

УДК 004.272.2:519.63

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

Параллельный контроль размера шага вложенными методами на основе преобразованных матриц коэффициентов

Статья посвящена вопросам параллельного управления шагом интегрирования при моделировании динамических объектов, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) большой размерности. Для возможного управления шагом интегрирования предлагается использование параллельных вложенных методов с генерацией коэффициентов заданного порядка точности. Расчетные схемы методов построены путем приведения матриц расчетных коэффициентов к диагональному или треугольному виду, что позволило значительно сократить число обменов на шаге. Разработаны параллельные алгоритмы вариации шага с фиксированным числом итераций и основанные на контроле локальной точности. На основе построенных алгоритмов выполнена параллельная реализация тестовых задач.

Ключевые слова: задача Коши, параллельные вычисления, диагонализация, триангуляризация, управление шагом

Введение

Рассматривается решение задачи Коши

$$x' = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0, \quad t \in t_0, t_0 + T, \quad (1)$$

где правая часть $f(t, x(t)): R^{m+1} \rightarrow R^m$ является достаточно гладкой функцией. При этом исследуется возможность построения таких методов, которые, с одной стороны, позволяли бы адаптировать шаг интегрирования с учетом особенностей поведения объекта, а, с другой стороны, обеспечивали выполнение свойств векторизации, т.е. возможности получать численное решение параллельно в различных расчетных точках или с различными порядками аппроксимации [1-3]. Для гибкого управления выбором шага желательно иметь возможность совершать шаг интегрирования и оценивать погрешность при меньшем количестве вычисляемых значений правых частей [4-5]. Для повышения вычислительной эффективности численного интегрирования дифференциальных уравнений и контроля пошаговой погрешности в работе предлагается использование вложенных методов [6-7]. Для получения оценки погрешности интегрирования методом порядка p параллельно выполняются шаги методами порядка точности p и $p+1$ ($p-1$). В работах [8-10] автором рассмотрены вопросы генерации таких методов заданного порядка точности, а в работах [11-13] вопросы упрощения итераций при численном интегрировании, что обеспечивается приведением коэффициентов расчетных матриц к особому виду. Так в работах [11-12] предлагается предварительно вы-

полнить диагонализацию полной матрицы коэффициентов расчетной схемы произвольного неявного метода, в работе [13] рассмотрены варианты триангуляризации.

Использование таких методов при параллельном моделировании динамических объектов кроме высоких показателей параллелизма характеризуется также хорошими свойствами устойчивости и высокими порядками аппроксимации. 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 параллельных алгоритмов управления шагом интегрирования при решении жестких уравнений и их систем на основе вложенных методов с приведенными к особому виду матрицами коэффициентов, что обеспечивает минимизацию числа обменов на итерациях.

Параллельный контроль размера шага с фиксированным числом итераций

Рассмотренные в [11-13] варианты приведения исходных матриц коэффициентов A в (2)

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^t \end{array}, \quad (2)$$

к виду с особенностями, основанными на диагонализации и триангуляризации, позволяют не только сократить количество обменов на итера-

циях, но и успешно использовать полученные варианты приведения матриц для управления шагом интегрирования.

Управление шагом может осуществляться за счет одновременного использования двух стадийных методов: основного метода вида (3) с приведенными матрицами коэффициентов

$$x_{n+1} = x_n + \tau_n \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (3)$$

$$k_i = f(t_n + c_i \tau_n, g_i),$$

$$g_i = x_n + \tau_n \sum_{l=1}^i a_{il} k_l, \quad i = 1, 2, \dots, s. \quad (4)$$

и вложенного метода вида (5)

$$\tilde{x}_{n+1} = x_n + \tau_n \sum_{i=1}^s \tilde{b}_i k_i \quad (5)$$

с порядками соответственно p и $p+1$ ($p-1$). В случае диагонализации матрицы (4) будет представлена в виде

$$g_i = x_n + \tau_n d_{ii} k_i, \quad i = 1, 2, \dots, s. \quad (6)$$

После преобразования исходной матрицы коэффициентов и получения расчетных схем с диагональной матрицей вида (6) или с нижней треугольной (4), необходимо обеспечить параллельную реализацию построенных методов.

Поскольку методы носят характер неявных относительно значений $g_i, i = 1, 2, \dots, s$, каждый временной шаг состоит из определения начального приближения

$$g_i^{(0)} = x_n, \quad i = 1, 2, \dots, s$$

и фиксированного количества итераций k

$$g_i^{(j)} = x_n + \tau_n \sum_{l=1}^i a_{il} f(t_n + c_l \tau_n, g_l^{(j-1)}). \quad (7)$$

Если исходная матрица была преобразована к диагональному виду, то соотношение (7) будет иметь вид

$$g_i^{(j)} = x_n + \tau_n d_{ii} f(t_n + c_i \tau_n, g_i^{(j-1)}). \quad (8)$$

Искомое решение

$$x_{n+1} = x_n + \tau_n \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i \tau_n, g_i^{(k)}).$$

Количество итераций k определяет порядок сходимости метода

$$p^* = \min(p, k + 1), \quad (9)$$

где p порядок используемого стадийного метода. Один шаг по времени, соответствующий

системам уравнений (3), (5), приведен на рис. 1. Каждый процессор получает значения x_n , которые принимаются за начальные приближения значений $g_i^{(0)} = x_n, i = 1, 2, \dots, s$, величину текущего временного шага τ_n и заданные значения количества итераций k_1 и k_2 , которые согласованы с порядками используемых стадийных методов p и $p+1$. Поскольку решение идет двумя методами, для реализации следует назначить две линейки процессоров, на каждой из которых будет осуществляется k_1 и k_2 повторяющихся независимых вычислений значений $g_i^{(j)}, i = 1, 2, \dots, s, j = 1, 2, \dots, k$ по (7) или (8) в зависимости от вида преобразования матрицы. Понятно, что в силу (8) нерационально использовать число итераций большее, чем порядок используемого стадийного метода p . В силу диагонального вида матрицы коэффициентов, для каждой итерации значения $g_i^{(j)}$ вычисляются параллельно и независимо друг от друга с помощью метода Ньютона. Процесс итерирования прекращается, если выполнено требуемое количество итераций.

На основе рассчитанных значений стадийных векторов по (3) и (5) формируются два решения, одно из которых получено методом с точностью $p - x_{n+1}^{(p)}$ второе с точностью $p+1 - x_{n+1}^{(p+1)}$.

Полученные решения позволяют сформировать норму вектора расхождений $\|x_{n+1}^{(p)} - \tilde{x}_{n+1}^{(p+1)}\|$, на основе которой осуществляется оценка достигнутой точности интегрирования на шаге

$$\varepsilon = \frac{1}{2^p - 1} \max \left\| \frac{x_{n+1}^{(p)} - \tilde{x}_{n+1}^{(p+1)}}{\tilde{x}_{n+1}^{(p+1)}} \right\|, \quad (10)$$

которая сравнивается с заданным значением точности tol . Если локальная погрешность превышена, текущее значение шага отбрасывается и осуществляется новый просчет для точки x_{n+1} с уменьшенной длиной шага.

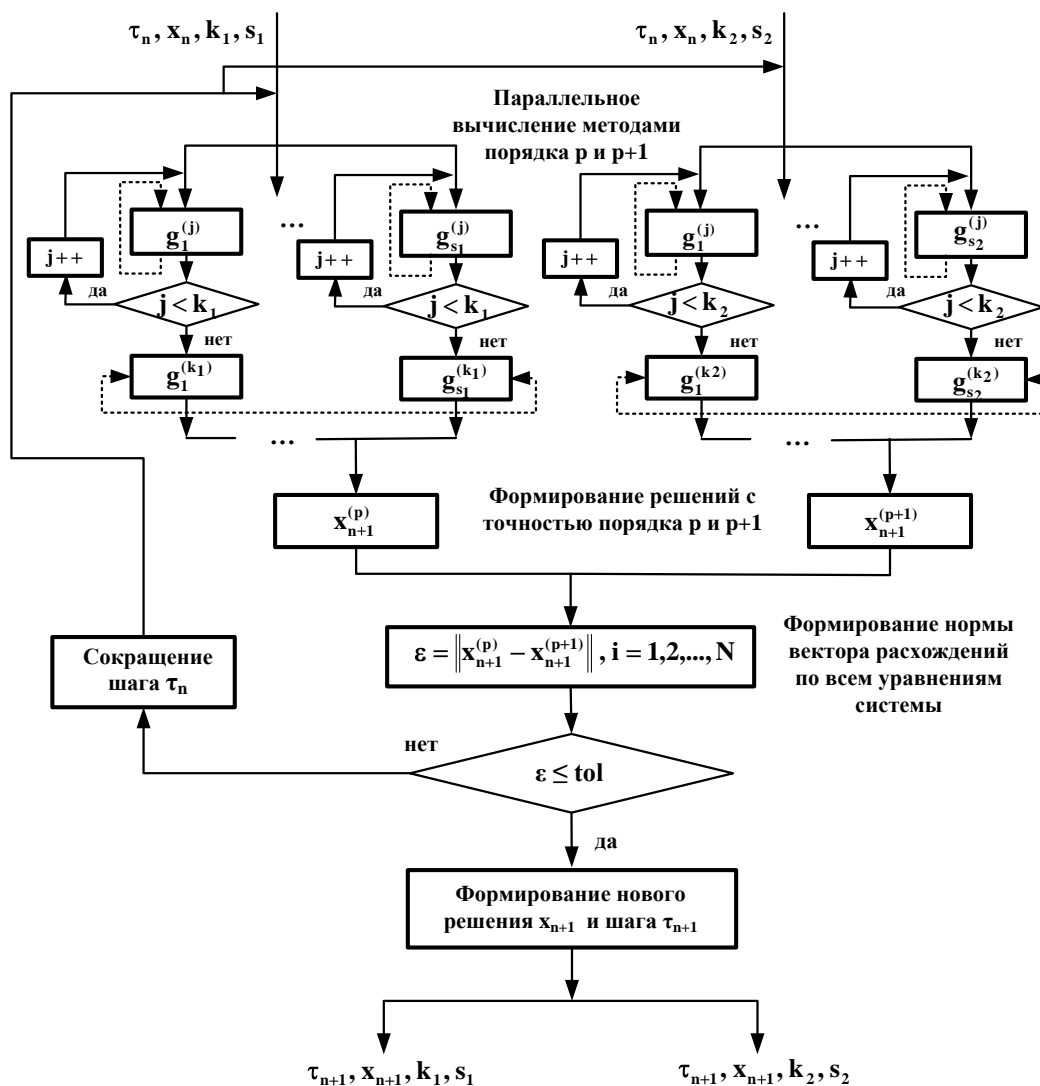


Рисунок 1 – Схема параллельного управления шагом с фиксированным числом итераций на основе диагонализированной матрицы коэффициентов

Если локальная точность обеспечена, формируются вектор решений и новое значение шага

$$\tau_{n+1} = \tau_n^*$$

$$* \min \left(\text{fax max}, \max \left(\text{fax min}, \omega \left(\frac{\text{tol}}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{p+1}} \right) \right). \quad (11)$$

Максимальные коэффициенты увеличения шага *faxmax* и уменьшения *faxmin* обычно выбирают между 1.5 и 5, что предотвращает слишком сильное увеличение (уменьшение) длины шага. Понятно, что, если их выбрать слишком малыми, это может привести и к излишнему увеличению вычислительной работы. Для шагов, выполняемых непосредственно после отбрасывания неудачных, значение *faxmax*= 1, ω - множитель безопасности, который выбирался равным 0.8,

0.9, $0.25^{\frac{1}{p+1}}$, $0.38^{\frac{1}{p+1}}$, чтобы на ближайших итерациях погрешность была приемлема с высокой вероятностью. В противном случае шаг отклоняется и просчет повторяется заново с шагом

$$\tau_n = \tau_n \text{ fax min}. \quad (12)$$

Параллельное управление размером шага, основанное на контроле локальной точности

Рассмотрим вариант реализации параллельного управления размером шага на основе преобразованных матриц коэффициентов, когда количество итераций задается не жестко, а определяется значением нормы вектора расхождений, полученным из приближений на соседних итерациях.

Тогда итерационные процессы на каждой из линеек процессорных элементов могут быть остановлены до достижения предельных значений k_1 и k_2 , если для обоих использующихся стадийных методов с порядками p и $p+1$ методов достигнуто выполнение соотношений

$$\max_{1 \leq i \leq s_j} |g_i^{(j)} - g_i^{(j-1)}| \leq tol, j = 1, 2, \dots$$

$$\max_{1 \leq i \leq s_2} |g_i^{(j)} - g_i^{(j-1)}| \leq tol, j = 1, 2, \dots$$

Схема алгоритма, основанная на выполнении условия сходимости, приведена на рис. 2.

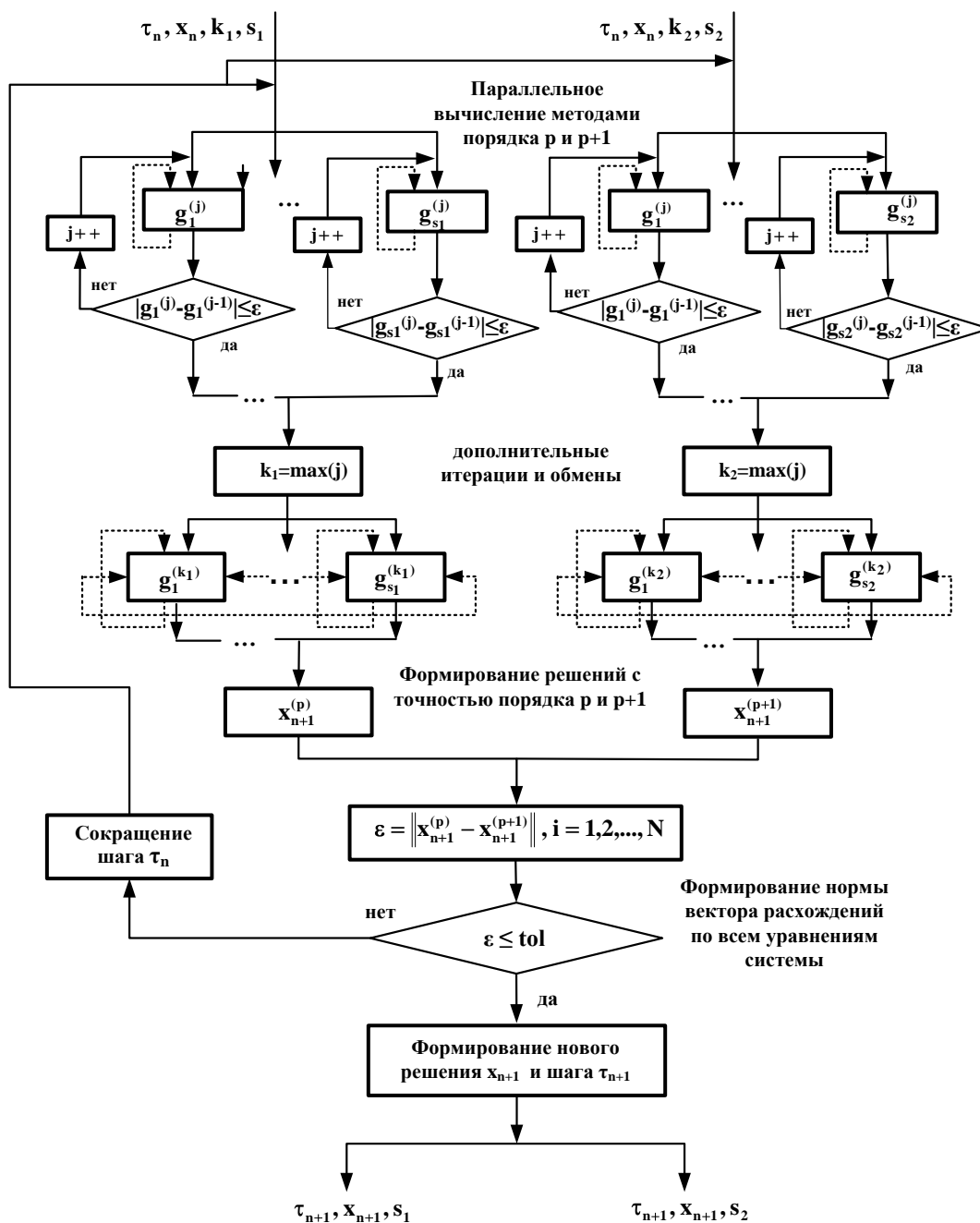


Рисунок 2 – Схема параллельного управления шагом с контролем локальной точности на основе диагонализированной матрицы коэффициентов

После определения требуемого числа итераций k_1 и k_2 , необходимых для обеспечения локальной точности каждым из методов, следует выполнить (если потребуется) дополнительные итерации для получения значений

$$g_i^{(k_1)}, i = 1, 2, \dots, s_1$$

и

$$g_i^{(k_2)}, i = 1, 2, \dots, s_2.$$

Затем на двух линейках процессоров будут сформированы два вектора решений $x_{n+1}^{(p)}$ и $x_{n+1}^{(p+1)}$.

Полученные решения позволяют сформировать норму вектора расхождений $\|x_{n+1}^{(p)} - \tilde{x}_{n+1}^{(p+1)}\|$ и на ее основании оценку достигнутой точности интегрирования на шаге по соотношению (10). Полученная оценка сравнивается с заданным значением точности. Далее, как и для алгоритма с фиксированным числом итераций, если заданная точность результата обеспечена на текущем шаге, шаг принимается, формируется вектор x_{n+1} и новое значение шага τ_{n+1} на основании (11). Если требуемая точность не достигнута, текущая длина шага сокращается по (12) и процесс вычислений повторяется с новым шагом.

Реализация тестовых задач на основе алгоритмов управления размером шага

В качестве тестовой задачи рассматривается система, приведенная в [15].

$$x_1' = \mu_1 x_1, \quad x_2' = x_1 + \mu_1 x_2, \quad (13)$$

$$x_3' = \mu_2 x_3, \quad x_4' = x_3 + \mu_2 x_4,$$

$$x_5' = 2x_4 + \mu_2 x_5, \quad x_6' = 3x_5 + \mu_2 x_6.$$

Точное решение этой линейной системы, у которой матрица правой части состоит из двух жордановых клеток, на интервале $t \in [0,1]$ имеет вид

$$x_1(t) = x_1(0)e^{\mu_1 t},$$

$$x_2(t) = x_2(0) + x_1(0) e^{\mu_1 t},$$

$$x_3(t) = x_3(0)e^{\mu_2 t},$$

$$x_4(t) = x_4(0) + x_3(0) e^{\mu_2 t},$$

$$x_5(t) = x_5(0) + 2x_4(0)t + x_3(0)t^2 e^{\mu_2 t},$$

$$x_6(t) = x_6(0) + 3x_5(0)t + 3x_4(0)t^2 + x_3(0)t^3 e^{\mu_2 t}.$$

Для начальных условий

$$x_1(0) = x_2(0) = 1,$$

$$x_3(0) = x_4(0) = x_5(0) = x_6(0) = 1000$$

система будет хорошо обусловлена при следующих значениях параметров

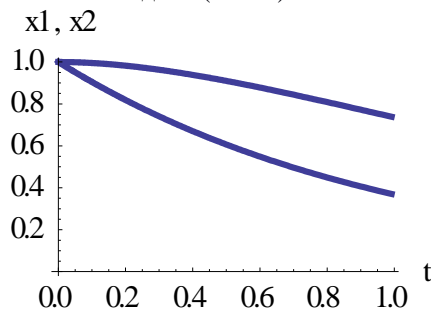
$$\mu_1 = 1, \mu_2 = 1. \quad (14)$$

Данная система будет жесткой при параметрах

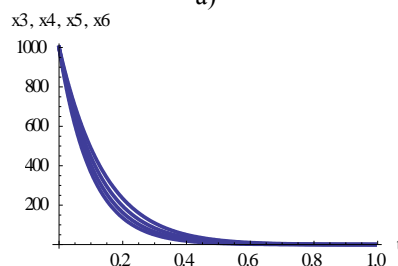
$$\mu_1 = -1, \mu_2 = -10000. \quad (15)$$

На рис. 3 из-за разного масштаба решения выполнено разделение компонент x_1, x_2 и x_3, x_4, x_5, x_6 а) – б) и приведено распределение глобальных погрешностей в).

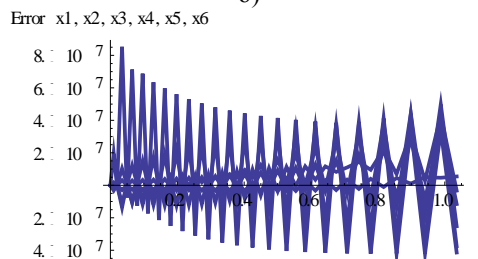
На рис. 4 представлена динамика изменения шага для мягкой хорошо обусловленной задачи (13–14).



а)



б)



в)

Рисунок 3 – Поведение численного решения а) – б) и распределения глобальных погрешностей в) задачи (13-14)

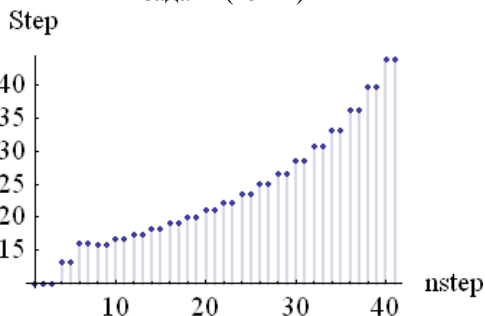


Рисунок 4 – Вариация шага для задачи (13-14)

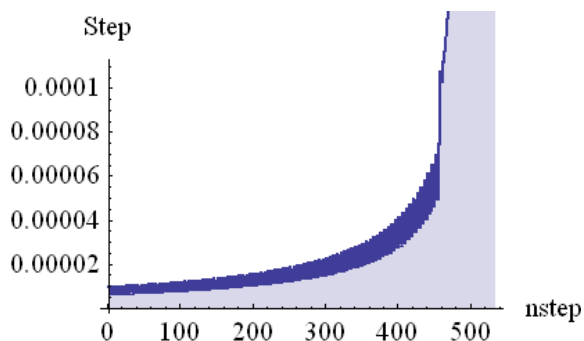


Рисунок 5 – Вариация шага для задачи (13), (15)

Изменение начальных условий и параметров привело к жесткой задаче (13), (15), при этом число шагов, потребовавшееся для численной реализации с заданной точностью, возросло на порядок и достигло 535 (рис. 5). Но если говорить о применении для данной задачи той же численной схемы, но без вариации шага, то для обеспечения заданной точности число шагов составило бы 10^5 .

Заключение

Исследования, проведенные в работе, способствуют повышению эффективности моделирования с использованием параллельных компь-

ютеров за счет сокращения числа обменов при параллельной численной реализации решения задачи Коши с помощью неявных методов, ориентированных на решение жестких уравнений и их систем. Предлагаемые подходы базируются на модификациях неявных многостадийных методов, обеспечивающих 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 (в s раз, где s – число стадий метода) достигается за счет использования диагонального или треугольного приближения исходной матрицы.

Для классических неявных методов, которые используются для решения жестких уравнений и их систем, определение диагональных D или треугольных T вхождений осуществляется однократно, до начала вычислений. Для такой модификации методов в работе использовалась программная система *Mathematica Wolfram Research, Inc.*

Список литературы

1. 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.
2. Дмитрієва О.А. Паралельні різницеві методи розв'язання задачі Коші / О.А. Дмитрієва. – Донецьк: ДонНТУ, 2011. – 265 с. – ISBN 978-966-377-104-5.
3. 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.
4. 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 978-3-659-38425-7.
5. Дмитриева О.А. Высокоэффективные алгоритмы управления шагом на основе параллельных коллокационных блочных методов // Искусственный интеллект, 2012. – № 4. – С. 77–88.
6. Дмитриева О.А. Разработка параллельных алгоритмов управления шагом на основе вложенных стадийных методов / О. А. Дмитриева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Проблеми моделювання та автоматизації проектування динамічних систем». – 2012. – № 1(10)–2(11). – С. 22–31
7. Дмитриева О.А. О параллельном управлении шагом на основе генерации вложенных стадийных методов // О. А. Дмитриева, В. Г. Гуськова, Н.Г. Гуськова // Збірка наукових праць 3-ої Всеукраїнської науково-практичної конференції «Автоматизація та комп'ютерно - інтегровані технології АКИТ - 2013», 17–18 квітня 2013. – К.: НТУУ "КПІ", 2013. – С. 22-24.
8. 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.
9. 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. – ISBN 978-3-844-31962-0.

10. Дмитриева О.А. Генерация операторов перехода для параллельного управления шагом при моделировании линейных динамических систем / О. А. Дмитриева // Радиоэлектроника. Информатика. Управление. – 2012. – № 2 (27). – С. 88–96.
11. Дмитриева О.А. Параллельное моделирование жестких систем на основе диагонализации полной матрицы / О. А. Дмитриева // Искусственный интеллект. – 2011. – № 4. – С. 46–53.
12. Дмитриева О.А. Генерация численных методов решения дифференциальных уравнений высоких порядков / О. А. Дмитриева, Я. А. Куприй // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Системний аналіз та інформаційні технології у науках про природу та суспільство». – 2011. – № 1. – С. 152–156.
13. Дмитриева О.А. Параллельное моделирование на основе триангуляризации полной матрицы / О. А. Дмитриева // Матеріали 4-ї міжнародної науково-технічної конференції «Моделювання та комп'ютерна графіка», Донецьк, 5–8 жовтня 2011. – Донецьк: ДонНТУ, 2011. – С.98–101.
14. Дмитриева О.А. Оптимизационное моделирование динамических систем / О. А. Дмитриева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Проблеми моделювання та автоматизації проектування динамічних систем». – 2008. – № 7 (150). – С. 90–103.
15. Залеткин, С.Ф. Коллекция дифференциальных уравнений для тестирования вычислительных алгоритмов и программ / С. Ф. Залеткин // Вопросы конструирования библиотек программ: под ред. Е.А. Гребеникова, В.А. Морозова, О.Б. Арушаняна. – М.: Изд-во МГУ, 1983. – с. 54-71.

Надійшла до редакції 20.10.2013

О.А. ДМИТРИЄВА

Донецький національний технічний університет

ПАРАЛЛЕЛЬНИЙ КОНТРОЛЬ РОЗМІРУ КРОКУ ВКЛАДЕНИМИ МЕТОДАМИ НА ОСНОВІ ПЕРЕТВОРЕНИХ МАТРИЦЬ КОЕФІЦІЄНТІВ

Стаття присвячена питанням паралельного керування кроком інтегрування при моделюванні динамічних об'єктів, описуваних системами звичайних диференціальних рівнянь (СОДУ) великої розмірності. Для можливого керування кроком інтегрування пропонується використання паралельних вкладених методів з генерацією коефіцієнтів заданого порядку точності. Розрахункові схеми методів побудовані шляхом приведення матриць розрахункових коефіцієнтів до діагонального або трикутного виду, що дозволило значно скоротити число обмінів на кроці. Розроблено паралельні алгоритми варіації кроку з фіксованим числом ітерацій і засновані на контролі локальної точності. На основі побудованих алгоритмів виконана паралельна реалізація тестових задач.

Ключові слова: *задача Коші, паралельні обчислення, діагоналізація, триангуляризація, керування кроком*

О.А. DMITRIEVA

Donetsk National Technical University

PARALLEL CONTROL OF THE STEP SIZE NESTED METHODS BASED ON TRANSFORMED MATRIX OF COEFFICIENTS

The article deals with the parallel control integration step in the modeling of dynamic objects, described by systems of ordinary differential equations (SODE) of large dimension.

Step control for the possible integration of the proposed use of parallel methods for the generation of embedded coefficients a given order of accuracy. Payment schemes are constructed on the methods of reducing a matrix of the estimated coefficients to the diagonal or triangular form, thus significantly reducing the number of exchanges in step.

Developed parallel algorithms variations step with fixed number of iterations based on the control local accuracy. On the basis of these algorithms made parallel implementation of the test problems. Applying such techniques for parallel simulation of dynamic objects than high levels of parallelism is also characterized by good stability properties and high-order methods. Obtained on the basis of this approach, numerical schemes have less computational complexity due to the significant reduction in the number of exchanges and are very effective in solving stiff equations.

The proposed approaches are based on modifications of the implicit multistep methods, concurrent receipt values in the stage-points, while sharing the values of the processors do not perform after each iteration, and then get the value for the next target point. Such a drastic reduction in the number of exchanges (s times, where s - the number steps of the method) is achieved by using a diagonal or triangular approximation of the original matrix. For classical implicit techniques which are used to solve the equations and rigid systems as defined diagonal D or triangular T occurrences performed once, before calculation. For the modification of methods used in the software system Mathematica Wolfram Research, Inc.

Key words: *Cauchy problem, parallel computing, diagonalization, triangularization, step control*