



005015372

by

Ващенко Геннадий Васильевич

**РАЗРАБОТКА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ОДНОШАГОВЫХ МЕТОДОВ И
КОМПЛЕКСА ПРОГРАММ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ
КИНЕТИКИ И БИОЛОГИИ**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

12 МАР 2012

Красноярск
2012

Работа выполнена в Институте вычислительного моделирования СО РАН и Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Сибирский государственный технологический университет» (г. Красноярск)

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор
Новиков Евгений Александрович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор
Добронец Борис Станиславович

доктор физико-математических наук,
профессор
Задорин Александр Иванович

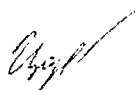
Ведущая организация: ФГБОУ ВПО «Тюменский государственный университет»

Защита диссертации состоится 9 марта 2012 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета ДМ 212.099.06 при Сибирском федеральном университете по адресу: г. Красноярск, ул. Киренского, д. 26, в ауд. УЛК-115

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Сибирского федерального университета.

Автореферат разослан «6» февраля 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Р.Ю. Царев

Общая характеристика работы

Работа относится к актуальной проблематике применения параллельных вычислительных систем в научных исследованиях.

Актуальность темы обусловлена необходимостью эффективного численного решения жестких и не жестких задач большой размерности, возникающих при математическом моделировании биологических и химических процессов. Данная проблема возникает при изучении процессов функционирования геномной сети и проникновения радиоактивных меток в ткань живого организма. Для решения таких задач необходимо использование многопроцессорных вычислительных систем и применение в расчетах экономичных и надежных численных методов. В настоящей работе эффективность алгоритмов интегрирования достигается построением методов с экономичным способом оценки аналога глобальной ошибки и дополнительным контролем устойчивости явных методов. Контроль устойчивости позволяет применять явные методы для решения больших задач умеренной жесткости. Сейчас параллельные алгоритмы с контролем точности и устойчивости, а также на основе L -устойчивых (m,k) -методов с контролем аналога глобальной ошибки отсутствуют. Это обстоятельство делает разработку подобных алгоритмов для моделирования биологических и химических процессов актуальной задачей.

Целью работы является разработка комплекса параллельных программ для моделирования процессов функционирования геномной сети и проникновения радиоактивных меток в ткань живого организма. Для достижения поставленной цели потребовалось решение следующих задач:

1. Построение и реализация параллельных алгоритмов явных методов типа Рунге-Кутты с первого по третий порядок с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы для решения задачи многостадийного синтеза вещества без ветвления и стоков. Анализ эффективности алгоритмов, разработка тестовых задач и исследование комплекса параллельных программ на многопроцессорной вычислительной системе кластерной архитектуры. Исследование комплекса программ на задаче типа реакции-диффузии, возникающей в химической кинетике.

2. Разработка и реализация параллельного алгоритма переменного шага на основе L -устойчивого $(2,1)$ -метода второго порядка, в котором для контроля точности используется оценка аналога глобальной ошибки. Анализ эффективности алгоритма и проверка программного комплекса на тестовых задачах, сравнение с вариантом алгоритма с постоянным шагом.

3. Применение комплекса параллельных программ на основе явных и L -устойчивых методов для моделирования процесса функционирования геномной сети и решения задачи проникновения помеченных радиоактивными метками антител в пораженную опухолью ткань живого организма.

Научная новизна. На основе явных методов типа Рунге-Кутты с первого по третий порядок точности созданы параллельные алгоритмы интегрирования переменного шага для решения задачи синтеза вещества, включая задачу моделирования функционирования геной сети. Разработаны параллельные алгоритмы на основе L -устойчивого (2,1)-метода второго порядка с оценкой аналога глобальной ошибки применительно к решению задачи проникновения антител в ткань живого организма. Проведен анализ эффективности созданных параллельных алгоритмов. Создан комплекс параллельных программ для решения жестких и не жестких задач на вычислительных системах кластерной архитектуры.

Теоретическая значимость. Построены и обоснованы параллельные алгоритмы интегрирования переменного шага на основе схем типа Рунге-Кутты с первого по третий порядок и L -устойчивого (2,1)-метода второго порядка для решения жестких и не жестких задач. Получены оценки эффективности, ускорения и соотношения изoeffективности, связывающие размерности исходной задачи и параллельной вычислительной системы.

Практическая значимость. Разработан комплекс параллельных программ, ориентированный на кластерные системы с распределенной памятью. Комплекс можно применять для численного решения практических задач, в учебном процессе при подготовке специалистов по математическому моделированию химических и биологических процессов, параллельному программированию. Комплексом программ проведено моделирование двух задач из биологии и химической кинетики.

Методы исследования. Применяется теория разностных схем и дифференциальных уравнений, используются методы математического анализа, теории графов, параллельного программирования, линейной алгебры, вычислительного эксперимента и математического моделирования. Эффективность параллельных алгоритмов интегрирования проверяется с помощью численных экспериментов.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались на Всероссийской конференции “Проблемы информатизации региона” (Красноярск, 2009); на XI Международной конференции “Информационно-вычислительные технологии и их приложения” (Пенза, 2009); на IV Международной конференции “Параллельные вычислительные технологии ПАВТ’2010” (Уфа, 2010); на XV Всероссийской конференции “Информационные и математические технологии в науке и управлении” (Иркутск, 2010); на V Международной конференции “Аналитические и численные методы моделирования естественнонаучных и социальных проблем” (Пенза, 2010); на I Международной конференции “Computer Technology and Applications” (Vladivostok, 2010); на VII Межрегиональной школе-семинаре “Распределенные и кластерные вычисления»” (Красноярск, 2010); на ежегодной Международной научной конференции “Приоритетные

направления развития науки, технологий и техники ”(Хургада, Египет, 2010); на семинарах ИВМ СО РАН и СибГТУ (Красноярск).

Работа поддержана грантами РФФИ (проекты 08–01–00621 и 11–01–00106) и грантом Президента (проект НШ–3431.2008.9).

Достоверность результатов обеспечивается корректным применением аппарата вычислительной математики при решении ОДУ большой размерности и методов параллельного программирования. Результаты компьютерного моделирования подтверждается сравнением с расчетами других авторов и с последовательными алгоритмами.

На защиту выносятся:

- Параллельные алгоритмы интегрирования с контролем точности вычислений и устойчивости численных формул на основе схем типа Рунге-Кутты с первого по третий порядок точности, а также параллельный алгоритм на основе L -устойчивого $(2,1)$ -метода второго порядка с выбором шага на основе оценки аналога глобальной ошибки.
- Комплекс параллельных программ для вычислительных систем кластерной архитектуры.
- Результаты расчетов комплексом параллельных программ задач моделирования функционирования геномной сети и решения задачи проникновения помеченных радиоактивными метками антител в пораженную опухолью ткань живого организма.

Личный вклад соискателя. В совместных работах соавтору принадлежат постановка задач и обсуждение результатов исследований. Автором разработаны и обоснованы параллельные алгоритмы, создан комплекс параллельных программ, проведены теоретические исследования, выполнено моделирование двух практических задач.

Публикации. Основные публикации по теме диссертации включают 18 работ, из них 5 в журналах по списку ВАК, 5 в Российских рецензируемых изданиях и 8 в сборниках трудов Всероссийских и Международных конференций.

Общая характеристика диссертации. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения, библиографического списка из 92 наименований. Общий объем работы составляет 132 стр.

Содержание работы

Во введении сформулирована цель работы, обоснованы актуальность темы, приведено краткое описание содержания работы по главам.

В первой главе приведены основные определения и способы оценки аналога глобальной ошибки, которые применяются при выборе величины шага интегрирования. Описаны способы контроля устойчивости явных методов. Рассматриваются вопросы реализации явных методов с контролем точности и устойчивости численных схем на многопроцессорных вычислительных системах.

Вторая глава посвящена построению и реализации параллельных алгоритмов интегрирования переменного шага на основе явных методов типа Рунге-Кутты с применением схем с первого по третий порядок точности. В первом параграфе сформулирован параллельный по пространству алгоритм интегрирования.

Для численного решения задачи Коши

$$y' = f(t, y), y(t_0) = y^{(0)}, t_0 \leq t \leq t_k, \quad (1)$$

$$y' = f(y), y(t_0) = y^{(0)}, t_0 \leq t \leq t_k, \quad (2)$$

где y и f – гладкие N - мерные вектор – функции на $[t_0, t_k]$ применяются явные методы типа Рунге-Кутты вида

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \sum_{i=1}^m d_{mi} K_i^{(n)}, K_i^{(n)} = h_n f(t_n + \gamma_i h_n, y^{(n)} + h_n \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} K_j^{(n)}), \quad (3)$$

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \sum_{i=1}^m d_{mi} K_i^{(n)}, K_i^{(n)} = h_n f(y^{(n)} + h_n \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} K_j^{(n)}), \quad (4)$$

где h_n – шаг интегрирования, $K_i^{(n)}$, $1 \leq i \leq m$, – стадии метода, m – число стадий. Коэффициенты d_{mi} , γ_i , β_{ij} , $1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq i-1$ определяют свойства точности и устойчивости (3) и (4). Для упрощения выкладок все исследования проводились для методов (4), но все построенные численные схемы можно использовать для решения неавтономных систем. Для этого достаточно в (3) подставить γ_i , $1 \leq i \leq m$, определенные следующим образом,

$$\gamma_1 = 0, \quad \gamma_i = \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij}, \quad 2 \leq i \leq m.$$

При распараллеливании по s уравнениям (4) записывается в виде

$$K_{1,s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(y_{s_j}^{(n)}), \quad \sigma_{2,s_j}^{(n)} = y_{s_j}^{(n)} + h \beta_{21} K_{1,s_j}^{(n)},$$

$$K_{i,s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(\sigma_{i,s_j}^{(n)}), \quad \sigma_{i,s_j}^{(n)} = y_{s_j}^{(n)} + h \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} K_{j,s_j}^{(n)}, \quad 2 \leq i \leq m, \quad (5)$$

$$y_{s_j}^{(n+1)} = y_{s_j}^{(n)} + h \sum_{i=1}^m d_{mi} K_{i,s_j}^{(n)}, y_{s_j}^{(0)} = u_{s_j},$$

$y_{s_j}^{(n+1)}, y_{s_j}^{(n)}, f_{s_j}^{(n)}, y_{s_j}^{(0)}, K_{i,s_j}^{(n)}, \sigma_{i,s_j}^{(n)} \in \text{proc}(j)$, $1 \leq j \leq p$; $(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s$, $s = [N/p]$, N – размерность системы (2), p – число процессоров или размерность вычислительной системы.

Алгоритм 1. Пусть для численного решения задачи (2) используется метод (4). Если известно решение $y^{(n)}$ в точке t_n , то каждый процессор $\text{proc}(j)$, $1 \leq j \leq p$, будет содержать j -ю часть компонент вектора $y_{s_j}^{(n+1)}$, $(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s$, после выполнения следующего алгоритма.

Шаг 1. В каждом $\text{proc}(j)$, $1 \leq j \leq p$; $(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s$:

- а) выполнить $recv(y_{s_1, \dots, p}^{(n+1)}; h; 1, \dots, p)$; б) вычислить $K_{1, s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(y^{(n)})$;
 в) вычислить $\sigma_{2, s_j}^{(n)} = y_{s_j}^{(n)} + h\beta_{21}K_{1, s_j}^{(n)}$; г) выполнить $send(\sigma_{2, s_j}^{(n)}; 1, 2, \dots, p)$;
 д) выполнить $recv(\sigma_{2, s_1, \dots, p}^{(n)}; 1, 2, \dots, p)$.

Шаг 2. а) вычислить $K_{i, s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(\sigma_i^{(n)})$; б) вычислить $\sigma_{i, s_j}^{(n)} = y_{s_j}^{(n)} + h \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} K_{j, s_j}^{(n)}$;
 в) выполнить $send(\sigma_{i, s_j}^{(n)}; 1, 2, \dots, p)$; г) выполнить $recv(\sigma_{i, s_1, \dots, p}^{(n)}; 1, 2, \dots, p)$.

... ..

Шаг m . Вычислить $K_{m, s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(\sigma_m^{(n)})$.

Шаг $m+1$. а) вычислить $y_{s_j}^{(n+1)} = y_{s_j}^{(n)} + h \sum_{i=1}^m d_{mi} K_{i, s_j}^{(n)}$;

б) сохранить $y_{s_j}^{(n)} = y_{s_j}^{(n+1)}$; в) выполнить $send(y_{s_j}^{(n+1)}; 1, 2, \dots, p)$.

Шаг $m+2$. Если необходимо, то из $proc(1)$ вывести решение $y^{(n+1)}$.

Шаг $m+3$. Выполнить следующий шаг интегрирования.

Во втором параграфе на основе одностадийной формулы (4) построен метод первого порядка точности с неравенством для контроля точности вычислений. Сформулирован параллельный алгоритм интегрирования. Приближенное решение задачи (2) определяется по формуле

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + K_1^{(n)}, K_1^{(n)} = h_n f(y^{(n)}). \quad (6)$$

Показано, что для контроля точности на шаге имеет место неравенство

$$0.5 h \|f_{n+1} - f_n\| \leq \varepsilon, \quad (7)$$

где ε – требуемая точность расчетов, $\|\cdot\|$ – некоторая норма в R^N , f_n и f_{n+1} – значения правой части системы (1) или (2) соответственно в точках t_n и t_{n+1} .

Параллельный аналог схемы (6) с контролем точности имеет вид

$$y_{s_j}^{(n+1)} = y_{s_j}^{(n)} + h_n f_{s_j}(y^{(n)}), \delta_{s_j}^{(n)} = \left| f_{s_j}^{(n+1)} - f_{s_j}^{(n)} \right|,$$

$$\|\delta_n\|_j = \max_{(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s} \{ |\delta_{s_j}^{(n)}| / (|y_{s_j}^{(n)}| + r) \}, \|\delta_n\| = 0.5 h_n \max_{1 \leq j \leq p} \{ \|\delta_n\|_j \} \leq \varepsilon, \quad (8)$$

$$1 \leq j \leq p, (j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s,$$

где $s = N/p$, если N кратно p и $s = [N/p] + q$ в противном случае.

Алгоритм 2. Пусть для решения (2) используется метод (8), и известно решение $y^{(n)}$ в точке t_n с шагом h_n . Тогда для получения значения $y^{(n+1)}$ в точке t_{n+1} справедлив параллельный алгоритм, в котором на каждом процессоре $proc(j)$ формируется своя j -я часть $y_{s_j}^{(n+1)}$ вектора решения.

Шаг 1. В каждом $proc(j)$, $1 \leq j \leq p$; $(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s$:

а) выполнить $recv(y_{s_j}^{(n)}; h; 1, \dots, p)$; б) вычислить $K_{1, s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(y^{(n)})$;

в) вычислить $y_{s_j}^{(n+1)} = y_{s_j}^{(n)} + h K_{1, s_j}^{(n)}$; г) выполнить $send(y_{s_j}^{(n+1)}; 1, 2, \dots, p)$;

- д) выполнить $recv(y_{s_1, \dots, p}^{(n+1)}; 1, \dots, p)$; е) вычислить $f_{s_j}^{(n+1)}(y^{(n+1)})$;
 ж) определить $\left| \delta^{(n)} \right|_{s_j} = |f_{s_j}^{(n+1)} - f_{s_j}^{(n)}| / (|y_{s_j}^{(n)}| + r)$;
 з) определить $\left\| \delta^{(n)} \right\|_j = \max \left\{ \left| \delta_{(j-1) \cdot s+1}^{(n)} \right|, \left| \delta_{(j-1) \cdot s+2}^{(n)} \right|, \dots, \left| \delta_{j \cdot s}^{(n)} \right| \right\}$;
 и) выполнить $send(\left\| \delta^{(n)} \right\|_j, 1)$.

Шаг 2. В $proc(1)$:

- а) выполнить $accur_control()$; б) вывести вектор $y^{(n+1)}$.

Шаг 3. Выполнить следующий шаг интегрирования.

Получены показатели ускорения и эффективности параллельного алгоритма.

В третьем параграфе на основе двухстадийной численной формулы построен метод второго порядка точности с неравенством для контроля точности и устойчивости вычислений. Сформулирован параллельный алгоритм интегрирования. Численные формулы имеют вид

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + 0.5(K_1^{(n)} + K_2^{(n)}), K_1^{(n)} = h_n f(y^{(n)}), K_2^{(n)} = h_n f(y^{(n)} + K_1^{(n)}). \quad (9)$$

Получены неравенство для контроля точности вычислений

$$0.5 \left\| K_2^{(n)} - K_1^{(n)} \right\| \leq \varepsilon \quad (10)$$

и оценка максимального собственного числа матрицы Якоби $v_n = h \lambda_{n \max}$.

Неравенство для контроля устойчивости имеет вид

$$v_n = 2 \max_{1 \leq i \leq N} (|k_{3,i}^{(n)} - k_{2,i}^{(n)}| / |k_{2,i}^{(n)} - k_{1,i}^{(n)}|) \leq 2, \quad (11)$$

где числу 2 примерно равна длина интервала устойчивости схемы (9), $k_{1,i}^{(n)}$, $k_{2,i}^{(n)}$ и $k_{3,i}^{(n)}$ компоненты векторов $K_1^{(n)}$, $K_2^{(n)}$ и вспомогательного вектора $K_3^{(n)} = h_n f(y^{(n+1)})$. Стадия $K_3^{(n)}$ совпадает с вектором $K_1^{(n)}$ для следующего шага, и поэтому не приводит к увеличению вычислительных затрат. Параллельный аналог метода (9) с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы записывается в виде

$$k_{1,s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(y^{(n)}), \sigma_{2,s_j}^{(n)} = y_{s_j}^{(n)} + h_n k_{1,s_j}^{(n)}, k_{2,s_j}^{(n)} = f_{s_j}(\sigma_{2,s_j}^{(n)}), \varepsilon_{s_j}^{(n)} = \left| k_{2,s_j}^{(n)} - k_{1,s_j}^{(n)} \right|,$$

$$\left\| \varepsilon_n \right\|_j = \max_{(j-1) \cdot s+1 \leq s_j \leq j \cdot s} \left\{ \left| \varepsilon_{s_j}^{(n)} \right| / (|y_{s_j}^{(n)}| + r) \right\}, \left\| \varepsilon_n \right\| = 0.5 h_n \max_{1 \leq j \leq p} \left\{ \left\| \varepsilon_n \right\|_j \right\} \leq \varepsilon, \quad (12)$$

$$y_{s_j}^{(n+1)} = y_{s_j}^{(n)} + 0.5 h_n \sum_{i=1}^2 k_{i,s_j}^{(n)}, k_{3,s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(y^{(n+1)}),$$

$$\left\| v_n \right\|_j = \max_{(j-1) \cdot s+1 \leq s_j \leq j \cdot s} \left\{ \left| k_{3,s_j}^{(n)} - k_{2,s_j}^{(n)} \right| / \left| k_{2,s_j}^{(n)} - k_{1,s_j}^{(n)} \right| \right\}, |v_n| = h_n \max_{1 \leq j \leq p} \left\{ |v_j^{(n)}| \right\} \leq 2, \quad (13)$$

$$y_{s_j}^{(n+1)}, y_{s_j}^{(n)}, f_{s_j}^{(n)}, k_{1,s_j}^{(n)}, \sigma_{2,s_j}^{(n)}, k_{2,s_j}^{(n)} \in proc(j), 1 \leq j \leq p; (j-1) \cdot s+1 \leq s_j \leq j \cdot s.$$

Алгоритм 3. Пусть для решения системы (1) используется метод (9). Если известно решение $y^{(n)}$ в точке t_n , то каждый $proc(j)$, $1 \leq j \leq p$ будет

содержать j -ю часть вектора численного решения, $y_{s_j}^{(n+1)}$, $(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s$, после выполнения алгоритма.

Шаг 1. В каждом $proc(j)$, $1 \leq j \leq p$; $(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s$:

- а) выполнить $recv(y_{s_1, \dots, p}^{(n+1)}, h_n; 1, \dots, p)$; б) вычислить $k_{1, s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(y^{(n)})$;
- в) вычислить $\sigma_{2, s_j}^{(n)} = y_{s_j}^{(n)} + h_n k_{1, s_j}^{(n)}$; г) выполнить $send(\sigma_{2, s_j}^{(n)}; 1, 2, \dots, p)$;
- д) выполнить $recv(\sigma_{2, s_1, \dots, p}^{(n)}; 1, 2, \dots, p)$.

Шаг 2. Вычислить $k_{2, s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(\sigma_2^{(n)})$.

Шаг 3. Вычислить $\varepsilon_{s_j}^{(n)} = |k_{2, s_j}^{(n)} - k_{1, s_j}^{(n)}|$.

Шаг 4. а) определить $\|\varepsilon_n\|_j = \max_{(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s} \{|\varepsilon_{s_j}^{(n)}| / (|y_{s_j}^{(n)}| + r)\}$;

б) выполнить $send(\|\varepsilon_n\|_j; 1)$;

Шаг 5. В $proc(1)$ выполнить $accur_control()$:

а) выполнить $recv(\|\varepsilon_n\|_j; 2, \dots, p)$; б) определить $\|\varepsilon_n\| = 0.5 h_n \max_{1 \leq j \leq p} \{\|\varepsilon_n\|_j\}$;

в) вычислить значение q_1 по формуле $q_1 = (\varepsilon / \|\varepsilon_n\|)^{1/2}$.

г) $q_1 < 1$, то есть точность не выполняется, то перевычислить h_n по формуле $h_n = q_1 h_n$ и $pr = 0$;

д) выполнить $send(h_n, pr; 2, \dots, p)$; е) при $q_1 \geq 1$ шаг h_n прежний, $pr = 1$;

ж) выполнить $send(h_n, pr; 2, \dots, p)$;

Шаг 6. а) выполнить $recv(h_n, pr; 1)$;

б) если $pr = 0$, то переходим в пункт в) шага 1, иначе на шаг 7.

Шаг 7. а) вычислить $y_{s_j}^{(n+1)} = y_{s_j}^{(n)} + 0.5 h_n \sum_{i=1}^2 k_{i, s_j}^{(n)}$;

б) выполнить $send(y_{s_j}^{(n+1)}; 1, 2, \dots, p)$; в) выполнить $recv(y_{s_j}^{(n+1)}; 1, 2, \dots, p)$.

Шаг 8. Вычислить $k_{3, s_j}^{(n)} = h_n f_{s_j}(y^{(n+1)})$.

Шаг 9. Вычислить $v_{s_j}^{(n)} = |k_{3, s_j}^{(n)} - k_{2, s_j}^{(n)}| / |k_{2, s_j}^{(n)} - k_{1, s_j}^{(n)}|$.

Шаг 10. а) определить $|v_n|_j = \max_{(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s} \{v_{s_j}^{(n)}\}$; б) выполнить $send(|v_n|_j; 1)$;

Шаг 11. В $proc(1)$ выполнить $accur_control()$ и $stable_control()$.

Шаг 12. а) выполнить $recv(h_n, pr; 1)$;

б) если $pr = 0$, то переходим в пункт в) шага 1, иначе на шаг 13.

Шаг 13. Выполнить следующий шаг интегрирования.

В четвертом параграфе на основе трехстадийной численной формулы построен метод третьего порядка точности с неравенством для контроля точности вычислений и устойчивости численной схемы. Сформулирован параллельный алгоритм интегрирования. Численные формулы имеют вид

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + (K_1^{(n)} + 2K_2^{(n)} + K_3^{(n)})/6, \quad (14)$$

$$K_1^{(n)} = h_n f(y^{(n)}), K_2^{(n)} = h_n f(y^{(n)} + 0.5K_1^{(n)}), K_3^{(n)} = h_n f(y^{(n)} - K_1^{(n)} + 2K_2^{(n)}).$$

Построены неравенство для контроля точности вычислений

$$\|K_1^{(n)} - 2K_2^{(n)} + K_3^{(n)}\| \leq 6\varepsilon$$

и оценка максимального собственного числа $v_n = h_n \lambda_{n \max}$ матрицы Якоби.

Неравенство для контроля устойчивости имеет вид

$$v_n = 0.5 \max_{1 \leq i \leq N} (|k_{1,i}^{(n)} - 2k_{2,i}^{(n)} + k_{3,i}^{(n)}| / |k_{2,i}^{(n)} - k_{1,i}^{(n)}|) \leq 2.5,$$

где числом 2.5 ограничен интервал устойчивости схемы (14), $k_{1,i}^{(n)}$, $k_{2,i}^{(n)}$ и $k_{3,i}^{(n)}$ компоненты векторов $K_1^{(n)}$, $K_2^{(n)}$ и $K_3^{(n)}$ соответственно. Параллельный вариант метода (14) с контролем точности и устойчивости записывается в виде

$$k_{1,s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(y^{(n)}), \quad \sigma_{2,s_j}^{(n)} = y_{s_j}^{(n)} + h_n 0.5 k_{1,s_j}^{(n)}, \quad k_{2,s_j}^{(n)} = f_{s_j}(\sigma_{2,s_j}^{(n)}),$$

$$\sigma_{3,s_j}^{(n)} = y_{s_j}^{(n)} + h_n (2k_{2,s_j}^{(n)} - k_{1,s_j}^{(n)}), \quad k_{3,s_j}^{(n)} = f_{s_j}(\sigma_{3,s_j}^{(n)}),$$

$$\varepsilon_{s_j}^{(n)} = |k_{3,s_j}^{(n)} - 2k_{2,s_j}^{(n)} + k_{1,s_j}^{(n)}|, \quad \|\varepsilon_n\|_j = \max_{(j-1)s+1 \leq s_j \leq j \cdot s} \{ \varepsilon_{s_j}^{(n)} / (|y_{s_j}^{(n)}| + r) \},$$

$$\|\varepsilon_n\| = h_n \max_{1 \leq j \leq p} \{ \|\varepsilon_n\|_j \} \leq 6\varepsilon,$$

$$y_{s_j}^{(n+1)} = y_{s_j}^{(n)} + h_n (k_{1,s_j}^{(n)} + 2k_{2,s_j}^{(n)} + k_{3,s_j}^{(n)})/6, \quad f_{s_j}^{(n)} = f_{s_j}^{(n)}(y^{(n+1)}),$$

$$v_{s_j}^{(n)} = |k_{1,s_j}^{(n)} - 2k_{2,s_j}^{(n)} + k_{3,s_j}^{(n)}| / |k_{2,s_j}^{(n)} - k_{1,s_j}^{(n)}|,$$

$$|v_n|_j = \max_{(j-1)s+1 \leq s_j \leq j \cdot s} \{ v_{s_j}^{(n)} \}, \quad |v_n| = 0.5 h_n \max_{1 \leq j \leq p} \{ |v_n|_j \} \leq 2.5,$$

$$y_{s_j}^{(n+1)}, y_{s_j}^{(n)}, f_{s_j}^{(n)}, k_{1,s_j}^{(n)}, \sigma_{2,s_j}^{(n)}, k_{2,s_j}^{(n)}, \sigma_{3,s_j}^{(n)}, k_{3,s_j}^{(n)} \in \text{proc}(j), 1 \leq j \leq p; (j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s,$$

Параллельный алгоритм формулируется аналогично алгоритму для двухстадийной схемы (алгоритм 3).

Проанализирована эффективность построенных алгоритмов.

Прогнозируемый шаг h_{n+1} вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max[h_n, \min(h^{ac}, h^{st})], \quad (15)$$

где h_n – последний успешный шаг интегрирования, h^{ac} – прогнозируемый шаг по точности, h^{st} – прогнозируемый шаг по устойчивости. Формула (15) показывает, что контроль устойчивости используется как ограничитель на рост шага, что позволяет сгладить последствия грубости оценок собственных чисел матрицы Якоби. Если шаг по устойчивости меньше последнего успешного, то он не будет уменьшен в силу возможной грубости оценки максимального собственного числа. В то же время шаг не будет и увеличен, потому что не исключается возможность неустойчивости численной схемы.

Если шаг по устойчивости должен быть уменьшен, то в качестве следующего шага будет применяться последний успешный шаг h_n . Данная формула позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость.

Численные эксперименты и теоретический анализ построенных параллельных алгоритмов и полученных выражений для ускорения и эффективности показали, что эффективность алгоритмов зависит от размерности исходной задачи и сложности ее правой части, количества процессоров и типа параллельной вычислительной системы, топологии сетей, порядка точности используемой численной схемы. Для решения конкретной задачи и конкретной численной схемы необходим анализ алгоритма с целью уменьшения коммуникационных затрат. Применение и организация параллельного вычислительного процесса имеет смысл для задач высокой размерности и сложной нелинейной правой частью.

Третья глава посвящена построению параллельных алгоритмов интегрирования на основе L -устойчивого $(2,1)$ -метода второго порядка точности. В первом параграфе приводятся основные сведения о (m,k) -методах. Во втором конструируются последовательный и параллельный алгоритмы на равномерной сетке. В третьем параграфе построены последовательный и параллельный алгоритмы переменного шага. Изучаются (m,k) -методы при $k=1$ и $m=2$, то есть

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + p_1 K_1^{(n)} + p_2 K_2^{(n)}, \quad D_n K_1^{(n)} = h_n f_n, \quad D_n K_2^{(n)} = K_1^{(n)}. \quad (16)$$

Показано, что при значениях коэффициентов $a=1-0.5\sqrt{2}$, $p_1=a$ и $p_2=1-a$ схема (16) является L -устойчивой и имеет второй порядок. Покомпонентная форма записи (16) при найденных значениях для a , p_1 и p_2 имеет вид

$$y_i^{(n+1)} = y_i^{(n)} + a k_{1,i}^{(n)} + (1-a) k_{2,i}^{(n)}, \quad \sum_{j=1}^N a_{ij}^{(n)} k_{1j}^{(n)} = g_i^{(n)}, \quad \sum_{j=1}^N a_{ij}^{(n)} k_{2j}^{(n)} = k_{1i}^{(n)}.$$

Параллельный вариант формул (16) записывается в виде

$$y_{s_j}^{(n+1)} = y_{s_j}^{(n)} + a k_{1,s_j}^{(n)} + (1-a) k_{2,s_j}^{(n)}, \quad \sum_{m=1}^N a_{s_j,m}^{(n)} k_{1,m}^{(n)} = g_{s_j}^{(n)}, \quad \sum_{m=1}^N a_{s_j,m}^{(n)} k_{2,m}^{(n)} = k_{s_j}^{(n)},$$

$$1 \leq j \leq p, \quad (j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s.$$

Матрица D_n размещается строчными блоками размером s , причем $s = N/p$, если N кратно p и $s = [N/p] + q$ в противном случае.

Во втором параграфе сформулирован параллельный алгоритм на равномерной сетке w_n . Построены функции `Par_LU_Decompos()` и `Par_LU_Solution()`, в которых реализованы параллельные версии декомпозиции матрицы D_n и нахождения векторов $K_1^{(n)}$ и $K_2^{(n)}$.

В третьем параграфе получено неравенство $\|K_1^{(n)} - K_2^{(n)}\| \leq \varepsilon$ для контроля точности вычислений и построен параллельный алгоритм переменного шага.

Алгоритм 4. Пусть для численного решения системы (2) используется (2,1)-метод с контролем точности, и известно решение $y^{(n)}$ в точке t_n с шагом h_n . Тогда для получения значения $y^{(n+1)}$ в точке t_{n+1} справедлив параллельный алгоритм, в котором на каждом процессоре $proc(j)$ формируется своя j -я часть вектора решения $y_{s_j}^{(n+1)}$.

Шаг 1. В каждом $proc(j)$, $1 \leq j \leq p$; $(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s$:

а) выполнить $recv(y_{s_{i \dots p}}^{(n+1)}, h; 1, \dots, p)$; б) вычислить $f_{s_j}^{(n)}(y^{(n)})$;

в) вычислить матрицу Якоби J_j , $1 \leq j \leq p$;

Шаг 2. Сформировать матрицу $D_n = E - ah f_n'$.

Шаг 3. Разложить матрицу D_n , $D_n = Par_LU_Decompos()$.

Шаг 4. Вычислить $K_1^{(n)}$, $K_1^{(n)} = Par_LU_Solution()$.

Шаг 5. Вычислить $K_2^{(n)}$, $K_2^{(n)} = Par_LU_Solution()$

Шаг 6. В каждом $proc(j)$, $1 \leq j \leq p$; $(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s$:

д) определить $|\delta^{(n)}|_{s_j} = |k_{2,s_j}^{(n)} - k_{1,s_j}^{(n)}| / (|y_{s_j}^{(n)}| + r)$;

ж) определить $\|\delta^{(n)}\|_j = \max\{|\delta_{(j-1) \cdot s + 1}^{(n)}|, |\delta_{(j-1) \cdot s + 2}^{(n)}|, \dots, |\delta_{j \cdot s}^{(n)}|\}$;

з) выполнить $send(\|\delta^{(n)}\|_j, 1)$.

Шаг 7. В $proc(1)$:

а) выполнить $accur_control()$; б) вывести вектор $y^{(n+1)}$.

Шаг 8. В каждом $proc(j)$, $1 \leq j \leq p$; $(j-1) \cdot s + 1 \leq s_j \leq j \cdot s$:

а) вычислить $y_{s_j}^{(n+1)} = y_{s_j}^{(n)} + p_1 k_{1,s_j}^{(n)} + p_2 k_{2,s_j}^{(n)}$;

б) выполнить $send(y_{s_{i \dots p}}^{(n+1)}; 1, \dots, p)$.

Шаг 9. Выполнить следующий шаг интегрирования.

В четвертом параграфе построены оценки ускорения, эффективности и соотношение изоэффективности.

Реализации параллельных вариантов алгоритма зависят от свойств и размерности исходной задачи, сложности правой части исходной системы, способов организации вычисления матрицы Якоби и факторизации (выбора ведущих элементов) матрицы D_n , но строго последовательный характер вычисления коэффициентов $K_1^{(n)}$ и $K_2^{(n)}$ останется неизменным. Построенное соотношение изоэффективности, связывающее размерность исходной системы и размерности параллельной вычислительной системы может быть использовано, как инструмент сравнения различных параллельных алгоритмов решения одной и той же задачи Коши (2,1)-методом, и подходов к выбору и построению алгоритмов вычисления матрицы Якоби, факторизации D_n и нахождения стадий.

В четвертой главе описан комплекс программ `parODE` для численного моделирования задач, описываемых жесткими и не жесткими системами дифференциальных уравнений. Приводятся результаты моделирования двух

практических задач. В первом параграфе описан комплекс параллельных программ. Структурная схема комплекса приведена на рис. 1.

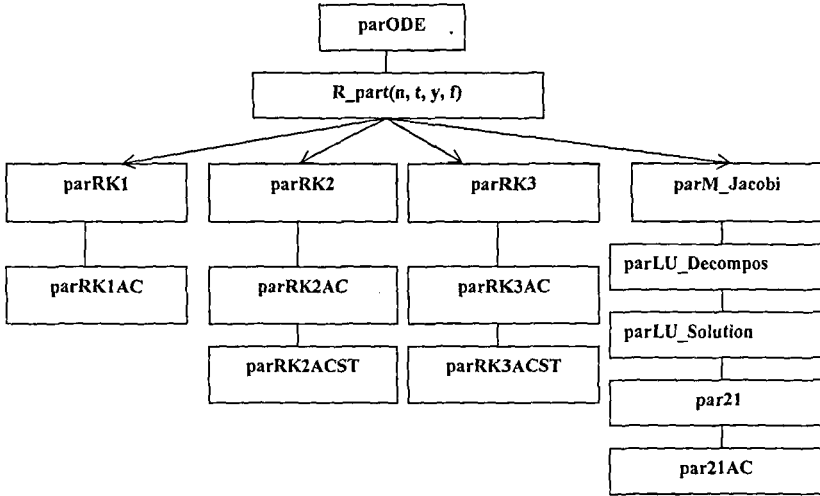


Рисунок 1- Состав комплекса параллельных программ

На рис. 1. приведены параллельные реализации алгоритмов:

- parRK1** – с постоянным шагом на основе явной схемы 1-го порядка;
- parRK1AC** – с переменным шагом на основе явной схемы 1-го порядка;
- parRK2** – с постоянным шагом на основе явной схемы 2-го порядка;
- parRK2AC** – с переменным шагом на основе явной схемы 2-го порядка с контролем точности;
- parRK2ACST** – с переменным шагом на основе явной схемы 2-го порядка с контролем точности и устойчивости;
- parRK3** – с постоянным шагом на основе явной схемы 3-го порядка;
- parRK3AC** – с переменным шагом на основе явной схемы 3-го порядка с контролем точности;
- parRK3ACST** – с переменным шагом на основе явной схемы 2-го порядка с контролем точности и устойчивости;
- par21** – с постоянным шагом на основе (2,1)-схемы;
- par21AC** – с переменным шагом на основе (2,1)-схемы;
- parM_Jacobi** – формирование матрицы Якоби в (2,1)-схеме;
- parLU_Decompos** – параллельная LU-факторизация;
- parLU_Solution** – для нахождения стадий в (2,1)-схеме;
- R_part(n, t, y, f)** – для вычисления правой части системы дифференциальных уравнений; разрабатывается пользователем для каждой конкретной задачи.

Во втором параграфе приведены результаты численного моделирования функционирования геной сети. В предположении однородности пространства в качестве модели функционирования применяется модель необратимого многостадийного процесса синтеза вещества без ветвления и стоков¹, то есть

$$x'_i = f(x_N) - k_{N,i}x_i, \quad x'_i = k_{N,i-1}x_{i-1} - k_{N,i}x_i, \quad 1 \leq i \leq N-1, \\ x'_N = k_{N,N-1}x_{N-1} - g(x_N).$$

Здесь x_i , $1 \leq i \leq N$, – концентрации промежуточных стадий синтеза вещества; x_N – концентрация конечной формы вещества (продукт синтеза); функции $f(x_N)$ и $g(x_N)$ определяют законы инициации синтеза вещества и его утилизацию. Решение задачи определялось при условиях: $k_{N,i} = (N-1)/\tau$, $g(x_N) = \theta x_N$, τ – суммарное время протекания из первого состояния в N -е; $f(x_N) = \alpha / (1 + \beta x_N^\gamma)$, где $\alpha \geq 0$, $\beta \geq 0$, $\gamma > 1$ и $\theta > 0$ – параметры.

Наиболее эффективным на данной задаче является параллельный алгоритм на основе одностадийной формулы с неравенством для контроля точности вычислений и реализованный в программе **parRK1AC** для расчетов на кластере ИВМ СО РАН. Ниже для нее приведены детальные результаты расчетов. Временные затраты приведены в табл. 1, показатели ускорения S_p – в табл. 2, поведение нормы локальной погрешности при требуемой точности $\epsilon = 10^{-2}$ и размерности $N=500$ и $N=10000$ – на рис. 2 и 3.

Таблица 1

Временные затраты на шаге выполнения **parRK1AC**

Число процессоров	N=500 t,сек	N= 1 000 t,сек	N= 10000 t,сек	N= 100 000 t,сек	N= 1 000 000 t,сек
1	$7.86 \cdot 10^{-6}$	$1.63 \cdot 10^{-5}$	$1.84 \cdot 10^{-4}$	$4.8 \cdot 10^{-3}$	$5.1 \cdot 10^{-2}$
2	$3.81 \cdot 10^{-4}$	$3.42 \cdot 10^{-4}$	$7.41 \cdot 10^{-4}$	$3.5 \cdot 10^{-3}$	$2.43 \cdot 10^{-2}$
4	$6.63 \cdot 10^{-4}$	$4.87 \cdot 10^{-4}$	$1.37 \cdot 10^{-3}$	$2.32 \cdot 10^{-3}$	$1.32 \cdot 10^{-2}$
8	$1.19 \cdot 10^{-3}$	$9.17 \cdot 10^{-4}$	$1.64 \cdot 10^{-3}$	$2.12 \cdot 10^{-3}$	$6.18 \cdot 10^{-3}$
10	$2.02 \cdot 10^{-3}$	$1.52 \cdot 10^{-3}$	$1.97 \cdot 10^{-3}$	$2.52 \cdot 10^{-3}$	$9.74 \cdot 10^{-3}$
20	$2.34 \cdot 10^{-3}$	$1.91 \cdot 10^{-3}$	$2.32 \cdot 10^{-3}$	$2.83 \cdot 10^{-3}$	$5.4 \cdot 10^{-3}$

Таблица 2

Показатели ускорения S_p выполнения **parRK1AC**

Ускорение, S_p	N=500	N= 1 000	N= 10000	N= 100 000	N= 1 000 000
S_2	0.022	0.05	0.25	1.4	2.1
S_4	0.012	0.03	0.12	2.07	3.9
S_8	0.0063	0.019	0.61	1.85	4.51
S_{10}	0.004	0.01	0.1	1.9	5.2
S_{20}	0.003	0.009	0.08	1.8	9.4

¹ Лихошвай В. А., Магушкин Ю. Г., Фадеев С. И. Задачи теории функционирования геной сетей // Сиб. журн. индустр. математики. -2003.- Т. 6.- №2(14).-С. 64–80.

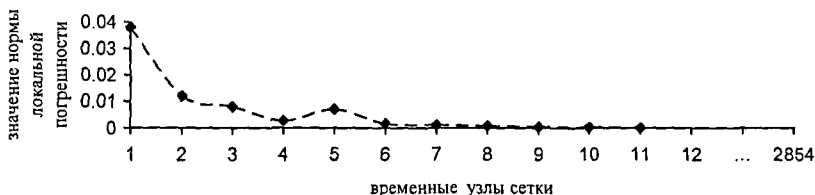


Рисунок 2- Поведение нормы локальной погрешности при заданной $\varepsilon = 10^{-2}$ и размерности системы $N=500$. Минимальное значение $5.9 \cdot 10^{-6}$



Рисунок 3- Поведение нормы локальной погрешности при заданной $\varepsilon = 10^{-2}$ и размерности системы $N=10000$. Минимальное значение $1.4 \cdot 10^{-2}$

Анализ результатов расчетов показал, что коммуникационные затраты составляют значительную часть общего времени решения. Увеличение числа процессоров не всегда приводит к уменьшению временных затрат.

В третьем параграфе приводятся результаты численного моделирования проникновения антител в ткань живого организма. Модель описывается системой одномерных уравнений реакции-диффузии²

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - kuv, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -kuv,$$

которые возникают из химической реакции $A+B \rightarrow C$ с константой скорости реакции k , где A – антитело с радиоактивной меткой, реагирующее с субстратом B – тканью, пораженной опухолью. Концентрации A и B обозначены через u и v соответственно. Изучается полубесконечная пластина, внутри которой субстрат B равномерно распределен. Реагент A , попадая на поверхность пластины, начинает проникать в нее. Для моделирования проникновения исходные уравнения рассматриваются в полосе $S_T = \{(x, t): 0 < x < \infty, 0 < t < T\}$ с начальными $u(x, 0) = 0, v(x, 0) = v_0, x > 0$, и граничными $u(0, t) = \phi(t), 0 < t < T$, условиями, где v_0 константа. После

² Mazzia F., Magherini C. Test Set for Initial Value Problem Solvers // Department of Mathematics, University of Bari and INdAM, Research Unit of Bari, release 2.4, 2008.

некоторых преобразований данная задача методом прямых сводится к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), y(0) = g, y \in R^{2N}, 0 \leq t \leq 20, \quad (17)$$

где N – задаваемый параметр. Функция f определяется формулами

$$f_{2j-1} = \alpha_j \frac{y_{2j+1} - y_{2j-3}}{2\Delta\zeta} + \beta_j \frac{y_{2j-3} - 2y_{2j-1} + y_{2j+1}}{(\Delta\zeta)^2} - ky_{2j-1}y_{2j}, f_{2j} = -ky_{2j}y_{2j-1},$$

где $\alpha_j = 2(j\Delta\zeta - 1)^3 c^2$, $\beta_j = (j\Delta\zeta - 1)^4 c^2$, $1 \leq j \leq N$, $\Delta\zeta = 1/N$, $y_{-1}(t) = \phi(t)$,

$y_{2N+1} = y_{2N-1}$, $g \in R^{2N}$ и $g = (0, v_0, 0, v_0, \dots, 0, v_0)^T$. Функция $\phi(t) = 2$ при $0 < t \leq 5$ и $\phi(t) = 0$ при $5 < t \leq 20$, то есть $\phi(t)$ имеет разрыв первого рода в точке $t=5$. В качестве параметров k , v_0 и c использовались $k=100$, $v_0=1$ и $c=4$. Задача о нахождении разрыва функции $\phi(t)$ при $t=5$ возлагалась на алгоритм управления шагом. Интегрирование осуществлялось с точностью $\epsilon=10^{-2}$ на промежутке $[0, 20]$ с начальным шагом 10^{-5} . Наиболее эффективным на данной задаче является программа **parRK2ACST**. Ниже для нее приведены детальные результаты расчетов. Временные затраты приведены в табл. 3, показатели ускорения S_p – в табл. 4, поведение нормы локальной погрешности при требуемой точности $\epsilon=10^{-2}$ и размерности $N=400$ и $N=1200$ – на рис. 4 и 5.

Таблица 3

Временные затраты на шаге выполнения **parRK2ACST**

Число процессоров	N=400 t,сек	N= 800 t,сек	N= 1200 t,сек	N= 2000 t,сек
1	$3.6 \cdot 10^{-5}$	$7.45 \cdot 10^{-5}$	$1.16 \cdot 10^{-4}$	$1.91 \cdot 10^{-4}$
2	$3.21 \cdot 10^{-5}$	$3.83 \cdot 10^{-5}$	$0.92 \cdot 10^{-4}$	$1.21 \cdot 10^{-4}$
4	$3.43 \cdot 10^{-4}$	$1.62 \cdot 10^{-4}$	$0.68 \cdot 10^{-4}$	$0.63 \cdot 10^{-4}$
8	$5.8 \cdot 10^{-4}$	$5.31 \cdot 10^{-4}$	$0.76 \cdot 10^{-4}$	$0.48 \cdot 10^{-4}$
10	$6.1 \cdot 10^{-3}$	$1.48 \cdot 10^{-3}$	$0.82 \cdot 10^{-4}$	$0.83 \cdot 10^{-4}$
20	$6.8 \cdot 10^{-3}$	$2.7 \cdot 10^{-3}$	$0.91 \cdot 10^{-4}$	$0.9 \cdot 10^{-4}$

Таблица 4

Показатели ускорения S_p выполнения **parRK2ACST**

Ускорение, S_p	N=400	N= 800	N= 1200	N= 2000
S_2	0.49	0.65	0.9	1.57
S_4	0.1	0.45	1.7	2.93
S_8	0.04	0.14	1.52	3.9
S_{10}	0.01	0.05	1.41	2.3
S_{20}	0.005	0.02	1.27	2.1



Рисунок 4- Поведение нормы локальной погрешности при заданной $\varepsilon = 10^{-2}$ и размерности системы $N=400$. Минимальное значение $4 \cdot 10^{-6}$



Рисунок 5- Поведение нормы локальной погрешности при заданной $\varepsilon = 10^{-2}$ и размерности системы $N=1200$. Минимальное значение $4 \cdot 10^{-6}$

Основные результаты

На основе явных методов типа Рунге-Кутты с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы, а также L -устойчивого $(2,1)$ -метода разработаны и реализованы на языке $C++$ параллельные алгоритмы переменного шага для решения жестких и нежестких задач. Создан комплекс параллельных программ для многопроцессорных вычислительных систем кластерной архитектуры, которым проведено моделирование двух практических задач.

1. Построены параллельные явные численные методы с первого по третий порядок с неравенствами для контроля точности вычислений и устойчивости численной схемы, а также L -устойчивый метод второго порядка точности.
2. Разработаны и обоснованы параллельные алгоритмы переменного шага на основе построенных методов, получены теоретические оценки эффективности и масштабируемости для вычислительных систем кластерной архитектуры.
3. Создан комплекс параллельных программ, в состав которого включены программные реализации разработанных алгоритмов. Работоспособность и эффективность комплекса исследована на общепринятых тестовых задачах.
4. Проведено численное моделирование функционирования геномной сети на основе модели многостадийного процесса синтеза вещества без ветвления и стоков, и найдено численное решение задачи проникновения помеченных радиоактивной меткой антител в пораженную опухолью ткань живого организма.

Публикации в журналах из списка ВАК:

1. Ващенко, Г.В. Последовательный (2,1)-метод и его параллельный аналог/ Г.В. Ващенко, Е.А. Новиков // Системы управления и информационные технологии. – 2009. – №4(38). – С. 8–11.
2. Ващенко, Г.В. Параллельный алгоритм (2,1)-метода решения жестких задач/Г.В. Ващенко, Е.А. Новиков//Естественные и технические науки.–2009. –№6.– С. 550–554.
3. Ващенко, Г.В. Параллельная реализация явных методов типа Рунге-Кутты/ Г.В. Ващенко, Е.А. Новиков//Вестник КрасГАУ. –2010. –Вып. №2. –С.14–18.
4. Ващенко, Г.В.Параллельная столбцовая схема и алгоритм (2,1)-метода для решения жестких задач/ Г.В. Ващенко, Е.А. Новиков // Вестник Ижевского государственного технического университета.–2010.–Вып. 1(45). –С.150–153
5. Ващенко, Г.В. Параллельная реализация явного метода Эйлера с контролем точности вычислений/Г.В. Ващенко, Е.А. Новиков//Журнал Сибирского федерального университета. Математика и физика. – 2011. – Т.4. – №1. – С. 70–76.

Публикации в других изданиях:

6. Ващенко, Г.В. Параллельные алгоритмы явных методов Рунге-Кутты/ Г.В. Ващенко, Е.А. Новиков //Сб. науч. тр. IX Всероссийской конф. “Проблемы информатизации региона”. Красноярск, 2009. -С. 334-336.
7. Ващенко, Г.В. О параллельных алгоритмах явных методов типа Рунге-Кутты/Г.В. Ващенко//Сб.ст. XI Междунар. конф. “Информационно -вычислительные технологии и их приложения”. Пенза, РИО ПГСХА. – 2009. – С. 73–77.
8. Ващенко, Г.В.Параллельная строчноориентированная схема (2,1)-метода решения жестких задач/ Г.В. Ващенко //Альманах современной науки и образования. – 2009. – №12(31). – Ч.1. – С. 13–16.
9. Ващенко, Г.В. Параллельный алгоритм L-устойчивого метода второго порядка для решения жестких задач/ Г.В. Ващенко, Е.А. Новиков // Вестник КрасГАУ: Ресурсосберегающие технологии механизации с/х.–2010.–Вып.6.–С.151–156.
10. Ващенко, Г.В.Параллельный алгоритм явного метода Эйлера с контролем точности вычислений/Г.В. Ващенко, Е.А.Новиков//Вестник КрасГАУ: Ресурсосберегающие технологии механизации с/х.–2010.–Вып.6.–С.156–160.
11. Ващенко, Г.В. Параллельный алгоритм L - устойчивого метода второго порядка для численного решения жестких задач/Г.В. Ващенко, Е.А. Новиков //Сб. ст. XV Всерос. конф. “Информационные и математические технологии в науке и управлении”. – Т. 3. – Иркутск. – 2010. – С. 233–237.
12. Ващенко, Г.В. Параллельный явный метод первого порядка с контролем точности/ Г.В. Ващенко // Сб. ст. V Междунар. конф. “Аналитические и численные методы моделирования естественнонаучных и социальных проблем”. Пенза: Приволжский Дом знаний. – 2010. – С. 61–63.

13. Ващенко, Г.В. Параллельные алгоритмы (2,1)-метода решения жестких задач/ Г.В. Ващенко, Е.А. Новиков //Сб. науч. тр. IV Междунар. конф. "Параллельные вычислительные технологии ПаВТ'2010". – Уфа. – 2010. – С. 679.
14. Novikov E.A., Vashchenko G.V. Parallel Algorithm for Explicit Runge-Kutta Method 2nd Order on Accuracy and Stability Control // In.: Proc. I Conf.: Computer Technology and Applications. – Vladivostok. – 2010. – P. 202–204.
15. Novikov E.A., Vashchenko G.V. Parallel explicit Runge-Kutta method 2nd order: implementation of accuracy and stability control: Сб. науч. тр. VII Межрегион. шк.-семинара "Распределенные и кластерные вычисления». – Красноярск: ИВМ СО РАН. – 2010. – С. 40–43.
16. Ващенко, Г.В. Параллельные явные одношаговые методы для численного решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений/ Г.В. Ващенко // Успехи современного естествознания. – 2011. – №1. – С. 75–76.
17. Ващенко, Г.В. Параллельный алгоритм явного трехстадийного метода типа Рунге-Кутты для численного решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений/ Г.В. Ващенко// Международный журнал прикладных и фундамент. исследований. – 2011. – №3.– С. 96–97.
18. Novikov E.A, Vashchenko G.V. Parallel explicit Runge-Kutta method 2nd order: accuracy and stability control // J. of Appl. and Fundamental research. – 2011. – №1. – P. 101–102.

Подписано в печать 27.01.2012
Формат 60x84/16. Усл. печ. л. 1,0
Тираж 100 экз. Заказ 6132

Отпечатано полиграфическим центром
Библиотечно-издательского комплекса
Сибирского федерального университета
660041 Красноярск, пр. Свободный, 82а
Тел/факс (391)206-26-58, 206-26-49
E-mail: print_sfu@mail.ru; <http://lib.sfu-kras.ru>