УДК 004.272.2:519.63

О.А. Дмитриева, канд. техн. наук, доц.,
ГВУЗ «Донецкий национальный технический университет», г. Донецк, Украина
dmitrieva.donntu@gmail.com

О приведении матриц расчетных коэффициентов коллокационных методов со старшими производными к диагональному виду

Статья посвящена вопросам построения параллельных разностных схем решения задачи Коши с улучшенными показателями скорости сходимости. С целью выравнивания порядка аппроксимации во всех расчетных точках в разностные схемы введены дополнительные производные. Коллокационные методы построены на интерполяционных многочленах Эрмита, степени которых совпадают с количеством точек коллокации. Введение дополнительных производных не приводит росту размерности системы, поэтому вычислительные затраты такие же, как и в случае решения стадийными коллокационными методами или соответствующими им неявными методами.

Ключевые слова: задача Коши, параллельные вычисления, точки коллокации, диагонализация, многочлены Эрмита.

Введение

Статья посвящена проблеме разработки параллельных численных методов решения задачи Коши (1) для систем обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) большой размерности

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

При этом исследуется возможность построения таких методов, которые бы объединяли в себе свойства векторизации, т. е. возможности получать численное решение параллельно в нескольких расчетных точках, и эффективное использование итерационного метода, обеспечивающего получение решения с заданной точностью. Векторизация процедуры поиска решения может быть обеспечена за счет разбиения интервала поиска решения на блоки, каждый из которых содержит несколько расчетных точек s. В этих точках, которые носят название коллокационных, необходимо потребовать совпадения производных с векторным полем исходного дифференциального уравнения [1-2]. Численное интегрирование (1) такими методами основано на формировании и решении на каждом шаге нелинейной системы алгебраических уравнений размерностью $n \times s$, где n - размерность исходной СОДУ или наивысший порядок уравнения, s – количество коллокационных точек в блоке. Эффективное решение такой системы является главной проблемой при реализации блочного коллокационного метода [3-5]. В расчетную схему могут вводиться производные старших порядков, что несколько усложняет вид системы уравнений, но не приводит к росту размерности [6]. При этом можно говорить об одно- [7] и многошаговых [8] коллокационных блочных методах, а также их модификациях. Использование таких методов при параллельном моделировании динамических объектов кроме высоких показателей параллелизма характеризуется также хорошими свойствами устойчивости и высокими порядками аппроксимации. Однако при решении жестких систем трудоемкость реализации, метода резко возрастает, что связано, прежде всего, с необходимостью многократного переопределения величины шага интегрирования на участках быстрого изменения производной [1, 9-10]. Получается, что в пределах каждой итерации коллокационный блочный метод обладает хорошим параллелизмом, так как вычисление компонентов вектора на итерации распределяется по s процессорам. Однако после каждой итерации процессоры должны обмениваться полученными результатами, а это подразумевает частую связь между процессорами [11]. Для исправления этого недостатка в работе предлагается подход, который ранее использовался автором в стадийных методах для преобразования матриц расчетных коэффициентов к диагональному виду [12-13]. Получаемые на основе такого подхода расчетные схемы обладают меньшей вычислительной сложностью за счет значительного сокращения числа обменов и являются весьма эффективными при решении жестких уравнений [14].

Цель данного исследования состоит в разработке для параллельного решения жестких уравнений и их систем блочных коллокационных одношаговых многостадийных методов со старшими производными и приведенными к особенному виду матрицами коэффициентов, что обеспечивает минимизацию числа обменов на итерациях по расчетным точкам.

Диагонализация исходных матриц стадийного коллокационного метода со старшими производными

Если в коллокационный многостадийный метод вместо интерполяционных многочленов Лагранжа ввести интерполяционные многочлены Эрмита с кратными узлами, для которых потребовать совпадения в точках коллокации $t_n + c_i\tau$ или $t_n + i\tau$ (для блочного метода) не только значений функции $f(t,x(t))$, но и ее производных $f^{(j)}(t,x(t)),\ j = 1,2,...,p_i$ до порядка p_i включительно, можно значительно повысить скорость сходимости [7-8]. Расчетные схемы одношаговых многостадийных методов со старшими производными примут вид

$$x_{n+1} = x_n + \tau\sum_{i=1}^{s}\sum_{l=0}^{p_i}\tau^l b_i^{(l)} k_i\,, \tag{2}$$

$$k_i = x_n + \tau\sum_{j=1}^{s}\sum_{l=0}^{p_i}\tau^l a_{ij}^{(l)} f^{(l)}(t_n + c_j\tau, k_j)\,,$$

$$i = 1,2,...,s,$$

где $f^{(l)}(t_n + c_j\tau, k_j)$ – l-ая производная правой части, вычисленная в точке $t_n + c_j\tau$,

$$f^{(0)}(t_n + c_j\tau, k_j) = f(t_n + c_j\tau, k_j)\ .$$

$a_{ij}^{(l)},\ b_i^{(l)}$ – элементы соответственных матриц и векторов схемы Батчера, которая из вида

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^t\,, \end{array} \tag{3}$$

приводится к следующему модифицированному виду (4) с шаблоном, приведенным на рис. 1.

$$\begin{array}{c|cccc} \mathrm{c} & A^{(0)} & A^{(1)} & \dots & A^{(p_i)} \\ \hline & b^{(0)t} & b^{(1)t} & \dots & b^{(p_i)t} \end{array} \tag{4}$$

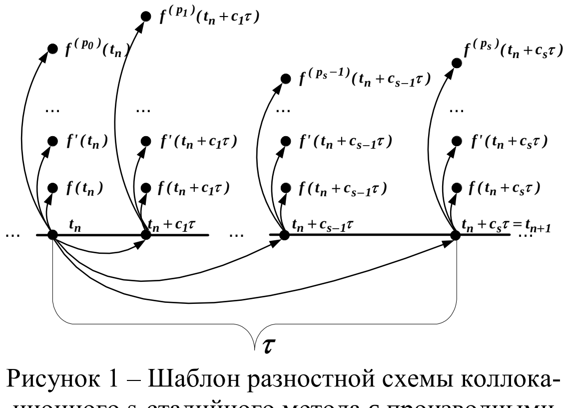

Рисунок 1 – Шаблон разностной схемы коллокационного s-стадийного метода с производными высших порядков

Элементы стадийного вектора c размерности s, как правило, задаются. А элементы матрицы А размерности $s\times\ s + p_1 + p_2 + ... + p_s$ и вектора b^t размерности $s + p_1 + p_2 + ... + p_s$ находятся из соотношений:

$$a_{ij}^{(l)} = \int_0^{c_i} h_{j,l}(t)dt, \quad b_i^{(l)} = \int_0^{1} h_{j,l}(t)dt, \tag{5}$$

$$i, j = 1,2,...,s,$$

где $h_{j,l}$ – многочлены Эрмита.

Если попытаться привести полные матрицы $A^{(l)}$, $l=1,2,\dots,s+1$ к диагональному виду, т.е. осуществить преобразование вида

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\ c_2. & a_{21}. & a_{22} & \dots & a_{2s} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_s \end{array} \Longrightarrow \begin{array}{c|cccc} c_1 & d_{11} & & & \\ c_2. & \dots & d_{22} & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_s & & \dots & & d_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_s \end{array}$$

можно значительно упростить процесс вычислений в силу того, что в (2) стадийные вектора k_i примут вид

$$k_i = x_n + \tau\sum_{l=0}^{p_i}\tau^l d_{ii}^{(l)} f^{(l)}(t_n + c_i\tau, k_i),$$

$$i = 1,2,...,s.$$

При этом среди множества возможных вариантов приближения $D^{(l)}$ для каждой матрицы $A^{(l)}$, $l=1,2,\dots,s+1$ выбираются такие, что спектральный радиус

$$\rho(I - {D^{(l)}}^{-1} A^{(l)}) = 0 \tag{6}$$

или

$$\rho(I - {D^{(l)}}^{-1} A^{(l)}) \to min \tag{7}$$

Решение задачи, связанной с поиском корней нелинейного уравнения (6) эквивалентно задаче

$$det\left({D^{(l)}}^{-1} A^{(l)} - \lambda I \right) = 0\,, \tag{8}$$

количество корней которой определяется стадийностью метода и равно s:

$$det\left({D^{(l)}}^{-1} A^{(l)} - \lambda I \right) = (1-\lambda)^s\,.$$

Это уравнение для соответствующего преобразвания записывается в следующем виде

$$(-\lambda)^s + \sum_{i=1}^{s}\mu_i(-\lambda)^{s-i} = (-\lambda)^s + \sum_{i=1}^{s} C_s^i(-\lambda)^{s-i}\ , \tag{9}$$

где C_s^i – комбинаторное соединение числа сочетаний,

μ_i - коэффициенты характеристического многочлена ${D^{(l)}}^{-1} A^{(l)}$.

μ_i оцениваются как сумма миноров i-ой степени, симметричных относительно главной диагонали $D^{(l)\ -1} A^{(l)}$. В частности, предельные случаи

$$\mu_1 = trace\left(D^{(l)\ -1} A^{(l)} \right), \quad \mu_s = det\left(D^{(l)\ -1} A^{(l)} \right).$$

В (9) левая и правая части эквивалентны, если соответствующие коэффициенты μ_i и C_s^i совпадают. На этом основании формируется нелинейная система из s неизвестных, такая что

$$\mu_i = C_s^i, \quad i = 1,2,...,s. \qquad (10)$$

Из множества возможных решений этой системы, максимальное число которых определяется как $2^s - 1$ выбирается такое

$$D^{(l)\ -1} = diag(d_1, d_2, ..., d_s),$$

на котором выполняются соотношения (6) или (7). Этот вариант $D^{(l)\ -1}$ в каждом l-ом случае, $l=1,2,...,s+1$, обеспечит лучшую сходимость численной реализации. Для такого выбора на каждом полученном решении строится матрица вида

$$Z(z) = z(I - zD^{(l)})^{-1}(A - D^{(l)})$$

и исследуется спектр ее собственных значений. По каждому полученному решению оценивается максимальное собственное значение $max(\rho(Z(z))$ спектра матрицы $Z(z)$. Среди множества решений для реализации выбирается вариант с минимальным значением $max(\rho(Z(z))$. Таким образом, подход для выбора матриц $D^{(l)}$, $l=1,2,...,s+1$, рассматриваемый в этой работе, базируется на минимизации спектрального радиуса матрицы.

Численное определение коэффициентов диагональных матриц для коллоцирования со старшими производными

В качестве исходных для диагонализации выбираются предложенные в [7] коллокационные многостадийные методы с производными высших порядков.

$$u_{n+1/3} = u_n + \tau\left(-\frac{949}{720} F_{n+\frac{1}{3}} + \frac{38}{45} F_{n+\frac{2}{3}} + \frac{581}{720} F_{n+1} \right) - \frac{\tau^2}{2160}\left(637F'_{n+\frac{1}{3}} + 4320F'_{n+\frac{2}{3}} + 173F'_{n+1} \right), \qquad (11)$$

$$u_{n+2/3} = u_n + \frac{\tau}{45}\left(-53F_{n+\frac{1}{3}} + 46F_{n+\frac{2}{3}} + 37F_{n+1} \right) - \tau^2\left(\frac{13}{45} F'_{n+\frac{1}{3}} + \frac{14}{27} F'_{n+\frac{2}{3}} + \frac{11}{135} F'_{n+1} \right),$$

$$u_{n+1} = u_n + \frac{\tau}{80}\left(-93F_{n+\frac{1}{3}} + 96F_{n+\frac{2}{3}} + 77F_{n+1} \right) - \frac{\tau^2}{80}\left(23F'_{n+\frac{1}{3}} + 160F'_{n+\frac{2}{3}} + 7F'_{n+1} \right).$$

Так для метода (11) с шаблоном, приведенным на рис. 2, вид диагонального приближения каждой матрицы определяется следующими соотношениями. Из исходной матрицы $A^{(0)}$

$$\begin{pmatrix} -949/720 & 38/45 & 581/720 \\ -53/45 & 46/45 & 37/45 \\ -93/80 & 96/80 & 77/80 \end{pmatrix}$$

формируется матрица $D^{(0)\ -1} A^{(0)}$ с искомыми элементами $D^{(0)\ -1} = diag(d_1, d_2, d_3)$

$$\begin{pmatrix} -\frac{949d_1}{720} & \frac{38d_1}{45} & \frac{581d_1}{720} \\ \frac{-53d_2}{45} & \frac{46d_2}{45} & \frac{37d_2}{45} \\ -\frac{93d_3}{80} & \frac{96d_3}{80} & \frac{77d_3}{80} \end{pmatrix}.$$

Используя (10), получим следующую нелинейную систему

$$\mu_1 = trace\left(D^{(0)\ -1} A^{(0)} \right) = -\frac{949d_1}{720} + \frac{46d_2}{45} + \frac{77d_3}{80} = 3,$$

$$\mu_2 = -\frac{127d_1d_2}{360} - \frac{119d_1d_3}{360} - \frac{d_2d_3}{360} = 3,,$$

$$\mu_3 = det\left(D^{(0)\ -1} A^{(0)} \right) = -\frac{d_1d_2d_3}{36} = 1.$$

Решением такой системы будут являться 2 действительных корня. Лучшему варианту диагонализации соответствует минимум из всех $max(\rho(Z(z))) = 0.23509$ на матрице

$$\begin{pmatrix} 3.03274 & 0 & 0 \\ 0 & -0.0326709 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0280351 \end{pmatrix}.$$

Для следующей исходной матрицы $A^{(1)}$

$$\begin{pmatrix} -637/2160 & -2 & -173/2160 \\ -13/45 & -14/27 & -11/135 \\ -23/80 & -2 & -7/80 \end{pmatrix}$$

формируется матрица $D^{(1)\ -1} A^{(1)}$ с искомыми элементами $D^{(1)\ -1} = diag(d_1, d_2, d_3)$

$$\begin{pmatrix} -\dfrac{637d_1}{2160} & -2d_1 & -\dfrac{173d_1}{2160} \\ -\dfrac{13d_2}{45} & -\dfrac{14d_2}{27} & -\dfrac{11d_2}{135} \\ -\dfrac{23d_3}{80} & -2d_3 & -\dfrac{7d_3}{80} \end{pmatrix}.$$

Используя (10), получим следующую нелинейную систему

$$\mu_1 = trace\left({D^{(1)}}^{-1} A^{(1)} \right) = -\frac{637d_1}{2160} - \frac{14d_2}{27} - \frac{7d_3}{80} = 3,$$

$$\mu_2 = -\frac{12389d_1d_2}{29160} + \frac{d_1d_3}{360} - \frac{127d_2d_3}{1080} = 3,$$

$$\mu_3 = det\left({D^{(1)}}^{-1} A^{(1)} \right) = \frac{59d_1d_2d_3}{14580} = 1.$$

Решением такой системы будут являться 6 корней, среди которых 2 действительных корня. Лучшему варианту диагонализации соответствует минимум из всех $max(\rho(Z(z))) = 0.38701$ на диагонализированной матрице

$$\begin{pmatrix} 0.2554 & 0 & 0 \\ 0 & -0.15797 & 0 \\ 0 & 0 & -0.100296 \end{pmatrix}.$$

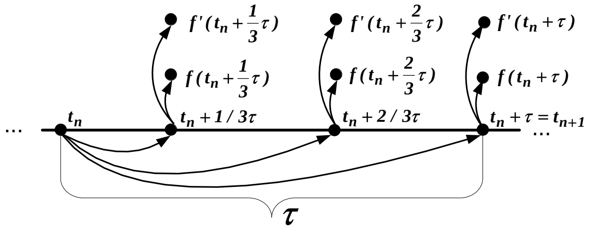

Рисунок 2 – Шаблон коллокационного трехстадийного метода с первыми производными

Параллельная реализация методов с преобразованными матрицами коэффициентов

Параллельная реализация предлагаемых алгоритмов, основанных на диагональных преобразованиях, осуществлялась на MIMD архитектурах. Процессоры связывались через соединительную сеть, которая состоит из прямых коммуникационных ссылок, соединяющих пары процессоров в линейку процессоров. Коммуникация исполняется посредством явной передачи сообщений.

После преобразования исходной матрицы коэффициентов и получения расчетных схем с диагональной матрицей встает вопрос об обеспечении параллельной реализации построенных методов. В работе рассматривались два способа построения решения: с фиксированным числом итераций и с контролем локальной точности.

Поскольку методы носят характер неявных относительно значений $k_i, i = 1,2,...,s$, каждый временной шаг для первого варианта реализации состоит из определения начального приближения $k_i^{(0)} = x_n, i = 1,2,...,s$ и фиксированного количества итераций *N*, которое определяет порядок сходимости метода

$$p^* = min(p, N+1), \qquad (12)$$

где *p* порядок использующегося стадийного метода.

Количество ньютоновских итераций можно задавать не жестко, а определять, исходя из нормы отклонения. Таким образом, итерационный процесс можно останавливать, если

$$\max_{1 \le i \le s} \left| k_i^{(j)} - k_i^{(j-1)} \right| \le \varepsilon.$$

Поскольку основная вычислительная работа при решении систем возникает при выполнении ньютоновских итераций, удачное распределение данных, обеспечивающее хорошую балансировку загрузки на каждой итерации, позволяет избежать перераспределения данных между процессорами. Для этих типов вычислений каждая строка якобиана и компонента правой части уравнения системы закрепляется за соответствующим процессором. Такое распределение позволяет избежать дополнительных коммуникационных расходов.

Анализ показателей параллелизма разработанных методов

Характеристики параллелизма, ускорение и эффективность, исследовались для систем с изменяющимися трудоемкостями вычисления правых частей *ft*, принимающими значения *ft*={10, 50, 100, 500, 5000}. Реализация трехстадийного неявного метода (11) с диагонализированной матрицей осуществлялась на топологии 1D тор с числом процессоров, совпадающих с размерностью системы. Оценки параллелизма: ускорение и эффективность, приведены на рис. 3 – 4.

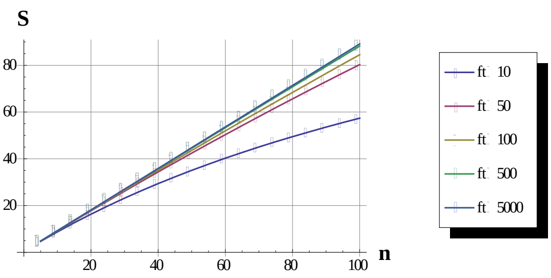

Рисунок 3 – Характеристики ускорения метода (11) с диагональной матрицей

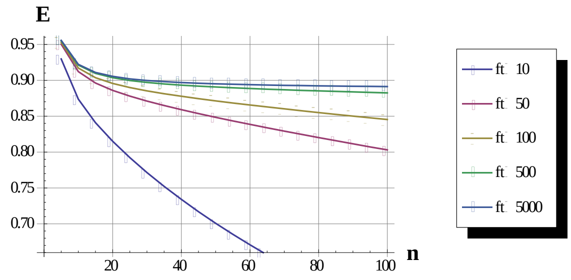

Рисунок 4 – Характеристики эффективности метода (11) с диагональной матрицей

Полученные при параллельной реализации достаточно высокие характеристики параллелизма (коэффициенты ускорения и эффективности) подтверждают эффективность разработанных методов при их использовании для решения жестких и плохо обусловленных задач.

Заключение

В работе рассматриваются подходы, направленные на сокращение числа обменов при параллельной численной реализации решения задачи Коши с помощью неявных методов, ориентированных на решение жестких уравнений и их систем. Основная идея заключается в модификации многостадийных коллокационных методов со старшими производными, обеспечивающей параллельное получение значений в стадийных точках. При этом обмен значениями процессоры осуществляют не после каждой итерации, а после получения значения для очередной расчетной точки. Такое радикальное сокращение числа обменов достигается за счет использования диагонального приближения исходной матрицы. Рассмотрены варианты диагонализации коллокационных стадийных методов со старшими производными. Приведена методика выбора лучшего варианта диагонального приближения, основывающаяся на минимизации спектрального радиуса матрицы.

Список литературы

1. Хайрер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие задачи / Э. Хайрер, Г. Ваннер. - М.: Мир, 1999. – 685 с.

2. Dmitrieva O. Parallel Algorithms of Simulation. Increase of simulation of dynamic objects with the lumped parameters into parallel computer systems / O. Dmitrieva, A. Firsova. – Lambert Academic Publishing, 2012. – 192 p. – ISBN-13: 978-3-659-28540-0, ISBN-10: 3659285404.

3. Дмитриева О.А. Разработка и исследование параллельных колокационных блочных методов / О. А. Дмитриева, Л. П. Фельдман // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка». – 2012. – № 16 (204). – С. 28–35.

4. Embedded block parallel methods for initial Cauchy problem numerical solution / [L.P. Feldman, I.A. Nazarova, O.A. Dmitrieva, T.V. Mikhaylova] // Proceedings of DNTU. – 2010. - №1. - P. 12-17.

5. Дмитриева О.А. Высокоэффективные алгоритмы управления шагом на основе параллельных коллокационных блочных методов / О.А. Дмитриева // Искусственный интеллект. - 2012. – № 4. – С. 77–88.

6. Дмитриева О.А. О введении производных высших порядков в параллельные колокационные методы решения задачи Коши / О. А. Дмитриева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Системний аналіз та інформаційні технології у науках про природу та суспільство». – 2012. – № 1 (2) –2 (3). – С. 69–74.

7. Дмитриева О.А. Повышение порядка аппроксимации параллельных блочных одношаговых разностных схем решения задачи Коши / О. А. Дмитриева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Обчислювальна техніка і автоматизація». – 2013. – № 1 (24). – С. 104–112.

8. Дмитриева О.А Разработка многошаговых параллельных коллокационных блочных методов с использованием интерполяционных полиномов Эрмита / О. А. Дмитриева // Радіоелектронні і комп'ютерні системи. – 2013. - № 5 (64). - С. 243-249.

9. Дмитрієва О.А. Генерація стійких блокових методів для розв'язання жорстких диференційних рівнянь і їх систем / О.А. Дмитрієва // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія "Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка" (ІКОТ-2011). – 2011. – Випуск 14(188). - С. 36-43.

10. Dmitrieva O. Parallel Step Control. Development of parallel algorithms of the step variation for simulation of stiff dynamic systems / O. Dmitrieva, L. Feldman. - Lambert Academic Publishing, 2013. – 72 p. – ISBN-13: 978-3-659-38425-7, ISBN-10: 3659384259.

11. Firsova A. Dynamic System Simulation. Robust algorithms of state estimation of dynamic lumped parameters systems / A. Firsova, O. Dmitrieva. – Lambert Academic Publishing, 2011. – 92 p.

12. Дмитриева О.А. Параллельное моделирование жестких систем на основе диагонализации полной матрицы / О. А. Дмитриева // Искусственный интеллект. – 2011. – № 4. – С. 46–53.

13. Дмитриева О.А. Упрощение итераций при параллельной реализации неявных методов решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений / О. А. Дмитриева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка». – 2011. – № 13 (185). – С. 13–18.

14. Дмитриева О. А. Формирование условий порядка методов Рунге-Кутты с использованием метода помеченных деревьев / О. А. Дмитриева, Я. А. Куприй // Інформаційні технології та комп'ютерна інженерія. – 2012. – № 3 (25). – С. 86–90.

Надійшла до редакції 08.07.2013

О.А. ДМИТРІЄВА
ДВНЗ «Донецький національний технічний університет»

ПРО ПРИВЕДЕННЯ МАТРИЦЬ РОЗРАХУНКОВИХ КОЕФІЦІЄНТІВ КОЛОКАЦІЙНИХ БЛОКОВИХ МЕТОДІВ ЗІ СТАРШИМИ ПОХІДНИМИ ДО ДІАГОНАЛЬНОГО ВИДУ

Стаття присвячена питанням побудови паралельних різницевих схем розв'язання задачі Коші з поліпшеними показниками швидкості збіжності. З метою вирівнювання порядку апроксимації у всіх розрахункових точках у різницеві схеми введено додаткові похідні. Колокаційні методи побудовані на інтерполяційних багаточленах Ерміта, степені яких збігаються з кількістю точок колокації. Введення додаткових похідних не приводить до росту розмірності системи, тому обчислювальні витрати такі ж, як і у випадку розв'язання стадійними колокаційними методами або відповідними їм неявними методами.

Ключові слова: задача Коші, паралельні обчислення, точки колокації, діагоналізація, багаточлени Ерміта.

O.A. DMITRIEVA
Donetsk National Technical University

REDUCTION OF THE MATRICES OF RATED COEFFICIENTS OF COLLOCATION METHODS WITH HIGHER DERIVATIVES TO DIAGONAL FORM

The article is devoted to the construction of parallel finite difference schemes for the Cauchy problem with improved convergence rate. The approaches to reduce the number of exchanges in a parallel numerical solution of the Cauchy problem using collocation methods focused on solving stiff equations and their systems are considered. To align the order of approximation in all the reference points in the finite difference scheme we introduced additional derivatives. Collocation methods are based on Hermite interpolation polynomials, whose degrees are equal with the number of collocation points. Introduction of additional derivatives does not increase the dimension of the system. The main idea is to modify multi-step collocation methods with higher derivatives, which provide parallel retrieve values in stage-points. A radical reduction in the number of exchanges is achieved by using a diagonal approximation of the original matrix. We consider variants of diagonalization of collocation stage methods with higher derivatives and describe a method of selecting the best variant of diagonal approximation based on matrix spectral radius minimization.

Parallel implementation of the proposed algorithms based on diagonal transformations was carried out on MIMD architecture. We developed several variants of parallel algorithms with transformed coefficient matrices: for a fixed number of iterations and based on controlling local accuracy.

Key words: Cauchy problem, parallel computing, collocation points, diagonalization, Hermite polynomials.