



计算方法丛书

偏微分方程并行 有限差分方法

张宝琳 袁国兴 著
刘兴平 陈 劲

科学出版社

计算方法丛书

偏微分方程并行有限差分方法

张宝琳 袁国兴 著
刘兴平 陈 劲

科学出版社

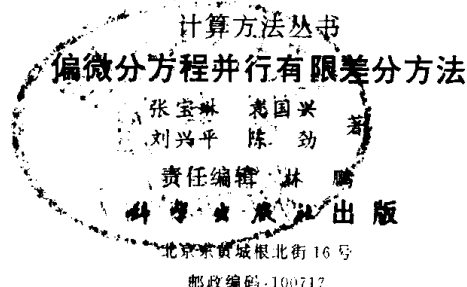
1994

(京)新登字 092 号

内 容 简 介

本书将系统地介绍适合并行计算的求解偏微分方程的有限差分方法, 主要包括: 三对角线性方程组的直接解法、抛物型方程的分组显式方法、抛物型方程的显-隐式交替法、椭圆型方程的并行迭代解法、流体力学问题的并行计算。

本书可供从事大规模科技工程计算的科研人员, 高校有关专业师生阅读。



化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

1994年9月第一版 开本: 850×1168 1/32

1994年9月第一次印刷 印张: 11 1/2

印数: 1-2600 字数: 287 000

ISBN 7-03-004272-7/O · 739

定价: 14.80 元

《计算方法丛书》编委会

主 编

冯 康

副主编

石钟慈 李岳生

编 委

王仁宏 王汝权 孙继广 李德元

李庆扬 吴文达 林 群 周毓麟

席少霖 徐利治 郭本瑜 袁兆鼎

黄鸿慈 蒋尔雄 雷晋干 滕振寰

序

当代科学技术的发展对大规模科学与工程计算的需求是无止境的。在科学与工程广泛领域内都提出了大型科学计算的问题，这些问题的解算需要在高性能并行计算机或向量计算机上进行。为了应用并行计算机完成规模尽可能大的科学与工程计算任务，需要研究求解问题的并行算法，需要最大限度地实现科学计算软件的并行化和向量化处理，使计算机的性能得到充分利用。

国际上，并行机和并行算法的研究已有 20 多年的历史。并行计算机发展很快，并行算法已经成为迅速崛起的新兴学术研究领域，倍受人们关注。目前，我国研制的并行-向量计算机 YH-II 已经问世，各种类型的多处理机系统已经在不少研究单位安装，从事并行计算工作的人员的队伍正在壮大，并行算法研究在我国日趋广泛和活跃。在国内外并行算法的研究热潮中，这本以偏微分方程有限差分并行解法为主题的专著的出版是一件令人高兴的事情。

本书作者较系统地总结和阐述了该领域内理论研究的最新成果，其中包括他们自己的研究成果，总结了他们开展向量计算的初步经验。本书以大型科学与工程计算为目标，既有理论上的创新与探索又有应用方面的实际经验，这种结合大规模科学与工程计算任务选题并对算法进行深入研究的作法是值得提倡的。

本书内容可供从事大型科学与工程计算的科研人员和并行计算专家参考，计算数学专业的高年级大学生、研究生和大学教师都可以阅读本书，相信他们一定能够从中获益。

周 毓 麟

前 言

计算工具对计算方法有决定作用。如同绘画艺术，绘画的技法紧紧依赖于作画工具。20年来，随着并行计算机和向量计算机的出现和发展，并行算法这个新兴学科正在迅速地崛起。区别于单指令流单数据流计算机，使用并行机需要研究和发展并行算法这种新“技法”。传统的计算方法正在经历着深刻的变革，迫切地需要并行化和向量化。只有卓有成效地开展并行算法研究，才可能充分发挥高效能并行计算机的效率，以对付当代高技术研究中大型科学计算问题的挑战。

许多大型科学计算问题都归结为求解复杂的偏微分方程或方程组。因此，数值求解偏微分方程的并行算法研究具有基本的科学意义。本书的主题是偏微分方程有限差分并行新解法与并行计算，介绍近年间国内外有关课题的研究成果，其中包括本书作者的研究成果和经验。全书共分七章。第一、二章分别为并行计算基本知识的概述和若干预备知识。由于偏微分方程隐式差分格式提出了求解三对角线性方程组的代数问题，第三章集中介绍三对角方程组的并行解法。第四、五两章讨论抛物型方程有限差分并行解法，其中第四章主要介绍 D.J.Evans 等人的分组显式(GE)方法，第五章介绍多种形式的交替分段(块)显隐式方法。第六章研究由椭圆型方程差分离散而得到的稀疏线性代数方程组的并行迭代解法。第七章是关于二维流体力学数值计算程序的并行化与向量化，总结了我们在银河机上开展向量计算的初步经验。各章的撰写是分别进行的，具体分工如下：第一章(张宝琳)，第二章(张宝琳、刘兴平)，第三章(张宝琳)，第四、五章(陈劲、张宝琳)，第六章(刘兴平)，第七章(袁国兴)。

我们以为，把分而治之(divide and conquer)作为建立并行算

DA44/05

法的基本策略或原则是正确的。为了实现传统计算方法的并行化,需要在如何“分”和如何“治”上花费力气。当然,为了实现这条基本策略,有时还应配合使用另外一些技巧,例如第六章中的重新编序(reordering),第五章中的交替(alternating)技术等。我们注意到,求解数学物理问题的区域分裂法目前受到颇多关注,发展很快。事实上,本书第五章与第六章的部分内容均与区域分裂法的思想相通。容易看出,在第五章中我们所提出的交替分段(块)显-隐式方法和交替分段(块)Crank-Nicolson方法就是一类典型的离散区域分裂法,其中既有网格区域的分裂也有差分算子的分裂。所不同的是,我们的方法是在传统的有限差分理论基础上发展起来的,它们还便于直接地在多种类型的并行计算机上使用。

当前,国内外并行计算研究发展迅速,有关文献剧增,关心的人愈来愈多。继《Parallel Computing》1984年创刊以来,今年又有两种国际并行计算学术刊物创刊。在此研究热潮之中,我们愿以本书作为引玉之砖奉献给读者,敬请批评指正。

在本书出版之际,我们感谢符鸿源、胡家赣研究员、陈培贤副研究员、陆金甫教授(清华大学)、张景琳、黄清南(西南计算中心)高级工程师等,他们曾经对作者的研究工作给予多方帮助。我们感谢李德元教授和沈隆钧研究员对本书出版的关心和帮助。我们感谢中国科学院院士周毓麟教授对作者并行计算课题研究工作的热情关心和鼓励,感谢他欣然为本书作序。

我们衷心地向系统工程研究所谢铁柱研究员致谢,他仔细审阅了本书初稿并提出了许多宝贵意见和修改的建议。

作 者

于北京应用物理与计算数学研究所
·计算物理实验室

目 录

第一章 引论	1
§ 1. 并行计算新时期	1
§ 2. 向量计算机与并行计算机	3
§ 3. 并行算法	11
§ 4. 并行计算的基本概念	16
参考文献	22
第二章 预备知识	24
§ 1. 有限差分方法基本知识	24
§ 2. 适定的初值问题	33
§ 3. 线性差分格式的相容性、收敛性和稳定性	34
§ 4. 线性代数的基本知识	38
参考文献	50
第三章 三对角线性方程组的直接解法	51
§ 1. 引言	51
§ 2. Stone 算法	51
§ 3. 循环约化方法	56
§ 4. 分裂法	64
§ 5. 分段追赶并行算法	69
§ 6. 块三角方程组的解法	76
参考文献	82
第四章 抛物型方程的分组显式方法	85
§ 1. 引言	85

§ 2. Saul'yev 非对称格式和分组显式(GE)	87
§ 3. 分组显式(GE)方法	94
§ 4. 截断误差分析及稳定性讨论	104
§ 5. 二维 Saul'yev 非对称格式及分组显式(GE)块	113
§ 6. 二维分组显式(GE)方法	119
§ 7. 交替分组显式(AGE)迭代法	129
§ 8. 变系数交替分组显式(AGE)算法	143
参考文献	153
第五章 抛物型方程的显-隐交替法	155
§ 1. 引言	155
§ 2. 交替分段显-隐式方法	157
§ 3. ASE-I 方法的一种特殊情形	161
§ 4. 二维交替分块显-隐式方法	164
§ 5. 第二类 Saul'yev 非对称格式	173
§ 6. 一维交替分段 Crank-Nicolson 方法	177
§ 7. 交替分块 Crank-Nicolson 方法	184
§ 8. 交替分带 Crank-Nicolson 方法	193
§ 9. 变系数交替分段显-隐式 ASE-I 算法(1)	199
§ 10. 变系数交替分段显-隐式 ASE-I 算法(2)	203
§ 11. 变系数交替分段 Crank-Nicolson 算法	209
§ 12. 纯显-隐分段交替方法	218
参考文献	222
第六章 椭圆型方程的并行迭代解法	223
§ 1. 引言	223
§ 2. 椭圆型方程的差分方法	226
§ 3. 迭代法的一般概念	234
§ 4. Jacobi 型迭代方法	237

§ 5. Gauss-Seidel 和 SOR 方法	245
§ 6. 多色排序与 GS, SOR 方法的并行和向量计算	251
§ 7. 交替方向法	264
§ 8. 因式分裂算法的并行计算	269
§ 9. 半迭代法	284
§ 10. 共轭类算法	289
§ 11. 预条件共轭类算法	294
§ 12. 多分裂并行迭代算法	305
参考文献	313

第七章 流体力学问题的并行计算 317

§ 1. 向量化的一些基本方法	319
§ 2. 辐射热传导方程的向量化	329
§ 3. 一类分叉函数的并行算法	338
§ 4. 多处理机的并行计算	348
参考文献	353

第一章 引 论

§ 1. 并行计算新时期

1946年2月世界上第一台电子计算机ENIAC问世,1950年前后包括EDVAC在内的第一批存储程序计算机即冯·诺伊曼(von Neumann)计算机制成。此后电子计算机的发展异常迅速,大约每隔5年计算速度增加10倍。但是,在传统的冯·诺伊曼计算机体系结构下,计算机的运行速度已经接近了物理极限,单靠改进线路的速度已不可能得到所期望的性能。于是,计算机科学家努力探索将并行性引入计算机体系结构的设计,并且于1972年在美国国家航空航天局Ames研究中心安装了世界上第一台并行计算机Illiac IV。这是一台闭合螺线阵列机系统,由64台百万次的处理机组成,每台处理机具有2048个64位字的存储器(图1.1)。这台机器的研制用了6年时间,花费了4倍于合同规定的金额,性能却甚至没有达到它最初提出的十分之一^[1],但是它的影响是深远的。

从Illiac IV的硬件结构设计及其并行语言、软件开发中,人们获得了非常宝贵的经验。Illiac IV的研制成功和投入使用(1975-1981年)代表了科学计算新时期的开始,这个时期就是并行计算的新时期。继这台机器出现之后,向量计算机STAR-100和CRAY-1先后在美国劳伦斯·里弗莫尔(1974年)和洛斯·阿拉莫斯(1976年)两个国家实验室安装。整个70年代,巨型计算机的使用只限于少数国家研究部门,而在80年代,各种类型的并行计算机和向量计算机有了很大的发展,正如人们曾经预言的,本世纪80年代多半是属于并行计算机的10

年。70 年代末，全世界只有几十台巨型机，80 年代初也只有 100 台，但是根据美国一家计算机咨询公司 ATC 的统计，到 1989 年中期，用于科技计算的计算机系统中已有 1480 个系统是并行机，特别是在全部安装的大约 500 个巨型机系统中，约有一半是并行机。还有一点值得注意，即自 1982 年以来小巨型机发展迅速，由于其性能比较好，价格合理，因此深受用户欢迎。所以，在计算机应用的广泛领域里，采用并行计算机或向量计算机进行高效能计算，这将是历史的必然。计算工具的革新对数值方法的发展具有深刻的影响。在各类巨型计算机蓬勃发展的推动下，并行算法的研究已经取得了许多成果，并且正在迅速向纵深发展着。

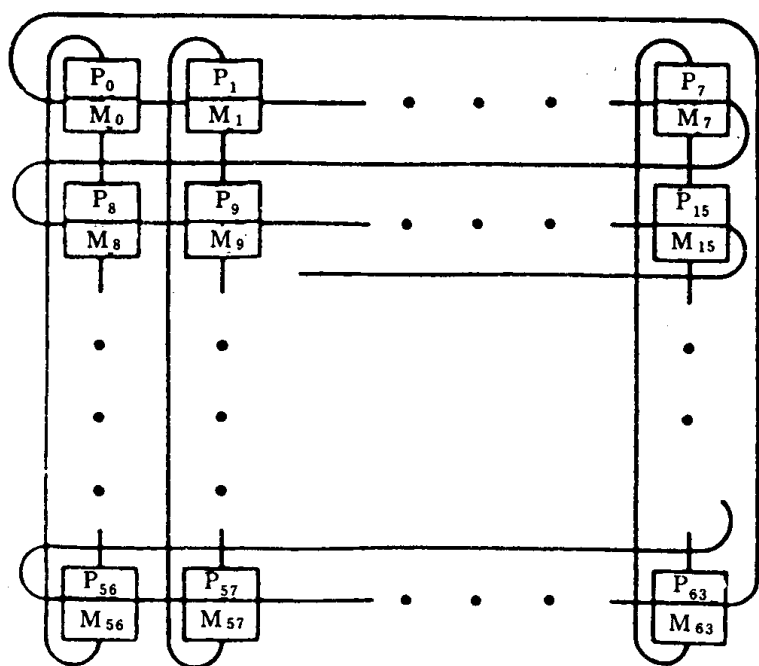


图 1.1 阵列机 Illiac IV

§ 2. 向量计算机与并行计算机

上节提到, 从 70 年代早期至中期, 并行计算机和向量计算机问世。前者为包含可并行运行的多个单处理机的系统, 后者具有可对向量数进行操作的硬件指令^{[2],[3]}。

向量计算机

向量计算机在其结构设计中使用流水线概念。把一个功能部件分成几个不同的部分, 每一部分对一对操作数执行部分功能。图 1.2 所示为一个浮点加法器, 被分成了 6 段, 每段完成浮点加法的一部分功能。因为每段可以对一对操作数进行操作, 所以在某确定时刻可有六对操作数处于流水线之中。

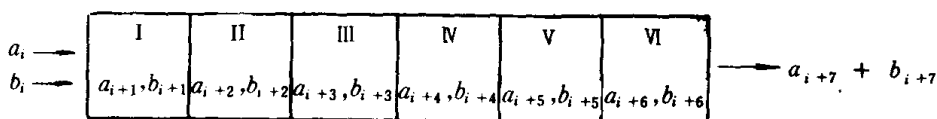


图 1.2 浮点流水线

一般可设某运算流水线有 k 段, 这时对向量数进行操作可能得到比标量计算近于 k 倍加速的时间效益。设被加工的一对操作数在该流水线每段上花费的时间均为 τ , 单位为 ns(纳秒), 时间 τ 称为流水线的时钟周期。我们仍以图 1.2 所示流水线为例以下表列出, 当两个向量操作数 $a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ 和 $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ 相加时, 从运算起始算起流水线各段在时间间隔 $\tau, 2\tau, 3\tau, \dots$ 以内的运行情况(见表 1.1)。

运算流水线实现操作步骤并行处理。我们有下面的执行向量指令的近似时间公式

$$T = S + \tau n, \quad (1.2.1)$$

表 1.1 浮点流水线各段运行情况

时间	等待	I	II	III	IV	V	VI	结果
τ	$\dots a_{n-1}, b_{n-1}$	a_n, b_n	空闲	空闲	空闲	空闲	空闲	无
2τ	$\dots a_{n-2}, b_{n-2}$	a_{n-1}, b_{n-1}	a_n, b_n	空闲	空闲	空闲	空闲	无
3τ	$\dots a_{n-3}, b_{n-3}$	a_{n-2}, b_{n-2}	a_{n-1}, b_{n-1}	a_n, b_n	空闲	空闲	空闲	无
4τ	$\dots a_{n-4}, b_{n-4}$	a_{n-3}, b_{n-3}	a_{n-2}, b_{n-2}	a_{n-1}, b_{n-1}	a_n, b_n	空闲	空闲	无
5τ	$\dots a_{n-5}, b_{n-5}$	a_{n-4}, b_{n-4}	a_{n-3}, b_{n-3}	a_{n-2}, b_{n-2}	a_{n-1}, b_{n-1}	a_n, b_n	空闲	无
6τ	$\dots a_{n-6}, b_{n-6}$	a_{n-5}, b_{n-5}	a_{n-4}, b_{n-4}	a_{n-3}, b_{n-3}	a_{n-2}, b_{n-2}	a_{n-1}, b_{n-1}	a_n, b_n	无
7τ	$\dots a_{n-7}, b_{n-7}$	a_{n-6}, b_{n-6}	a_{n-5}, b_{n-5}	a_{n-4}, b_{n-4}	a_{n-3}, b_{n-3}	a_{n-2}, b_{n-2}	a_{n-1}, b_{n-1}	$a_n + b_n$
8τ	$\dots a_{n-8}, b_{n-8}$	a_{n-7}, b_{n-7}	a_{n-6}, b_{n-6}	a_{n-5}, b_{n-5}	a_{n-4}, b_{n-4}	a_{n-3}, b_{n-3}	a_{n-2}, b_{n-2}	$a_{n-1} + b_{n-1}$ $a_n + b_n$
	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$

其中 S 为起始时间，它定义为从发出执行命令至产生向量运算的第一个结果这段时间，包括了准备好操作数和使流水线“充满”的时间；从流水线中“流”出一个结果所需时间，大约是一个时钟周期； n 为向量操作数的向量长度； T 是执行一条向量指令所花的总时间。

我们看到，起始时间 S 是一种额外开销，如果把它分摊到一对向量操作数的每对分量运算时间上去，当 n 较大时这种开销份额对运算时间影响较小，机器执行向量指令的效率较高，相对标量计算可望达到近于 k 倍的加速；相反，当 n 很小时额外开销份额影响较大，执行向量指令的时间效益一般都不会好。

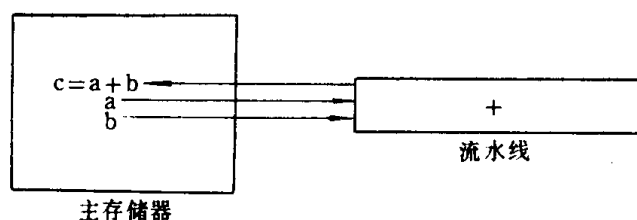


图 1.3 存储器-存储器计算机的加法运算

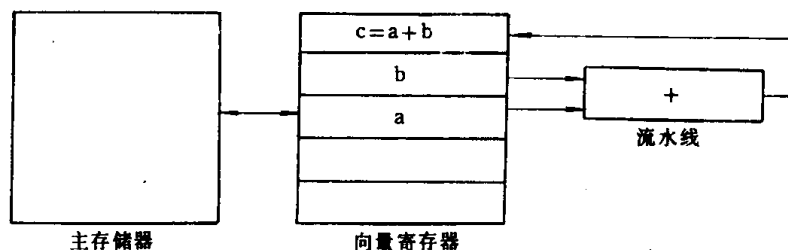


图 1.4 寄存器-寄存器计算机的加法运算

向量计算机最著名的例子，一类是 CDC 公司的 STAR-100, CYBER203 和 CYBER205。STAR-100 于 1974 年

交付使用，并于 70 年代后期和 80 年代初发展为 CYBER203 和 205。另一类是 CRAY 公司的 CRAY-1(1976 年), CRAY X-MP (1982 年), CRAY-2(1985 年)和 CRAY-3。这两类型号计算机系统的处理机在执行向量指令时具有不同的特征。前者向量操作数取自主内存，其计算结果也放入主存储器，称为存储器-存储器处理机；后者的向量操作数不是直接取自主存储器，而是取自快速存储部件向量寄存器，其计算结果也放回向量寄存器。这样的向量寄存器数量不多，向量寄存器由主存储器取数，又把结果存入主存储器。每个向量寄存器可容纳 64 个浮点数，这种向量处理机称为寄存器-寄存器处理机。参阅图 1.3 和 1.4。由于这种结构上的不同特点，前者的启始时间 S 一般比后者大许多，所以为了获得理想的计算效率，在安排向量计算时，对于 CYBER 机器向量长度应该愈长愈好，对于 CRAY 机器来说向量长度最好是 64 的倍数。

并行计算机

并行计算机的基本设想是让若干台处理机彼此协同地共同完成一项计算任务。假如一台处理机完成该任务所需时间为 t ，那么 p 台处理机能在 t/p 时间内完成。其日常生活类比的例子是：一个人需五天干完的活儿，改由五人干则一天可完。然而这种理想的加速情况对并行机来说是很少见的，但它却是研制并行机和发展并行算法的根本目标所在。

并行计算机的一个重要分类法是将其分为单指令流多数据流 (SIMD) 计算机和多指令流多数据流 (MIMD) 计算机两大类。

SIMD 计算机相当于阵列处理机，有多个处理单元 PE，由同一个控制部件管理，所有 PE 接收控制部件发送的相同指令，而对来自不同数据流的数据进行操作。阵列机还可分为字片模式和位片模式。§ 1 提到的 Illiac IV 是字片模式的大型阵列机。ICL DAP 是位阵列机，其单个处理机 PE 只处理二进制一位数字的运算，它是 1976 年在英国研制成功的一种商售计算机，位

阵列机型号还有 80 年代的产品: Goodyear MPP 和 Connection Machine 等, 这类机器具有数量较大的处理单元, DAP 有 4096 个单元, MPP 有 16384 个单元, Connection Machine 有 64936 个单元。

在 80 年代出现的更多的并行计算系统是 MIMD 计算机。这类机器系统结构各异, 型号众多, 在计算机领域形成了一块多处理机的混杂园地。

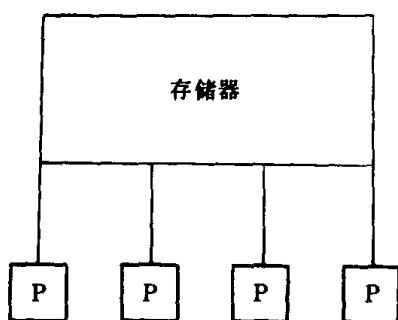


图 1.5 共享存储系统

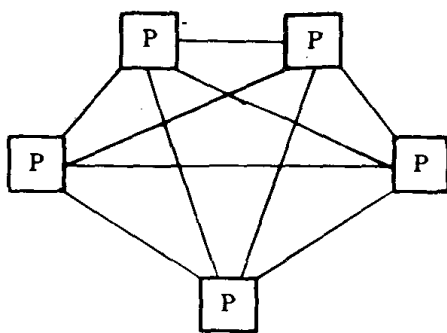


图 1.6 一个完全互连系统

MIMD 型计算机, 实现任务一级并行, 它具有两条基本特征: (1)包含多个处理机的单一计算机; (2)各个处理机之间可以