

О.А. ДМИТРИЕВА, д-р техн. наук, проф., зав. каф., ДонНТУ,
Красноармейск

О ПОСТРОЕНИИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ МОДЕЛИРОВАНИЯ С ВАРИАЦИЕЙ ШАГА В РАСЧЕТНОМ БЛОКЕ

Предложены параллельные разностные схемы моделирования динамических объектов, позволяющие управлять размером шага при численном интегрировании. Расчетные схемы сформированы на основе многошаговых коллокационных блочных методов. Численные решения для каждого расчетного блока реализованы с использованием ньютоновских итераций. Ил.: 4. Библиогр.: 12 назв.

Ключевые слова: разностная схема, управление размером шага, коллокационный блочный метод, ньютоновская итерация.

Постановка проблемы. На текущий момент компьютерное моделирование является одним из наиболее распространенных и эффективных исследовательских приемов, которые используют для оценки поведения сложных динамических объектов [1]. В то же время, существует широкий класс задач, решение которых с помощью последовательного моделирования отмечается неприемлемыми временными затратами, а также недостаточной производительностью [2]. Этот факт влечет за собой необходимость использования для моделирования сложных объектов компьютерных систем с параллельной архитектурой [3 – 4]. Однако, несмотря на то, что научные исследования находятся на этапе, который характеризуется наличием современных средств огромной вычислительной мощности, характеристики параллелизма вычислений, такие, как ускорение и коэффициент эффективности, далеки от своих потенциальных оценок [2, 5]. В связи с этим актуальными становятся задачи, связанные с разработкой современных параллельных численных методов и адаптацией для параллельной реализации существующих [6]. Успешное решение этих задач определяет один из важнейших путей сокращения времени решения сложных и трудоемких задач, к которым, прежде всего, необходимо отнести задачу Коши (1) для систем дифференциальных уравнений большой размерности [7], описывающих поведение сложных динамических объектов

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

Поскольку, как правило, найти аналитическое решение (1) не представляется возможным [8], применяют численные методы решения данной задачи. Получение решения необходимого порядка точности численными методами влечет за собой выполнение значительного

количества итераций. Усовершенствование методов нахождения численного решения задачи Коши позволяет не только сократить время получения результата, но и делает возможным решение задач большей размерности [9].

Анализ литературы. Одношаговые коллокационные методы для решения задачи Коши (1) строятся на интерполяционных многочленах, степени которых совпадают с количеством точек коллокации, а значения многочленов в этих точках совпадают с правыми частями дифференциального уравнения в расчетных точках [10]. При этом точки коллокации расположены регулярно и контроль оценки погрешности может обеспечиваться использованием правила Рунге, экстраполяцией Ричардсона, вложенными методами [7, 8], что, как правило, сводится к многократным просчетам с изменяющимся шагом.

В работе [9] для эффективного управления глобальной ошибкой численных схем предложены равнозначные блочные методы, в которых используется условие асимптотического равенства локальной и глобальной ошибок, но при этом шаг интегрирования должен быть достаточно малым.

Параллельная реализация численного решения (1) в [6] обеспечивается использованием одношаговых многоточечных блочных методов с различными размерностями расчетных блоков. При этом используются как коллокационные методы [10], так и методы типа Биккарта [11]. Однако внутри блока невозможно обеспечить изменение шага интегрирования. Этот вопрос становится наиболее актуальным, когда искомая функция (функции) на отдельных участках интегрирования характеризуется различными скоростями изменения. В этом случае целесообразно использовать для интегрирования адаптируемый шаг, что не позволяет обеспечить расчетные коллокационные схемы в [10, 11].

Цель статьи заключается в разработке параллельных разностных схем моделирования требуемого порядка точности, обеспечивающих возможность управления шагом интегрирования при численной реализации.

Генерирование разностных схем. Для устранения вышеописанных недостатков, связанных с невозможностью изменения шага интегрирования, в работе предлагаются новые расчетные схемы, которые также строятся на интерполяционных многочленах, степени которых совпадают с количеством точек коллокации, а значения многочленов в этих точках совпадают с правыми частями дифференциального уравнения в расчетных точках [6, 10]. При этом точки коллокации могут быть расположены нерегулярно, хотя, желательно (но не обязательно),

чтобы они были связаны между собой какими-либо коэффициентами пропорциональности, например, степенями двойки. Поскольку речь идет о многошаговых методах, необходимо выделить множество точек, формирующих опорный блок

$$t_{n,i} = t_{n,0} + i\tau_n \in [t_{n-m+1}, t_{n,0}], \quad i = -(m-1), -(m-2), \dots, 0,$$

а также множества точек, которые формируют расчетные блоки:

$$\begin{aligned} t_{n,i}^{(1)} &= t_{n,0} + i\tau_{n_1} \in [t_{n,0}, t_{n,s_1}], \quad i = 1, 2, \dots, s_1, \\ t_{n,i}^{(2)} &= t_{n,0} + i\tau_{n_2} \in [t_{n,0}, t_{n,s_2}], \quad i = 1, 2, \dots, s_2. \end{aligned}$$

При этом проще всего связать шаги интегрирования τ_{n_1} и τ_{n_2} соотношениями $\tau_{n_1} = 2\tau_{n_2}$. Тогда между размерностями расчетных блоков должно будет выполняться соотношение $s_2 = 2s_1$. Счет будет выполняться параллельно для двух расчетных схем с одинаковыми размерностями опорных блоков и с различающимися в s_2/s_1 раз размерностями расчетных блоков. Канонический вид многошаговых коллокационных методов с числом опорных точек m и числом расчетных точек s_1 и s_2 соответственно, будет иметь вид

$$\begin{aligned} u_{n,i}^{(1)} &= u_{n,0} + \tau_n \sum_{j=1-m}^0 b_{i,j}^{(1)} F_{n,j} + \tau_{n_1} \sum_{j=1}^{s_1} a_{i,j}^{(1)} F_{n,j}^{(1)}, \quad i = 1, 2, \dots, s_1, \\ u_{n,i}^{(2)} &= u_{n,0} + \tau_n \sum_{j=1-m}^0 b_{i,j}^{(2)} F_{n,j} + \tau_{n_2} \sum_{i=1}^{s_2} a_{i,j}^{(2)} F_{n,j}^{(2)}, \quad i = 1, 2, \dots, s_2, \end{aligned} \quad (2)$$

где $u_{n,i}^{(1)}$, $u_{n,i}^{(2)}$ – приближенные значения решения задачи Коши (1) в точках $t_{n,i}^{(1)}$, $t_{n,i}^{(2)}$ соответственно; $\tau_n, \tau_{n_1}, \tau_{n_2}$ – шаги интегрирования в опорном блоке, в блоках размерностью s_1 и s_2 соответственно; $F_{n,j} = f(t_n + j\tau_n, u_{n,j})$ – правые части уравнения (1) в точках, $j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0$, $F_{nj}^{(1)} = f(t_n + j\tau_{n_1}, u_{n,j})$, $j = 1, 2, \dots, s_1$, $F_{n,j}^{(2)} = f(t_n + j\tau_{n_2}, u_{n,j})$, $j = 1, 2, \dots, s_2$, $a_{i,j}^{(1)}$, $b_{i,j}^{(1)}$, $a_{i,j}^{(2)}$, $b_{i,j}^{(2)}$ – коэффициенты расчетных схем в (2).

В отличие от подхода к оценке погрешности, который основывался на введении дополнительной точки в опорный блок и требовал генерирования двух расчетных схем [6], предлагаемый подход требует большего количества расчетных схем. В частности, необходимо

сгенерировать базовые расчетные схемы, соответствующие интегрированию с неизменным шагом, затем предусмотреть схемы для увеличения и сокращения шагов. Причем, схемы сокращения необходимо подготовить как для расчетного, так и для опорного блоков. Фактически генерирование этих схем сводится к определению расчетных коэффициентов и осуществляется один раз, до начала вычислений, подразумевая их многократное использование при решении различных задач. В качестве примера можно привести расчетные схемы для метода $((m \times s_1) \times (m \times s_2))$ со значениями параметров $m = 3, s_1 = 2, s_2 = 4$. Для получения разностных схем можно использовать интегро-интерполяционный метод. Формирование разностных схем методов и $(m \times s_1)$ и $(m \times s_2)$ подразумевает интегрирование в пределах, $(t_{n,0}, t_{n,i})$ с соответствующими значениями индексов и размерностями опорных блоков m

$$u_{n,i} = u_{n,0} + \int_{t_{n,0}}^{t_{n,i}} L_{m+s-1}(t) dt.$$

Основные расчетные схемы для метода $(m \times s_1)$ с узлами интерполяции $\{\{t_n - 2\tau, F_{n,-2}\}, \{t_n - \tau, F_{n,-1}\}, \{t_n, F_{n,0}\}, \{t_n + \tau, F_{n,1}\}, \{t_n + 2\tau, F_{n,2}\}\}$ примут вид:

$$u_{n,1} = u_{n,0} + \frac{\tau}{720}(11F_{n,-2} - 74F_{n,-1} + 456F_{n,0} + 346F_{n,1} - 19F_{n,2}), \quad (3)$$

$$u_{n,2} = u_{n,0} - \frac{\tau}{90}(-F_{n,-2} + 4F_{n,-1} + 24F_{n,0} + 124F_{n,1} + 29F_{n,2}).$$

Для метода $(m \times s_2)$ используются узлы интерполяции:

$$\{\{t_n - 2\tau, F_{n,-2}\}, \{t_n - \tau, F_{n,-1}\}, \{t_n, F_{n,0}\}, \{t_n + \tau/2, F_{n,1/2}\}, \{t_n + \tau, F_{n,1}\}, \{t_n + 3\tau/2, F_{n,3/2}\}, \{t_n + 2\tau, F_{n,2}\}\}.$$

Сокращение шага основным методом $(m \times s_1)$:

$$u_{n,1/2} = u_{n,0} + \frac{\tau}{28800}(37F_{n,-2} - 335F_{n,-1} + 7455F_{n,0} + 7808F_{n,1/2} - 565F_{n,1}), \quad (4)$$

$$u_{n,1} = u_{n,0} + \frac{\tau}{1800}(-F_{n,-2} + 5F_{n,-1} + 285F_{n,0} + 1216F_{n,1/2} + 295F_{n,1}),$$

увеличение шага основным методом $(m \times s_1)$:

$$\begin{aligned}
 u_{n,2} &= u_{n,0} + \frac{\tau}{900}(145F_{n,-2} - 704F_{n,-1} + 1635F_{n,0} + 755F_{n,2} - 31F_{n,4}), \\
 u_{n,4} &= u_{n,0} - \frac{2\tau}{225}(20F_{n,-2} - 64F_{n,-1} - 15F_{n,0} - 320F_{n,2} - 74F_{n,4}).
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

Такого же типа схемы генерируются для возможных сжатия и растяжения шага вспомогательными методами с учетом количества узлов интерполяции и их размещения. Из-за громоздкости расчетных формул в статье приводятся только основные разностные схемы. Кроме того, учитывая итерационный характер (4), для ускорения сходимости на первом шаге итерационного процесса используются предикторные формулы Адамса [5], которые также должны быть предварительно сгенерированы для всех вариантов изменения шага (растяжение, сжатие, постоянство).

Тестовая реализация параллельных алгоритмов управления шагом. В качестве примера выбрана тестовая задача [9], характеризующаяся существенно различающимся поведением искомых функций на отрезке интегрирования

$$\begin{aligned}
 x_1'(t) &= 2t(x_2(t))^{1/5}x_4(t), \quad x_2'(t) = 10t \exp(5(x_3(t)-1))x_4(t), \\
 x_3'(t) &= 2tx_4(t), \quad x_4'(t) = -2t \ln(x_1(t)), \\
 x_1(0) &= 1, \quad x_2(0) = 1, \quad x_3(0) = 1, \quad x_4(0) = 1, \\
 0 &\leq t \leq 4
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

с известными точными решениями

$$\begin{aligned}
 x_1(t) &= \exp(\sin^2(t)), \quad x_2(t) = \exp(5 \sin^2(t)), \\
 x_3(t) &= \sin^2(t) + 1, \quad x_4(t) = \cos^2(t).
 \end{aligned}$$

Графики численных решений приведены на рис. 1, 2. На рис. 3 приведена динамика изменения шага, на рис. 4 – худшие показатели накопленных погрешностей, которые наблюдались при численном интегрировании функции $x_2(t)$.

При получении решений соотношение между локальной Er и глобальной Tol погрешностями обеспечивалось на уровне $Tol \leq 10Er \cdot (Er = 10^{-8})$. Как видно из рис. 4, худшая накопленная погрешность ни на каком шаге интегрирования не превышает заданную Tol .

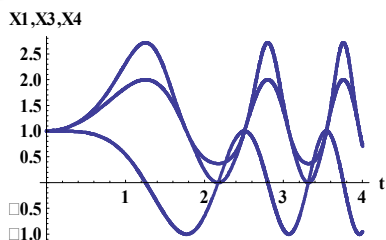


Рис. 1. Точные и численные решения по $x_1(t), x_3(t), x_4(t)$

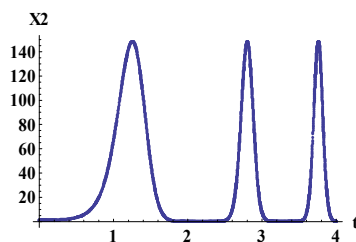


Рис. 2. Точное и численное решения по $x_2(t)$

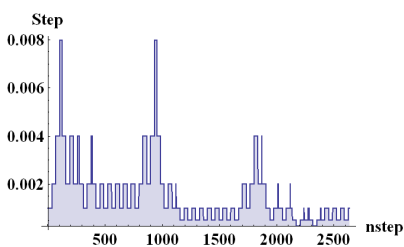


Рис. 3. Автоматическое изменение шага интегрирования

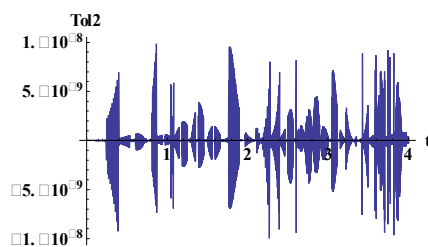


Рис. 4. Накопленная погрешность решения по $x_2(t)$

При проведении численных экспериментов кроме основных показателей, к которым относят локальную и глобальную погрешности численного решения, размеры и количество шагов интегрирования, оценивался коэффициент эффективности, характеризующий отношение количества результативных шагов к общему числу посчитанных. Кроме того, при проведении экспериментов с различными значениями индикаторов, которые обеспечивают принятие решения об изменении размера шага (параметр инерционности, количество итераций для уточнения решения методом Ньютона, близость текущей локальной погрешности к предельному отношению Tol/Ep и т.п.), получены зависимости, обеспечивающие достижение коэффициентом эффективности значений, близких к единице.

Выводы. Проведенные исследования позволили предложить новые подходы к решению проблемы параллельного управления точностью интегрирования на основе вариации длины шага. Управление шагом интегрирования основано на использовании многоточечных коллокационных блочных методов с изменяемыми размерностями опорных и расчетных блоков с неравномерным расположением узлов, связанных между собой некоторыми

коэффициентами пропорциональности. Локальная погрешность численного интегрирования оценивалась как норма расхождений решений, полученных с разными порядками аппроксимации в совпадающих точках расчетного блока. Величина полученной погрешности и состояния значений индикаторов использовались для принятия решения о размере очередного шага интегрирования, что обеспечивало заданную точность на каждом участке. Численное решение для каждого расчетного блока осуществлялось с помощью итерационного процесса, для ускорения сходимости начальные приближения определялись с помощью предикторного метода Адамса. Для автоматического формирования вычислительных схем разработана программная система, основанная на использовании интегро-интерполяционного метода, позволяющая генерировать коэффициенты разностных уравнений с произвольными размерностями расчетных и опорных блоков, с возможностью перехода на схемы растяжения – сжатия шага. При необходимости сокращения длины шага, ранее посчитанные значения использовались в расчетных схемах как промежуточные, что позволило значительно сократить количество вычислительных операций. Оценки погрешности аппроксимации сформированы без использования точного решения.

Список литературы: 1. Воеводин В.В. Параллельные вычисления / В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. – СПб.: BHV-Санкт-Петербург, 2002. – 608 с. 2. Migdalas A. Parallel Computing in Optimization / A. Migdalas, M. Pardalos, S. Storoy. – Springer Verlag, 2012. – 463 p. 3. Дмитриева О.А. Параллельне моделювання динамічних об'єктів зі сконцентрованими параметрами / О.А. Дмитриева. – Харків: "Ноулідж". – 2014. – 336 с. 4. Hairer E. Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems / E. Hairer, S. Nørsett, G. Wanner. – Springer Verlag, 1993. – 528 p. 5. Argyros I. Convergence and Applications of Newton-type Iterations / I. Argyros. – Springer Verlag, 2009. – 463 p. 6. Хайпер Э. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems / E. Hairer, G. Wanner. – Springer Verlag, 1996. – 614 p. 7. Фельдман Л.П. Параллельные методы решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений блочными разностными схемами / Л.П. Фельдман // Известия Южного федерального университета. – 2007. – Т. 75. – № 3 – С. 47–60. 8. Вайнер Р. Эффективное управление точностью численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений и оптимальные интерполяционные равнозначные блочные методы с переменным шагом / Р. Вайнер, Г. Ю. Куликов // Журнал вычислительной математики и математической физики – 2014. – Т. 54. – № 4 – С. 591–607. 9. Дмитриева О.А. Коллокационные блочные методы с контролем на шаге / О.А. Дмитриева // Системы обработки информации. – 2015. – № 5 (130). – С. 78–84. 10. Дмитриева О.А. Разработка и обоснование параллельных одношаговых блочных методов типа Биккарта / О.А. Дмитриева // Системы обработки информации. – 2014. – № 7 (123). – С. 121–126.

References:

1. Voevodin, V.V. and Voevodin, V.I. (2002), *Parallel computing*, BHV, St. Petersburg, 608 p.
2. Migdalas, A., Pardalos, M. and Storoy, S. (2012), *Parallel Computing in Optimization*, Springer Verlag, 463 p.

3. Dmitrieva, O.A. (2014), *The parallel simulation of dynamic objects with concentrated parameters*, Noulidzh, Kharkiv, 336 p.
4. Hairer, E., Nørsett, S. and Wanner, G. (1993), *Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems*, Springer Verlag, 528 p.
5. Argyros, I. (2009), *Convergence and Applications of Newton-type Iterations*, Springer Verlag, 463 p.
6. Hairer, E. and Wanner, G. (1996), *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems*, Springer Verlag, 614 p.
7. Feldman, L.P. (2007), "Parallel methods of solving the Cauchy problem for ordinary differential equations of block-difference schemes", *News of Southern Federal University*, Vol. 75, No. 3, pp. 47-60.
8. Weiner, R. and Kulikov, G.Yu. (2014), "Effective management of the accuracy of the numerical integration of ordinary differential equations and optimal interpolation methods equivalent block with variable pitch", *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, Vol. 54, No. 4, pp. 591-607.
9. Dmitrieva, O.A. (2015), "Collocation methods to control block in step", *Information processing systems*, No. 5 (130), pp. 78-84.
10. Dmitrieva, O.A. (2014), "Development and support of parallel one-step block methods such of Bickart", *Information processing systems*, No. 7 (123), pp. 121-126.

Поступила (received) 15.07.2015

Статью представил д-р техн. наук, проф. ДонНТУ Башков Е.А.

Dmitrieva Olga, Dr. Sci.Tech, Professor
Donetsk National Technical University
Pl. Shibankova, Krasnoarmejsk, 1, Ukraine, 85301
Tel.: (050) 998-11-75, e-mail: dmitrieva.donntu@gmail.com
ORCID ID: 0000-0001-8921-8433

УДК 004.272.2:519.63

Про побудову паралельних різницевих схем моделювання з варіацією кроку в розрахунковому блоці / Дмитрієва О.А // Вісник НТУ "ХПИ". Серія: Інформатика та моделювання. – Харків: НТУ "ХПИ". – 2016. – № 21 (1193). – С. 20 – 28.

Запропоновано паралельні різницеві схеми моделювання динамічних об'єктів, що дозволяють керувати розміром кроку при чисельному інтегруванні. Розрахункові схеми сформовані на основі багатокрокових колокаційних блокових методів. Чисельні розв'язки для кожного розрахункового блоку реалізовані з використанням ньютонівських ітерацій. Іл.: 4. Бібліогр.: 12 назв.

Ключові слова: різницева схема, керування розміром кроку, колокаційний блоковий метод, ньютонівська ітерація.

УДК 004.272.2:519.63

О построении параллельных разностных схем моделирования с вариацией шага в расчетном блоке / Дмитриева О.А // Вестник НТУ "ХПИ". Серія: Інформатика и моделирование. – Харьков: НТУ "ХПИ". – 2016. – № 21 (1193). – С. 20 – 28.

Предложены параллельные разностные схемы моделирования динамических объектов, позволяющие управлять размером шага при численном интегрировании. Расчетные схемы сформированы на основе многшаговых коллокационных блочных методов. Численные решения для каждого расчетного блока реализованы с использованием ньютоновских итераций. Ил.: 4. Библиогр.: 12 назв.

Ключевые слова: разностная схема, управление размером шага, коллокационный блочный метод, ньютоновская итерация.

UDC 004.272.2:519.63

About development of parallel difference schemes modeling with variation steps in the settlement block / Dmitrieva O.A. // Herald of the National Technical University "KhPI". Subject issue: Information Science and Modelling. – Kharkov: NTU "KhPI". – 2016. – №. 21 (1193). – P. 20 – 28.

Offered the parallel difference schemes for modeling of dynamic objects that allow you to control the step size in numerical integration. Calculation schemes are formed on the basis of collocation multistep block methods. Numerical solutions for each calculated block implemented using Newtonian iterations. Figs.: 4. Refs.: 12 titles.

Keywords: difference scheme, control the step size, collocation multistep block method, Newton iteration.