

СХОДИМОСТЬ И ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ОДНОШАГОВЫХ БЛОЧНЫХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С СОСРЕДОТОЧЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Фельдман Л.П.

Кафедра ПМИИ ДонГТУ

E-mail: feldman@r5.dgtu. donetsk.ua

Abstract

Feldman I. Convergence and error estimation of parallel one-step block methods of simulation of dynamic lumped-parameter systems. In paper being prolongation of operation [1], the output of the formulas and error estimation of approximating for one-step multipoint algorithm is reduced. The convergence is demonstrated and the error estimation of a method is obtained. The acceleration of algorithm is defined in view of time of exchanges in vector SIMD. The outcomes of solution of the test problem are reduced.

Введение

Создание и применение современных супер-компьютеров стало в настоящее время одним из основных направлений в ведущих странах мира. Перспективы развития супер-ЭВМ в ближайшем будущем в большей степени будут определяться успехами вычислительной математики, а не успехами электроники. Поэтому, создание, всесторонний анализ и достаточное обоснование предлагаемых параллельных методов и алгоритмов, ориентированных на эффективное использование в многопроцессорных системах, является одной из важнейших работ по развитию параллельных вычислительных технологий.

1. Одношаговый блочный метод

Для задачи Коши

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad x(t_0) = x_0 \quad (1)$$

рассмотрим одношаговый k точечный разностный метод [1]. Множество M точек равномерной сетки $t_m, m=1, 2, \dots, M$ и $t_M=T$ с шагом τ разобьем на блоки, содержащие k точек, $kN=M$. В каждом блоке введем номер точки $i=0, 1, \dots, k$ и обозначим через $t_{n,i}$ точку n -го блока с номером i . Точку $t_{n,0}$ назовем началом блока n , а $t_{n,k}$ – концом блока. Очевидно, что имеет место $t_{n,k} = t_{n+1,0}$. Условимся начальную точку в блок не включать. В рассматриваемом методе только последняя точка предшествующего блока используется в следующем блоке. Уравнения одношагового разностного метода для блока n с учетом введенных обозначений можно записать в виде

$$\frac{u_{n,i} - u_{n,0}}{\tau} = b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j}, \quad i = \overline{1, k}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2)$$

где $F_{n,i} = f(t_{n,i}, u_{n,i})$.

1.1. Погрешность аппроксимации одношагового блочного метода

Выражение для погрешности аппроксимации рассматриваемого разностного метода (2) на решении уравнения (1) имеет вид [2]

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

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

Разлагая $x(t_n + i\tau)$ и $x'(t_n + j\tau)$ в ряды Тейлора в окрестности точки t_n , получим

$$\frac{x_{n,i} - x_{n,0}}{i\tau} = \sum_{l=1}^p \frac{(i\tau)^{l-1}}{l!} x^{(l)}_{n,0} + O(\tau^p), \quad i = \overline{1, k}, \quad x'_{n,j} = \sum_{l=1}^p \frac{(j\tau)^{l-1}}{(l-1)!} x^{(l)}_{n,0} + O(\tau^p), \quad j = \overline{1, k}.$$

Подставляя эти разложения в выражение (3) для погрешности аппроксимации будем иметь

$$r_{n,i} = -\sum_{l=1}^p \frac{(i\tau)^{l-1}}{l!} x^{(l)}_{n,0} + b_i x'_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} \sum_{l=1}^p \frac{(j\tau)^{l-1}}{(l-1)!} x^{(l)}_{n,0} + O(\tau^p), \quad i = \overline{1, k}.$$

Сгруппируем члены с одинаковыми производными и изменим порядок суммирования в последнем выражении, тогда получим

$$r_{n,i} = \left(b_i + \sum_{j=1}^k a_{i,j} - 1 \right) + \sum_{l=2}^p \frac{\tau^{l-1}}{(l-1)!} x^{(l)}_{n,0} \left(\sum_{j=1}^k j^{l-1} a_{i,j} - \frac{i^{l-1}}{l} \right) + O(\tau^p), \quad i = \overline{1, k}. \quad (4)$$

Отсюда следует, что погрешность аппроксимации имеет порядок p , если выполнены условия

$$b_i + \sum_{j=1}^k a_{i,j} = 1, \quad \sum_{j=1}^k j^{l-1} a_{i,j} = \frac{i^{l-1}}{l}, \quad i = \overline{1, k}, \quad l = \overline{2, p}. \quad (5)$$

Система уравнений (5) для каждого фиксированного i содержит p уравнений и $k+1$ неизвестных $b_i, a_{i,1}, a_{i,2}, \dots, a_{i,k}$. Потребуем, чтобы $p=k+1$, тогда из системы (5) можно будет определить все неизвестные коэффициенты b_i и $a_{i,j}, i, j = \overline{1, 2, \dots, k}$, которые в дальнейшем будем считать элементами вектора \mathbf{b} матрицы \mathbf{A} соответственно. Отсюда следует, что *наивысший порядок аппроксимации одношагового k -точечного блочного метода равен $k+1$* . Его погрешность в соответствии с (4) определяется формулой

$$r_{n,i} = \frac{\tau^{k+1}}{(k+1)!} x^{(k+2)}_{n,0} \left[\sum_{j=1}^k j^{k+1} a_{i,j} - \frac{i^{k+1}}{k+2} \right] + O(\tau^{k+2}), \quad i = \overline{1, k}.$$

1.2. Сходимость и оценка погрешности одношагового блочного метода

Обозначим через \mathbf{u}_n - вектор значений приближенного решения в точках n -го блока с компонентами $u_{n,i}, i = \overline{1, 2, \dots, k}$ и вектор \mathbf{u}'_n , компонента которого $u'_{n,i} = f(t_{n,i}, u_{n,i}) = F_{n,i}$ равна значению правой части уравнения (1) в точке, соответствующей значению приближенного решения. Запишем систему (2) в векторной форме

$$\mathbf{D}_k^{-1}(\mathbf{u}_n - u_{n,0} \mathbf{e}) / \tau = \mathbf{u}'_{n,0} \mathbf{b} + \mathbf{A} \mathbf{u}'_n, \quad (7)$$

где $\mathbf{D}_k = (d_{ii})$ - диагональная матрица с элементами $d_{ii} = i, i = \overline{1, 2, \dots, k}$, \mathbf{e} - единичный вектор столбец, \mathbf{b} - вектор столбец с компонентами b_i .

Обозначим через \mathbf{x}_n - вектор значений точного решения задачи (1) в точках блока n . Получим уравнение, которому удовлетворяет вектор погрешностей в блоке

$$\mathbf{z}_n = \mathbf{u}_n - \mathbf{x}_n.$$

Подставим в левую часть уравнения (7) $\mathbf{u}_n = \mathbf{z}_n + \mathbf{x}_n$, добавим к правой части и вычтем из нее выражение $\mathbf{x}'_{n,0} \mathbf{b} + \mathbf{A} \mathbf{x}'_n$, тогда уравнение для погрешности примет вид

$$\mathbf{D}_k^{-1}(\mathbf{z}_n - z_{n,0} \mathbf{e}) / \tau = -\mathbf{D}_k^{-1}(\mathbf{x}_n - x_{n,0} \mathbf{e}) / \tau + \mathbf{x}'_{n,0} \mathbf{b} + \mathbf{A} \mathbf{x}'_n + (\mathbf{u}'_{n,0} - \mathbf{x}'_{n,0}) \mathbf{b} + \mathbf{A}(\mathbf{u}'_n - \mathbf{x}'_n).$$

Входящее в правую часть выражение

$$\mathbf{r}_n = -\mathbf{D}_k^{-1}(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n,0} \mathbf{e}) / \tau + \mathbf{x}'_{n,0} \mathbf{b} + \mathbf{A} \mathbf{x}'_n \quad (8)$$

представляет собой вектор невязок разностных уравнений (2) на точном решении уравнения (1). Поскольку разностные уравнения (7) аппроксимируют исходное уравнение в точках блока с порядком $O(\tau^{k+1})$, то имеет место оценка

$$\|\mathbf{r}_n\|_c = O(\tau^{k+1}). \quad (9)$$

Оставшиеся члены правой части уравнения для погрешности обозначим через

$$\omega_n = (\mathbf{u}'_{n,0} - \mathbf{x}'_{n,0}) \mathbf{b} + \mathbf{A}(\mathbf{u}'_n - \mathbf{x}'_n). \quad (10)$$

Тогда уравнение для погрешности запишется короче

$$\mathbf{z}_n = \mathbf{z}_{n,0} \mathbf{e} + \tau \mathbf{D}_k (\mathbf{r}_n + \omega_n). \quad (11)$$

Вектор функция ω_n зависит не линейно от погрешности \mathbf{z}_n . Вид этой зависимости определяется функцией $f(t, x)$. В дальнейшем будем предполагать, что $f(t, x)$ удовлетворяет условию Липшица по второму аргументу, т. е.

$$|f(t, x_1) - f(t, x_2)| \leq L |x_1 - x_2| \quad (12)$$

для всех t, x_1, x_2 из рассматриваемой области. Согласно формуле конечных приращений Лагранжа для компоненты i имеем

$$u'_{n,i} - x'_{n,i} = f(t_{n,i}, u_{n,i}) - f(t_{n,i}, x_{n,i}) = l_{n,i} z_{n,i},$$

где

$$l_{n,i} = f_x(t_{n,i}, x_{n,i} + \theta z_{n,i}), \quad 0 \leq \theta \leq 1, \quad i = \overline{0, k}.$$

Подставляя последние в (10), получим

$$\omega_n = \mathbf{z}_{n,0} \mathbf{b} + \mathbf{A} \mathbf{D}_1 \mathbf{z}_n,$$

где \mathbf{D}_1 – диагональная матрица с элементами $d'_{i,i} = l_{n,i}$, $i = 1, 2, \dots, k$ и ее норма имеет в силу (12) следующую оценку

$$\|\mathbf{D}_1\|_c \leq L \quad (13)$$

Заменим ω_n в уравнении (11) полученным для него выражением, запишем его в виде

$$\mathbf{z}_n = \tau \mathbf{D}_k \mathbf{r}_n + \mathbf{z}_{n,0} (\mathbf{e} + \tau \mathbf{D}_k \mathbf{b}) + \tau \mathbf{D}_k \mathbf{A} \mathbf{D}_1 \mathbf{z}_n.$$

Введем норму

$$\|\mathbf{z}_n\| = \max_{1 \leq i \leq k} |z_{n,i}|.$$

Далее, учитывая (9) и (13) и то, что $|z_{n,0}| \leq \|\mathbf{z}_{n-1}\|$, получим неравенство

$$\|\mathbf{z}_n\| \leq C \tau^{k+2} + (1 + k\tau \|\mathbf{b}\|_c) \|\mathbf{z}_{n-1}\| + kL \tau \|\mathbf{A}\|_c \|\mathbf{z}_n\|,$$

которое преобразуем к виду

$$(1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c) \|\mathbf{z}_n\| \leq C \tau^{k+2} + (1 + k\tau \|\mathbf{b}\|_c) \|\mathbf{z}_{n-1}\|.$$

Если на τ наложить ограничение

$$\tau < \tau_0 = \frac{1}{kL \|\mathbf{A}\|_c}, \quad (14)$$

то оценка, связывающая нормы погрешностей соседних блоков примет вид

$$\|\mathbf{z}_n\| \leq (C \tau^{k+2} + (1 + k\tau \|\mathbf{b}\|_c) \|\mathbf{z}_{n-1}\|) / (1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c) \quad (15)$$

т. к. в силу условия (14) имеет место $1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c > 0$. Подставляя последовательно в (15) значения погрешностей для блоков $n-1, n-2, \dots, 1$, получим

$$z_n \leq [C\tau] \left(1 + \frac{1+k\tau b_c}{1-kL\tau A_c} + \left(\frac{1+k\tau b_c}{1-kL\tau A_c} \right)^2 + \dots + \left(\frac{1+k\tau b_c}{1-kL\tau A_c} \right)^{n-1} \right) + \left(\frac{1+k\tau b_c}{1-kL\tau A_c} \right)^n \|z_0\| / (1-kL\tau A_c)$$

Используем то, что $\|z_0\|=0$ и упростим последнее выражение

$$z_n \leq C\tau^{k+1} \frac{\left(\frac{1+k\tau b_c}{1-kL\tau A_c} \right)^n - 1}{\left(\|b\|_c + L\|A\|_c \right) k} \leq C\tau^{k+1} \frac{E^{kn\tau(\|b\|+L\|A\|)} - 1}{\left(\|b\|_c + L\|A\|_c \right) k}$$

Последнее неравенство справедливо для любого n , $0 < n \leq N$, из этого следует:

$$\|z\|_c \leq C\tau^{k+1} \frac{E^{T(\|b\|+L\|A\|)} - 1}{\left(\|b\|_c + L\|A\|_c \right) k} \tag{16}$$

Таким образом, доказана

Теорема. Пусть правая часть уравнения (1) $f(t,x)$ удовлетворяет условию Липшица по второму аргументу с константой L и r_n – невязка одношагового k -точечного блочного метода (2), определенная согласно (3) с оценкой (9). Тогда при

$$\tau < \tau_0 = \frac{1}{kL\|A\|_c} \text{ и } kn\tau \leq T$$

для погрешности метода имеет место оценка

$$\|z\|_c \leq C\tau^{k+1} \frac{E^{T(\|b\|+L\|A\|)} - 1}{\left(\|b\|_c + L\|A\|_c \right)}$$

Следствие. Если разностное уравнение (2) аппроксимирует исходное уравнение (1), то решение разностной задачи (2) сходится при $\tau \rightarrow 0$ к решению исходной задачи (1), причем порядок точности совпадает с порядком аппроксимации(9).

1.3. Алгоритм параллельного решения нелинейной разностной задачи

Для вычисления приближенных значений решения задачи Коши (1) необходимо решить нелинейную систему уравнений (2). Используем для этого следующий итерационный процесс

$$u_{n,i,0} = u_{n,0} + i\tau F_{n,0}, \quad i = \overline{1, k}, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$u_{n,i,s+1} = u_{n,0} + i\tau \left(b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,i,s} \right), \quad i = \overline{1, k}, \quad s = \overline{0, k-1}, \quad n = 1, 2, \dots \tag{17}$$

который позволяет проводить вычисления параллельно для каждого узла блока. Для сходимости итерационного процесса достаточно выполнения условия (14).

Покажем, что после выполнения $k+1$ шагов вычислений по формулам (17) локальная ошибка в узлах блока будет иметь порядок $O(\tau^{k-2})$. Обозначим через $u_{n,i}^{[p]}$ значение решения в точке $t_{n,i}$, найденное с локальной погрешностью $O(\tau^p)$, а через

$$F_{n,i}^{[p]} = f(t_{n,i}, u_{n,i}^{[p]}), \quad (18)$$

вычисленное при этом значение правой части уравнения (1). Допустим, что значения $u_{n,0}$ вычислены с локальной ошибкой $O(\tau^{k+2})$, тогда и правая часть уравнения может быть вычислена с такой же погрешностью, т. е. имеем $F_{n,0}^{[k+2]}$. Выполнив первый шаг вычислений по первой формуле (17), получим

$$u_{n,i,0}^{[2]} = u_{n,0}^{[k+2]} + i\tau F_{n,i,0}^{[k+2]}, \quad i = \overline{1, k},$$

так как локальная ошибка формулы Эйлера имеет порядок $O(\tau^2)$. Параллельные вычисления по второй формуле (17) при $s=0$ дадут следующие результаты:

$$u_{n,i,1}^{[3]} = u_{n,0}^{[k+2]} + i\tau(b_i F_{n,0}^{[k+2]} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j,0}^{[2]}), \quad i = \overline{1, k},$$

так как функции $F_{n,j,0}^{[2]} = f(t_{n,j}, u_{n,j,0}^{[2]}), j = \overline{1, k}$ могут быть вычислены с локальной ошибкой $O(\tau^2)$. Вычисления на следующем шаге $s=1$ улучшат точность результатов на один порядок. Продолжая вычисления до $s=k-1$, получим результаты, соответствующие локальным предельным точностям приближенных формул (17), т. е.

$$u_{n,i,k}^{[k+2]} = u_{n,0}^{[k+2]} + i\tau(b_i F_{n,0}^{[k+2]} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j,k-1}^{[k+1]}), \quad i = \overline{1, k},$$

поскольку разностные уравнения (2) аппроксимируют дифференциальное уравнение (1) с порядком $O(\tau^{k+1})$. Дальнейшие шаги не дадут повышения порядка точности результатов.

Приведем результаты решения умеренно устойчивой тестовой задачи

$$x' = -10(t-1)x, \quad x(0) = 1 \quad (19)$$

с помощью формул одношагового четырехточечного метода. Аналитическое решение рассматриваемой задачи имеет вид

$$x(t) = \text{Exp}(-5t(t-2)). \quad (20)$$

Для четырехточечного метода были вычислены следующие значения

$$\|A\|_c = 1.4375, \quad \|b\|_c = 0.3486, \quad L=10, \quad \tau=0.0174.$$

Шаг интегрирования τ был выбран таким, чтобы было выполнено условие (14). Поскольку точное решение (20) известно, то нетрудно найти ошибки E_p в точках, где было найдено приближенное решение. График на рис. 1 иллюстрирует их распределение.

Число итераций	ошибка
1	15.
2	2.3
3	0.25
4	0.025
5	0.002
6	0.00014
7	-0.000007

Таблица 1. Зависимость ошибки от числа итераций

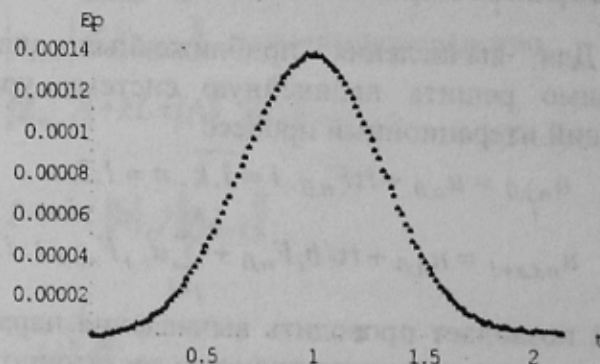


Рис.1. Погрешность приближенного решения.

Максимальная ошибка получается в точке $t=1$ и равна $\epsilon=0.00014$ при выполнении шести итераций. Зависимость ошибки в точке $t=1$ от числа выполненных итераций приведена в таблице 1. Как следует из таблицы 1, процесс сходится медленно.

и для получения решения с высокой точностью требуется не менее шести итераций. Поэтому для сокращения времени решения следует использовать методы, которые имеют более высокую скорость сходимости, например метод Ньютона.

Решение задачи (19) методом Рунге-Кутты четвертого порядка точности с тем же шагом дает максимальную ошибку равную $\epsilon = 0.00168$, что на порядок хуже, чем в одношаговом блочном методе. Это объясняется тем, что четырехточечный блочный метод имеет более высокий пятый порядок точности.

Заключение

При численном решении задачи Коши для сравнительной характеристики методов можно рассматривать различные показатели. В случае произвольной правой части уравнения о трудоемкости метода естественно судить по числу обращений для вычисления значений правой части уравнения на каждый узел сетки.

Найдем время выполнения алгоритма, определяемого формулами (17) на одном процессоре. Обозначим через t_f – время вычисления значения функции $f(t, x)$, t_{ad} , t_{mul} – время выполнения операции сложения и умножения соответственно. Время вычисления приближенных значений решения с локальной точностью $O(\tau^{k+2})$ во всех k узлах блока составит

$$T_s = (k^2 + 1) t_f + k[k(k-1) + 2] t_{ad} + (k^3 + 2k + 1) t_{mu}.$$

Для параллельного выполнения вычислений по формулам (17) закрепим за каждым узлом блока процессор. При его реализации на k процессорах можно одновременно вычислять значения $F_{n,i,s}$, а затем также одновременно получить по формулам (17) значения $u_{n,i,s}$ для каждого фиксированного s . Объединим процессоры в кольцо, чтобы иметь возможность одновременной передачи данных соседним процессорам. Обозначим через t_{ta} – время передачи числа соседнему процессору. Время параллельного вычисления приближенных значений решения с той же точностью для всех узлов блока составит

$$T_p = (k+1) t_f + (k^2 - k + 3) t_{ad} + (k^2 + 3) t_{mu} + k(k-1) t_{ta}.$$

Ускорение параллельного одношагового k точечного алгоритма можно будет теперь вычислить по формуле

$$W(k) = T_s / T_p.$$

Если учитывать только время вычислений правой части уравнения, т.к. времена выполнения арифметических операций и обмена значительно меньше времени вычисления правой части, то ускорение k точечного параллельного алгоритма можно считать приближенно равным

$$W(k)_{\text{poi}} = (k^2 - 1) / (k + 1).$$

Литература

1. Фельдман Л.П. Параллельные интерполяционные алгоритмы численного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений на SIMD компьютере. Научн. тр. ДонГТУ. Серия: Проблемы моделирования и автоматизации проектирования динамических систем, выпуск 10: - Донецк: ДонГТУ, 1999, с. 20-25.
2. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. - М.: Наука. 1989, 412 с.