УДК 681.5

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЖОРСТКИХ ДИНАМІЧНИХ ЗАДАЧ НА БАЗІ НЕЯВНИХ БЛОКОВИХ МЕТОДІВ ІЗ КОНТРОЛЕМ ЛОКАЛЬНОЇ ПОХИБКИ

І.А. Назарова
Донецький національний технічний університет

В статье рассматривается численное моделирование жестких динамических задач с сосредоточенными параметрами, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений. Предложены эффективные параллельные блочные методы с встроенными способами оценки локальной погрешности. Получены характеристики потенциального и реального параллелизма.

Дослідження методів розв’язання жорстких динамічних задач із зосередженими параметрами [1] виявили, що паралельні властивості таких методів багато в чому визначаються видом чисельної схеми, покладеної в їх основу. Найменш трудомісткими є явні методи, проте властиві цим схемам недоліки, зокрема умовна стійкість, істотно обмежують сферу їх застосування. У зв'язку із цим значний інтерес мають неявні схеми, які, не дивлячись на велику обчислювальну складність, не мають альтернативи серед однокрокових методів при вирішенні жорстких задач [2].

У статті розглядається чисельне розв’язання задачі Коші, асоційоване з розв’язанням систем звичайних диференційних рівнянь (ЗДР) першого порядку із відомими початковими умовами:

$$\begin{cases} \dfrac{d\bar{y}(x)}{dx} = \bar{f}(x,\bar{y}(x)), \\ \bar{y}(x_0) = \bar{y}_0, \end{cases} \tag{1}$$

де права частина системи є в загальному випадку нелінійна функція, що задає відображення $F = \bar{f} : R \times R^m \to R^m$.

Блокові багатоточкові методи вирішення динамічних задач є особливо актуальними, бо добре узгоджуються з архітектурою паралельних обчислювальних систем (ОС) і не вимагають обчислення значень в проміжних вузлах, що значно підвищує ефективність розрахунків. Дані методи володіють достатніми характеристиками стійкості і є по своїй суті паралельними, оскільки дозволяють отримувати розв’язок одночасно в декількох точках сітки інтегрування.

Множина точок рівномірної сітки $\Omega_h : \{ x_j \}, j = \overline{1,M}$ розбивається на N блоків. Кожен блок містить k точок і при цьому $N \leq M$. Передбачається, що в межах блоку всі точки рівновіддалені одна від одної:

$$x_{n,i} = x_{n,o} + ih, i = \overline{1,k}, \qquad (2)$$

де i – номер точки в блоці $i = \overline{1,k}$; n – номер блоку $n = \overline{1,N}$; $x_{n,i}$ – точка з номером i, що належить блоку n; $x_{n,0}$ – початкова точка n-го блоку; $x_{n,k}$ – кінцева точка n-го блоку. Множина точок n-го блоку з k точок позначається, як $T_n^{(k)}$. При цьому має місце рівність: $x_{n,k} = x_{n+1,0}$. Нехай $y_{n,0}$ є наближене значення розв'язку задачі Коші в точці $x_{n,0}$ – початковій точці оброблюваного блоку. Рівняння однокрокових блокових різницевих методів у вживанні до ЗДР для блоку з k точок можуть бути записані таким чином:

$$y_{n,i} = y_{n,0} + ih\left[b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^{k} a_{i,j} F_{n,j} \right]; i = \overline{1,k}; n = \overline{1,N}. \qquad (3)$$

Розкладом в ряд Тейлору функцій, що входять у нев'язку, можна показати, що однокроковий k – точковий блоковий метод має найбільший порядок апроксимації, рівний $k+1$, отже, локальна помилка у вузлах блоку має порядок $O(h^{k+2})$ [1]. Блокові паралельні методи відносяться до класу неявних, тому для обчислення наближеного розв'язку задачі Коші необхідно вирішити систему, в загальному випадку нелінійних, рівнянь. Одним із засобів здобуття розв'язку є метод простої функціональній ітерації:

$$\begin{cases} y_{n,i,0} = y_{n,0} + ihF_{n,0}, i = \overline{1,k}, n = 1,2,\ldots,N, \\ y_{n,i,l+1} = y_{n,0} + ih(b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^{k} a_{i,j} F_{n,j,l}), \;\; l = \overline{0,L-1}, \end{cases} \qquad (4)$$

де n – номер блоку, $n = 1,2,\ldots,N$; i – номер точки блоку, $i = \overline{1,k}$; l – номер поточної ітерації $l = \overline{0,L-1}$; L – максимальне число ненульових ітерацій.

На відміну від явних методів вирішення СЗДР, реалізація альтернативних засобів оцінки апостеріорної локальної похибки на основі блокових методів пов'язана із рядом особливостей:

– немає відповідних послідовних аналогів, отже, потрібно розробити і обґрунтувати метод оцінки локальної похибки;

– зміна кроку інтегрування можлива лише після виконання обчислень у всіх k вузлах поточного n-го блоку;

– при умові незадовільної оцінки локальної похибки практично усі обчислення для точок блоку виявляються даремними (тільки деякі звернення до правої частини СЗДР можуть бути використані знову).

Нехай розв'язання задачі Коші для ЗДР виконується на основі k-точкового однокрокового блокового методу і з контролем локальної похибки на базі методу дублювання кроку або правила Рунге. При реалізації дублювання кроку необхідно провести обчислення по одній і тій же групі формул:

$$\begin{cases} y_{n,i}^{(1)} = y_{n,0}^{(1)} + ih \cdot \left[b_i f(x_{n,0}; y_{n,0}^{(1)}) + \sum_{j=1}^{k} a_{i,j} f(x_{n,j}; y_{n,j}^{(1)}) \right], n = \overline{1,N},\ i = \overline{1,k} \\ y_{n,i}^{(2)} = y_{n,0}^{(2)} + i\frac{h}{2} \cdot \left[b_i f(x_{n,0}; y_{n,0}^{(2)}) + \sum_{j=1}^{k} a_{i,j} f(x_{n,j}; y_{n,j}^{(2)}) \right], n = \overline{1,N1}, i = \overline{1,k} \end{cases} \tag{5}$$

на двох різних рівномірних сітках:

1) $\Omega_h = \{ x_j \}, j = \overline{1,M}$ із кроком h у N блоках;

2) $\Omega_{h/2} = \{ x_j \}, j = \overline{1,M1}$ із половинним кроком у $N1$ блоках.

Апроксимація розв'язку з одинарним кроком позначається $y_{n,i}^{(1)}$, а із половинним, відповідно: $y_{n,i}^{(2)}$. Точки n-го блоку сітки Ω_h складають множину $T_{n,k}^{(1)}$, а сітки $\Omega_{h/2}$ – $T_{n,k}^{(2)}$. Оскільки кількість точок в блоці для обох сіток дорівнює k, то для одного й того ж інтервалу інтегрування число блоків другої сітки точно у два рази більше, ніж для першої. Основою розрахунку при інтегруванні є сітка Ω_h, при цьому кожен вузол з парним номером в блоках сітки $\Omega_{h/2}$ використовується для обчислення оцінки локальної похибки на цьому кроці. Більш того, як розв'язку в цих вузлах часто приймається апроксимація, отримана з половинним кроком або екстрапольована, як найбільш точна. Вузли сітки $\Omega_{h/2}$ з непарними номерами використовуються лише як допоміжні. Оскільки дані методи є неявними, вживання правила Рунге до блокових однокрокових методів вимагає вирішення трьох різних систем нелінійних алгебраїчних рівнянь розмірності k.

Загальний час послідовної реалізації блокових методів з правилом Рунге T_1 складається з суми часу обчислення вирішення з одинарним кроком в блоці n плюс час вирішення з половинним кроком в n-тому і $(n+1)$-шому блоках:

$$T_1 = [k(l1 + l2 + l3) + 2] \cdot T_F + [(l1 + l2 + l3)(2k^2 + 4k) + 9k] \cdot t_{op} \tag{6}$$

де T_F – час обчислень правої частини ЗДР, t_{op} – час обчислень операції із плаваючою точкою.

Оскільки для здобуття кожного з трьох вирішень реалізується свій ітераційний процес, введемо наступні позначення. Нехай $L1$ – гранична кількість ітерацій для знаходження апроксимації вирішення $y_{n,i}^{(1)}$, $L2$ – для рішення $y_{n,i}^{(2)}$ и $L3$ – для рішення $y_{n+1,i}^{(2)}$. Тоді, відповідно, поточне число ітерацій, що забезпечує достатню для кожної з даних задач точність, позначимо: $li,\ li \le Li,\ i = \overline{1,3}$.

Паралельний блоковий k-точковий метод із контролем локальної апостеріорної похибки за правилом Рунге використає максимальний ступінь паралелізму: $Dop = k$, бо кожен процесор обчислює вирішення в одному вузлі сітки Для кожної із трьох задач послідовно виконуються обчислення нульової і подальших ітерацій. При цьому нульова ітерація складається з наступних кроків: обчислення нульового наближення паралельно в кожному вузлі нового блоку по першій формулі системи (4); обчислення правої частини ЗДР від нульового наближення; множинний обмін обчисленими значеннями правої частини за типом "усі-усім". Потім li раз виконується аналогічна група операцій для подальших ітерацій:

1) обчислення чергового наближення в кожному вузлі нового блоку по другій формулі (4), базовою операцією є множення матриці на вектор значень правих частин ЗДР;

2) обчислення правої частини ЗДР від отриманого наближення і множинний обмін значеннями правої частини за типом "усі-усім".

Час паралельних обчислень $T_{p,comp}$ за схемою (5) із локальною точністю $O(h^{k+li+2})$ у вузлах відповідних сіток складає:

$$T_{p,comp} = (\sum_{i=1}^{3} li + 2) \cdot T_F + [\sum_{i=1}^{3} li \cdot (2k+5) + 4] \cdot t_{op}. \tag{7}$$

Потенційні характеристики паралелізму запропонованого методу можна обчислити за числом звернень до правої частини ЗДР. При $T_F \gg t_{op}$: $S_{pot} \approx \left[\left(k\sum_{i=1}^{3} li + 2\right)\cdot T_F\right] \Big/ \left[\left(\sum_{i=1}^{3} li + 2\right)\cdot T_F\right] \approx k,\ E_{pot} \approx \dfrac{S_{pot}}{p} \approx 1,$ тобто має місце практично лінійне прискорення і одинична ефективність. Такі ж потенційні характеристики можуть бути отримані і у разі, коли права частина за часом обчислення сумірна з часом виконання однієї операції з плаваючою точкою. Реальні динамічні характеристики отриманого паралельного алгоритму істотно залежать не лише від параметрів задачі і алгоритму, але і від ефективності організації міжпроцесорних зв'язків і визначаються співвідношеннями:

$$S = \frac{(k\cdot\sum_{i=1}^{3} li+2)\cdot T_F + [\sum_{i=1}^{3} li\cdot(2k^2+4k)+5k]\cdot t_{op}}{(\sum_{i=1}^{3} li+2)\cdot T_F + [\sum_{i=1}^{3} li\cdot(2k+5)+4]\cdot t_{op} + \left(\sum_{i=1}^{3} li+2\right)\cdot T_{all-to-all}(p)}, \qquad (8)$$

$$E = \frac{(k\cdot\sum_{i=1}^{3} li+2)\cdot T_F + [\sum_{i=1}^{3} li\cdot(2k^2+4k)+5k]\cdot t_{op}}{k(\sum_{i=1}^{3} li+2)\cdot T_F + [\sum_{i=1}^{3} li\cdot(2k+5)+4]\cdot t_{op} + \left(\sum_{i=1}^{3} li+2\right)\cdot T_{all-to-all}(p)}. \qquad (9)$$

З тимчасових характеристик алгоритму і початкової задачі слідкує, що якість паралелізму найбільш істотно залежить від необхідного об'єму обчислень на реалізацію правої частини (1) і кількості точок в одному блоці. Очевидно, чим складніше права частина ЗДР, тим краще характеристики паралелізму: $\uparrow T_F \Rightarrow \uparrow S \Rightarrow \uparrow E$ і, одночасно, чим більше розмір блоку, тим більше прискорення і менша ефективність даного методу: $\uparrow k \Rightarrow \uparrow p \Rightarrow \uparrow S \Rightarrow \downarrow E$.

Таким чином, найкращі характеристики паралелізму при рішенні нелінійної задачі Коші для одного рівняння блоковими методами з контролем локальної похибки за правилом Рунге досягаються для будь-якої паралельної архітектури, великої розмірності задачі, складної правої частини і високошвидкісних мереж передачі інформації.

Література

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

2. Фельдман Л.П., Назарова И.А. Параллельные алгоритмы численного решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Математическое моделирование, т.18, № 9, 2006. – С. 17-31.

Отримано 27.05.09