением функции $f(x)$.
Наиболее общая постановка задачи: $f(x)=0, \quad x\in(-\infty,+\infty)$.
Проблема бесконечного интервала решается преобразованием Римана:

$$(-\infty,+\infty)=(-\infty,-A)\cup[-A,+A]\cup(+A,+\infty);$$
$$(-\infty,-A): \quad x'=-1/x, \quad g(x')=f(-1/x), \quad x'\in(0,1/A);$$
$$(+A,+\infty): \quad x'=+1/x, \quad h(x')=f(+1/x), \quad x'\in(0,1/A).$$



Вывод: во многих случаях задачу можно разделить на фиксированное число независимых ветвей (функциональный параллелизм). Кроме того, можно одновременно вычислять несколько значений $f(x)$ в методах высокого порядка точности. Если корней у уравнения больше одного, то каждый из них можно вычислять независимо.

Ресурс параллелизма – каждое независимое вычисление $f(x)$, сложность вычислений функции, вычисления коэффициентов и полинома Лагранжа, число изолированных корней.

5.2. Случай системы уравнений.
$\mathbf{F}(\mathbf{x})=0 \quad \Leftrightarrow \quad f_k(x_1,\dots,x_m)=0, \quad k=1,\dots,m; \quad \mathbf{x},\mathbf{F}\in\mathbb{R}^m$.

Система может быть линейная или нелинейная. В первом случае имеем прямые и итерационные методы ее решения. Во втором – в основном только итерационные. Методы решения линейных систем рассмотрим ниже. Методы решения нелинейных систем подразделяются на четыре основных класса: градиентные, координатные, стохастические, гибридные.

Градиентный метод: $\mathbf{x}_0$ – начальное приближение, $\mathbf{x}_{s+1}=\mathbf{x}_s-\alpha\left[\nabla\mathbf{F}(\mathbf{x}_s)\right]^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}_s), \quad s=0,1,2,\dots$.

Координатный метод: $\begin{cases} f_k\left(x_1^*,\dots,x_k,\dots,x_m^*\right)=\varphi_k(x_k)=0, \quad k=1,\dots,m; \quad \Rightarrow \quad \mathbf{x}_s; \\ \left\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_s)\right\|<\varepsilon \quad ? \quad (\textit{нет}) \Rightarrow \textit{повтор процедуры.} \end{cases}$

Стохастический метод: $\begin{aligned} &\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_N - \textit{последовательность независимых случайных векторов в } D\subset\mathbb{R}^m; \\ &\mathbf{x}_*=\mathbf{x}_{s_0}: \quad \left\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_*)\right\|=\min_{1\le s\le N}\left\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_s)\right\|\le\frac{C}{\sqrt{N}}. \end{aligned}$

Гибридные: метод случайного градиента, градиентный метод покоординатного спуска и др.
Ресурс параллелизма – размерность пространства, сложность вычислений функции, порядок метода.

6. Решение ОДУ.

6.1. Постановки задач. Любое количество ОДУ разного порядка можно свести к системе уравнений первого порядка:

$\mathbf{F}(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, t) = 0,$ или $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t), \quad 0 < t < 1, \quad \mathbf{x}, \mathbf{F} \in \mathbb{R}^m.$

Покомпонентная формулировка:

$f_i\left(\dot{x}_1, ..., \dot{x}_m, x_1, ..., x_m, t\right) = 0, \quad i = 1, ..., m.$

Задачи решения ОДУ бывают двух типов: начальные и краевые.

Начальная задача (задача Коши): $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$.

Краевая задача: $\mathbf{A}_0\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{A}_1\mathbf{x}(1) = \mathbf{x}_1, \quad \mathbf{A}_0, \mathbf{A}_1 \in \mathbb{R}^{m\times m}, \quad rank(\mathbf{A}_0) + rank(\mathbf{A}_1) = m.$

6.2. Методы решения задачи Коши.

Методы решения разделяются на аналитические, полуаналитические и приближенные.

Аналитические (теоретические методы) – поиск траектории $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), ..., x_m(t))$ в явном виде или в виде квадратур.

Полуаналитические методы – разложение траектории $\mathbf{x}(t)$ по базисным функциям $\xi_k(t)$, при котором коэффициенты разложения определяются приближенно.

Приближенные (численные) методы позволяют найти конечное множество точек траектории:

$\mathbf{x}(t), \quad t \in [0,1] \quad \to \quad \left\{\mathbf{x}(t_k), \quad k = 0, ..., N\right\}$.

Методы с постоянным шагом: $t_k = \tau \cdot k, \quad k = 0, ..., N, \quad \tau = 1/N.$

Формула Коши: $\mathbf{x}\left(t+\tau\right) = \mathbf{x}\left(t\right) + \int\limits_t^{t+\tau} \mathbf{F}(x(s), s)ds.$

Одношаговые методы.

Схема Эйлера: $\mathbf{x}(t+\tau) = \mathbf{x}(t) + \tau\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), t)$ – явная схема 1-го порядка (формула левых прямоугольников).

Схема Рунге-Кутты: $\mathbf{x}(t+\tau) = \mathbf{x}(t) + \tau\mathbf{F}(\mathbf{x}(t) + 0.5\tau\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), t), t + 0.5\tau)$ – явная схема 2-го порядка (формула средних прямоугольников).

Схема Адамса: $\mathbf{x}(t+\tau) = \mathbf{x}(t) + 0.5\tau\left(\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), t) + \mathbf{F}(\mathbf{x}(t+\tau), t+\tau)\right)$ – симметричная неявная схема 2-го порядка (формула трапеций).

Многошаговые методы (явные и неявные).

Явный двухшаговый метод Адамса:

$\mathbf{x}(t+\tau) = \mathbf{x}(t) + \tau\left[1.5\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), t) - 0.5\mathbf{F}(\mathbf{x}(t-\tau), t-\tau)\right]$ – квадратура + экстраполяция.

Неявный трехшаговый метод Адамса:

$$\mathbf{x}(t+\tau) = \mathbf{x}(t) + \tau\left[\frac{5}{12}\mathbf{F}(\mathbf{x}(t+\tau), t+\tau) + \frac{8}{12}\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), t) - \frac{1}{12}\mathbf{F}(\mathbf{x}(t-\tau), t-\tau)\right].$$

Схемы с переменным шагом: методы Гира, Башфорта и др.

Ресурс параллелизма – размерность вектора $\mathbf{x}$, явность или неявность алгоритма, количество независимых вычислений вектора $\mathbf{F}$.

6.3. Методы решения краевых задач.

Метод стрельбы. Решаем начальную задачу с условиями:

$\mathbf{A}_0\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{A}_1\mathbf{x}(1) = \mathbf{x}_1, \quad \mathbf{A}_0, \mathbf{A}_1 \in \mathbb{R}^{m\times m}, \quad rank(\mathbf{A}_0) + rank(\mathbf{A}_1) = m.$

Метод стрельбы состоит в том, что мы дополняем вектор $\mathbf{x}_0$ недостающими компонентами и решаем задачу Коши. Получаем траекторию $\mathbf{x}(t)$. Эта траектория должна удовлетворять второму краевому условию: $\mathbf{A}_1\mathbf{x}(1) = \mathbf{x}_1$. Это фактически нелинейное уравнение, заданное неявным образом. Его решаем с помощью итераций.

Вариант метода. Введем новый вектор параметров $\boldsymbol{\delta}=\left(\delta_1,...,\delta_m\right)$. Переупорядочим вектор траектории $\mathbf{x}\left(t\right)$ и переформулируем граничные условия так, чтобы они превратились в равенства, и слева первыми компонентами были значения из вектора $\mathbf{x}_0$ (в количестве k), а справа последними компонентами были значения из вектора $\mathbf{x}_1$ (в количестве m-k). В качестве недостающих компонент возьмем компоненты вектора $\boldsymbol{\delta}$:

$$\mathbf{x}\left(0\right)=\left(x_{1,0},...,x_{k,0},\delta_{k+1,0},...,\delta_{m,0}\right),$$

$$\mathbf{x}\left(1\right)=\left(\delta_{1,N},...,\delta_{k,N},x_{k+1,N},...,x_{m,N}\right).$$

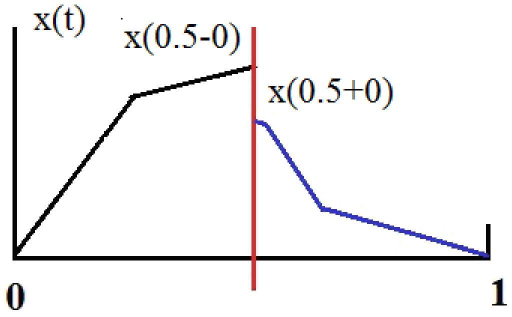


Рис. 1. Вид пробных траекторий.

Задав начальное состояние вектора $\boldsymbol{\delta}$, можем найти траекторию $\mathbf{x}\left(t\right)$, составленную из решения двух задач Коши – от 0 до 0.5 и от 1.0 до 0.5 (см. Рис. 1). Далее можно применить итерационный процесс по вектору $\boldsymbol{\delta}$, минимизирующий норму разности траекторий в средней точке временного интервала:

$$\Phi\left(\boldsymbol{\delta}\right)=\left\|\mathbf{x}\left(0.5+0;\boldsymbol{\delta}\right)-\mathbf{x}\left(0.5-0;\boldsymbol{\delta}\right)\right\|^2\to\min.$$

В качестве таких итераций можно использовать метод Ньютона с неявным вычислением градиента функционала $\Phi\left(\boldsymbol{\delta}\right)$: $\overset{s+1}{\boldsymbol{\delta}}=\overset{s}{\boldsymbol{\delta}}-\alpha\left(\dfrac{\partial\Phi}{\partial\delta}\left(\overset{s}{\boldsymbol{\delta}}\right)\right)^{-1}\left(\overset{s+1}{\boldsymbol{\delta}}-\overset{s}{\boldsymbol{\delta}}\right)$. В качестве начального можно взять нулевой вектор.

Комментарии. Можно стрелять и слева, и справа, и навстречу. Можно также применять ***метод параллельной стрельбы*** (разбиение отрезка на N частей, ввод базисных функций на каждом подотрезке, а далее сшивка решения). Это способ повышения устойчивости алгоритма.
Применяется также ***метод случайной стрельбы***.

Линейная краевая задача:

$$\dot{\mathbf{x}}=\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{f},\quad 0<t<1,\quad \mathbf{A}_0\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0,\quad \mathbf{A}_1\mathbf{x}(1)=\mathbf{x}_1.$$

Метод построения фундаментальных решений. Смысл его в том, что в линейном случае можно найти фундаментальную систему решений и подбирать коэффициенты разложения решения по этому базису.

$\mathbf{x}\left(t\right)=\mathbf{x}^{(0)}(t)+\sum\limits_{k=1}^{m}\alpha_k\mathbf{x}^{(k)}(t)$, где $\mathbf{x}^{(k)}(t)$ – решения однородных систем вида

$$\dot{\mathbf{x}}^{(k)}=\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)},\quad 0<t<1,\quad x_i^{(k)}(0)=\delta_{ik},$$

$\mathbf{x}^{(0)}(t)$ – решение неоднородной системы

$$\dot{\mathbf{x}}^{(0)}=\mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}+\mathbf{f},\quad 0<t<1,\quad x_i^{(0)}(0)=0.$$

Коэффициенты α_k определяем из условий:

$$\mathbf{A}_0\mathbf{x}(0)=\mathbf{A}_0\left[\sum_{k=1}^{m}\alpha_k\mathbf{x}^{(k)}(0)\right]=\mathbf{x}_0,\quad \mathbf{A}_1\left[\mathbf{x}^{(0)}(1)+\sum_{k=1}^{m}\alpha_k\mathbf{x}^{(k)}(1)\right]=\mathbf{x}_1.$$

Получаем СЛАУ размерности m. Метод хорош, но не устойчив, если матрица СЛАУ плохо обусловлена. Ресурс параллелизма – размерность векторов и сложность вычислений правой части.

Метод дифференциальной прогонки для систем из двух уравнений:

$$\dot{u}=av+f,\quad \dot{v}=bu+g,\quad u(0)=u_0,\quad v(1)=v_1.$$

Решение представим в виде $u\left(t\right)=\alpha(t)v\left(t\right)+\beta(t)$. С помощью элементарных преобразований можно получить следующие формулы для определения решения:

$$\dot{\alpha}+b\alpha^2-a=0,\quad \alpha(0)=0;\quad \dot{\beta}+\alpha b\beta+\alpha g-f=0,\quad \beta(0)=u_0;$$

$$\dot{v}-\alpha bv-b\beta-g=0,\quad v(1)=v_1;\quad u=\alpha v+\beta.$$

Решение каждой задачи Коши можно реализовать численно, в том числе используя параллельный алгоритм.