

УДК 519.8

Параллельное моделирование жестких динамических систем диагонально неявными методами с адаптацией шага

О.А. Дмитриева, Я.А.Куприй
Донецкий национальный технический университет
dmitriv@r5.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Dmitrieva O.A. Parallele modelling of stiffness dynamic systems by diagonally implicit methods with step adaptation. In work are considered unitary diagonally implicit algorithms stiffness dynamic systems of the decision. Algorithms of running are resulted by step of integration at the decision problems Caushi based on use of enclosed methods. Algorithms of a choice's an initial step and condensation the received results of delivery are offered.

Введение

Для параллельной реализации решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) могут использоваться два основных подхода. Первый из них связан с сегментацией системы (иногда указывается как параллелизм системы), второй связан с параллельным алгоритмом (иногда указывается как параллелизм метода) [1]. В первом варианте, заданная система ОДУ разделяется на составные части, которые распределяются по доступным процессорам где используются традиционные процедуры решения ОДУ (например, Рунге-Кутта или линейный многоступенчатый). Если число уравнений велико, этот подход обеспечивает превосходную возможность для параллелизма, до тех пор, пока вычислительная нагрузка может быть хорошо сбалансирована между процессорами. Существующие методы этой категории в большей или меньшей степени основаны на идее независимого интегрирования [1,2]. При независимом интегрировании подмножества уравнений интегрируются независимо одно от другого, с контролем длины шага и ошибки каждого подмножества, определенной локально. Существенным недостатком этого подхода является неотъемлемая задача определения того, как производить сегментацию уравнений, чтобы уравнивать рабочую нагрузку между доступными процессорами. Поэтому такой подход возможно будет эффективен только когда система имеет регулярную структуру, например такую, которая возникает в результате декомпозиции дифференциального уравнения в частных производных. Кроме того, могут возникать существенные внутри-процессорные коммуникации.

В подходе, связанном с использованием параллельных алгоритмов, каждый процессор работает с целым

уравнением, и параллелизм достигает алгоритмического уровня. Этот подход обеспечивает потенциал только для малой степени параллелизма, но значительным преимуществом этого подхода является тот факт, что он позволяет обойти проблему декомпозиции. Несмотря на то, что проблема внутрипроцессорной коммуникации возрастает, с ней относительно просто справиться. В данной статье исследования концентрируются на втором подходе, и являются продолжением работ [1-6].

Проблема жесткости при численном решении

Под жесткими уравнениями будем подразумевать такие, для которых определенные неявные методы дают лучший результат, обычно несопоставимый с явными методами [7]. Формализация такого прагматического определения для разных типов уравнений и систем может носить различный характер [8]. В частности, для системы ОДУ (1)

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad (1)$$
$$t_0 \leq t \leq T$$

формальное определение жесткости может быть введено следующим образом. Пусть для уравнения (1) существует некоторый пограничный слой, размер которого по сравнению с полным отрезком наблюдения задается неравенством

$$\tau_{\text{пл}} \ll T - t_0 \quad (2)$$

а значения производных вне пограничного слоя полагаются меньшими, чем значения внутри него в N раз, где $N \gg 1$.

Для возникновения больших производных внутри пограничного слоя матрица Якоби системы (1) должна иметь большие по модулю собственные числа. Производные компонент вектора

$$y(t) = [y_1(t), y_2(t), \dots, y_n(t)]^T \quad (3)$$

при $t \in [t_0 + \tau_{ps}, t_0 + \tau]$ могут достигать значений порядка

$$L = \max_{t \in [t_0 + \tau_{ps}, t_0 + \tau]} |y_i(t)|, \quad i = 1, \dots, m, \quad (4)$$

значение L определяется из неравенства

$$0 < L \leq \rho \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \leq \left\| \frac{\partial f}{\partial y} \right\|, \quad (5)$$

где $\rho \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)$ - максимальный модуль собственных чисел матрицы Якоби.

Система (1) является жесткой на отрезке изменения независимой переменной t , принадлежащем интервалу существования ее решений, если при любом векторе начальных значений

$$[t_0, y(t_0)] = y_0$$

и на любом отрезке

$$[\tau_0, \tau_0 + \tau] \equiv [t_0, T]$$

найдутся такие числа τ_{ps}, L, N , удовлетворяющие (2) и (5), что справедливы неравенства

$$\left| \frac{\partial y_i}{\partial t} \right|_{t \in [\tau_0 + \tau_{ps}, \tau_0 + \tau]} \leq \frac{L}{N} \max_{t \in [t_0 + \tau_{ps}, t_0 + \tau]} |y_i(t)|$$

$$i = 1, \dots, m$$

$$\tau_0 + \tau_{ps} \leq t \leq \tau_0 + \tau, \quad N \gg 1. \quad (6)$$

Если начальные условия таковы, что пограничный слой явно присутствует, то величина N дает представление о том, во сколько раз уменьшились производные после его прохождения. Важным моментом является связь жесткости системы с величиной наблюдаемого промежутка, поскольку даже нежесткие системы часто начинают проявлять свойства жесткости при неограниченном увеличении интервала наблюдения системы.

Для жестких систем почти всегда существуют два участка решения с существенно различным характером поведения его составляющих, причем продолжительность первого значительно меньше, чем второго [8].

При численном решении жестких дифференциальных уравнений возникает необходимость в изменении шага интегрирования, поскольку малые погрешности, полученные вне пограничного слоя, позволяют существенно увеличить шаг интегрирования. При этом, с одной стороны,

необходимо обеспечить длину шага, достаточно малую для достижения требуемой точности вычисляемых результатов на пограничном слое, а, с другой стороны, нужно гарантировать достаточно большую длину шага во избежание бесполезной вычислительной работы.

В литературе уже достаточно хорошо изучены и исследованы вопросы жесткости систем дифференциальных уравнений линейного типа

$$\frac{dy}{dt} = Ay(t), \quad y(t_0) = y_0, \quad (7)$$

системы с переменной матрицей

$$\frac{dy}{dt} = A(t)y(t), \quad y(t_0) = y_0, \quad (8)$$

или неоднородные системы типа

$$\frac{dy}{dt} = Ay(t) + q(t), \quad y(t_0) = y_0, \quad (9)$$

В таких случаях собственные числа матрицы A полностью определяют характер частных решений, и система может считаться жесткой, если матрица A обладает большим числом обусловленности [6]

$$k(A) = \frac{\max_i |a_i|}{\min_i |a_i|} \gg 1 \quad (10)$$

В [7] к классу жестких систем относят такие, для которых справедливо неравенство

$$\mu(A) = \frac{\max_i |\operatorname{Re} \lambda_i|}{\min_i |\operatorname{Re} \lambda_i|} \gg 1 \quad (11)$$

$$\operatorname{Re} \lambda_i < 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

где $\operatorname{Re} \lambda_i$ - действительная часть λ_i .

Что же касается систем общего вида, то жесткие уравнения требуют оценки A -устойчивости, новых математических теорий об ограничении на порядок метода [9] и неявных методы численного решения с расширенными областями устойчивости по шагу дискретности, а также рассмотрение вопросов их практического использования.

Согласно классическим представлениям, точность методов численного решения определяется порядком аппроксимации и значениями коэффициентов погрешности [10]. Поэтому параметры метода обычно рассчитывают исходя из условий обеспечения заданного порядка и минимизации коэффициентов погрешности. Для жестких задач

классические понятия теряют свое значение. Например, определение порядка аппроксимации основано на асимптотическом поведении ошибки численного решения при $h \rightarrow 0$, но в этом случае для всех собственных значений λ_i матрицы Якоби имеем $h\lambda_i \rightarrow 0$, т.е. задача перестает быть жесткой. В жестком случае поведение ошибки следует изучать при больших значениях $h\lambda_i$ для жесткого спектра. При решении жестких задач неявными методами реальный порядок может оказаться меньше классического [5].

Известные процедуры оценки погрешности и изменения шага (правило Рунге, экстраполяция Ричардсона) имеют высокую трудоемкость и замедляют время получения результата. Тогда необходимо разрабатывать алгоритмы автоматического выбора шага. Но здесь возникает новая сложность. Если для последовательного счета такие подходы, хотя и не являются широко распространенными, но все-таки иногда употребляются [10], то для параллельных реализаций, а тем более для блочных методов такие алгоритмы отсутствуют практически [1].

Диагонально-неявные схемы численного решения

Рассмотрим задачу Коши для обыкновенного дифференциального уравнения (1). Один шаг численного решения задачи (1), представленной в виде

$$\frac{c}{b^T}$$

задается следующими расчетными формулами

$$y_{n+1} = y_n + h * \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (12)$$

$$k_i = f(t_n + c_i h, g_i),$$

$$g_i = y_n + h * \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j, \quad i = 1, 2, \dots, s.$$

Метод является явным, если матрица $A = \{a_{ij}\}$ обращается в нуль для $j \geq i$, диагонально-неявным, если матрица $A = \{a_{ij}\}$ обращается в нуль для $j > i$ или если матрица $A = \{a_{ij}\}$ диагональная, метод является неявным для всех остальных случаев. Поскольку речь идет о жестких системах, то в этой работе анализ ограничится

диагонально - неявными методами. Для таких методов s компонент блочного вектора могут быть вычислены параллельно. Следовательно, если доступны s процессоров, то время, необходимое для вычисления одного шага интегрирования, это по большей части время, необходимое для вычисления s компонент блока. Оптимальное число процессоров определяется как множество процессоров, для которого количество вычислений компонент блока (последовательных) на шаг минимальное. В связи с этим нужно отметить, что часто для выполнения блочного метода необходимо менее чем s процессоров.

Диагонально-неявный метод предполагает нижнюю треугольную форму матрицы $A = \{a_{ij}\}$. Если потребовать, чтобы все диагональные элементы матрицы были равны между собой, то это позволит выполнять только одно LU – разложение на шаге интегрирования. Можно модифицировать схему таким образом, чтобы таблица коэффициентов метода приняла следующий вид [7]

| | | | | | | |
|-----------|---------------|---------------|---|---|---------------|----------|
| 0 | 0 | | | | | |
| c_2 | a_{21} | γ | | | | |
| . | . | . | | | | |
| . | . | . | | | | |
| c_s | a_{s1} | a_{s2} | . | . | γ | |
| 1 | b_1 | b_2 | . | . | b_s | γ |
| y_{n+1} | b_1 | b_2 | . | . | b_s | γ |
| y_{n+1} | \tilde{b}_1 | \tilde{b}_2 | . | . | \tilde{b}_s | γ |

В этом случае метод будет являться $(s+1)$ – стадийным, но его вычислительные затраты совпадут с затратами (s) – стадийного метода, так как он обладает явно вычисляемой первой стадией. К тому же у такого метода последняя строка матрицы $A = \{a_{ij}\}$ совпадает с вектором b^T , что дает значительное преимущество методу, который классифицируется как жестко точный по своему построению ($FSAL$ – *First Same As Last*) и используется для решения жестких и дифференциально-алгебраических систем.

В расчетную схему этого метода кроме численного приближения y_{n+1} можно внести еще и некоторое выражение \tilde{y}_{n+1} более высокого порядка (более точно, чем y_{n+1}). Последнее может служить для управления погрешностью на каждом шаге.

Генерация коэффициентов расчетной схемы

Определение порядка аппроксимации и коэффициентов погрешности численных методов интегрирования сводится к сравнению рядов Тейлора для точного и численного решений [10]. 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.

Построение модельных уравнений опирается на следующий факт [11]: 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 q , требует формирования всех абстрактных деревьев, порядок которых укладывается в интервал от 1 до q .

Для определения метода порядка q необходимо сформировать все абстрактные (непомеченные) деревья порядка $\leq q$. Каждое из таких деревьев tr определяет одно условие метода вида

$$\Psi(tr) = \frac{1}{Y(tr)} \quad (14)$$

где $\Psi(tr)$ – некоторая комбинация коэффициентов дерева tr ,

$Y(tr)$ – коэффициент, определяемый как произведение весовых коэффициентов вершин дерева.

Для генерации набора абстрактных деревьев произвольного порядка в работе использовался следующий подход [8]:

1) Формировались все возможные наборы абстрактных деревьев с общим порядком $q-1$.

2) Деревья внутри каждого набора объединялись путем добавления общего корня.

3) Корню дерева ставился в соответствие коэффициент b , листьям – коэффициенты c , а промежуточным вершинам – коэффициенты a .

4) Для определения коэффициента $Y(tr)$ каждой вершине, являющейся «листом» дерева, ставился в соответствие весовой коэффициент, равный 1, а всем остальным вершинам – весовой коэффициент, на единицу больший суммы весов исходящих вершин.

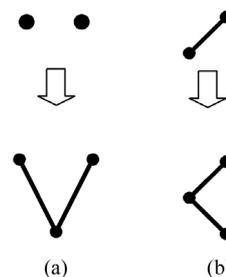


Рисунок 1 – Формирование деревьев порядка 3

В качестве примера приведем вариант формирования деревьев для метода порядка $q=3$. Для этого нужно построить все деревья, порядок которых на единицу меньше, т.е. $q-1=2$.

Существует два возможных набора деревьев с суммарным порядком, равным двум. Это два дерева порядка 1 и одно дерево порядка 2. Формирование деревьев порядка 3 путем добавления корня к каждому набору деревьев приведено на рис. 1.

Для формирования функции $\Psi(tr)$ нового дерева перейдем от индексов i, j, k, l, \dots к индексам i_1, i_2, i_3, i_4 и т.д. Для нового дерева порядка q , формируемого из m деревьев порядка $q-1$, условие (14) будет определяться следующим соотношением

$$\sum_{i=1}^n b_i \prod_{j=1}^m \Psi(tr_j) = \frac{1}{\prod_{j=1}^m Y(tr_j)} \quad (15)$$

где $\Psi(tr_j)$ – это преобразование функции $\Psi(tr)$ по правилу

$$\begin{aligned} b_{i_n} &\rightarrow a_{i_n/i_{n-1}} \\ a_{i_n/i_{n-1}} &\rightarrow a_{i_{n+1}/i_{n+2}} \\ a_{i_n} &\rightarrow a_{i_{n+1}} \end{aligned} \quad (16)$$

Для проведения экспериментальных исследований воспользуемся следующей расчетной схемой [12], сгенерированной на основании приведенного ранее алгоритма

Таблица 1
Расчетная схема диагонально-неявного метода с $p=2, s=3$

| | | | |
|---------------|---------------------------|-----------------|-------------|
| 0 | 0 | | |
| $2Y$ | Y | Y | |
| 1 | $(1-\gamma)/2$ | $(1-\gamma)/2$ | γ |
| Y_{n+1} | $(1-\gamma)/2$ | $(1-\gamma)/2$ | γ |
| β_{n+1} | $(1+\gamma)/6$ | $(5-3\gamma)/6$ | $\gamma/3$ |
| err | $(1-2\gamma)/3$ | -1/3 | $2\gamma/3$ |
| | $\gamma = 1 - \sqrt{2}/2$ | | |

Аналогічним образом формуються умовия для метода любого порядка.

Численная реализация решения уравнения Ван дер Поля

В качестве одной из тестовых задач выбиралось жесткое уравнение Ван дер Поля

$$y'' + \alpha(y^2 - 1)y' + y = 0, \quad (17)$$

Которое может быть приведено к следующей системе

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= y_2, \\ \dot{y}_2 &= \alpha(1 - y_2^2)y_2 + y_1. \end{aligned} \quad (18)$$

С начальными условиями

$$y_1(0) = 2, \quad y_2(0) = 2 \quad (19)$$

на промежутке $0 \leq t \leq T$.

Поскольку точные решения уравнения Ван дер Поля неизвестны [13], в качестве меры оценки полученных решений используются асимптотические оценки Дородницына [14], которые зависят от параметра жесткости α . Оценка по амплитуде

$$\begin{aligned} y_{\alpha} &= 2 + 0.77937\alpha^{-\frac{4}{3}} - \frac{16}{27}\alpha^{-\frac{4}{3}} \frac{\ln(\alpha)}{\alpha^2} - \\ &- 0.8762\alpha^{-1} + O\left(\alpha^{-\frac{5}{3}}\right), \end{aligned} \quad (20)$$

Асимптотическая оценка периода релаксационных колебаний

$$\begin{aligned} T_{\alpha} &= 1.613706\alpha + 7.01432\alpha^{-\frac{4}{3}} - \frac{2}{3}\alpha^{-\frac{4}{3}} \frac{\ln(\alpha)}{\alpha} - \\ &- 1.3233\alpha^{-1} + O\left(\alpha^{-\frac{5}{3}}\right), \end{aligned} \quad (21)$$

Результаты численного решения системы (18)-(19) явными методами характеризуются недопустимыми погрешностями [15]. Используем для решения диагонально-неявный метод, приведенный в табл. 1, который обеспечивает порядок точности $O(h^3/3)$ и соответствующее порядку минимально возможное число стадий s .

В расчетную схему введен еще один дополнительный вектор \hat{y}_{n+1} , который позволит оценивать погрешность, достигаемую на шаге интегрирования, и управлять ею. Вектор err введен для визуализации полученной погрешности. Результаты реализации системы (18) с помощью неявного метода при фиксируемой предельной погрешности приведены на рис. 2 а), б).

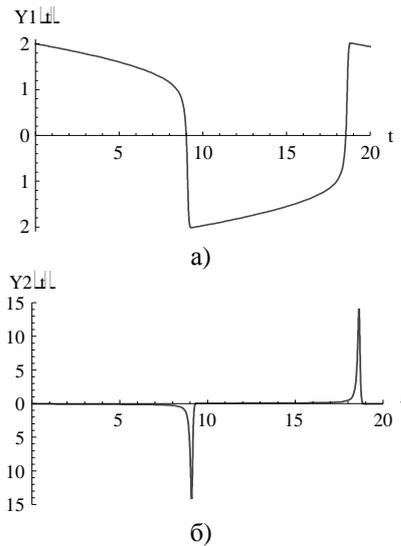


Рисунок 2 – Численное решение системы (18)-(19) с $\alpha = 10^{-3}$

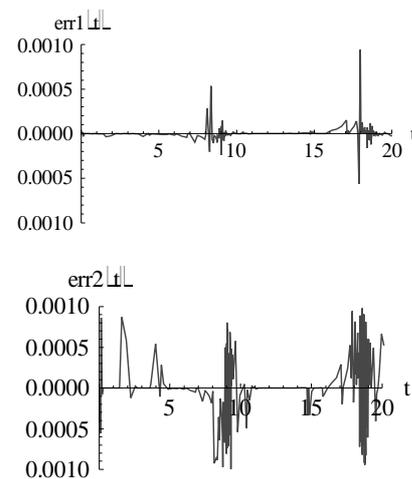


Рисунок 3 – Величины погрешности решения

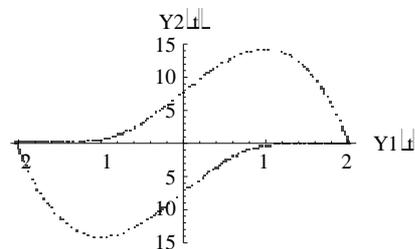


Рисунок 4 – Предельный цикл при решении (18)-(19)

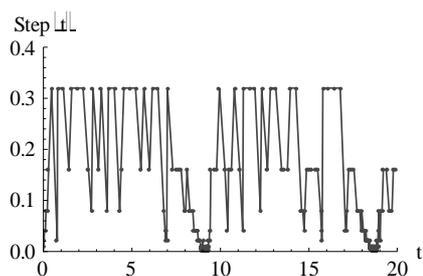


Рисунок 5 – Вариация длины шага при решении (18)-(19)

Заключение

Рассмотрены вопросы генерации и параллельной реализации диагонально-неявных методы решения задачи Коши для жестких обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем с вариацией шага. В процессе решения осуществляется автоматическая настройка размерности шага интегрирования, обеспечивающая заданную точность. При этом несколько возможных вариантов значений длины шага рассчитываются параллельно, а затем

осуществляется продвижение с максимально возможным шагом, который обеспечивает заданную точность решения.

Получены численные решения только одной тестовой задачи. Эксперименты, проведенные с другими нелинейными жесткими задачами полностью подтверждают качественную картину, полученную при решении уравнения Ван-дер-Поля. При этом оценки максимальной погрешности результатов, достигнутых с помощью диагонально-неявных методов никогда не превышали заданную оценку погрешности.

В проведенных исследованиях эффективность решения жестких задач для обыкновенных дифференциальных уравнений обеспечивалась не только привлечением диагонально-неявных схем расчета, но и выбором начального значения шага, а также процедурой адаптации шага интегрирования к поведению динамического процесса.

Литература

1. Фельдман Л.П., Дмитриева О.А. Эффективные методы распараллеливания численного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.// Математическое моделирование, том 13, № 7, 2001. – С.66-72.
2. Дмитриева О.А. Об особенностях моделирования линейных динамических систем в многопроцессорных средах// Электронное моделирование, № 2, 2007. С. 63-72.
3. Дмитриева О.А. Анализ параллельных алгоритмов численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений методами Адамса-Башфорта и Адамса-Моултона.// Математическое моделирование 2000, т. 12, № 5, С. 81-86.
4. Дмитриева О. А. Параллельные алгоритмы обработки систем линейных уравнений/ Материалы XV международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС-2007) 25-31 мая 2007 г., Алушта – М.: Вузовская книга, 2007. С. 213-215
5. Дмитриева О.А. Устойчивость численного моделирования динамических систем// Материалы VII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях. (NPNJ-2008), 25 – 31 мая 2008 г., Алушта – М.: Вузовская книга, 2008. С. 310-313.
6. Дмитриева О.А. Параллельные методы численного решения линейных систем ОДУ //Материалы XVI международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС-2009), Алушта, Крым, 25-31 мая 2009 г., – М.: Вузовская книга, 2009. – с. 278-279.
7. Скворцов Л. М. Диагонально неявные FSAL-методы Рунге-Кутты для жестких и дифференциально-алгебраических систем // Математическое моделирование. 2002. Т. 14, № 2. С. 3-17.
8. Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноуцкий И.Г. Численные методы решения жестких систем. – М.: Наука. 1979. 208 с.
9. Скворцов Л.М. Точность методов Рунге-Кутты при решении жестких задач. //Журнал вычислительной математики и математической физики, 2003, том 43, № 9, с. 1374-1384
10. Хайрер Э., Ваннер. Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие задачи. - М.: Мир, 1999.- 685с.
11. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер. Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. - М.: Мир, 1990.- 512с.
12. Hosea M.E., Shampine L.F. Analysis and implementation of TR-BDF2 // Applied Numerical Mathematics. 1996. V. 20, № 1-3. P. 21-37.
13. Мищенко Е.Ф., Розов Н.Х. Дифференциальные уравнения с малым параметром и релаксационные колебания. – М.: Наука. 1975. 248 с.
14. А.А. Дородницын. Асимптотическое решение уравнения Ван-дер-Поля.// Прикладная математика и механика, 1947. Т.11, №3. С.313-328
15. Butcher J.C. Numerical methods for ordinary differential equations. – Cornwall: John Wiley & Sons, 2008. 468 p.

Поступила в редакцию 30.03.2010