УДК 004.272.2:519.63

О РАЗРАБОТКЕ ОПЕРАТОРОВ ПЕРЕХОДА ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЛИНЕЙНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Дмитриева О.А., Гуськова Н.Г.
Донецкий национальный технический университет

Предложены параллельные алгоритмы моделирования линейных динамических объектов, основанные на построении операторов перехода. Разработанные алгоритмы базируются на вложенных стадийных схемах и позволяют осуществлять автоматический выбор оптимального размера шага в каждой точке сетки. Параллельная реализация ориентирована на кластерные вычислительные системы типа MIMD.

Введение

Наибольшая необходимость в эффективных параллельных вычислениях возникает при моделировании динамических процессов, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) большой размерности [1]. Такие задачи возникают как непосредственно в процессе математического моделирования [2], так и при генерации вторичных систем уравнений, например, при решении задач математической физики методом прямых [3]. При этом можно говорить о некоторых особенностях сгенерированных систем. Очень часто они носят линейный характер. Кроме того, матрица коэффициентов, как правило, является разреженной. Системы такого вида возникают при дискретизации уравнений в частных производных, при сведении однородного дифференциального уравнения любого порядка с постоянными коэффициентами к системе уравнений 1-го порядка и т.п.

5

Учет таких особенностей моделируемого объекта позволяет разрабатывать алгоритмы, которые изначально ориентированы на параллельную архитектуру и, кроме того, дают возможность автоматически генерировать шаг интегрирования, который обеспечивает требуемую точность. Практически все известные в настоящее время численные методы с автоматическим выбором шага интегрирования основаны на вычислении главного члена локальной ошибки и последующем выборе такого размера для очередного шага, который является максимальным для заданного предела локальной точности [4-5]. Но при этом возникает необходимость повторных вычислений в каждой точке, что приводит к значительному увеличению вычислительных затрат. Кроме того, жестко регламентируются пропорции сокращения шага [6-7].

Основная идея, на которой базируется конструирование операторов перехода для решения линейных систем ОДУ на параллельных компьютерах, заключается в одновременном получении двух приближений с разными порядками. Алгоритмы управления шагом, предлагаемые в работе, базируются на использовании вложенных стадийных методов. Параллельный счет осуществляется в пределах каждого шага с числом стадий s и s+1. Две нити вычислений проходят независимо, и необходимость в обменах возникает только после получения конечных результатов для расчетных точек.

1 Генерация операторов перехода для параллельного моделирования однородной задачи

Пусть математическую модель динамической системы можно представить в виде системы с постоянными коэффициентами и начальными условиями

$$x' = Dx + f(t),\ x(t_0) = (x_1(t_0)),\ x_2(t_0),\ \dots,\ x_N(t_0))^T, \tag{1}$$

где D – матрица размерностью $N \times N$ с постоянными коэффициентами.

Здесь вычисление значения вектора неизвестных на очередном шаге требует предварительного определения значений x_n. Управление шагом в работе осуществляется за счет использования вложенных стадийный методов порядка p, которые кроме численного приближения значений вектора неизвестных x_{n+1} на $n+1$ шаге содержат некоторые выражения $\tilde{x}_{n+1}$ более высокого порядка, как правило, $p+1$.

В частности, если система (1) является однородной, т.е. $f_i(t) = 0$, $i = 1, 2, \dots, N$, то в зависимости от выбранного метода интегрирования

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^t \end{array},$$

можно прийти к соотношениям

$$x_{n+1} = x_n + \tau_n \sum_{i=1}^{s} b_i k_i, \tag{2}$$

$$k_i = D\left(x_n + \tau_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j \right), \quad i = 1,2,\dots,s, \tag{3}$$

которые позволяют получить результат с точностью порядка p. Поправочный, или вложенный вектор неизвестных

$$\tilde{x}_{n+1} = x_n + \tau_n \sum_{i=1}^{s} \tilde{b}_i k_i \tag{4}$$

оценивает результат с точностью $p+1$. Иногда могут быть сгенерированы методы, поправочный вектор в которых оценивается с точностью p-1. Особый вид векторов k_i, $i = 1, 2, \dots, s$ в (3), который обусловлен линейностью правых частей в (1) позволяет на каждом шаге искать решения в виде

$$x_{n+1} = Q_n x_n; \tag{5}$$

$$\tilde{x}_{n+1} = \tilde{Q}_n x_n, \tag{6}$$

где Q_n, $\tilde{Q}_n$ – операторы (матрицы) переходов.

Добавленный в расчетную схему оператор более высокого порядка $\tilde{Q}_n$ может служить для управления погрешностью и длиной шага. Поскольку в качестве исходных методов для построения оператора перехода Q_n выбираются известные последовательные стадийные методы, то генерация оператора сводится к сравнению рядов Тейлора для точного и численного решений. Для наглядного представления получаемых при разложении в ряд элементарных дифференциалов используются древодидные графовые структуры, при этом существует взаимно однозначное соответствие между множеством элементарных дифференциалов и множеством деревьев. Для генерации коэффициентов вложенных векторов стадийных методов в работе использовался подход, приведенный в [8] и основанный на формировании набора абстрактных деревьев требуемого порядка:

Построение модельных уравнений опирается на следующий факт [8]: для любого дерева можно построить такую систему уравнений, что разложение в ряд Тейлора одной из переменных содержит только один элементарный дифференциал, соответствующий данному дереву.

Что касается оператора перехода $\widetilde{Q}_n$, то для его построения необходимо дополнительно определить коэффициенты $\widetilde{b}_i$, $i = 1,2,...,s$ для (4). Определение коэффициентов метода порядка p+1, требует формирования всех абстрактных деревьев, порядок которых укладывается в интервал от 1 до p+1.

Поскольку количество соотношений типа для построения деревьев напрямую зависит от порядка точности p и определяется комбинаторными зависимостями, для их генерации и построения операторов перехода привлекался программный интерфейс *Mathematica Wolfram Research*. Формировались операторы перехода как на основе известных стадийных методов, так и для методов, которые были предложены в работах [9-12]. Так, например, например, для пятистадийного метода Зонневельда оператор перехода может быть представлен как

$$Q_n = \left(E + D\tau_n \left(E + \frac{1}{2} D\tau_n \left(E + \frac{1}{3} D\tau_n \left(E + \frac{1}{4} D\tau_n \right)\right)\right)\right).$$

Вложенный оператор для управления шагом

$$\widetilde{Q}_n = \left(E + D\tau_n \left(E + \frac{1}{2} D\tau_n \left(E + \frac{1}{3} D\tau_n \left(E + \frac{1}{2} D\tau_n \left(E + \frac{1}{2} D\tau_n \right)\right)\right)\right)\right).$$

Оператор перехода метода Фельберга 4-го порядка

$$Q_n = \left(E + D\tau_n \left(E + \frac{257}{114} D\tau_n \left(E + \frac{2303}{100233} D\tau_n \left(E - \frac{593}{4606} D\tau_n \right)\right)\right)\right).$$

Вложенный оператор метода Фельберга для управления шагом 5-го порядка

$$\widetilde{Q}_n = \left(E + D\tau_n \left(E + \frac{2707}{1254} D\tau_n \left(E + \frac{10283}{40605} D\tau_n \left(E - \frac{47077}{534716} D\tau_n \left(E + \frac{6523}{94154} D\tau_n \right)\right)\right)\right)\right).$$

Полученные операторы перехода, которые необходимо определить один раз до начала вычислений, позволяют находить значения вектора неизвестных параллельно. Такая реструктуризация известных стадийных методов позволяет преобразовать последовательность вычислений таким образом, что доминирующей операцией становится операция *gapsy* (*general Ax plus y*). Приведение вычислений к последовательности *gapsy* обладает значительными преимуществами при параллельной реализации, а алгоритмы выполнения таких операций подробно изложены в [13].

2 Разработка операторов перехода для параллельного моделирования неоднородной задачи

Особый вид системы (1) позволяет построить, некоторые операторы перехода и для неоднородного случая. Но при этом речь будет идти о линейной комбинации операторов перехода для получения решения основным и вложенным методами. Для получения одного решения на шаге необходимо построить по одному оператору для основного и вложенного методов преобразования линейной части Dx. Количество операторов для преобразования нелинейной части $f(t)$ будет зависеть от числа стадий метода. Т.е. для неоднородного случая можно получить зависимости вида

$$x_{n+1} = Q_n x_n + G_{n,1} f(t_n) + G_{n,2} f(t_n + c_1\tau_n) + \ldots + G_{n,s} f(t_n + c_{s-1}\tau_n) \tag{7}$$

$$\tilde{x}_{n+1} = \tilde{Q}_n x_n + \tilde{G}_{n,1} f(t_n) + \tilde{G}_{n,2} f(t_n + c_1\tau_n) + \ldots + \tilde{G}_{n,s+1} f(t_n + c_s\tau_n) \tag{8}$$

Добавленные в расчетную схему операторы более высокого порядка $\tilde{Q}_n$, $\tilde{G}_{n,1}$, $\tilde{G}_{n,2}$, … , $\tilde{G}_{n,s+1}$ так же, как и в разд. 1 будут служить для управления погрешностью и длиной шага. В качестве примера сгенерируем по методу Мерсона 4 (5) [8] операторы перехода типа (7) – (8). Введем определения стадийных векторов с учетом неоднородности

$$k_1 = \tau_n * \left(Dx_n + f(t)\right),$$

$$k_2 = \tau_n * \left(D\left(x_n + 1/3k_1\right) + f\left(t + c_1\tau_n\right)\right),$$

$$k_3 = \tau_n * \left(D\left(x_n + 1/6k_1 + 1/6k_2\right) + f\left(t + c_2\tau_n\right)\right),$$

$$k_4 = \tau_n * \left(D\left(x_n + 1/8k_1 + 3/8k_3\right) + f\left(t + c_3\tau_n\right)\right),$$

$$k_5 = \tau_n * \left(D\left(x_n + 1/2k_1 - 3/2k_3 + 2k_4\right) + f\left(t + c_4\tau_n\right)\right)$$

и вектора сборки решений основным и вложенным методами

$$\Delta x_n = 1/2k_1 - 3/2k_3 + 2k_4,$$

$$\Delta \tilde{x}_n = 1/6k_1 + 2/3k_4 + 1/6k_5.$$

После построения и сравнения рядов Тейлора для точного и численного решений, получим следующий вид операторов перехода определения x_{n+1} для неоднородной задачи

$$Q_n = D\tau_n\left(E + \frac{1}{2}D\tau_n\left(E + \frac{1}{3}D\tau_n\left(E + \frac{1}{4}D\tau_n\right)\right)\right),$$

$$G_{n,1} = \frac{\tau_n}{2}\left(E + \frac{1}{12}D^2\tau_n^2\left(E + D\tau_n\right)\right),$$

$$G_{n,2} = -\frac{1}{4}\tau_n\left(E - \frac{1}{2}D\tau_n\right),$$

$$G_{n,3} = -\frac{3}{2}\tau_n\left(E - \frac{1}{2}D\tau_n\right),$$

$$G_{n,4} = 2\tau_n.$$

Для оценки $\tilde{x}_{n+1}$ операторы перехода будут иметь вид

$$\tilde{Q}_n = D\tau_n\left(E + \frac{1}{2}D\tau_n\left(E + \frac{1}{3}D\tau_n\left(E + \frac{1}{4}D\tau_n\left(E + \frac{1}{6}D\tau_n\right)\right)\right)\right),$$

$$\tilde{G}_{n,1} = \frac{\tau_n}{6}\left(E + D\tau_n\left(E + \frac{1}{4}D\tau_n\left(E + \frac{1}{2}D\tau_n\left(E + \frac{1}{3}D\tau_n\right)\right)\right)\right),$$

$$\tilde{G}_{n,2} = \frac{1}{48}D^3\tau_n^4,\ \tilde{G}_{n,3} = \frac{1}{8}D^2\tau_n^3,$$

$$\tilde{G}_{n,4} = \frac{2}{3}\tau_n\left(E + \frac{1}{2}D\tau_n\right);\ \tilde{G}_{n,5} = \frac{1}{6}\tau_n.$$

Здесь вычисление каждого из полученных операторов перехода на шаге может осуществляться автономно, что при реализации в параллельных вычислительных системах позволяет избавиться от обменов на стадиях. Кроме того, вычисление, по сути, сводится к выполнению операций матрично-векторного умножения, для которых разработаны эффективные алгоритмы параллельной реализации.

Выводы

Для моделирования линейных динамических объектов в работе предложены подходы, позволяющие реструктуризировать стадийные вложенные методы и перейти от последовательной реализации к параллельному выполнению вычислений с контролем погрешности на шаге. Такая реструктуризация стадийного метода осуществляется за счет построения оператора перехода, сводящего процедуру получения решения на шаге для однородных систем к выполнению параллельных матрично-векторных операций.

Для линейных неоднородных систем требуется построение нескольких операторов перехода, количество которых напрямую зависит от числа стадий исходного метода. Операторы перехода для каждого s - стадийного метода строятся один раз, до начала вычислений и позволяют за счет параллельной реализации в s раз сократить число матричных операций, выполняемых на каждом шаге. При этом для умножения матриц используются модифицированные параллельные алгоритмы, позволяющие в 2 раза сократить число обменов между процессорными элементами, выполняемых на каждом шаге. Сокращение числа обменов достигается за счет изменения порядка начальной загрузки значений коэффициентов матриц в решающее поле микропроцессоров параллельных вычислительных систем.

5

Перечень источников

[1] Zanariah A.M., Suleiman M.B Solving Large Systems of Ordinary Differential Equations on Parallel Computer// Journ. of Scientific Research. –2009. – Vol. 29. – № 4. – P. 491–501.

[2] Enright W.H. Software for ordinary and delay differential equations: Accurate discrete approximate solutions are not enough //Applied Numerical Mathematics. – 2006. – Vol. 56. – № 3–4, P. 459–471.

[3] Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие задачи. – М.: Мир, 1999. – 685 с.

[4] Soderlind G. Digital filters in adaptive time-stepping.// ACM Trans. Math. Softwar. – 2003. – Vol. 29. – P. 1–26.

[5] Дмитриева О.А. Параллельное моделирование динамических объектов с выбором шага на основе экстраполяционных методов // Радіоелектронні і комп’ютерні системи. – 2012. – № 6 (58). – С. 312–317.

[6] Куликов Г.Ю., Хрусталева Е.Ю. Об автоматическом управлении размером шага и порядком в явных одношаговых экстраполяционных методах.// Журнал вычислительной математики и математической физики, 2008, Т. 48, № 8, С. 1392 –1405

[7] Schmitt B.A., Weiner R., Jebens S. Parameter optimization for explicit parallel peer two-step methods// Applied Numerical Mathematics. – 2009. – Vol. 59. – № 3–4. – P. 769–782

[8] Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер. Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – М.: Мир, 1990. – 512 с.

[9] Firsova A., Dmitrieva O. Dynamic System Simulation. Robust algorithms of state estimation of dynamic lumped parameters systems. – LAPublishing, 2011. – 92 p.

[10] Дмитрієва О.А. Паралельні різницеві методи розв’язання задачі Коші – Донецьк: ДонНТУ, 2011. 265 с.

[11] Дмитриева О.А. Параллельное моделирование жестких систем на основе диагонализации полной матрицы.// Искусственный интеллект. – 2011, № 4, С. 46-53.

[12] Дмитрієва О.А. Генерація стійких блокових методів для розв’язання жорстких диференційних рівнянь і їх систем// Наукові праці ДонНТУ. Серія ІКОТ-2011. Випуск 14(188) – Донецьк: ДонНТУ. – 2011. – С. 36–43.

[13] Голуб Дж. Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. – М.: Мир, 1999 – 548 с.