

УДК 004.272.2:519.63

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

## **ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ СВЕДЕНИЯ ПОЛНОЙ МАТРИЦЫ МНОГОСТАДИЙНОГО МЕТОДА**

Рассмотрены вопросы построения эффективных параллельных алгоритмов численного решения задачи Коши, основанные на приведении полной матрицы коэффициентов методов типа Рунге-Кутты к нижнему треугольному виду. Подобные преобразования позволяют значительно сократить количество LU-разложений и снизить трудоемкость реализации метода даже при последовательной реализации. Кроме того, при использовании параллельной вычислительной системы затраты уменьшаются пропорционально количеству используемых процессоров. Доказана устойчивость преобразованных методов, оценена скорость сходимости.

**Ключевые слова:** Задача Коши, многостадийный метод, полная матрица, диагонализация, триангуляризация, вычислительная сложность

### ***Введение***

Большая часть предлагаемых на сегодняшний день численных методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем базируется на классических многостадийных методах [1]. Как правило, наиболее часто употребляемыми являются неявные многостадийные методы, поскольку они изначально ориентированы на решение задач со специальными свойствами: жестких, плохо обусловленных, быстро осциллирующих [2–3]. В таких методах неявные отношения разрешаются с помощью итерационного процесса [4–5]. В пределах каждой итерации стадийный метод обладает некоторым параллелизмом, так как вычисление компонентов вектора на итерации распределяется по  $s$  процессорам, где  $s$  – количество неявных стадий метода [6]. Однако после каждой итерации процессоры должны обмениваться полученными результатами, а это подразумевает частую связь между процессорами. Такой мелкозернистый параллелизм особенно не привлекателен при использовании в компьютерах с распределенной памятью [7]. В статье предлагается альтернативный подход, который базируется на неявных многостадийных методах, модифицированных таким образом, что неявные стадии являются уже параллельными, так, что значения в стадийных точках могут быть получены независимо друг от

друга. Т.е. обмен значениями процессоры осуществляют не после каждой итерации, а после получения значения для очередной расчетной точки. Такое радикальное сокращение числа обменов достигается за счет использования диагонального или треугольного приближения исходной матрицы [8].

При реализации численного решения задачи Коши

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

с помощью неявных методов для каждой расчетной точки или блока точек возникает необходимость в решении системы нелинейных уравнений, размерность которой определяется количеством стадий неявного метода и количеством уравнений в системе [3, 9–10]. Классический подход к решению данной проблемы заключается в использовании итерационного метода Ньютона с полным якобианом [1–2]. При решении жестких систем этот подход является непривлекательным из-за высокой трудоемкости реализации, связанной, прежде всего, с необходимостью многократного переопределения величины шага интегрирования на участках быстрого изменения производной [2, 9]. Именно проблемы эффективной реализации решения таких систем являются основной целью данной работы. Для ускорения процесса счета наряду с параллельной реализацией предлагается использование преобразований подобия, приводящее исходный функциональный определитель к нижнему треугольному или диагональному виду, что обеспечивает улучшенные показатели параллелизма [8, 11–12].

### **Сведение полной матрицы к особенному виду**

Рассматривается задача Коши для обыкновенного дифференциального уравнения (1), численное решение которой пошагово реализуется с помощью неявного многостадийного метода (2)

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

Для системы (1) размерностью  $N$  при выборе  $s$ -стадийного метода каждая итерация требует  $s$  вычислений правой части и включает в себя решение нелинейной системы размерности  $s \ll N$ . Высокая требуемая точность решения, а, следовательно, большое число стадий  $s$ , и(или)

большая размерность системы  $N$  приводят к высокому порядку нелинейной системы размерности  $s\sqrt{N}$ . В качестве исходных методов численного решения задачи Коши рассматриваются неявные методы, которые характеризуются высоким порядком точности и наличием  $L$ -устойчивости. Если система (2) содержит хотя бы одно нелинейное уравнение, для ее решения необходимо использовать какой-либо итерационный метод: простой итерации, релаксации или метод Ньютона. Преимущества последнего было отмечено в работах [1–2, 8, 13–14]. Применительно к системе (2) метод Ньютона на каждой итерации требует решения линейной системы с упрощенной матрицей. Каждая итерация в (2) подразумевает  $s$  вычислений правой части и решения линейной системы размерности  $s\sqrt{N}$ . Матрица одна и та же для всех итераций. Но, даже если ее LU-разложение для упрощенного приведенного варианта будет находиться только один раз, при большой размерности системы это будет связано со значительными вычислительными затратами. Затраты на LU-разложение для системы размерности  $s\sqrt{N}$  определяются соотношением [8]

$$\frac{2s^3 N^3}{3} + O(s^2 N^2).$$

Как правило, последнее слагаемое в этом выражении игнорируется, но трудоемкость LU-разложения все-таки остается высокой. Для сокращения этих затрат в работе предлагается преобразование подобия, которым якобиан преобразуется к треугольному виду.

Для классических неявных стадийных методов, которые используются для решения жестких уравнений и их систем, такие преобразованные вхождения  $T$  сложны и требуют дальнейших модификаций, вовлекающих в расчеты сложную арифметику, основанную на матричных вычислениях. Именно этот факт определил необходимость использования в работе пакета *Mathematika Wolfram Research, Inc.* Триангуляризация базового неявного метода типа Рунге-Кутты с полной исходной матрицей

$$\begin{array}{c|cccccc}
 c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s-1} & a_{1s} \\
 c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s-1} & a_{2s} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss-1} & a_{ss} \\
 \hline
 & b_1 & b_2 & \dots & b_{s-1} & b_s
 \end{array}$$



$$A = LDU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & L & 0 \\ l_{21} & 1 & L & 0 \\ l_{s1} & l_{s2} & L & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & 0 & L & 0 \\ 0 & d_2 & L & 0 \\ 0 & 0 & L & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u_{12}/d_1 & L & u_{1s}/d_1 \\ 0 & 1 & L & u_{2s}/d_2 \\ 0 & 0 & L & 1 \end{pmatrix}.$$

Окончательное представление треугольной матрицы для итерирования

$$T_L = L - I + D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & L & 0 \\ l_{21} & d_2 & L & 0 \\ L & L & L & L \\ l_{s1} & l_{s2} & L & d_s \end{pmatrix}.$$

Окончательно построенный на  $T$  вхождениях итерационный метод очень эффективен, обладает естественным параллелизмом, что позволяет его реализацию в параллельных вычислительных системах. Фактически, подходом преобразования подобия, затраты на LU-разложение могут быть уменьшены до величины  $8N^3/3$ . Этот подход непосредственно заменяет функциональный якобиан неявного метода треугольной матрицей. Основные затраты такого подхода состоят в оценке трудоемкости LU-разложения преобразованной матрицы, которые составляют  $O(N^3)$ . Кроме того, при использовании параллельной вычислительной системы с  $s$  процессорами эти затраты уменьшаются на величину  $s$ . Т.е. для многостадийных методов выигрыш в параллельной реализации является очень значительным [12].

### **Исследование сходимости неявных методов на основе триангуляризации матрицы**

Как правило, итерационные процессы, используемые для решения уравнений, возникающих в неявных стадийных методах (2), начинают быстро сходиться только после определенного числа итераций. Поскольку планируется параллельная реализация метода, при которой итерационный метод одновременно применяется на всех стадиях шага, становится особенно важной быстрая сходимость с самых первых итераций. Рассмотренный в [10–11] вариант проведения итерационного процесса, в котором якобиан упрощен до диагональной формы, довольно эффективен для обеспечения сходимости, но у него довольно медленная начальная сходимость. Поэтому привлекательной является такая модификация предложенного в [10–11] подхода, чтобы сходимость обеспечивалась уже на начальных итерациях.

Разрешимость системы (3) доказывается на основе теоремы [1], утверждающей, что если  $f(t, (x(t)))$  непрерывная и удовлетворяющая условию Липшица с постоянной  $L$  функция в некоторой окрестности начальных условий и

$$M = \max_i \sum_{j=1}^s |q_{ij}|. \quad (4)$$

Тогда, если выполнено неравенство

$$\tau < \frac{1}{L * M}, \quad (5)$$

то существует единственное решение системы уравнений (3), которое может быть получено итерированием. Для итерирования нелинейной системы (3) можно воспользоваться следующими итерациями:

$$k_i^{(m+1)} = f \left( t_n + c_i \tau, x_n + \tau \sum_{j=1}^i q_{ij} k_j^{(m)}, \quad i = 1, 2, \dots, s \right). \quad (6)$$

Определяется вектор  $K = (k_1, k_2, \dots, k_s)^T$  и вводится норма

$$\|K\| = \max_i |k_i|, \quad i = 1, 2, \dots, s.$$

Тогда (6) можно записать в виде

$$K = F(K),$$

где

$$F_i(K) = f \left( t_n + c_i \tau, x_n + \tau \sum_{j=1}^i q_{ij} k_j^{(m)}, \quad i = 1, 2, \dots, s \right). \quad (7)$$

и

$$\|F(K)\| = \max_i |F_i(K)|, \quad i = 1, 2, \dots, s.$$

Оценивается норма разности

$$\begin{aligned} & \|F(K^{m+1}) - F(K^m)\| = \max_i |F_i(K^{m+1}) - F_i(K^m)| = \\ & = \max_i \left| f \left( t_n + c_i \tau, x_n + \tau \sum_{j=1}^i q_{ij} k_j^{(m)} \right) - f \left( t_n + c_i \tau, x_n + \tau \sum_{j=1}^i q_{ij} k_j^{(m)} \right) \right|. \end{aligned}$$

Используя условие Липшица, можно получить

$$\begin{aligned} & \|F(K^{m+1}) - F(K^m)\| \leq L * \max_i \left| \tau \sum_{j=1}^i q_{ij} (k_j^{(m+1)} - k_j^{(m)}) \right| \leq \\ & \leq L * \max_i \left| \tau \sum_{j=1}^i q_{ij} \|k_j^{(m+1)} - k_j^{(m)}\| \right| \leq L \tau \|K^{m+1} - K^m\| \max_i \sum_{j=1}^i |q_{ij}| \leq \end{aligned}$$

$$\leq LM\tau \|K^{m+1} - K^m\|.$$

Отсюда в силу (5) следует, что

$$\|F(K^{m+1}) - F(K^m)\| \leq \|K^{m+1} - K^m\|.$$

Таким образом, отображение  $F(K)$  является сжимающим отображением, что обеспечивает существование и единственность решения и сходимость последовательности приближений к решению.

### **Параллельное моделирование на основе триангуляризации полной матрицы**

Параллельная реализация предлагаемых алгоритмов, основанных на диагональных и треугольных преобразованиях, осуществлялась на MIMD архитектуре. Процессоры связаны через соединительную сеть, которая состоит из прямых коммуникационных ссылок, соединяющих пары процессоров в линейку процессорных элементов. Коммуникация выполняется посредством явной передачи сообщений. Обмен данными выполняется в синхронизированной коммуникационной фазе. Рассматривались варианты реализации методов с преобразованными матрицами коэффициентов, основанные на выполнении фиксированного числа итераций и на контроле локальной точности.

После преобразования исходной матрицы коэффициентов и получения расчетных схем с нижней треугольной матрицей, 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  $k$

$$g_i^{(m)} = x_n + \tau \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_i \tau, g_i^{(m-1)}), \quad i = 1, 2, \dots, s, m = 1, 2, \dots, k. \quad (8)$$

Если исходная матрица была преобразована к треугольному виду, то соотношение (8) будет выглядеть как

$$g_i^{(m)} = x_n + \tau \sum_{j=1}^i q_{ij} f(t_n + c_i \tau, g_i^{(m-1)}), \quad i = 1, 2, \dots, s, m = 1, 2, \dots, k. \quad (9)$$

Искомое решение

$$x_{n+1} = x_n + \tau \sum_{i=1}^s b_i f(g_i^{(k)}). \quad (10)$$

Количество итераций  $k$  определяет порядок сходимости метода

$$p^* = \min(p, k + 1) \quad (11)$$

где  $p$  — порядок используемого стадийного метода. Один шаг по времени, соответствующий системам уравнений (9) – (10), приведен на рис.1.

Каждый процессор получает значения  $x_n$ , которые принимаются за начальные приближения значений  $g_i^{(0)} = x_n$ , величину текущего временного шага  $\tau$  и заданное число итераций  $k$ . Понятно, что в силу (11) нерационально использовать число итераций большее, чем порядок используемого стадийного метода  $p$ . На каждом  $i$ -ом процессоре  $i = 1, 2, \dots, s$  осуществляется  $k$  вычислений значений  $g_i^{(m)}$ ,  $i = 1, 2, \dots, s, m = 1, 2, \dots, k$ . Если в расчетах используется матрица коэффициентов, приведенная к нижнему треугольному виду, то осуществление автономных итераций не представляется возможным, поскольку после каждого выполненного приближения возникает необходимость в обменах значениями  $g_i^{(m)}$ , поэтому число массовых обменов будет напрямую связано с заданным количеством итераций (см. рис. 1). Увеличение числа обменов, с одной стороны, приводит к возрастанию времени реализации задачи, но, с другой стороны, лучшая сходимость методов с треугольной матрицей коэффициентов позволяет сократить число итераций для оценки значений  $g_i^{(m)}$ .

При параллельной реализации методов с преобразованными матрицами коэффициентов, основанной на контроле локальной точности, количество ньютоновских итераций задается не жестко, а определяется, исходя из нормы отклонения. Таким образом, итерационный процесс можно останавливать, если  $\max_i |g_i^{(m)} - g_i^{(m-1)}| \leq \varepsilon$ . Поскольку решение нелинейной системы размером  $N$  имеет вычислительную сложность порядка  $N^3$ , решение отдельных систем потребует вычислительных усилий порядка  $sN^3$  вместо  $(sN)^3$ . При этом основная вычислительная работа при решении систем возникает при выполнении ньютоновских итераций. Следовательно, удачное распределение данных, которое обеспечивает хорошую балансировку загрузки на каждой ньютоновской

итерации, позволяет избежать перераспределения данных между процессорами.

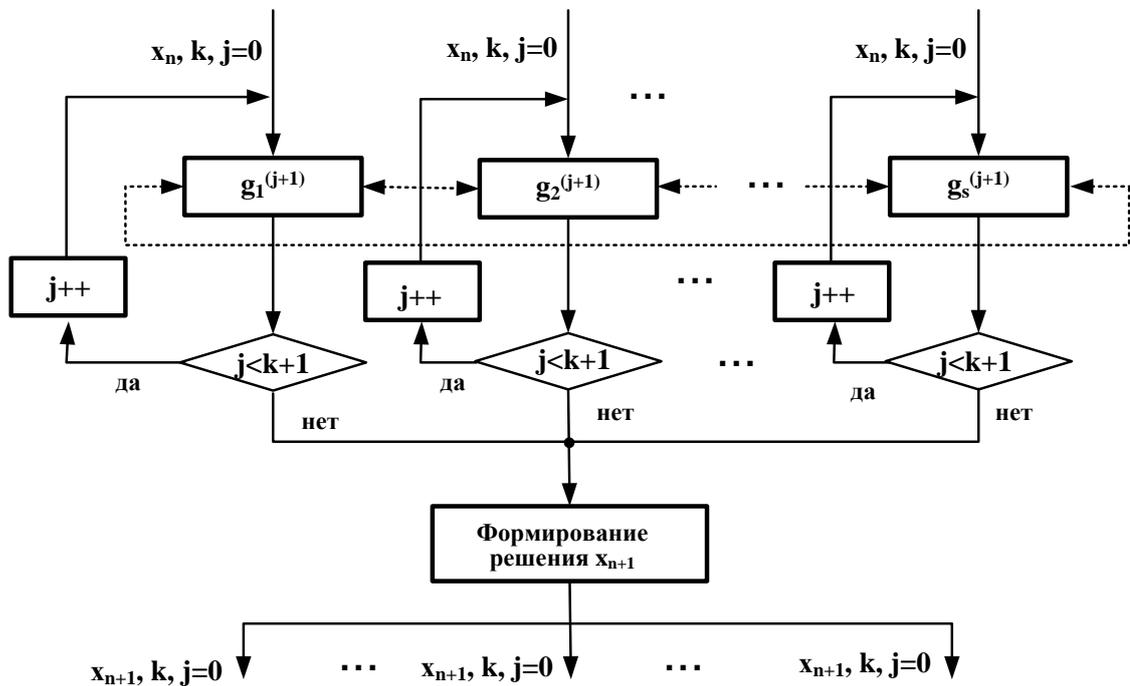


Рисунок 1. – Параллельная реализация макрошага с фиксированным числом итераций при триангуляризованной матрице коэффициентов

Характеристики параллелизма, ускорение и эффективность, исследовались для систем с изменяющимися трудоемкостями вычисления правых частей  $ft$ , принимающими значения  $ft = \{10, 50, 100, 500, 5000\}$ . Реализация двухстадийного неявного метода с нижней треугольной матрицей на SIMD структуре с числом процессорных элементов, совпадающих с размерностью системы, дает следующие показатели ускорения и эффективности (рис. 2). Те же характеристики для четырехстадийного метода приведены на рис. 3.

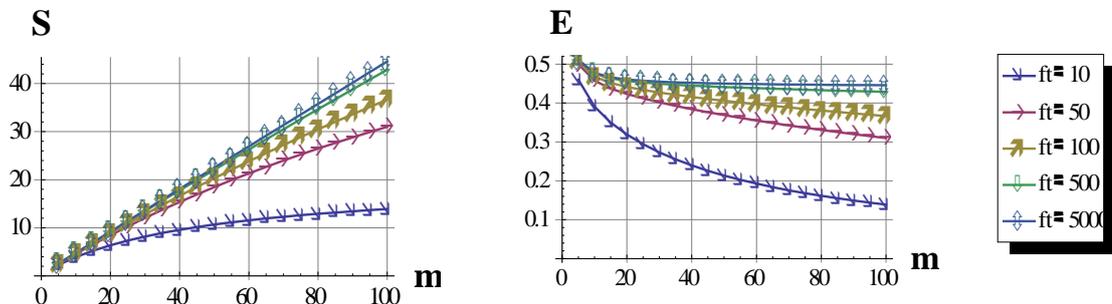


Рисунок 2. – Характеристики параллелизма 2-хстадийного метода с нижней треугольной матрицей

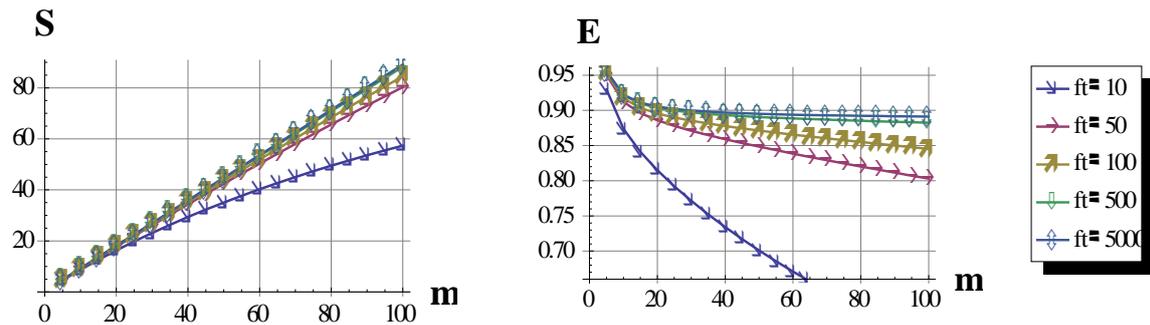


Рисунок 3. – Характеристики параллелизма 4-хстадийного метода с нижней треугольной матрицей

### **Заклучение**

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 достигается за счет использования треугольного приближения исходной матрицы. Приведение полной матрицы коэффициентов стадийного метода к треугольной форме с одной стороны, обеспечивает хороший параллелизм численной реализации, незначительно уступающий диагонализированной матрице, а, с другой стороны, обеспечивает быструю сходимость уже на начальных итерациях.

Построенные на основе предложенных методов параллельные алгоритмы характеризуются высокой скоростью сходимости, устойчивостью, обладают естественным параллелизмом, что обеспечивает их эффективную реализацию в параллельных вычислительных системах.

Проведенные эксперименты позволили получить зависимости показателей параллелизма от типа преобразования матрицы коэффициентов стадийного метода, алгоритма оценки числа итераций и трудоемкости правой части.

### **Список литературы**

1. Хайрер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / Э. Хайрер, С. Нерсетт, Г. Ваннер. – М.: Мир, 1990. – 512с. – ISBN 5-03-001179-X.. - М.: Мир, 1990.- 512с.
2. Хайрер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие задачи. / Э. Хайрер, Г. Ваннер. – М.: Мир, 1999. – 685с. – ISBN 5-03-003117.

3. Butcher J. C. ARK methods for stiff problems / J. C. Butcher, N. Rattenbury // Applied Numerical Mathematics. – 2005. – Vol. 53, № 1. – P. 165–181.
4. Butcher J. C. Numerical methods for ordinary differential equations / J. C. Butcher. – Wiley-VCH Verlag, 2003. – 418 p. – ISBN 0-471-96758-0.
5. Дмитрієва О.А. Паралельні різницеві методи розв'язання задачі Коші / О. А. Дмитрієва. - Донецьк: ДонНТУ, 2011. 265 с.
6. Burrage, K. Parallel iterated method based on Variable stepsize Multistep Runge-Kutta methods of Radau type for stiff problems / K. Burrage, H. Suhartanto // Adv.Comput. Math. - 2000. – Vol. 13. - P. 257 – 270.
7. 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 978-3-659-28540-0.
8. Houwen P. J. Embedded diagonally implicit Runge-Kutta algorithms on parallel computers / P. J. Houwen, B. P. Sommeijer, W. Couzy // Tech. Rep. NM-R8912, Centre for Mathematics and Computer Science, Amsterdam. – 1989. – 18 p.
9. Houwen P. J. Iteration of Runge-Kutta Methods with Block Triangular Jacobians / P. J. Houwen, B. P. Sommeijer // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. – 1996. – Vol. 76, № 7. – P. 367–375.
10. Дмитриева О.А. Параллельное моделирование жестких систем на основе диагонализации полной матрицы / / О. А. Дмитриева // Искусственный интеллект. - 2011, № 4, С. 46-53.
11. Дмитриева О.А. Упрощение итераций при параллельной реализации неявных методов решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений / О. А. Дмитриева // Наукові праці ДонНТУ. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка». – 2011. – № 13 (185). – С. 13–18.
12. Дмитриева О.А. Повышение порядка аппроксимации параллельных блочных одношаговых разностных схем решения задачи Коши / О. А. Дмитриева // Наукові праці ДонНТУ Серія «Обчислювальна техніка і автоматизація». – 2013. – № 1 (24). – С. 104–112.
13. Дмитриева О.А. Высокоэффективные алгоритмы управления шагом на основе параллельных колокационных блочных методов / О. А. Дмитриева // Искусственный интеллект. – 2012. – № 4. – С. 77–88
14. Дмитриева О.А. Организация параллельных вычислений при моделировании динамических объектов с автоматическим выбором шага и порядка / О. А. Дмитриева // Наукові праці ДонНТУ Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка». – 2012. – № 15(203). – С. 140–147.
15. 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.

*Надійшла до редакції 10.11.2013 р.*

*Рецензент: д.т.н., проф. Фельдман Л.П.*

**О.А. Дмитрієва**

Донецький національний технічний університет

**Паралельне моделювання на основі зведення повної матриці багатостадійного методу.** Розглянуто питання побудови ефективних паралельних алгоритмів чисельного розв'язку задачі Коші, засновані на приведенні повної матриці коефіцієнтів методів типу Рунге-Кутти до трикутного виду. Подібні перетворення дозволяють значно скоротити кількість LU-розкладань і знизити трудомісткість реалізації методу навіть при послідовній реалізації. Крім того, при використанні паралельної обчислювальної системи, витрати зменшуються пропорційно кількості використовуваних процесорів. Доведено стійкість перетворених методів, визначено швидкість збіжності.

**Ключові слова:** Задача Коші, багатостадійний метод, повна матриця, діагоналізація, триангуляризація, обчислювальна складність

**O.A. Dmitrieva**

Donetsk National Technical University

**Parallel simulation based on reduction of full matrix multistep method.** Consideration questions construction of effective parallel algorithms for numerical solution of the Cauchy problem, which are based on the reduction of the full coefficients matrix of Runge -Kutta methods to the lower triangular form. Such transformations can significantly reduce the number of LU- decomposition and reduce the complexity implementation of the method even in the sequential implementation. In addition, the use parallel computing system costs are reduced proportionally to the number of processors used. Prove the stability converted methods rate of convergence.

As the initial methods of numerical solution the Cauchy problem considered implicit methods, which are characterized by a high order of accuracy and the presence of L-stability. The proposed approaches are based on modifications of implicit multistep methods, concurrent receipt values in the stage-points, while processors exchange values are not carried out after each iteration, and then get the value for the next design point. Such a radical reduction in the number of exchanges is achieved by using a triangular approximation of the original matrix. Bringing full matrix coefficients phasic method triangular shape with one hand provides good parallelism numerical implementation slightly inferior to the diagonal matrix, and, on the other hand, provides faster convergence at the early iterations. To bring the classic stage-implicit methods to triangular form used package *Mathematica Wolfram Research, Inc.*

Constructed on the basis of the proposed methods parallel algorithms are characterized by high rate of convergence, stability, have a natural parallelism that ensures their effective implementation in the parallel computer systems. The experiments yielded indicators depending on the type of parallelism transformation matrix coefficients stepwise method, the algorithm for estimating the number of iterations and the complexity of the right side.

**Keywords:** Cauchy problem, multistep method, full matrix, diagonalization, triangulation, computational complexity