УДК 681.3

Ю.Я. ЛЕДЯНКИН

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ. СПОСОБ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ В ЕДИНОМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ ПОТОКЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Анотація. *Запропоновано і описано спосіб паралельної реалізації методу найменших квадратів з обробкою інформації на рівні складних структур даних на процесорних елементах, що включають скалярний помножувач. Він орієнтований на рішення задач математичної фізики в єдиному обчислювальному (технологічному) потоці. Опис розглянуто на конкретному прикладі в порівнянні з відомим рішенням. Корисна фахівцям з математики, розробникам методів і структур спецпроцесорів для вирішення задач математичної фізики та інших задач.*
Ключові слова: *поліном, інтегрування та диференціювання сплайнів, нев'язка, паралельна обробка, складні структури даних, скалярний помножувач, єдиний обчислювальний (технологічний) потік.*

Аннотация. *Предложен и описан способ параллельной реализации метода наименьших квадратов с обработкой информации на уровне сложных структур данных на процессорных элементах, включающих скалярный умножитель. Он ориентирован на решение задач математической физики в едином вычислительном (технологическом) потоке. Описание рассмотрено на конкретном примере в сравнении с известным решением. Полезна специалистам по математике, разработчикам методов и структур спецпроцессоров для решения задач математической физики и других задач.*
Ключевые слова: *полином, интегрирование и дифференцирование сплайнов, невязка, параллельная обработка, сложные структуры данных, скалярный умножитель, единый вычислительный (технологический) поток.*

Abstract. *The way of a parallel implementation of the least squares method with information processing at the level of complex data structures in the processing elements including a scalar multiplier is proposed and described. It is solving the problems of mathematical physics in a single computational (technology) flow oriented method. A description is considered on the basis of specific example in comparison with the known solution. It is useful for specialists of mathematics and developers of methods and structures of special processor for solving problems of mathematical physics and other problems.*
Keywords: *polynomial, integration and differentiation of splines, discrepancy, parallel processing, complex data structures, scalar multiplier, single computational (technology) flow.*

1. Введение

Моделирование и решение сложных задач в различных областях науки, техники и экономики предполагают использование вычислительных систем (ВС) высокой производительности. Обычно такие ВС работают со спецпроцессорами (СП), обеспечивающими резкое повышение скорости обработки с одновременным снижением стоимости затрат на получение решения. Примером таких ВС текущего времени являются гетерогенные системы на базе графических спецпроцессоров (GPU) и кластерных структур на базе классических многоядерных процессоров (CPU), разработанных фирмами nVIDIA и AMD с соответствующими доработками CUDA и STREAM, для решения общих задач.

А ранее в работе [1] для решения задач математической физики (МФ) был предложен, разработан и описан единый технологический (в математическом плане) поток (ЕТП) по обработке сложных структур данных (ССД) на всех этапах решения задачи от ввода исходных данных до получения псевдорешения системы вида $Ax = b$, включая расчет коэффициентов системы. Архитектура, покрывающая его, предполагает выполнение вычислений на параллельной структуре из процессорных элементов (ПЭ). Каждый ПЭ такого СП включает скалярный умножитель (СУ), обрабатывающий информацию на уровне ССД в режиме ЕТП. Решение задач МФ на таком СП ориентировано на использование метода конечных элементов (МКЭ), а, возможно, применение и методов конечных разностей (МКР) типа метода приращений [МП], схемы простой итерации (СПИ). Но применение МКЭ основано на использовании полиномов в качестве пробных функций при интерполяции. Поэтому он дает большую точность аппроксимации при резком сокращении количества узлов триангулируемой области решения. Применение МКЭ также ведет к сокращению размерности решаемых систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) и, следовательно, к сокращению аппаратурных затрат.

Желание расширить область применения СП, реализующего такие принципы, привело к рассмотрению методов взвешенных невязок (МВН) в том наборе, к которому относят методы моментов (ММ), коллокаций (МК), наименьших квадратов (МНК), Галеркина (МГ). Это связано еще и с тем, что вариационные принципы, послужившие основой обоснования МКЭ на ранних этапах его внедрения [1], гораздо сложнее в применении.

В работах [2, 3] рассмотрены вопросы реализации МВН, ММ, МК, МГ, а также краевых условий с единых позиций параллельных вычислений в режиме ЕТП с обработкой исходных данных в виде ССД.

Ниже предлагается рассмотреть применение МНК. Он является наиболее ранним из серии МВН. В сочетании с МКЭ и методом Галеркина на классе ряда задач МФ он успешно работает, хотя для некоторых нестационарных задач его применение не имеет строгого обоснования.

2. Постановка задачи

Для описания МНК рассматривают [4] функцию ошибок:

$$\varepsilon = L(u) - p, \tag{1}$$

$$F = <\varepsilon, \varepsilon> = <L(u) - p, L(u) - p>. \tag{2}$$

Для аппроксимирующей функции

$$u = \sum a_\kappa \phi_\kappa \tag{3}$$

минимизируют функцию F путем дифференцирования по a_i:

$$\partial F / \partial a_i = 0, \quad i = 1, 2, ..., N. \tag{4}$$

Получают уравнение

$$\partial F / \partial a_i = \partial / \partial a_i < \varepsilon, \varepsilon > = \partial / \partial a_i \{< L(\sum a_k \phi_k), L(\sum a_k \phi_\kappa) > -2 < L(\sum a_\kappa \phi_\kappa), p) > + < p, p >\}, \tag{5}$$

которое упрощается, если L – линейный оператор:

$$2 < L(\sum a_\kappa \phi_\kappa), L(\phi) > -2 < L(\phi_i), p >= 0 \tag{6}$$

или

$$< L(\sum a_\kappa \phi_\kappa - p), L(\phi_i) >= 0. \tag{7}$$

На примере, взятом из [4], рассмотрим возможность применения МНК в сочетании с регулярным матричным представлением (РМП), предложенным и разработанным в [1] для решения задач МФ на СП в режиме ЕТП.

Пусть

$$L(u) - p = \partial^2 u / \partial x^2 + u + x = 0. \tag{8}$$

Выбирается аппроксимирующий полином вида

$$u = (x - x^2)a_1 + (x^2 - x^3)a_2, \tag{9}$$

для которого невязка равна

$$\varepsilon = x + (-2 + x - x^2)a_1 + (2 - 6x + x^2 - x^3)a_2. \tag{10}$$

Составляя скалярный квадрат ε и минимизируя его по a_1, a_2, имеем

$$\int_0^1 \varepsilon(-2 + x - x^2)dx = [\text{K}]_1 = 0, \tag{11}$$

$$\int_0^1 \varepsilon(2 - 6x + x^2 - x^3)dx = [\text{K}]_2 = 0. \tag{11a}$$

После интегрирования (11), (11 а) получаем систему уравнений относительно a_1, a_2:

$$\begin{bmatrix} 202 & 101 \\ 101 & 1532 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 55 \\ 393 \end{Bmatrix}. \tag{12}$$

Решением системы будут

$$a_1 = 0{,}192, \;\; a_2 = 0{,}165. \tag{13}$$

Традиционное вычисление интегралов сводится к преобразованиям выражений под знаком интеграла с последующим интегрированием по частям:

$$\int_0^1 \varepsilon(-2 + x - x^2)dx = 0,$$

$$\int_0^1 (x + a_1(-2 + x - x^2) + a_2(2 - 6x + x^2 - x^3))(-2 + x - x^2)dx =$$

$$= \int_0^1 ((-2x + x^2 - x^3) + a_1(4 - 4x + 5x^2 - 2x^3 + x^4) + a_2(-4 + 14x - 10x^2 + 9x^3 - 2x^4 + x^5))dx =$$

$$= |(-x^2 + x^3/3 - x^4/4) + a_1(4x - 2x^2 + 5/3x^3\; x^4/2 + x^5/5) + a_2(-4x + 7x^2 - 10x^3/3 +$$

$$+ 9x^4/4 - 2x^5/5 + x^6/6)\,||_0^1 = (-1 + 1/3 - 1/4) + \alpha_1(4 - 2 + 5/3 - 1/2 + 1/5) +$$

$$+ a_2(-4 + 7 - 10/3 + 9/4 - 2/5 + 1/6) = -55/60 + a_1 202/60 + a_2(101/60) = 0, \tag{14}$$

или

$$202\alpha_1 + 101\alpha_2 = 55.$$

Второй интеграл (11 а) вычисляется по аналогии:

$$\int_0^1 \varepsilon(2 - 6x + x^2 - x^3)dx = \int_0^1 (2x - 6x^2 + x^3 - x^4) + \alpha_1(-4 + 14x - 10x^2 + 9x^3 - 2x^4 + x^5\;) +$$

$$+ \alpha_2(4 - 24x + 40x^2 - 16x^3 + 13x^4 - 2x^5 + x^6)dx = = -19/2 + \alpha_1 101/60 + \alpha_2 393/105 = 0, \tag{15}$$

или

$$\alpha_1 101/60 + \alpha_2 393/105 = 19/2.$$

Обозначим полиномы первой (14) и второй (15) подынтегральных функций:

$$f_1(x) = (-2 + x - x^2)\,, \tag{16}$$

$$f_2(x) = (2 - 6x + x^2 - x^3), \tag{17}$$

$$f_3(x) = (-2x + x^2 - x^3), \tag{18}$$

$$f_4(x) = (2x - 6x^2 + x^3 - x^4) \tag{19}$$

и перепишем интегралы

$$\int_0^1 (f_3(x) + \alpha_1 f_1(x) f_1(x) + \alpha_2 f_1(x) f_2(x))dx = 0\ , \tag{20}$$

$$\int_0^1 (f_4(x) + \alpha_1 f_1(x) f_2(x) + \alpha_2 f_2(x) f_2(x))dx = 0. \tag{21}$$

Решение задачи.

Запишем полиномы (16)–(19) в виде РМП:

$$f_1(x) \Rightarrow [\Phi_1] =$$

$$= \begin{bmatrix} -2 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ & -2 & 1 & -1 & 0 \\ & & -2 & 1 & -1 \\ & & & -2 & 1 \\ & & & & -2 \end{bmatrix} \Rightarrow [\Phi_1]^T = \begin{bmatrix} -2 & & & & \\ 1 & -2 & & & \\ -1 & 1 & -2 & & \\ 0 & -1 & 1 & -2 & \\ 0 & 0 & -1 & 1 & -2 \end{bmatrix} \Rightarrow f_1^*(x) = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \end{vmatrix} \tag{22}$$

и произведение $f_1(x) * f_1(x) = [\Phi_1]^T * [\Phi_1^*] = [\Phi_1]^T * f_1^*(x) \Rightarrow$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} -2 & & & & \\ 1 & -2 & & & \\ -1 & 1 & -2 & & \\ 0 & -1 & 1 & -2 & \\ 0 & 0 & -1 & 1 & -2 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 5 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \end{vmatrix}. \tag{23}$$

Аналогично для произведения

$$f_1^T(x) * f_2^*(x) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} -2 & & & & & \\ 1 & -2 & & & & \\ -1 & 1 & -2 & & & \\ 0 & -1 & 1 & -2 & & \\ 0 & 0 & -1 & 1 & -2 & \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -2 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 2 \\ -6 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 \\ 14 \\ -10 \\ 9 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \\ x^5 \end{vmatrix} \tag{24}$$

и произведения полиномов

$$f_2(x) * f_2(x) \Rightarrow [\Phi_2]^T \; f_2^*(x) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 2 & & & & & & \\ -6 & 2 & & & & & \\ 1 & -6 & 2 & & & & \\ -1 & 1 & -6 & 2 & & & \\ 0 & -1 & 1 & -6 & 2 & & \\ 0 & 0 & -1 & 1 & -6 & 2 & \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -6 & 2 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 2 \\ -6 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ -24 \\ 40 \\ -16 \\ 13 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} * \left| \begin{matrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \\ x^{5_5} \\ x^6 \end{matrix} \right. \Rightarrow f_2^*(x). \tag{25}$$

Замечание. Следует иметь в виду, что результирующая матрица имеет порядок m_R на единицу больше суммы порядков сомножителей (матриц) m_1, m_2, т.е.

$$m_R = m_1 + m_2 + 1.$$

Интегрирование полиномиальных функций, заданных в виде РМП, выполняется по частям. Для этого зададим матричный оператор интегрирования $[A]$ в виде

$$[A] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & ... \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & ... \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 1/3 & 0 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5 & ... \end{bmatrix} dx. \tag{26}$$

Проинтегрируем полиномы первого интеграла

$$\int_0^1 f_1(x)dx = \Rightarrow \int_0^1 [\Phi_1]dx = [A] * [\Phi_1^*]\, dx = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & ... \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & ... \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 1/3 & 0 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5 & ... \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 5 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} dx =$$

$$= \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \\ -2 \\ 5/3 \\ -2/4 \\ 1/5 \end{bmatrix} * * \left| \begin{matrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \\ x^5 \end{matrix} \right|_0^1 \Rightarrow = f_1^*(x) \Rightarrow [\mathrm{K}_1]_{1\ 1} \Rightarrow a_1[A] * [4 - 4 + 5x^2 - 2x^3 + x^4]^T \{x\} dx =$$

$$= a_1 [A] * [4 - 4\ 5 - 2\ 1]^T \{x\} dx = [0\ 4 - 2\ 5/3 - 2/4\ 1/5]^T \{x\} \Big|_0^1 . \tag{27}$$

Аналогично проинтегрируем остальные подынтегральные функции.

Для $[\Phi_1]_2 \Rightarrow f_1(x)\cdot * \ f_2(x)$.

$$[\mathrm{K}_2]_1 = \int_0^1 a_2\ [\Phi_1]_2^* dx = a_2[A]*[\Phi_1^*]_2\,dx = a_2[A][-4\,14\ \text{-10/3 9/4 -2/5 1/6}]^T\{x\}dx =$$

$$= a_2[0-47-10/39/4-2/51/6]^T = a_2\begin{bmatrix}0\\-4\\7\\-10/3\\9/4\\-2/5\\1/6\end{bmatrix}\left|\begin{matrix}x^0\\x^1\\x^2\\x^3\\x^4\\x^5\\x^6\end{matrix}\right|_0^1 \Rightarrow f_1^*(x). \qquad (28)$$

Для функции $[\Phi_3] \Rightarrow f_3^*(x)$:

$$[\mathrm{K}_3]_1 = \int_0^1 [\Phi_3^*]dx = [A]\,[\Phi_3^*]\ dx = [A]*[\text{-2 1 -1}]^T\{\mathrm{x}\}\,dx = [\text{0 0 -1 1/3 -1/4}]^T\ \ \{\mathrm{x}\}\Big|_0^1 =$$

$$= \begin{bmatrix}0\\0\\-1\\1/3\\-1/4\end{bmatrix}\left|\begin{matrix}x^0\\x^1\\x^2\\x^3\\x^4\end{matrix}\right|_0^1 \Rightarrow f_3^*(x). \qquad (29)$$

Вычисления по второму интегралу (11а) производим по аналогии с вычислениями по первому интегралу:

$$\int_0^1 f_4(x) = [\mathrm{K}_4]_2 = \int_0^1 [\Phi_4]dx = [A]*[\Phi_4^*]\ dx \Rightarrow [A]*[0\ 2\ –6\ 1\ –1]^T\{\mathrm{x}\}\,dx = [A]\,[\Phi_4^*]^T\ dx =$$

$$= \begin{bmatrix}0\\0\\1\\-2\\1/4\\-1/5\end{bmatrix}\left|\begin{matrix}x^0\\x^1\\x^2\\x^3\\x^4\\x^5\end{matrix}\right|_0^1 \Rightarrow f_{4,2}^*(x). \qquad (30)$$

$$\int_0^1 f_1(x)\cdot f_2(x)dx = [\mathrm{K}_1]_2 = \int_0^1 a_1[\Phi_1]_2 dx = [A]a_1[\Phi_1^*]_2\,dx = [\text{-4 14 -10 9 -21}]^T\ \{x\}dx =$$

$$=a_1\begin{bmatrix} 0 \\ -4 \\ 7 \\ -10/3 \\ 9/4 \\ -2/5 \\ 1/6 \end{bmatrix} \left| \begin{matrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \\ x^5 \\ x^6 \end{matrix} \right|_0^1 \rightarrow f_{1,2}^*(x). \qquad (31)$$

$$\int_0^1 a_2 f_2(x) * f_2(x)\,dx = [K_2]_2 = a_2[\Phi_2^*]dx = [A]a_2\,[4\ \text{-}24\ 40\ \text{-}16\ 13\ \text{-}2\ 1]^T\{\text{x}\}\,dx =$$

$$=\begin{bmatrix} 0 \\ 4 \\ -12 \\ 40/3 \\ -4 \\ 13/5 \\ -1/3 \\ 1/7 \end{bmatrix} \left| \begin{matrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \\ x^5 \\ x^6 \\ x^7 \end{matrix} \right|_0^1 \rightarrow f_{2,2}^*(x). \qquad (32)$$

После вычисления в общем виде подынтегральных выражений (11), (11 а), описанных в форме РМП (23)–(29), для составления системы уравнений по вычислению a_1, a_2 следует процедура вычисления значений коэффициентов путем подстановки значений пределов интегрирования.

Запишем в матричном виде интегралы:

$$[\text{K}]_1 = a_1[\text{K}_1]_1^T[x] + a_2[\text{K}_2]_1^T[x] + [\text{K}_3]_1^T[x],$$

$$[\text{K}]_2 = a_1[\text{K}_1]_2^T[x] + a_2[\text{K}_2]_2^T[x] + [\text{K}_3]_2^T[x] \qquad (33)$$

и в вычисленные в общем виде значения интегралов подставим пределы интегрирования, определив, таким образом, значения коэффициентов системы уравнений (для $x=1$):

$$a_1[\text{K}_1]_1^T[x] = a_1[04 - 25/3 - 2/41/5] * [x^0 x^1 x^2 x^3 x^4 x^5]^T \Big|_0^1 =$$

$$= a_1(0*1 + 4*1\ \text{-}2*1 + 5/2*1\ –2/4*1 + 1/5*1) = a_1 * 101/30, \qquad (34)$$

$$a_2[\text{K}_2]_1^T[x] = a_2\,[0\ \text{-}4\ \ 7\ \text{-}10/3\ \ 9/4\ \text{-}2/5\ 1/6] * [\,x^0\ x^1\ x^2\ x^3\ x^4\ x^5\ x^6\,]^T \Big|_0^1 =$$

$$= a_2\,(0*1\ –4*1\ \ 7*1\ –10/3*1\ 9/4*1\ –2/5*1\ 1/6*1) = a_2 * 101/60, \qquad (35)$$

$$[\text{K}_3]_1^T[x] = [0\ 0\ \text{-}1\ 1/3\ \text{-}1/4] * [\,x^0\ x^1\ x^2\ x^3\ x^4\ x^5\,]^T \Big|_0^1 =$$

$$=(0*1\ \ 0*1\ \ \text{-}1*1 + 1/3*1\ \ –1/4*1) = \text{-}11/12. \qquad (36)$$

Аналогично для $[K]_2$ (при $x=1$):

$$[\text{K}_1]_2^T[x] = [0\ 0\ 1\ \text{-}2\ \ 1/4\ –1/5] *\ [\,x^0\ x^1\ x^2\ x^3\ x^4\ x^5\,]^T \Big|_0^1 =$$

$$=(0*1+0*1+1*1-2*1+1/4*1-1/5*1)=-19/20, \tag{37}$$

$$a_1[\mathrm{K}_2]_2^T[x]=a_1[0\ \text{-}4\ 7\text{-}10/3\ 9/4\ \text{-}2/5\ 1/6]*\ [x^0\ x^1\ x^2\ x^3\ x^4\ x^5\ x^6]^T\Big|_0^1=$$

$$=a_1(0*1\ \ \text{-}4*1\ \ 7*1\ \ \text{-}10/3*1\ \ 9/4*1\ \ \text{-}2/5*1\ \ 1/6*1)=a_1*101/60, \tag{38}$$

$$a_2[\mathrm{K}_2]_2^T[x]=a_2[0\ 4\ \text{-}12\ 40/3\ \text{-}4\ 13/5\ \text{-}1/3\ 1/7]*\ [x^0\ x^1\ x^2\ x^3\ x^4\ x^5\ x^6]^T\Big|_0^1=$$

$$=a_2(0*1\ 4*1\ \text{-}12*1\ \ 40/3*1\ \text{-}4*1+13/5*1\ \text{-}1/3*1+1/7*1)=a_2*131/35. \tag{39}$$

Вычисленные значения коэффициентов позволяют составить систему

$$\begin{bmatrix} 202/60 & 101/60 \\ 101/60 & 393/105 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 55/60 \\ 19/20 \end{Bmatrix} \tag{40}$$

или

$$\begin{Bmatrix} 3{,}36667 & 1{,}68333 \\ 1{,}68333 & 3{,}74286 \end{Bmatrix} * \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0{,}91667 \\ 0{,}95 \end{Bmatrix}. \tag{41}$$

Решение системы методом исключения после прямого хода дает матрицу

$$\left[\begin{array}{cc|c} 3{,}36667 & 1{,}68333 & 0{,}91667 \\ 0 & 9{,}76671 & 1{,}65537 \end{array}\right], \tag{42}$$

откуда $a_1 = 0{,}18753, \quad a_2 = 0{,}16949,$ (43)

что позволяет вычислить значения функции u_i из уравнения

$$u_i = x_i(1-x_i)(a_1 + a_2 x_i) \tag{44}$$

для точек коллокации x_i=0,25; $x_2 = 0{,}5$; $x_3 = 0{,}75$:

$$u_1 = 0{,}25*0{,}75(0{,}18754+0{,}16984*0{,}25)=0{,}043125, \tag{44а}$$

$$u_2 = 0{,}5*0{,}5(0{,}18754+0{,}16984*0{,}5)=0{,}068115, \tag{44б}$$

$$u_3 = 0{,}75*0{,}25(0{,}18754+0{,}16984*0{,}75)=0{,}05905. \tag{44в}$$

Точные значения функции равны: u_1=0,044014; u_2=0,069747; u_3=0,060056.

В обычном методе коллокации число точек равно числу неизвестных параметров. Когда их число превышает количество неизвестных, параметры a_i определяются путем минимизации в среднеквадратичном смысле. Ошибка ε:

$$\varepsilon = L(u) - p, \tag{45а}$$

а также

$$F = <(L(u)-p)^2,\ \Delta_m>, \tag{45б}$$

где Δ_m – функция Дирака, $m = 1,\dots,M$;

После минимизации (45б) для i-го уравнения получаем

$$<\{L(u)-p\}*\{\partial\, L(u)/\partial\, \alpha_i\},\ \Delta_m>=0, \tag{46}$$

и вместо (46) применение линейного оператора L дает

$$< \{L(\sum a_i * \Phi^k) - p\} * L(\Phi^i), \Delta_m >= 0\,, \quad i = 1,2,..., N\,. \tag{47}$$

Пример. Для уравнения (8)–(10) [4] аппроксимирующей функции (44) невязка

$$\varepsilon = x + (-2 + x - x^2)a_1 + \left(2 - 6x + x^2 - x^3\right)a_2$$

или

$$\varepsilon = x + L(\Phi_1)a_1 + L(\Phi_2)a_2 \tag{48}$$

может быть вычислена в 3-х точках коллокации $x_1 = 1/4$,

$$\varepsilon_1 = \begin{bmatrix} L(\Phi_1)_1 & L(\Phi_2)_1 \\ L(\Phi_1)_2 & L(\Phi_2)_2 \\ L(\Phi_1)_3 & L(\Phi_2)_3 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix}, \tag{49}$$

где $L(\ )^i$ указывает, что функция вычисляется в точке x_i, $i = 1,\,2,\,3$.

$$\varepsilon_1 = x_1 + (-2 + x_1 - x_1^2)\,a_1 + (2 - 6\,x_1 + x_1^2 - x_1^3)\,a_2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 1/4 + a_1[-2\ 1 - 1] * \begin{bmatrix} x_1^0 = 1 \\ x_1^1 = 1/4 \\ x_1^2 = 1/16 \end{bmatrix} + a_2[2 - 6\ 1 - 1] * \begin{bmatrix} x_1^0 = 1 \\ x_1^2 = 1/4 \\ x_1^2 = 1/16 \\ x_1^3 = 1/64 \end{bmatrix} =$$

$$= 1/4 + a_1(-2 + 1/4 - 1) + a_2(2 - 6/2\ 1/16 - 1/64) = 1/4 + (-29/16\,a_1 + 35/64\,a_2). \tag{50а}$$

По аналогии с (50 а) вычисляем ε_2 и ε_3:

$$\varepsilon_2 = 1/2 + (-2\ 1/4 - 1/4)\,a_1 + (2\ -6/2\ 1/4\ -1/8)\,a_2 = 1/2 + (-7/4\,a_1 - 7/8\,a_2), \tag{50б}$$

$$\varepsilon_3 = 3/4 + (-29/16\,a_1 - 151/64\,a_2). \tag{50в}$$

Составим квадрат невязки и минимизируем по параметрам a_1 и a_2:

$$\begin{Bmatrix} L(\Phi_1)_1 & L(\mathit{\Phi}_1)_2 & L(\mathit{\Phi}_1)_3 \\ L(\mathit{\Phi}_2)_1 & L(\mathit{\Phi}_2)_2 & L(\mathit{\Phi}_2)_3 \end{Bmatrix} * \begin{bmatrix} L(\mathit{\Phi}_1)_1 & L(\mathit{\Phi}_2)_1 \\ L(\mathit{\Phi}_1)_2 & L(\mathit{\Phi}_2)_2 \\ L(\mathit{\Phi}_1)_3 & L(\mathit{\Phi}_2)_3 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} L(\Phi_1)_1 & L(\mathit{\Phi}_1)_2 & L(\mathit{\Phi}_1)_3 \\ L(\mathit{\Phi}_2)_1 & L(\mathit{\Phi}_{22} & L(\mathit{\Phi}_2)_3 \end{Bmatrix} * \begin{Bmatrix} -x_1 \\ -x_2 \\ -x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}. \tag{51}$$

$$y_i = (-2 + x_i - x_i^2) * (-2 + x_i - x_2) = (4 - 4\,x_i + 5\,x_i^2 - 2\,x_i^3 + x_i^4) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} -2 & & & & \\ 1 & -2 & & & \\ -1 & 1 & -2 & & \\ 0 & -1 & 1 & -2 & \\ 0 & 0 & -1 & 1 & -2 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 5 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \end{vmatrix} = (4 - 4\,x + 5\,x^2 - 2\,x^3 + x^4). \tag{52}$$

$$(L(\Phi_1)_1)^2 = \psi = y_i^T * y_1 = [4\ -4\ 5\ -2\ 1] * \begin{bmatrix} x^0 = 1 \\ x^1 = 1/4 \\ x^2 = 1/16 \\ x^3 = 1/64 \\ x^4 = 1/256 \end{bmatrix} =$$

$$=(4*1\ -4*1/4+5*1/16\ -2*1/64+1*1/256)=841/256=(29/16*29/16). \qquad (53а)$$

$$(L(\Phi_1)_2)^2 = \psi_2 = y_2^T * y_2 = [4\ -4\ 5\ -2\ 1] * \begin{bmatrix} x^0 = 1 \\ x^1 = 1/2 \\ x^2 = 1/4 \\ x^3 = 1/8 \\ x^4 = 1/16 \end{bmatrix} =$$

$$=(4*1\ -4*1/2+5*1/4\ -2*1/8+1*1/16)=49/16=(7/4*7/4). \qquad (53б)$$

$$(L(\Phi_1)_3)^2 = \psi_3 = y_3^T * y_3 = [4\ -4\ 5\ -2\ 1] * \begin{Bmatrix} x^0 = 1 \\ x^1 = 3/4 \\ x^2 = 9/16 \\ x^3 = 27/64 \\ x^4 = 81/256 \end{Bmatrix} = -841/256=(-29/16*-29/16). \qquad (53в)$$

Для $(L(\Phi_2)_1)^2$ – аналогично.

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} -29/16 & 35/64 \\ -7/4 & -7/8 \\ -29/16 & -151/64 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} -1/4 \\ -1/2 \\ -3/4 \end{Bmatrix}, \qquad (54)$$

откуда

$$\begin{bmatrix} 29/16 & 36/64 \\ -7/4 & -7/8 \\ -29/16 & -151/64 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} -29/16 & -7/4 & -29/16 \\ 35/64 & -7/8 & -151/64 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} -1/4 \\ -1/2 \\ -3/4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}. \qquad (55)$$

Поскольку 29/16=1,8125; 7/4 =1,75; 35/64 =0,5469; 7/8 =0,875; 151/64=2,3594, то

$$(-1{,}8125)^2 + (1{,}75)^2 + (1{,}8125)^2 = 9{,}6334,$$

$$(0{,}5469)^2 + (0{,}875)^2 + (2{,}3594)^2 = 6{,}6314,$$

$$(0{,}5469)*(-1{,}8125)+(0{,}875*1{,}75)+(2{,}3594*1{,}8125)=4{,}8164,$$

$$(-1{,}8125*0{,}5469)+(1{,}75*0{,}875)+(1{,}8125*2{,}3594)=4{,}8164.$$

Вычисление системы (55) дает матрицу

$$\begin{bmatrix} 9{,}6334 & 4{,}8164 \\ 4{,}8164 & 6{,}6314 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2{,}6875 \\ 2{,}0704 \end{Bmatrix}, \qquad (56а)$$

после решения которой

$$\begin{bmatrix} 9,6334 & 4,8164 & | & 2,6875 \\ 0 & -40,6852 & | & -7,0009 \end{bmatrix},$$

получаем значение искомых коэффициентов:

$$a_2=0{,}1722, \quad a_1=0{,}1928. \qquad (56б)$$

После чего значение функции в заданных точках коллокации равно

$$u_i = x_i\,(1\text{-}\,x_i\,)\,(a_1+a_2x_i\,), \qquad (57)$$

$$u_1 = 0{,}25*0{,}5(0{,}1928+0{,}1722*0{,}25)=0{,}0442,$$

$$u_2 = 0{,}5*0{,}5(0{,}1928+0{,}1722*0{,}5)=0{,}0697,$$

$$u_3 = 0{,}75*0{,}25(0{,}1928+0{,}1722*0{,}75)=0{,}06036.$$

Сравнение значений функции, записанных и вычисленных с помощью РМП, со значениями, полученными последовательным способом в тестовом примере, показывает, что они не отличаются.

Замечание. Произведение матрицы на матрицу (вектор), которое сводится к вычислению суммы парных произведений, не описываем. Для этих целей и создан СУ, который лежит в основе вычислительного процесса по технологии ЕТП.

3. Выводы

1. Способ вычислений по методу наименьших квадратов в сочетании с РМП полиномов работает и его можно применять в параллельных структурах со скалярным умножителем в основе ПЭ.
2. Применение предлагаемого способа реализации МНК расширит круг решаемых задач в СП параллельного типа из ПЭ, которые строятся на базе СУ. А реализация ЕТП при решении задач МФ, а также других научно-технических и экономических задач, в сочетании с обработкой информации в виде ССД на параллельной структуре гарантирует дополнительные преимущества.
3. Точность метода не изменяется при переходе от аналитической записи пробных функций (интерполяционных полиномов) к записи в виде РМП. Но обработка сплайнов, как ССД, на параллельных структурах резко повысит производительность вычислительного устройства в целом.
4. В ходе вычислительного процесса за счет хранения коэффициентов, участвующих в расчетах, в каждом из ПЭ резко сокращается число обращений к глобальной памяти Host процессора, обслуживающего СП.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Единый технологический поток в организации вычислений – способ повышения производительности параллельных структур на процессорных элементах транспьютерного типа / Ледянкин Ю.Я. – Киев, 1989. – 20 с. – (Препр. / АН УССР. Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова; 89-57).
2. Ледянкин Ю.Я. К вопросу преобразования и параллельного ввода граничных условий при решении краевых задач в едином вычислительном потоке / Ю.Я. Ледянкин // Математичні машини і системи. – 2012. – № 1. – С. 28 – 35.
3. Ледянкин Ю.Я. Методы взвешенных невязок, коллокаций, моментов. Способ параллельной реализации в едином вычислительном потоке решения задач математической физики / Ю.Я. Ледянкин // Математичні машини і системи. – 2012. – № 2. – С. 17 – 28.
4. Коннор Дж. Метод конечных элементов в механике жидкости / Дж. Коннор, К. Бреббиа; пер. с англ. – Л.: Судостроение, 1979. – 264 с.

Стаття надійшла до редакції 08.08.2012