

РАЗРАБОТКА И ОБОСНОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ОДНОШАГОВЫХ БЛОЧНЫХ МЕТОДОВ ТИПА БИККАРТА

В работе рассматриваются подходы, ориентированные на численное моделирование динамических систем с сосредоточенными параметрами. Для обеспечения возможности параллельной реализации предлагается модификация классических методов типа Биккарта с одной опережающей точкой, позволяющая увеличить количество расчетных точек, формирующих расчетный блок. Для разрабатываемых разностных схем построены системы уравнений, позволяющие определить расчетные коэффициенты для любой размерности блока. Доказана абсолютная устойчивость построенных методов по начальным данным и условная устойчивость по правой части. Исследованы зависимости устойчивости по правой части от количества расчетных точек в блоке. На известных тестовых задачах с произвольной размерностью выполнена параллельная реализация разработанных методов с введением в алгоритмы моделирования процедуры управления шагом интегрирования.

Ключевые слова: задача Коши, метод Биккарта, блочный метод, разностная схема, область устойчивости, шаг интегрирования, матрица перехода.

Введение

Наиболее распространенным классом задач в практике математического моделирования динамических процессов, которые наблюдаются в объектах как с сосредоточенными, так и с распределенными параметрами, является задача Коши

$$x'(t) = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0. \quad (1)$$

Из-за большой размерности и нелинейности систем дифференциальных уравнений (1), которыми часто описываются динамические процессы, поиск аналитических решений таких систем является невозможным, что приводит к необходимости применения численных методов [1 – 2]. Необходимо отметить существование широкого класса задач, решение которых с помощью классического (последовательного) моделирования отмечается неприемлемыми временными затратами, а также недостаточной производительностью [3]. В связи с этим одним из определяющих факторов современного развития области математического моделирования является использование высокопроизводительных параллельных и распределенных вычислительных систем [4]. При этом особую актуальность приобретают вопросы, связанные с разработкой современных параллельных численных методов и адаптацией для параллельной реализации существующих. Как правило, разработка параллельных алгоритмов поиска решений задачи Коши сводится к разработке параллельных алгоритмов поиска решений нелинейных систем алгебраических уравнений, порождаемых численными методами дискретизации [5 – 6]. При этом непосредственное влияние избранного метода на эффективность его параллельной реализации ос-

тается без внимания исследователей. Материал данной статьи является продолжением исследований, проведенных в [7 – 10], и ориентирован на разработку и обоснование методов моделирования динамических систем с расширенной областью устойчивости, обладающих высокими показателями параллелизма.

Генерация разностных схем одношаговых блочных методов типа Биккарта

Как правило, для использования в параллельных вычислительных системах стараются адаптировать многошаговые или многоточечные численные методы решения задачи (1), структура которых хорошо согласуется с топологией процессорного поля. Однако наличие барьеров Далквиста [1 – 2], которые характеризуются ограниченным порядком A – устойчивых многошаговых методов [11] приводит к необходимости разработки новых подходов, связанных либо с использованием производных от решений высших порядков [12], либо с введением дополнительных этапов, стадийной и(или) опережающей точки (методы с забеганием вперед) [13]. Если в качестве опережающей ввести не одну, а несколько точек, блок размерностью s ,

$$T_n^{(s)} = \{t_{n,1}, t_{n,2}, \dots, t_{n,s}\},$$

то приближенные значения решения в них

$$U_n^s = \{u_{n,1}, u_{n,2}, \dots, u_{n,s}\}$$

можно будет определять параллельно из соотношений, построенных по методам типа Биккарта [14], но с увеличенным количеством расчетных точек

$$\frac{1}{\tau} \sum_{j=0}^s a_{i,j} u_{n,j} = f_{n,i}, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (2)$$

где τ – шаг интегрирования,

$$f_{n,i} = f(x(t_n + i\tau), t_n + i\tau),$$

$a_{i,j}, i = 1, 2, \dots, s, j = 1, 2, \dots, s$ – неизвестные коэффициенты разностных уравнений.

Для определения коэффициентов разностной схемы формируются выражения для невязок на решении $x(t)$ исходного дифференциального уравнения

$$r_{n,i} = -\frac{1}{\tau} \sum_{j=0}^s a_{i,j} x_{n,j} + x'_{n,i}, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (3)$$

где $x_{n,j} = x(t_n + j\tau), x'_{n,j} = x'(t_n + j\tau)$.

Для i -го уравнения потребуем его аппроксимации в точке $t_{n,0}$. Раскладывая $x(t_n + j\tau)$ и $x'(t_n + i\tau)$ в ряды Тейлора в окрестности точки $t_{n,0}$, подставляя эти разложения в выражение (3) и группируя члены с одинаковыми степенями по τ , получим систему уравнений для определения коэффициентов разностной схемы

$$\sum_{j=0}^s a_{ij} = 0, \quad (4)$$

$$1 - \sum_{j=0}^s j^* a_{i,j} = 0,$$

$$i^{l-1} - \frac{1}{l} \sum_{j=0}^s a_{i,j} * j^l = 0, \quad i = 1, 2, \dots, s, l = 2, 3, \dots, s.$$

С помощью системы (4) можно получить расчетные коэффициенты для произвольного количества искомым точек в блоке. Таким образом, можно сгенерировать разностную расчетную схему, ориентированную на количество доступных процессоров в параллельной реализации. Так, для размерности блока $s=2$ (соответственно, при наличии двух процессоров) система уравнений примет вид

$$-\frac{1}{2}u_n + \frac{1}{2}u_{n+2} = \tau f_{n+1}, \quad (5)$$

$$\frac{1}{2}u_n - 2u_{n+1} + \frac{3}{2}u_{n+2} = \tau f_{n+2}.$$

При увеличении количества расчетных точек усложняется и система разностных уравнений. Для блока $s=5$ система уравнений будет выглядеть так:

$$-\frac{1}{5}u_n - \frac{13}{12}u_{n+1} + 2u_{n+2} - u_{n+3} + \frac{1}{3}u_{n+4} - \frac{1}{20}u_{n+5} = \tau f_{n+1},$$

$$\frac{1}{20}u_n - \frac{1}{2}u_{n+1} - \frac{1}{3}u_{n+2} + u_{n+3} - \frac{1}{4}u_{n+4} + \frac{1}{30}u_{n+5} = \tau f_{n+2},$$

$$-\frac{1}{30}u_n + \frac{1}{4}u_{n+1} - u_{n+2} + \frac{1}{3}u_{n+3} + \frac{1}{2}u_{n+4} - \frac{1}{20}u_{n+5} = \tau f_{n+3},$$

$$\frac{1}{20}u_n - \frac{1}{3}u_{n+1} + u_{n+2} - 2u_{n+3} + \frac{13}{12}u_{n+4} + \frac{1}{5}u_{n+5} = \tau f_{n+4},$$

$$-\frac{1}{5}u_n + \frac{5}{4}u_{n+1} - \frac{10}{3}u_{n+2} + 5u_{n+3} - 5u_{n+4} + \frac{137}{60}u_{n+5} = \tau f_{n+5}.$$

Оценка устойчивости параллельных блочных методов типа Биккарта по начальным данным

Для оценки устойчивости полученных методов по начальным условиям необходимо определить матрицу перехода соответствующей однородной системы уравнений вида

$$V_{n+1} = S U_n, \quad (6)$$

где $U_n = (u_{n,0})$,

$$V_{n+1} = (u_{n,j}), \quad j = 1, 2, \dots, s, n = 1, 2, \dots,$$

$$S = -A_2^{-1} A_1,$$

$$A_1 = (a_{1,0}, a_{2,0}, \dots, a_{s,0})^T,$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,s} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,s} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{s,1} & a_{s,2} & \dots & a_{s,s} \end{pmatrix}.$$

Устойчивость или неустойчивость уравнения (6) по начальным данным определяется расположением корней характеристического уравнения матрицы \tilde{S} , которая для одношаговых методов с числом расчетных точек s будет сформирована в виде:

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & S_1 \\ 0 & \dots & 0 & S_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & S_s \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Считается [14], что для матрицы \tilde{S} выполнено условие корней, если все корни ее характеристического уравнения лежат внутри или на границе единичного круга, причем на границе круга нет кратных корней. Это условие является необходимым и достаточным для устойчивости уравнения (6) по начальным данным.

Проверим устойчивость двухточечного метода типа Биккарта (5), определяемого следующими расчетными коэффициентами

$$A_1 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)^T, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ -2 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}.$$

Соответственно

$$S = -A_2^{-1} A_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{S} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Приведем \tilde{S} к нормальной жордановой форме:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Характеристическое уравнение матрицы \tilde{S} имеет корни равные $q_1 = 0, q_2 = 1$, поэтому метод устойчив по начальным данным. Прделав аналогичные преобразования для метода типа Биккарта с произвольной размерностью блока, получим форму Жордана для матрицы \tilde{S} вида

$$\begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, характеристическое уравнение матрицы \tilde{S} имеет корни, равные $q_1 = 0, q_2 = 0, \dots, q_s = 1$, что обеспечивает устойчивость разработанных методов по начальным данным.

Оценка устойчивости параллельных блочных методов типа Биккарта по правой части

Для исследования устойчивости по правой части вводится модельное одномерное уравнение вида $x' = \lambda x, t > 0,$ (8)

где λ – комплексное число ($\lambda < 0$).

Численное решение модельного уравнения находится в виде

$$u_{n+1} = M u_n,$$

или

$$u_{n+1} = M^{n+1} u_0,$$

а устойчивость решения при $u_{n+1} \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$ гарантируется при условии $|M| < 1$. Метод считается A -устойчивым, если границей области устойчивости метода в комплексном пространстве является мнимая ось, и $A(\alpha)$ -устойчивым, если область его устойчивости содержит угол $|\arg(-\mu)| < \alpha, \mu = \lambda \tau$. Для рассматриваемых методов типа Биккарта строится функция устойчивости M .

Определяются правые части(2) в соответствии с (8) $f_{n,j} = f(t_{n,j}, u_{n,j}) = \lambda u_{n,j}$ и, после введения замены $\mu = \lambda \tau$, строится система уравнений вида (6), для которой матрица перехода S будет иметь вид:

$$S = -(A_2 - \mu E)^{-1} A_1.$$

Матрица \tilde{S} , по характеристическому уравнению которой можно будет определить тип устойчивости метода, будет определяться представлением (7).

Проверим устойчивость метода типа Биккарта (5). Определим матрицу перехода \tilde{S} :

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\mu-2}{2-3\mu+2\mu^2} \\ 0 & -\frac{\mu+2}{2-3\mu+2\mu^2} \end{pmatrix}$$

и приведем ее к нормальной жордановой форме

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\mu+2}{2-3\mu+2\mu^2} \end{pmatrix}.$$

Характеристическое уравнение матрицы \tilde{S} имеет корни, равные

$$q_1(\mu) = 0, q_2(\mu) = -\frac{\mu+2}{2-3\mu+2\mu^2}.$$

Представим область устойчивости метода, определяемую вторым собственным числом, графически (рис. 1), положив

$$e^{i\varphi} = -\frac{\mu+2}{2-3\mu+2\mu^2}.$$

Границей Γ области устойчивости G является множество таких точек, для которых $|q(\mu)| = 1$. Покажем, что границей Γ является мнимая ось, т.е. множество точек

$$\mu = i\alpha,$$

где α произвольное действительное число.

Областью устойчивости метода является левая полуплоскость $\text{Re}(\mu) < 0$, так как для действительных отрицательных значений μ имеет место $0 \leq q[\mu] < 1$. Следовательно, метод абсолютно устойчив.

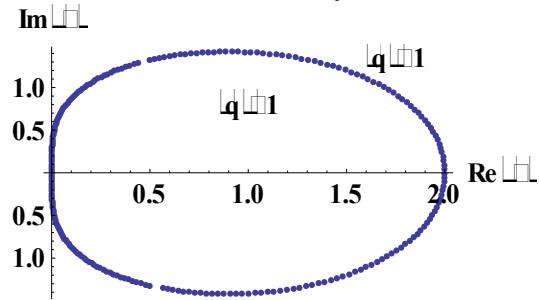


Рис. 1. Область устойчивости блочного метода типа Биккарта, $s=2, \alpha = 90^\circ$

По мере увеличения размерности блока методы характеризуются $A(\alpha)$ – устойчивостью, причем значение угла α сокращается (рис. 2 – 4) от предельного значения $\alpha = 90^\circ$ для случая $s=2$ (рис. 1), до $\alpha = 82.4^\circ$ для случая $s=6$ (рис. 4).

Необходимо отметить, что методы с такими высокими показателями величин углов α , определяющих область устойчивости, могут быть использованы при моделировании объектов, описываемых жесткими, плохо обусловленными, быстро осцилли-

На рис. 6 – 8 приведены диаграммы, характеризующие зависимость размерности шага (Step) и количества осуществленных шагов (nstep) от заданной точности (tol) при моделировании задачи (9) размерности $N=10000$.

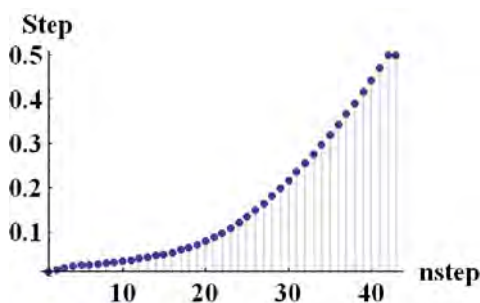


Рис. 6. Вариация шага для задачи (9), $tol = 10^{-3}$

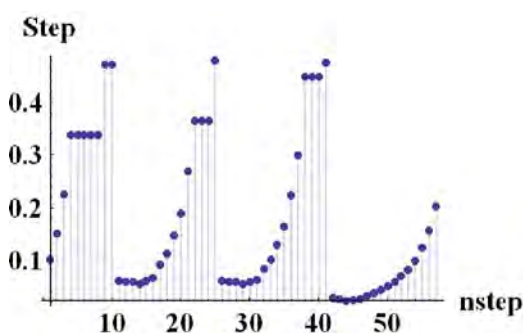


Рис. 7. Вариация шага для задачи (9), $tol = 10^{-6}$

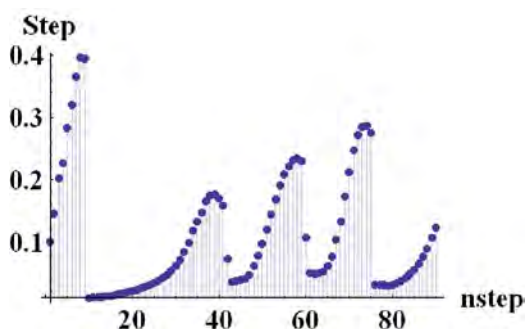


Рис. 8. Вариация шага для задачи (9), $tol = 10^{-9}$

Также при параллельной реализации оценивалось отношение числа принятых шагов к общему числу шагов интегрирования в зависимости от заданной точности (точность представлена логарифмической шкалой). На рис. 9 видно, что коэффициент, характеризующий отношение числа принятых шагов к общему числу шагов интегрирования для всех использованных методов близок к единице, что свидетельствует об эффективности процедуры управления шагом.

Заключение

Работа ориентирована на создание параллельных численных методов моделирования динамических систем с сосредоточенными параметрами. В качестве исходного выбран класс методов с одной

опережающей точкой типа Биккарта и осуществлена попытка увеличить количество расчетных точек, формирующих блок.

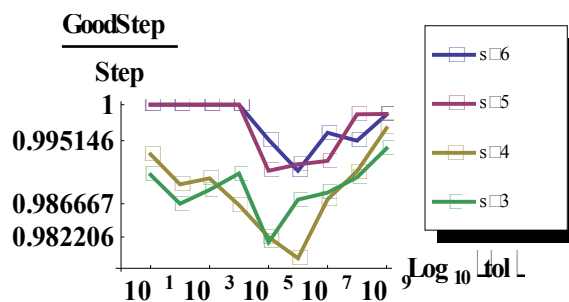


Рис. 9. Диаграммы зависимостей отношения принятых шагов к общему числу от заданной точности для методов типа Биккарта

Использование выражений для невязок и разложений в ряд Тейлора позволило сформировать общий вид системы алгебраических уравнений, позволяющих определить расчетные коэффициенты для любого количества опережающих точек. Для некоторых размерностей блоков приведены сгенерированные разностные расчетные схемы, ориентированные на количество доступных процессоров в параллельной реализации.

Доказана абсолютная устойчивость построенных методов по начальным данным и $A(\alpha)$ – устойчивость по правой части. Показано, что величины углов α сокращаются с ростом размерности блока, но, тем не менее, остаются приемлемыми для моделирования объектов, описываемых жесткими, плохо обусловленными, быстро осциллирующими системами обыкновенных дифференциальных уравнений.

С целью выявления рабочих характеристик и областей применимости разработанных методов в работе выполнена параллельная реализация традиционных тестовых задач, характеризующихся большой размерностью, которая может варьироваться, и наличием жестких компонент. Эффективность разработанных методов оценивалась с помощью сопоставления двух характеристик: погрешности и времени вычисления. Получены оценки, характеризующие качество алгоритмов управления шагом интегрирования, формирующиеся на соотношениях принятых и отброшенных шагов. Для параллельных методов типа Биккарта исследовались зависимости отношения принятых шагов к общему числу от заданной точности и от различного количества расчетных точек. Практически на всех тестовых задачах отношение принятых шагов интегрирования к общему числу просчитанных шагов стремится к единице.

Список литературы

1. Хайпер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие задачи [Текст] / Э. Хайпер, Г. Ваннер. – М.: Мир, 1999. – 685 с.

2. Хайрер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. [Текст] / Э. Хайрер, С. Нерсетт, Г. Ваннер. – М.: Мир, 1990. – 512 с.
3. Воеводин В.В. Параллельные вычисления. [Текст] / В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. – СПб.: BHV-Санкт-Петербург, 2002. – 608 с. – ISBN 5-94157-160-7.
4. The Networking and Information Technology Research and Development Program fy 2013. [Электронный ресурс] // Reports National Coordination Office for Networking and Information Technology Research and Development. – 2013. – Режим доступа: <http://www.nitrd.gov/pubs/2013supplement/FY13NITRDSupplement.pdf>.
5. Фельдман Л.П. Чисельні методи в інформації. [Текст] / Л.П. Фельдман, А.І. Петренко, О.А. Дмитрієва. – К.: Видавнична група BHV, 2006. – 480 с.
6. Дмитрієва О.А. Паралельні різницеві методи розв'язання задачі Коші [Текст] / О.А. Дмитрієва. – Донецьк: ДонНТУ, 2011. – 265 с.
7. Дмитриева О.А. Управление шагом интегрирования при параллельной реализации обобщенных коллокационных блочных методов [Текст] / О.А. Дмитриева // Радиоэлектронные и компьютерные системы. – 2014. – №5 (69). – С. 119-123.
8. Дмитриева О.А. Повышение порядка аппроксимации параллельных блочных одношаговых разностных схем решения задачи Коши [Текст] / О.А. Дмитриева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Обчислювальна техніка і автоматизація». – 2013. – № 1 (24). – С. 104-112.
9. Дмитриева О.А. Оптимизация выполнения матрично-векторных операций при параллельном моделировании динамических процессов [Текст] / О.А. Дмитриева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Обчислювальна техніка і автоматизація». – 2014. – № 1 (26). – С. 34-42.
10. Дмитриева О.А. Параллельный контроль размера шага на основе коллокационных методов с использованием интерполяционных полиномов Эрмита [Текст] / О.А. Дмитриева // Искусственный интеллект. – 2013. – № 3 (61). – С. 488-494.
11. Дмитриева О.А. Разработка многошаговых параллельных коллокационных блочных методов с использованием интерполяционных полиномов Эрмита [Текст] / О.А. Дмитриева // Радиоэлектронные и компьютерные системы. – 2013. – № 5 (64). – С. 243-249.
12. Дмитриева О.А. О введении производных высших порядков в параллельные коллокационные методы решения задачи Коши [Текст] / О.А. Дмитриева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Системний аналіз та інформаційні технології у науках про природу та суспільство» (САІТ-2012). Випуск 2. – Донецьк: ДонНТУ, 2012. – №1(2) – 2(3). – С. 69-74.
13. Дмитриева О.А. О модификации многошаговых коллокационных блочных методов при параллельном моделировании динамических объектов [Текст] / О.А. Дмитриева // Системы обработки информации. – X.: ХУПС, 2013. – Вып. 7(114). – С. 121-126.
14. Bickart T.A. An efficient solution process for implicit Runge-Kutta methods [Текст] / T.A. Bickart // SIAM Journal Numerical Analysis. – 1977. – Vol. 14, № 8. – P. 1022-1027.
15. Самарский А.А. Численные методы [Текст] / А.А. Самарский, А.В. Гулин. – М.: Наука, 1989. – 432 с. – ISBN 5-02-013996-3.
16. Ishak F. Parallel Block Method for Solving Delay Differential Equations [Текст] / F. Ishak, M. B. Suleiman // IMF. – 2010. – Vol. 55, №5. – P. 2707-2772.

Поступила в редколлегию 25.06.2014

Рецензент: д-р техн. наук, проф. Л.П. Фельдман, Донецкий национальный технический университет, Донецк.

РОЗРОБКА Й ОБҐРУНТУВАННЯ ПАРАЛЕЛЬНИХ ОДНОКРОКОВИХ БЛОКОВИХ МЕТОДІВ ТИПУ БІККАРТА

О.А. Дмитрієва

У роботі розглядаються підходи, орієнтовані на чисельне моделювання динамічних систем із зосередженими параметрами. Для забезпечення можливості паралельної реалізації пропонується модифікація класичних методів типу Біккарта з однією випереджуючою точкою, яка дозволяє збільшити кількість розрахункових точок, що формують розрахунковий блок. Для розроблювальних різницевих схем побудовані системи рівнянь, що дозволяють визначити розрахункові коефіцієнти для будь-якої розмірності блоку. Доведено абсолютну стійкість побудованих методів за початковим даними й умовну стійкість за правою частиною. Досліджено залежності стійкості за правою частиною від кількості розрахункових точок у блоці. На відомих тестових задачах з доволіною розмірністю виконано паралельну реалізацію розроблених методів із введенням в алгоритми моделювання процедури керування кроком інтегрування.

Ключові слова: задача Коші, метод Біккарта, блоковий метод, різницева схема, область стійкості, крок інтегрування, матриця переходу.

DEVELOPMENT AND SUBSTANTIATION OF PARALLEL STEP BLOCK METHODS OF BICKART TYPE

O.A. Dmitrieva

The paper discusses approaches focused on the numerical simulation of dynamic systems with lumped parameters. In order to enable the parallel implementation the modification of the classical methods of Bickart type with one advanced point has been proposed, which allows one to increase the number of calculation points, forming the calculation block. For the developed difference schemes the systems of equations have been built, which allow one to determine the calculation coefficients for any dimension of the block. The absolute stability of the developed methods on the initial data and the conditional stability on the right-hand side have been proved. The dependence of the stability on the right-hand side on the number of calculation points in a block has been studied. Parallel implementation of the developed methods has been carried out on well-known test problems with an arbitrary dimension with introducing into simulation algorithms the procedure of integration step control.

Keywords: the Cauchy problem, the Bickart method, a block method, a difference scheme, the stability domain, the integration step, the transition matrix.