

О.А. Дмитриева (канд. тех. наук., доц.)
Донецкий национальный технический университет
dmitriv@pmi.dgtu.donetsk.ua

РАЗРАБОТКА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ УПРАВЛЕНИЯ ШАГОМ НА ОСНОВЕ ВЛОЖЕННЫХ СТАДИЙНЫХ МЕТОДОВ

Работа посвящена построению эффективных параллельных алгоритмов численного решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Поскольку при численном решении жестких систем возникает необходимость в изменении шага интегрирования, контроль за размером шага осуществляется автоматически на основе вложенных многостадийных методов.

Ключевые слова: задача Коши, стадийный метод, вариация шага, порядок точности

Введение

Для гибкого управления выбором шага при решении исходной задачи Коши

$$x' = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = (x_1(t_0), x_2(t_0), \dots, x_N(t_0))^T \quad (1)$$

для жестких уравнений и их систем желательно иметь возможность совершать шаг интегрирования и оценивать погрешность при меньшем количестве вычисляемых значений правых частей [1-3]. Рассмотренный в [4] метод пошагового контроля точности численного интегрирования дифференциальных уравнений и выбора расчетного шага на основе двойного счета по правилу Рунге приводит к значительному увеличению вычислений [5-6]. Для повышения вычислительной эффективности численного интегрирования дифференциальных уравнений и контроля пошаговой погрешности в работе предлагаются параллельные вложенные методы. Основная идея состоит в выполнении шага от точки x_n к x_{n+1} методами порядка точности p и $p+1$, для того чтобы получить оценку погрешности интегрирования методом порядка p [7]. В общем случае для разностного метода p -го порядка аппроксимации выражение для главного члена локальной погрешности будет иметь вид

$$\gamma_n = O(\tau^{p+1}) \quad (2)$$

При практической оценке этой величины можно считать, что погрешность методов более высокой точности на шаге имеет главный член вида [8]

$$\gamma_{n+1}(\tau) = \varphi^{(p+1)}(t_n, x_n) \tau^{p+1}$$

Точка $(t_n + \tau, x_{n+1})$ находится близко от точки (t_n, x_n) , поэтому погрешность на следующем шаге будет иметь такой же главный член. Будем считать, что при использовании метода p -го порядка точности абсолютная величина погрешности на каждом шаге не должна превышать заданной величины tol . Тогда, если, согласно правилу Рунге, осуществить двойной счет с шагом 0.5τ , то в результате двух шагов будет получено приближение $u_{n+1}^{(0.5\tau)}$ к значению $x(t_n + \tau)$ такое, что

$$u_{n+1}^{(0.5\tau)} - x(t_n + \tau) \approx 2\varphi^{(p+1)}(t_n, x_n)(0.5\tau)^{p+1}.$$

Если, исходя из точки (t_n, x_n) , применить любой стадийный метод с шагом τ , то получится приближенное значение $u_{n+1}^{(\tau)}$, для которого

$$u_{n+1}^{(\tau)} - x(t_n + \tau) \approx \varphi^{(p+1)}(t_n, x_n)\tau^{p+1}.$$

Из этих соотношений получим представление главного члена погрешности на шаге в виде

$$u_{n+1}^{(0.5\tau)} - x(t_n + \tau) \approx \frac{u_{n+1}^{(\tau)} - u_{n+1}^{(0.5\tau)}}{2^p - 1}.$$

При желании можно уточнить полученное приближенное значение, прибавив к нему величину главного члена погрешности., т. е. положить

$$x(t_n + \tau) \approx u_{n+1}^{(0.5\tau)} + \frac{u_{n+1}^{(0.5\tau)} - u_{n+1}^{(\tau)}}{2^p - 1}.$$

Поскольку для метода порядка p пошаговая погрешность, в соответствии с (2), определяется формулой

$$u_{n+1}^{(p)} - x(t_n + \tau) \approx \varphi^{(p+1)}(t_n, x_n)\tau^{p+1}, \quad (3)$$

и для метода порядка $p+1$ пошаговая погрешность определяется как

$$u_{n+1}^{(p+1)} - x(t_n + \tau) \approx \varphi^{(p+2)}(t_n, x_n)\tau^{p+2}, \quad (4)$$

то, вычитая из (3) соотношение (4), получим представление главного члена погрешности метода p -го порядка на шаге в виде

$$u_{n+1}^{(p)} - u_{n+1}^{(p+1)} \approx \tau^{p+1}\varphi^{(p+1)}(t_n, x_n) - \tau^{p+2}\varphi^{(p+2)}(t_n, x_n) \approx \tau^{p+1}\varphi^{(p+1)}(t_n, x_n)$$

Таким образом, для главного члена погрешности получаем оценку

$$\gamma_{n+1}(\tau) \approx u_{n+1}^{(p)} - u_{n+1}^{(p+1)} \quad (5)$$

Обеспечивая на каждом шаге соотношение $\gamma_{n+1}(\tau) \leq tol$, что будет осуществляться либо за счет изменения порядка метода p , либо шага интегрирования τ , можно получить решение с требуемой точностью [9]. Для этого в расчетную схему любого стадийного метода кроме численного приближения $x(t_n + \tau)$ необходимо внести еще и некоторое выражение $\tilde{x}(t_n + \tau)$, как правило, более высокого порядка (более точное, чем

$x(t_n + \tau)$). Иногда могут быть сгенерированы методы, поправочный вектор в которых оценивается с точностью $p-1$. Последнее и будет служить для управления погрешностью на каждом шаге.

Генерация вложенных стадийных методов заданного порядка точности

Для вывода вложенного метода в качестве исходной выберем явную s -стадийную схему требуемого порядка точности p с возможностью вариации шага интегрирования τ_n вида

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= x_n + \tau_n \sum_{i=1}^s b_i k_i, \\k_i &= f(t_n + c_i \tau_n, g_i), \\g_i &= x_n + \tau_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j, \quad i = 1, 2, \dots, s.\end{aligned}\tag{6}$$

В (6) для получения оценки погрешности численного решения с порядком $p+1$ необходимо ввести вложенную схему с дополнительными коэффициентами \tilde{b}_i , $i = 1, 2, \dots, s+1$ вида

$$\tilde{x}_{n+1} = x_n + \tau_n \sum_{i=1}^s \tilde{b}_i k_i\tag{7}$$

Имеется несколько известных расчетных схем [10], которые уже содержат коэффициенты вложенного метода, хотя у большинства многостадийных методов такие коэффициенты отсутствуют. Кроме того, как правило, при использовании расчетных схем, ориентированных на параллельную реализацию или специально сгенерированных под топологию процессорного поля, дополнительные коэффициенты \tilde{b}_i подлежат определению. Т.е. необходимо получить вложенные коэффициенты для стадийного метода, которые обеспечили бы для опорного метода порядка p поиск решения \tilde{x}_{n+1} с порядком $p+1$.

Определение порядка аппроксимации и коэффициентов погрешности численных методов интегрирования сводится к сравнению рядов Тейлора для точного и численного решений [11]. Для наглядного представления получаемых при разложении в ряд элементарных дифференциалов используют древовидные 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 [10] и основанный на формировании набора абстрактных деревьев требуемого порядка. Построение модельных уравнений опирается на следующий факт [10]: для любого дерева можно построить такую систему уравнений, что разложение в ряд Тейлора одной из переменных содержит только один элементарный дифференциал, соответствующий данному дереву. Определение коэффициентов метода порядка $p+1$, требует формирования всех абстрактных деревьев, порядок которых укладывается в интервал от 1 до $p+1$.

Выберем в качестве базисной одну из стадийных схем Фельберга с числом стадий $s=3$, определяемую следующей зависимостью

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & & & \\ 1/4 & 1/4 & 0 & & \\ 27/40 & -189/800 & 729/800 & 0 & \\ x_{n+1} & 214/891 & 1/33 & 650/891 & 0 \end{array}$$

Основная формула численного интегрирования, построенная по базисной стадийной схеме будет иметь вид:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n, x_n), \\ k_2 &= f(t_n + 1/4\tau_n, x_n + \tau_n/4k_1), \\ k_3 &= f(t_n + 27/40\tau_n, x_n + \tau_n(-189/800k_1 + 729/800k_2)), \\ x_{n+1} &= x_n + \tau_n(214/891k_1 + 1/33k_2 + 729/800k_3), \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (8)$$

Для вложенного метода, который должен иметь более высокую точность и использовать те же точки, в которых выполняется вычисление правых частей в (8), построим зависимость

$$\begin{aligned} k_4 &= f(t_n + \tau_n, x_n + \tau_n(a_{41}k_1 + a_{42}k_2 + a_{43}k_3)), \\ \tilde{x}_{n+1} &= x_n + \tau_n(\tilde{b}_1k_1 + \tilde{b}_2k_2 + \tilde{b}_3k_3 + \tilde{b}_4k_4), \end{aligned} \quad (9)$$

Погрешность аппроксимации вложенного метода (9) определяется

$$r_n = -\frac{x_{n+1} - x_n}{\tau_n} + (\tilde{b}_1k_1 + \tilde{b}_2k_2 + \tilde{b}_3k_3 + \tilde{b}_4k_4), \quad (10)$$

где k_i , $i = 1, 2, 3, 4$ определены (8) и (9).

После разложения всех функций, входящих в (10) в ряд Тейлора в точке t_n и приравнявая нулю коэффициенты при τ^j , $j = 0, 1, 2, 3$, получаем условия третьего порядка аппроксимации:

$$\begin{aligned} \tilde{b}_1 + \tilde{b}_2 + \tilde{b}_3 + \tilde{b}_4 &= 1, \\ -20 + 10\tilde{b}_2 + 27\tilde{b}_3 + 40(a_{41} + a_{42} + a_{43})\tilde{b}_4 &= 0, \end{aligned}$$

$$-20 + 10\tilde{b}_2 + 27\tilde{b}_3 + 40\tilde{b}_4 = 0,$$

$$-1600 + 300\tilde{b}_2 + 2187\tilde{b}_3 + 4800(a_{41} + a_{42} + a_{43})^2 \tilde{b}_4 = 0,$$

$$-1600 + 2187\tilde{b}_3 + 240(10a_{42} + 27a_{43})\tilde{b}_4 = 0,$$

$$-1600 + 300\tilde{b}_2 + 2187\tilde{b}_3 + 4800(a_{41} + a_{42} + a_{43})\tilde{b}_4 = 0,$$

$$-1600 + 300\tilde{b}_2 + 2187\tilde{b}_3 + 4800\tilde{b}_4 = 0.$$

После упрощения и решения полученной системы уравнений искомые коэффициенты определяются как

$$\tilde{b}_1 = \frac{41}{162}, \quad \tilde{b}_2 = 0, \quad \tilde{b}_3 = \frac{800}{1053}, \quad \tilde{b}_4 = -\frac{1}{78},$$

$$a_{41} = \frac{214}{891}, \quad a_{42} = \frac{1}{33}, \quad a_{43} = \frac{650}{891}.$$

Тогда окончательно вложенная схема примет вид

0	0			
1/4	1/4	0		
27/40	-189/800	729/800	0	
1	214/891	1/33	650/891	0
x_{n+1}	214/891	1/33	650/891	0
\tilde{x}_{n+1}	41/162	0	800/1053	-1/78

Организация параллельного управления шагом на основе вложенных многостадийных явных методов

Для параллельного управления размером шага интегрирования при реализации задачи (1) будем использовать вложенный многостадийный явный метод (6) - (7) с числом расчетных точек s по основному методу и $s+1$ по вложенному. Выделим систему процессорных узлов размерностью $s+1$ с топологией 1D тор, на которых запустим параллельные процессы. Первые s узлов будут рассчитывать значения промежуточных векторов в s стадийных точках в соответствии с выбранным численным методом для расчета x_{n+1} . Эти же значения будут использоваться и вложенным стадийным методом. Дополнительно вложенному методу для вычисления \tilde{x}_{n+1} потребуется значение k_{s+1} . Определенные для одной и той же точки с разными порядками точности p и $p+1$ значения x_{n+1} и \tilde{x}_{n+1} позволяют

оценить норму вектора расхождений $\|x_{n+1} - \tilde{x}_{n+1}\|$ и погрешность на шаге, которая оценивается как

$$\varepsilon = \frac{1}{2^p - 1} \max \frac{|x_{n+1} - \tilde{x}_{n+1}|}{\tilde{x}_{n+1}}$$

Если полученная погрешность на шаге не превышает заданную точность tol , рассчитывается новая длина шага

$$\tau_{n+1} = \tau_n \min \left(\text{fact max}, \max \left(\text{fact min}, \omega \left(\frac{tol}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{p+1}} \right) \right).$$

Параметры fact max , fact min , ω выбираются, исходя из соображений, приведенных в [10]. В противном случае от шага придется отказаться и повторить просчет с шагом

$$\tau_n = \tau_n \text{fact min}.$$

Схема алгоритма управления шагом на основе вложенных методов приведена на рис. 1.

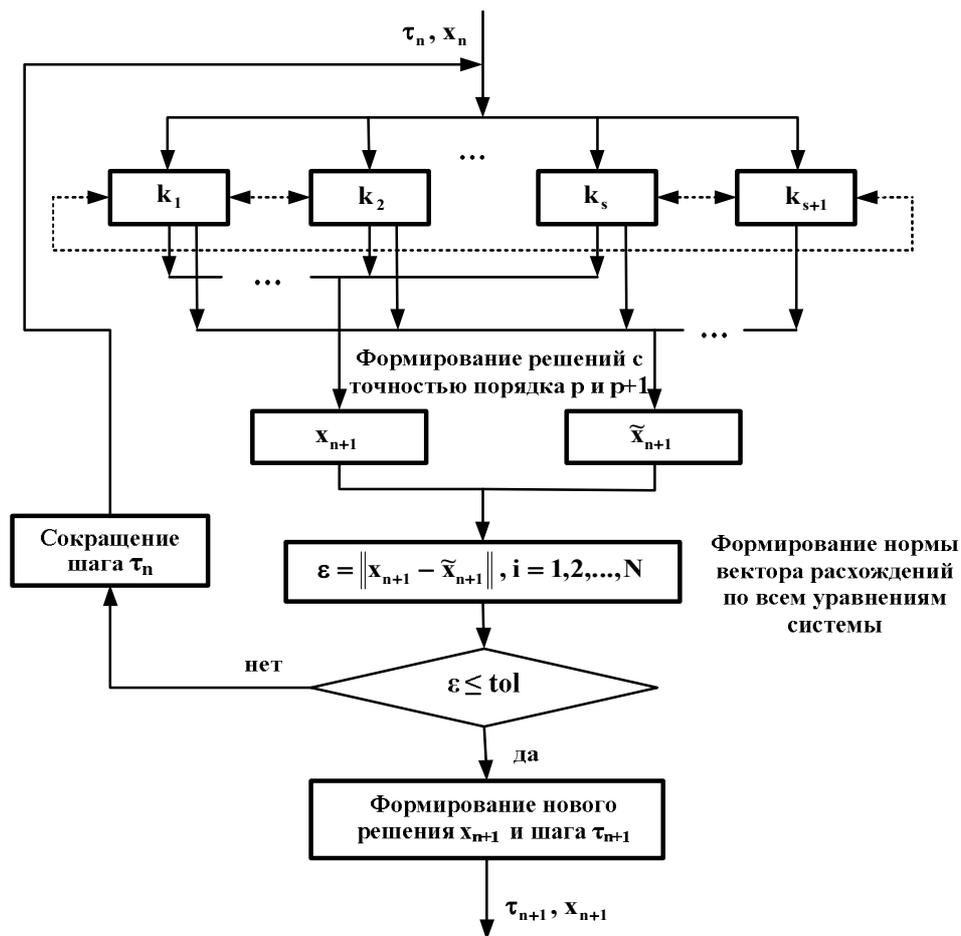


Рисунок 1 - Схема параллельной реализации макрошага на основе вложенных методов

При выборе первоначального шага τ_0 в работе руководствовались соображениями, приведенными в [7]. Начальный выбор осуществлялся исходя из предположения, что величина шага зависит от задаваемой точности tol , правых частей интегрируемых функций $f(t, x(t))$, порядка явного стадийного метода интегрирования p , начальных условий и границ интервала $[t_0, t_{end} = t_0 + T]$.

Численные эксперименты по параллельному управлению шагом на основе вложенных многостадийных методов

Поскольку изначально методы позиционировались как ориентированные на решение жестких систем, в работе рассматривается известная плохо обусловленная тестовая задача Дэвисона (Problem of Davison) [12]

$$x' = Dx(t) + \frac{4}{\pi} E_d \sum_{k=0}^4 \frac{\sin((2k+1)\pi t)}{2k+1}, \quad (11)$$

где $D = \{d_{i,j}\}$, $d_{i,i} = -(1.5)^{N-1}$, $d_{i,i-1} = d_{i,i+1} = 0.1$,

$$x(t_0 = 0) = 0, t_{end} = 5.$$

для системы обыкновенных дифференциальных уравнений размерностью $N=10000$.

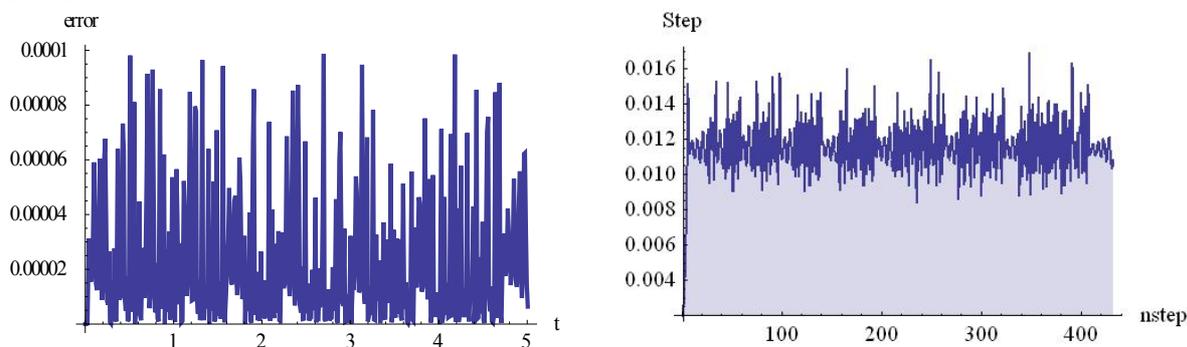


Рисунок 2 - Погрешность и шаги интегрирования с операторами перехода метода Фельберга системы (11) с точностью 10^{-4} .

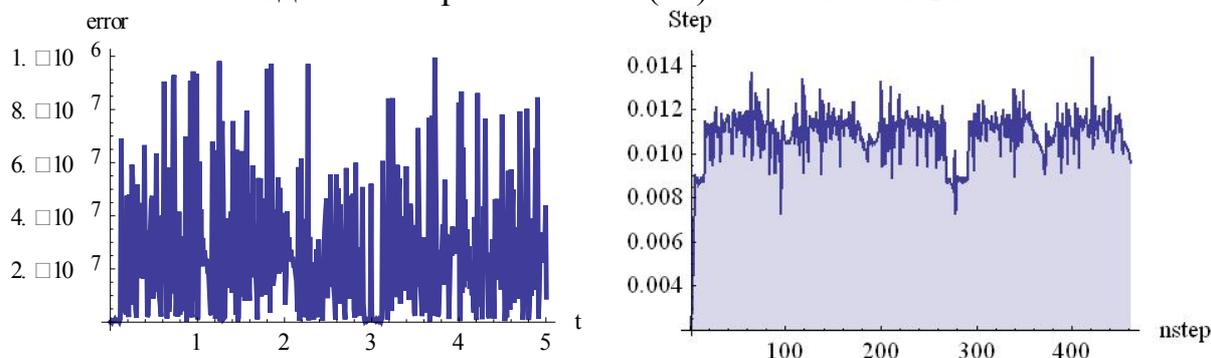


Рисунок 3 - Погрешность и шаги интегрирования с операторами перехода метода Фельберга системы (11) с точностью 10^{-6} .

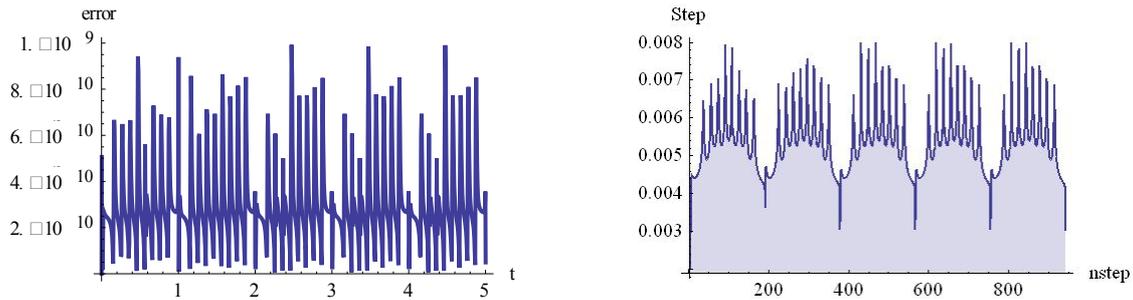


Рисунок 4 - Погрешность и шаги интегрирования с операторами перехода метода Фельберга системы (11) с точностью 10^{-9}

Заклучение

Для повышения вычислительной эффективности численного интегрирования дифференциальных уравнений и контроля пошаговой погрешности в работе предлагаются параллельные вложенные методы. Подробно рассмотрены вопросы генерации коэффициентов вложенных стадийных методов заданного порядка точности. Для генерации коэффициентов вложенных векторов стадийных методов в работе использовался подход, основанный на формировании набора абстрактных деревьев требуемого порядка.

Параллельное управление шагом осуществлялось на двух линейках процессорных элементов. В качестве размера шага выбирался максимально возможный, обеспечивающий с учетом гарантийных факторов локальную точность. Численные эксперименты проводились на плохо обусловленной тестовой задаче Дэвисона, позволяющей сформировать систему обыкновенных дифференциальных уравнений любой размерности. Выполнена параллельная реализация разработанных методов. Полученные характеристики параллелизма свидетельствуют о высоких скоростных свойствах разработанных методов и способности получать решение с заданной точностью.

Список литературы

1. Хайпер Э., Ваннер. Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие задачи. - М.: Мир, 1999.- 685с.
2. Soderlind G. Digital filters in adaptive time-stepping.// ACM Trans. Math. Softwar. - 2003. – Vol. 29. - P. 1-26.
3. 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
4. Куликов Г. Ю. Об одном способе контроля ошибки для методов Рунге-Кутты// Журнал вычислительной математики и математической физики, 1998, том 38, № 10, с. 1651-1653

5. 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
6. Дмитриева О.А. Параллельное моделирование динамических объектов с выбором шага на основе экстраполяционных методов // Радиоелектронні і комп'ютерні системи. – 2012. - № 6 (58). - С. 312-317.
7. Дмитриева О.А. Параллельні різницеві методи розв'язання задачі Коші - Донецьк: ДонНТУ, 2011. 265 с.
8. Butcher J. C., Rattenbury N. ARK methods for stiff problems// Applied Numerical Mathematics. – 2005. – Vol. 53. - № 1. - P. 165–181.
9. Дмитриева О.А. Параллельное моделирование жестких систем на основе диагонализации полной матрицы.// Искусственный интеллект. - 2011, № 4, С. 46-53.
10. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер. Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. - М.: Мир, 1990.- 512с.
11. Дмитриева О.А., Куприй Я.А. Параллельное моделирование жестких динамических систем диагонально неявными методами с адаптацией шага// Наукові праці ДонНТУ. ІКОТ-2010. Випуск 12(165). – Донецьк: ДонНТУ. – 2010. - С. 111-116.
12. Houwen P. J. van der, Sommeijer B. P. Iteration of Runge-Kutta Methods with Block Triangular Jacobians //Journal of Applied Mathematics and Mechanics 1996. – [Vol. 76, № 7.](#) - P. 367–375.

Надійшла до редакції 02.09.2012 р.

Рецензент: д-р.тех.наук, проф. Фельдман Л.П.

О.А. Дмитриева

Донецький національний технічний університет

Розробка паралельних алгоритмів керування кроком на основі вкладених стадійних методів. Робота присвячена побудові ефективних паралельних алгоритмів чисельного розв'язку задачі Коші для жорстких систем звичайних диференціальних рівнянь. Оскільки при чисельному розв'язанні твердих систем виникає необхідність у зміні кроку інтегрування, контроль за розміром кроку здійснюється автоматично на основі вкладених багатостадійних методів.

Ключові слова: задача Коші, стадійний метод, варіація кроку, порядок точності

О.А. Dmitrieva

Donetsk National Technical University

Development of parallel algorithm of variable step based on embedded stage method. We construct efficient parallel algorithms for the numerical solution of the Cauchy problem for stiff systems of ordinary differential equations. As for the numerical solution of stiff systems it is necessary to change the integration step, the step size control is performed automatically based on embedded multi-step methods.

Keywords: cauchy problem, stage method, the variation of the step, the order of accuracy