

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕЖЕСТКИХ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВЛОЖЕННЫМ МЕТОДОМ КУТТЫ-МЕРСОНА

Фельдман Л.П., Назарова И.А.

Кафедра ПМИИ, ДонНТУ
nazarova@r5.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Feldman L.P., Nazarova I.A. Parallel realization of numerical solution nonstiff ordinary differential equations of embedded Kutta-Merson method. Parallel solution of nonstiff ordinary differential equations with use Kutta-Merson method provided embedded solutions are considered. For embedded Kutta-Merson method, the potential system and algorithm parallelism is exploited. Obtained algorithm are realized on SIMD-system with matrix topology, parallel solution the execution time and acceleration are defined.

Введение

Одна из основных проблем, связанных с применением методов Рунге-Кутты, состоит в получении надежных и, в то же время простых и эффективных оценок погрешности решения задачи Коши. В решении данной проблемы значительные успехи достигнуты за счет введения вложенных методов Рунге-Кутты (ВМРК) или методов вложенных форм. Основные соображения, положенные в основу этих методов, таковы: нужно получить формулы из семейства Рунге-Кутты, которые использовали бы одни и те же значения функций – правой части уравнения – и определяли бы разные конкретные методы одного или смежных порядков [1,2].

1.Общая характеристика вложенных методов Рунге-Кутты

Численно решается задача Коши, уравнение или система обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с известными начальными условиями :

$$\begin{cases} y' = f(x, y); \\ y(x_0) = y_0. \end{cases} \quad (1)$$

Общая схема методов Рунге-Кутты с вложенным решением:

$$\begin{cases} y^{n+1} = y^n + h_n \cdot \sum_{l=1}^s b_l \cdot k_l; \\ \hat{y}^{n+1} = y^n + h_n \cdot \sum_{l=1}^s \hat{b}_l \cdot k_l; \\ k_l = f(x_n + c_l \cdot h_n; y_l + h_n \cdot \sum_{i=1}^{l-1} a_{li} \cdot k_i); l = 1, \dots, s; \\ d^{n+1} = |\hat{y}^{n+1} - y^{n+1}| \end{cases} \quad (2)$$

Вложенный метод Рунге-Кутты $r(\hat{r})$ – это схема, в которой метод \hat{r} -го порядка (“оценщика погрешности”) получается как побочный продукт метода r -го порядка. Порядок аппроксимаций: y^n и \hat{y}^n обычно отличается на 1, т.е. $r = \hat{r} + 1$

или $r = \hat{r} - 1$. Для определения локальной погрешности менее точного результата и управления величиной шага интегрирования используется величина пропорциональная разности $|(\hat{y}_{k+1} - y_{k+1})|$.

2. Вычислительные схемы вложенного метода Кутты-Мерсона

Идея вложенных форм для методов Рунге-Кутты реализована в различных вычислительных схемах той или иной эффективности. Рассмотрим один из первых методов такого типа: пятиэтапный метод Кутты-Мерсона четвертого порядка [1].

Метод Кутты-Мерсона4(5) обладает той особенностью, что \hat{y}^n имеет порядок $\hat{r} = 5$ только для линейных уравнений с постоянными коэффициентами. Рассмотрим различные способы реализации метода вложенных форм Кутты-Мерсона при решении системы однородных линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами(СЛОДУ), в силу того, что лучшие результаты схема дает именно в этом случае.

Общий вид задачи Коши для однородных СЛОДУ с постоянными коэффициентами:

$$\begin{cases} \bar{y}' = A\bar{y}, \\ \bar{y}(x_0) = \bar{y}_0 = (y_1^0, y_2^0, \dots, y_m^0)^T, \\ \bar{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T, \\ A = \|a_{ij}\|, i, j = 1..m \end{cases} \quad (3)$$

где \bar{y} – вектор неизвестных; \bar{y}_0 – вектор начальных условий; A – матрица коэффициентов линейной системы.

Численное решение системы (3) последовательно можно получить по следующей схеме Кутты-Мерсона :

$$\begin{cases} \bar{k}_1^n = A\bar{y}^n; \\ \bar{k}_2^n = A[\bar{y}^n + \frac{h}{3}\bar{k}_1^n]; \\ \bar{k}_3^n = A[\bar{y}^n + \frac{h}{6}\bar{k}_1^n + \frac{h}{6}\bar{k}_2^n]; \\ \bar{k}_4^n = A[\bar{y}^n + \frac{h}{8}\bar{k}_1^n + \frac{3h}{8}\bar{k}_2^n]; \\ \bar{k}_5^n = A[\bar{y}^n + \frac{h}{2}\bar{k}_1^n - \frac{3h}{2}\bar{k}_2^n + 2h\bar{k}_4^n]; \\ \bar{y}^{n+1} = \bar{y}^n + \frac{h}{2}(\bar{k}_1^n - 3\bar{k}_3^n + 4\bar{k}_4^n); \\ \bar{y}^{n+1} = \bar{y}^n + \frac{h}{2}(\bar{k}_1^n + 4\bar{k}_4^n + \bar{k}_5^n). \end{cases} \quad (4)$$

Выполним элементарные преобразования системы (4) для оценки времени последовательной реализации одного шага интегрирования и оценим время вычисления с учетом :

$$\begin{cases} \bar{k}_1^n = A \bar{y}^n ; \\ \bar{k}_2^n = \bar{k}_1^n + \frac{h}{3} A \bar{k}_1^n ; \\ \bar{k}_3^n = \bar{k}_1^n + \frac{h}{6} A \bar{k}_1^n + \frac{h}{6} A \bar{k}_2^n ; \\ \bar{k}_4^n = \bar{k}_1^n + \frac{h}{8} A \bar{k}_1^n + \frac{3h}{8} A \bar{k}_2^n ; \\ \bar{k}_5^n = \bar{k}_1^n + \frac{h}{2} A \bar{k}_1^n - \frac{3h}{2} A \bar{k}_2^n + 2hA \bar{k}_4^n . \end{cases} \quad (5)$$

Время, затраченное на выполнение последовательного вычисления шаговых коэффициентов по схеме (5) :

$$T_{\bar{k}} = 4t_{A \times \bar{y}} + 8t_{C \times \bar{y}} + 8t_{\bar{y} + \bar{y}}, \quad (6)$$

где $t_{A \times \bar{y}}$ – время умножения матрицы на вектор; $t_{C \times \bar{y}}$ – время умножения вектора на скаляр; $t_{\bar{y} + \bar{y}}$ – время выполнения сложения векторов.

Общее время, затрачиваемое на реализацию одного шага интегрирования, по схеме Кутты-Мерсона (5) включает время вычисления шаговых коэффициентов, обеих аппроксимаций и оценки локальной погрешности:

$$T_{1шага} = 4t_{A \times \bar{y}} + 13t_{C \times \bar{y}} + 15t_{\bar{y} + \bar{y}}. \quad (7)$$

Предложенная схема имеет достаточно высокую вычислительную сложность. Для сокращения вычислений представим величины \bar{y} , \bar{y}' и \bar{d} на каждом шаге, как функции матрицы коэффициентов системы и шага интегрирования.

После упрощающих преобразований получим:

$$\begin{cases} \bar{y}^{n+1} = [E + hA + \frac{h^2}{2} A^2 + \frac{h^3}{6} A^3 + \frac{h^4}{24} A^4] \cdot \bar{y}^n ; \\ \bar{y}'^{n+1} = [E + hA + \frac{h^2}{2} A^2 + \frac{h^3}{6} A^3] \cdot \bar{y}^n ; \\ \left| \bar{y}^{n+1} - \bar{y}'^{n+1} \right| = \frac{h^4}{24} A^4 \cdot \bar{y}^n . \end{cases} \quad (8)$$

Вычислительная схема (8) позволяет уменьшить время каждого шага интегрирования за счет создания подготовительного этапа, который будет выполняться до начала основного счета и содержать операции, не связанные непосредственно с номером шага. Для вложенных методов величина шага интегрирования h – не есть постоянная величина, поэтому основной операцией подготовительного этапа будет: вычисление степеней матрицы коэффициентов системы A^2, A^3, A^4 . Заметим, что эта операция являлась наиболее трудоемкой в схеме (8). Время подготовительного этапа вычисляется, как :

$$T_{подг.эmana} = 3t_{A \times A} + 3t_{C \times A},$$

где $t_{A \times A}$ – время вычисления скалярного произведения матриц; $t_{C \times A}$ – время умножения матрицу на скаляр. Определим время выполнения одного шага

интегрирования по схеме (9) с учетом того факта, что нет необходимости в вычислении обоих приближений, достаточно знать \bar{y}^{n+1} и \bar{d}^{n+1} :

$$T_{Iшага} = 4t_{A \times \bar{y}} + 13t_{C \times \bar{y}} + 15t_{\bar{y} + \bar{y}}. \tag{9}$$

3. Параллельная реализация вложенных схем Кутты-Мерсона

Рассмотрим отображение алгоритмических схем Кутты-Мерсона на многопроцессорные вычислительные системы SIMD-структуры с распределенной памятью. Конфигурацию системы считаем фиксированной: число процессорных элементов и схема их соединения не изменяются в процессе счета. Каждый процессор может выполнить любую арифметическую операцию за один такт, временные затраты, связанные с обращением к памяти отсутствуют.

Параллельная реализация метода Кутты-Мерсона требует распараллеливания следующих базовых операций: матричное и векторное умножение и сложение, а также умножение вектора и матрицы на скаляр. Из предыдущего анализа вычислительных свойств метода можно предположить, что одно из наиболее оптимальных топологических решений – это квадратная сетка $m \times m$ или ее замкнутый эквивалент – тор. На такой топологической схеме достаточно эффективно выполняются матричные операции, составляющие основу преобразованных вложенных форм. Для простоты изложения рассмотрим случай, когда количество процессорных элементов в строке или столбце матрицы совпадает с размерностью задачи, m . Вычисление матричного умножения и умножения матрицы на вектор может быть выполнено по систолическому алгоритму, который является наиболее эффективным для SIMD-систем[3]. Процесс выполнения систолического умножения матриц состоит из предварительного косоого сдвига левого сомножителя по строкам, влево и правого - вверх, по столбцам. Затем пошагово выполняются: m умножений элементов, $(m-1)$ - одиночный сдвиг и $(m-1)$ сложение:

$$T_{AxA}^{сис\tau} = mt_{умн} + (m-1)t_{сд} + 3(m-1)t_{сд}, \tag{10}$$

где $t_{умн}, t_{сд}, t_{сд}$ - времена выполнения одиночных операций умножения, сложения и сдвига. Вычисление систолического умножения матрицы на вектор на базе алгоритма сдваивания, подробно описано в [4] и требует следующего времени выполнения:

$$T_{AxY}^{сис\tau} = t_{умн} + (m + \hat{m} - 2)t_{сд} + \text{Log}_2 \hat{m} t_{сд}, \tag{11}$$

где $\hat{m} = 2^l - 1$ и $l = \lceil \text{Log}_2 m \rceil$. Тогда, время решения задачи за n шагов интегрирования по схеме (5) равно:

$$T_{KM} = (m-1)t_{сд} + nT_{Iшага}. \tag{12}$$

Здесь первое слагаемое учитывает время подготовительного косоого сдвига матрицы, которое может быть выполнено до начала общего решения задачи. После подстановки значений времени выполнения произведения матрицы на вектор для вычислительной схемы (6) метода Кутты-Мерсона имеем:

$$T_{KM} = (17nt_{умн} + (4\text{Log}_2 \hat{m} + 15)nt_{сд} + [4n(m + \hat{m} - 2) + (m-1)]t_{сд}). \tag{13}$$

Для преобразованной схемы (8) общее время выполнения равно:

$$T'_{KM} = (9n + 3m + 3)t_{умн} + (n\text{Log}_2 \hat{m} + 3n + 3m - 3)t_{сд} + [n(m + \hat{m} - 2) + 9(m-1)]t_{сд}, \tag{14}$$

в том числе время подготовительного этапа составляет:

$$T_{подг.эмана} = (3m + 3)t_{умн} + (3m - 3)t_{сл} + 9(m - 1)t_{сд}. \quad (15)$$

Для сравнения сложности вычислительных схем метода Кутты-Мерсона (5) и (8), на рисунке 1 приведены графики зависимости отношения времени обмена и арифметических операций от размерности задачи, m .

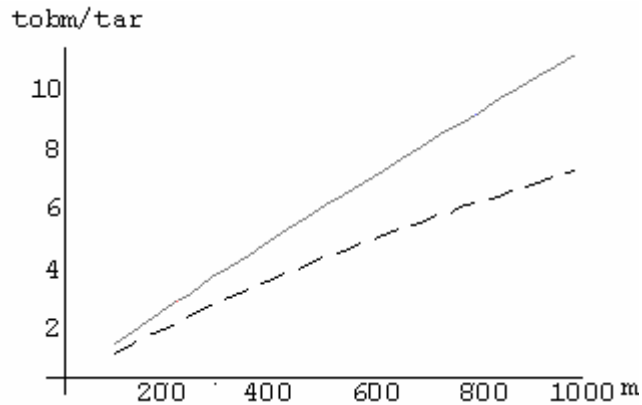


Рисунок 1 – Зависимость отношения времени обмена и вычислений от порядка системы

Здесь и в дальнейшем сплошной линией изображены характеристики алгоритма (5), прерывистой – алгоритма (8).

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы: подготовительный этап схемы (8) имеет большую вычислительную и обменную сложность, что не является недостатком в силу того, что эти операции выполняются один раз до начала основного счета; вычислительная сложность преобразованной схемы Кутты - Мерсона меньше, чем схемы без преобразований; количество обменных операций в схеме (5) приблизительно в четыре раза больше, чем в схеме (8); обе вычислительные схемы имеют больший удельный вес операций обмена, чем арифметических в общем объеме вычислений.

4. Оценка качества параллельных схем Кутты-Мерсона

Для сравнения и оценки качества предложенных параллельных вычислительных схем алгоритма Кутты-Мерсона используются следующие наиболее распространенные критерии: коэффициент ускорения, S и эффективности, E . При этом считается, что последовательные варианты этих схем реализованы на однопроцессорной ВС с быстродействием арифметического процессора и объемом ОЗУ равным суммарному объему всех ЗУ арифметических процессоров и с необходимым числом внешних устройств, имеющих скорости обмена такие же, что и МПВС типа SIMD. Приведем характеристики потенциального параллелизма схем Кутты-Мерсона (5) и (8), а также оценку качества алгоритмов с учетом операций обмена.

Для вычислительной схемы (5) время реализации на однопроцессорной ВС составляет для n точек интегрирования:

$$T_{посл} = (4m^2 + 13m)t_{умн} + (4m^2 + 15m)t_{сд}, \quad (16)$$

тогда коэффициент ускорения без учета обменных операций равен

$$S_{ном.КМ} = \frac{n(4m^2 + 13m)t_{умн} + n(4m^2 + 15m)t_{сд}}{17nt_{умн} + (4\text{Log}_2\hat{m} + 15)nt_{сл}}, \quad (17)$$

а с учетом таковых:

$$S_{КМ} = \frac{n(4m^2 + 13m)t_{умн} + n(4m^2 + 15m)t_{сд}}{17nt_{умн} + (4\text{Log}_2\hat{m} + 15)nt_{сл} + [4n(m + \hat{m} - 2) + (m - 1)]t_{сд}}. \quad (18)$$

Качество вычислительной схемы (9) может быть оценено следующим образом :

$$T'_{посл} = (3m^3 + 3m^2 + 6nm)t_{умн} + (3m^3 + 5nm)t_{сл},$$

$$S'_{ном.КМ} = \frac{(3m^3 + 3m^2 + 6nm)t_{умн} + (3m^3 + 5nm)t_{сл}}{(9n + 3m + 3)t_{умн} + (n\text{Log}_2\hat{m} + 3n + 3m - 3)t_{сл}} \quad (19)$$

$$S'_{КМ} = \frac{(3m^3 + 3m^2 + 6nm)t_{умн} + (3m^3 + 5nm)t_{сл}}{(9n + 3m + 3)t_{умн} + (n\text{Log}_2\hat{m} + 3n + 3m - 3)t_{сл} + [n(m + \hat{m} - 2) + 9(m - 1)]t_{сд}}. \quad (20)$$

Коэффициент эффективности может быть получен из коэффициента ускорения путем деления, в данном случае на m^2 :

$$E_{КМ} = \frac{n(4m^2 + 13m)t_{умн} + n(4m^2 + 15m)t_{сд}}{m^2 [17nt_{умн} + (4\text{Log}_2\hat{m} + 15)nt_{сл} + [4n(m + \hat{m} - 2) + (m - 1)]t_{сд}]} \quad (21)$$

и

$$E'_{КМ} = \frac{(3m^3 + 3m^2 + 6nm)t_{умн} + (3m^2 + 5nm)t_{сл}}{m^2 [(9n + 3m + 3)t_{умн} + (n\text{Log}_2\hat{m} + 3n + 3m - 3)t_{сл} + [n(m + \hat{m} - 2) + 9(m - 1)]t_{сд}]}$$

На рисунках 2,3 приведены коэффициенты ускорения для оценки потенциального параллелизма схем и параллелизма с учетом обмена, как функции размерности задачи

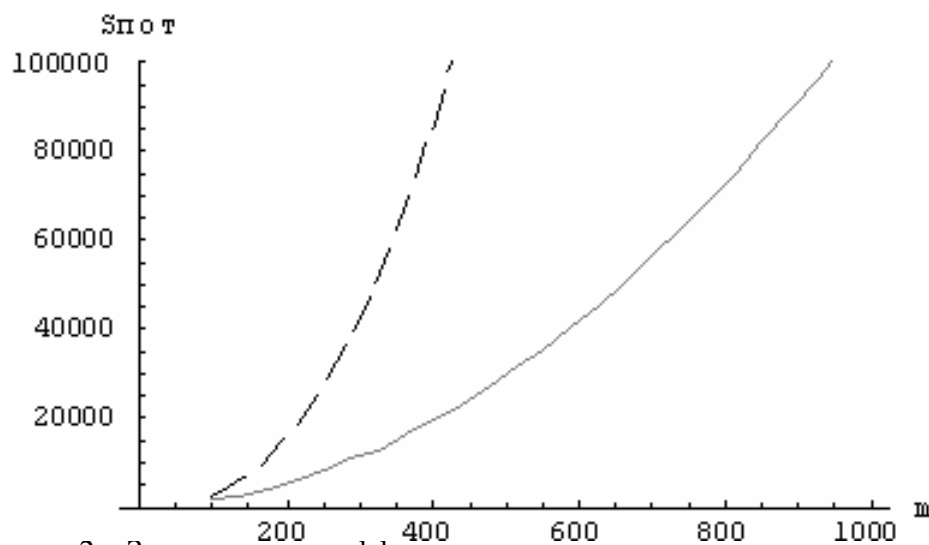


Рисунок 2 – Зависимость коэффициентов ускорения от порядка системы без учета обменных операций

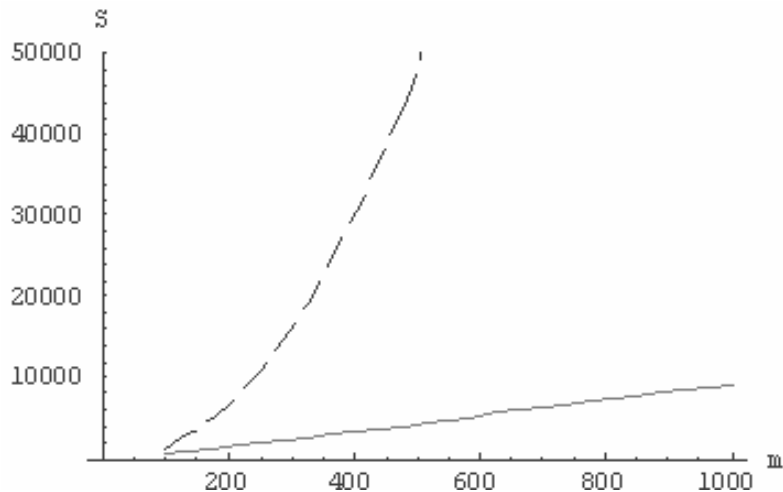


Рисунок 3 – Залежність коефіцієнтів прискорення від порядку системи з урахуванням операцій обміну

Визначення характеристик паралелізму здійснювалось з допомогою пакета *Mathematica*® (Wolfram Research Inc.).

Заключення

Проведений порівняльний аналіз двох різних схем вложеного методу Кутти-Мерсона показав суттєве різниця в ефективності їх відображення на паралельну SIMD - систему з матричною топологією. Модифікований метод з обчислювальною схемою (8) продемонстрував кращі характеристики потенціального паралелізму і паралелізму реального, враховуючого крім арифметических ще і обмінні операції, які можуть суттєво впливати на складність алгоритму в цілому.

Перспективним напрямком подальших досліджень є оцінка впливу різних топологій багатопроцесорних ВС на характеристики якості паралельних алгоритмів вложеного методу Рунге-Кутти, розробка паралельних алгоритмів ВМРК більш високих порядків.

Перелік джерел

1. Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи: Пер. с англ. – М.: Мир, 1990. – 512с.
2. Bergman S., Rauber T., Runger G. Parallel execution of embedded Runge-Kutta methods. *International Journal of Supercomputer Applications*, 10(1):62-90, 1996.
3. Бройнль Т. Паралельне програмування: Початковий курс: Навч. посібник/ Вступ.слово А.Ройтера;Пер. з нім. В.А.Святного. - К.: Вища шк.,1997.-358с.
4. Фельдман Л.П. Параллельные алгоритмы моделирования динамических систем, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями// Научн.тр.ДонГТУ.Серия: Информатика, кибернетика и вычислительная техника, (ИКВТ-99),выпуск 6: – Донецк : ДонГТУ,1999, с. 24-29.

Поступила в редакційну колегію 28.10.2002