ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN

KHOA CÔNG NGHỆ THÔNG TIN

Cao Thị Anh Thư

Mô hình tính toán song song giải các bài toán biên phức tạp dựa trên tư tưởng chia miền

Chuyên ngành: Khoa học máy tính
Mã số: 60.48.01

Luận văn thạc sỹ Khoa học máy tính

Người hướng dẫn Khoa học :
TS. Vũ Vinh Quang

Thái Nguyên - 2009

MỤC LỤC

LỜI CẢM ƠN

Sau một thời gian nghiên cứu và thực hiện luận văn thạc sỹ chuyên ngành Khoa học máy tính, đến nay luận văn :"*Mô hình tính toán song song giải các bài toán biên phức tạp dựa trên tư tưởng chia miền"* của tôi đã được hoàn thiện và đầy đủ. Để có được kết quả như mong muốn tôi luôn nhận được sự quan tâm, chỉ bảo sự giúp đỡ từ thầy giáo hướng dẫn: Tiến sĩ Vũ Vinh Quang - Phó trưởng Khoa Công nghệ thông tin- Đại học Thái Nguyên. Nhân dịp này tôi xin trân trọng gửi lời cảm ơn của mình tới các thầy giáo, các vị giáo sư của Viện Công nghệ Thông tin, các thầy cô giáo thuộc Khoa Công nghệ thông tin - Đại học Thái Nguyên đã truyền đạt những kiến thức bổ ích cho các học viên cao học khoá 6 nơi tôi được học tập và nghiên cứu trong suốt 2 năm qua. Tôi xin bày tỏ tình cảm và lời cảm ơn chân thành nhất tới các đồng nghiệp Viễn thông Thái Nguyên, tới bạn bè người thân và gia đình đã khích lệ, động viên, giúp đỡ tôi trong thời gian qua.

Một lần nữa tôi xin gửi lời cảm ơn sâu sắc nhất tới thầy giáo Vũ Vinh Quang đã hướng dẫn, tạo điều kiện để tôi được học tập và nghiên cứu hoàn thiện luận văn của mình.

Tôi xin trân trọng cảm ơn!

Thái Nguyên, ngày 30 tháng10 năm 2009.

Học viên

Cao Thị Anh Thư

ĐẶT VẤN ĐỀ

Lý thuyết về phương pháp chia miền đã được phát triển trong vòng 20 năm qua, xuất phát từ công thức đa miền và phương trình biên chung Steklov-Poincare, các phương pháp chia miền được phát triển từ các sơ đồ lặp cơ bản như: Sơ đồ Dirichlet-Neumann, sơ đồ Neumann-Neumann và sơ đồ Robin được nghiên cứu bởi tác giả trên thế giới. Có thể thấy cơ sở của các phương pháp đều xuất phát từ giá trị điều kiện trên biên phân chia từ đó xây dựng các sơ đồ lặp dạng hai lớp đối với phương trình toán tử. Việc nghiên cứu tính chất hội tụ của các sơ đồ lặp sử dụng kết quả của các không gian Sobolev và toán tử Steklov-Poincare.

Nội dung chính của luận văn là trên cơ sở của lý thuyết chia miền, luận văn đề xuất mô hình tính toán song song giải quyết các bài toán với điều kiện biên rất phức tạp trên tư tưởng chia miền, tiến hành cài đặt thử nghiệm mô hình đồng thời ứng dụng mô hình song song giải quyết một bài toán trong môi trường vật lý bán dẫn. Luận văn cấu trúc gồm 3 chương:

Chương 1: Đưa ra cơ sở về phương pháp lưới, thuật toán thu gọn khối lượng tính toán giải phương trình lưới và cơ sở lý thuyết về các sơ đồ lặp tổng quát.

Chương 2: Trình bày tóm tắt cơ sở toán học về phương pháp chia miền, các sơ đồ lặp cơ bản trong phương pháp chia miền. Một số phương pháp chia miền của các tác giả trên thế giới và đặc biệt là các sơ đồ lặp trên tư tưởng hiệu chỉnh hàm hoặc đạo hàm trên biên phân chia của các tác giả Việt Nam và Nhật Bản, phương pháp chia miền đối với bài toán biên gián đoạn mạnh.

Chương 3: Trên cơ sở của các sơ đồ lặp theo hướng hiệu chỉnh hàm và đạo hàm, luận văn đề xuất sơ đồ tính toán song song dựa trên tư tưởng hiệu chỉnh hàm hoặc đạo hàm, tiến hành tính toán bằng số so sánh hai sơ đồ tính toán song song và đồng thời áp dụng phương pháp song song giải quyết một bài toán cơ học được các tác giả trên thế giới quan tâm.

Các kết quả lý thuyết được kiểm tra bằng các chương trình thực nghiệm lập trình trong môi trường MATLAB trên máy tính PC.

Chương 1

CÁC KIẾN THỨC CƠ BẢN VỀ GIẢI SỐ PHƯƠNG TRÌNH ĐẠO HÀM RIÊNG

Trong chương này, chúng tôi trình bày một số kiến thức liên quan đến việc giải số phương trình đạo hàm riêng bao gồm cơ sở của phương pháp lưới, thuật toán thu gọn khối lượng tính toán và lý thuyết về phương pháp lặp giải phương trình toán tử. Những kiến thức cơ sở và kết quả được tham khảo từ các tài liệu [5, 10, 16, 21].

1.1 Phương pháp sai phân

Lưới sai phân:

Xét bài toán
$$\begin{cases} -\Delta u = f, & x \in \Omega, \\ u = g, & x \in \partial\Omega. \end{cases} \tag{1.1}$$

trong đó $\Omega = \{(x,y) \in R^2, a \le x \le b, c \le y \le d\}$, chọn 2 số nguyên $N > 1$ và $M > 1$, đặt $h = (b-a)/N$ gọi là bước lưới theo x, $k = (d-c)/M$ gọi là bước lưới theo y. Đặt $x_i = a + ih, y_j = c + jk, i = 0..N, j = 0..M$. Mỗi điểm (x_i, y_j) gọi là một nút lưới ký hiệu là nút (i, j). Tập tất cả các nút trong ký hiệu là Ω_{hk}. Nút ở trên biên Γ gọi là nút biên; tập tất cả các nút biên ký hiệu là Γ_{hk}, tập $\bar{\Omega}_{hk} = \Omega_{hk} \cup \Gamma_{hk}$ gọi là một lưới sai phân trên $\bar{\Omega}$.

Hàm lưới: Mỗi hàm số xác định tại các nút của lưới gọi là một hàm lưới, giá trị của hàm lưới $u(x, y)$ tại nút lưới (i, j) viết tắt là $u_{i,j}$. Mỗi hàm $u(x, y)$ xác định tại mọi $(x, y) \in \bar{\Omega}$ tạo ra hàm lưới u xác định bởi $u_{i,j}$.

Bài toán sai phân: Ký hiệu $Lu = f$ là tập các hàm số hai biến x, y có các đạo hàm riêng đến cấp m liên tục trong $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ Giả sử bài toán có nghiệm $u \in C^4(\bar{\Omega})$, khi đó:

$$max_{(x,y)\in\bar{\Omega}} |\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x,y)| \le C_1 = const,\ max_{(x,y)\in\bar{\Omega}} |\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}(x,y)| \le C_2 = const.$$

Do đó theo công thức Taylor ta có:

$$u(x_{i+1}, y_j) = u(x_i) + h, y_j \ = u(x_i, y_j) - h\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + o(h^4) \text{ hay}$$

$$\frac{u(x_{i+1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i-1}, y_j)}{h^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + o(h^2)$$

Một cách tương tự:

$$u(x_i, y_{j+1}) = u(x_i, y_j + k) \ = u(x_i, y_j) + k\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{k^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{k^3}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial y^3} + o(k^4)$$

$$u(x_i, y_{j-1}) = u(x_i, y_j - k) \ = u(x_i, y_j) - k\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{k^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{k^3}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial y^3} + o(k^4)$$

Do đó:

$$\frac{u(x_i, y_{j+1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j-1})}{k^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + o(k^2)$$

Vậy ta có:

$$\frac{u(x_{i+1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i-1}, y_j)}{h^2} + \frac{u(x_i, y_{j+1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j-1})}{k^2} =$$

$$\Delta u + o(h^2 + k^2)$$

Ta đặt:

$$\Delta_{hk} u \equiv \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1} - 1}{k^2}$$

Khi đó chứng tỏ:

$$\Delta_{kh} u = \Delta u + o(h^2 + k^2)$$

Số hạng $O(h^2+k^2)$ là một vô cùng bé bậc hai. Ta nói toán tử Δ_{kh} xấp xỉ toán tử , điều đó cho phép Δ thay phương trình vi phân bằng phương trình sai phân:

$$\Delta_{hk} u = f_{ij}, \quad f_{ij} = f(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \Omega_{hk}$$

tức là:

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j} - 1}{k^2} = f(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \Omega_{hk} \qquad (1.2)$$

đồng thời thay điều kiện biên bằng điều kiện:

$$u_{ij} = g(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \Gamma_{hk} \qquad (1.3)$$

Ta được bài toán sai phân hoàn chỉnh: tìm hàm lưới u tại các nút (i, j) thoả mãn hệ phương trình sai phân (1.2) với điều kiện biên (1.3). Như vậy việc tìm nghiệm xấp xỉ của bài toán vi phân (1.1) với độ chính xác cấp hai được đưa về việc giải bài toán sai phân (1.2) với điều kiện (1.3) bằng các phương pháp đại số.

1.2 Thuật toán thu gọn khối lượng tính toán

Được đề xuất bởi Samarski-Nicolaev.

Bằng các phép biến đổi đơn giản về vec tơ và ma trận, các bài toán sai phân luôn luôn được đưa về hệ phương trình vec tơ 3 điểm thuộc một trong các dạng sau đây:

1.2.1 Bài toán biên thứ nhất

Xét bài toán biên thứ nhất đối với phương trình véc tơ ba điểm

$$-Y_{j-1} + CY_j - Y_{j+1} = F_j \ , 1 \le j \le N-1, \ Y_0 = F_0, \ Y_N = F_N . \qquad (1.4)$$

Trong đó Y_j là véc tơ cần tìm, C là ma trận vuông, F_j là véc tơ cho trước. ý tưởng của phương pháp rút gọn hoàn toàn giải (1.1) là khử liên tiếp các ẩn Y_j đầu tiên với các j lẻ, sau đó từ các phương trình còn lại khử các Y_j

với j là bội của 2, rồi bội của 4,… Mỗi bước khử sẽ giảm được một nửa số ẩn. Như vậy nếu $N = 2^n$ thì sau một số lần khử sẽ còn lại một phương trình chứa véc tơ ẩn $Y_{N/2}$ mà từ đó $Y_{N/2}$ có thể tính được qua Y_0 và Y_N . Sau khi đã có được $Y_0, Y_{N/2}$ và Y_N thì quá trình ngược lại là việc tìm các Y_j với j là bội của $\frac{N}{4}$ rồi bội của $\frac{N}{8}$,… Rõ ràng, phương pháp rút gọn hoàn toàn là một biến thể của phương pháp khử Gauss áp dụng cho bài toán (1.4) trong đó việc khử các biến được thực hiện theo một thứ tự đặc biệt. Sau đây, ta sẽ mô tả cụ thể phương pháp. Giả sử $N = 2^n, n > 0$ Ký hiệu $C^{(0)} = C, F_j^{(0)} = F_j; j = 1, 2, ..., N-1$. Khi đó (1.4) được viết dưới dạng

$$-Y_{j-1} + C^0 Y_j - Y_{j+1} = F_j^{(0)} (1 \leq j \leq N-1),\ Y_0 = F_0,\ Y_N = F_N. \tag{1.5}$$

Bước khử thứ nhất: Từ các phương trình đầu của (1.5) ta khử các Y_j với j lẻ. Muốn vậy ta viết 3 phương trình liên tiếp:

$$-Y_{j-2} + C^{(0)} Y_{j-1} - Y_j = F_{j-1}^{(0)},$$
$$-Y_{j-1} + C^{(0)} Y_j - Y_{j+1} = F_j^{(0)},$$
$$-Y_j + C^{(0)} Y_{j+1} - Y_{j+2} = F_{j+1}^{(0)}$$

Nhân 2 vế của phương trình thứ hai với $C^{(0)}$ vào bên trái rồi cộng cả 3 phương trình lại ta được

$$-Y_{j-2} + C^{(1)} Y_j - Y_{j+2} = F_{j-1}^{(1)}, j = 2, 4, ..., N-2,\ Y_0 = F_0,\ Y_N = F_N \tag{1.6}$$

trong đó: $C^{(1)} = (C^{(}0))^2 - 2E \quad F_j^{(1)} = F_{j-1}^{(0)} + c^{(0)} F_j^{(0)} + F_{j+1}^{(0)}, j = 2, 4, ..., N-2$.

Nhận xét rằng hệ (1.6) chỉ chứa các Y_j với j chẵn, số véc tơ ẩn Y_j là $\frac{N}{2} - 1$. Do đó nếu giải được hệ này thì các Y_j với j lẻ sẽ tìm được từ phương trình