

УДК 004.272.2:519.63

О.А. ДМИТРИЄВА (д-р техн. наук, проф.)

Донецький національний технічний університет

ПРО БЛОКОВУ МОДИФІКАЦІЮ МЕТОДІВ ТИПУ БІККАРТА

На основі відомих методів типу Біккарта були виконані одно- і багатокрокові модифікації різницевих схем з організацією розрахункових блоків. Досліджено стійкість отриманих методів за початковими даними і по правій частині. Для формування різницевих схем сформовано загальний вигляд системи алгебраїчних рівнянь, що дозволяє визначити невідомі коефіцієнти для будь-якої кількості опорних і розрахункових точок. Отримано співвідношення для оцінки максимальних порядків апроксимації різницевих схем. Для деяких розмірностей блоків наведено різницеві схеми, які орієнтовані на кількість доступних процесорів в паралельній реалізації. На відомих тестових завданнях з довільною розмірністю виконано паралельну реалізацію розроблених методів.

Ключові слова: задача Коші, метод Біккарта, різницева схема, розрахунковий блок, стійкість, нев'язок, порядок апроксимації.

Вступ. Сучасний стан розробок і досліджень в області математичного моделювання відзначається широким застосуванням паралельних обчислювальних систем різних архітектур [1]. Заявлена потужність сучасних паралельних систем вже перевищує рубіж петафлопс, але реальна продуктивність, за різними оцінками [2], не досягає 15% від можливої пікової як при вирішенні обчислювальних задач і завдань, пов'язаних з обробкою інформації, так і при реалізації паралельних моделей складних динамічних систем (СДС). Таким чином, на даному етапі розвитку паралельного моделювання СДС розробники моделей не в змозі скористатися тими перевагами, які потенційно притаманні апаратній базі паралельних обчислювальних систем. Саме тому на перше місце виходить напрямок, пов'язаний з ефективною організацією паралельних обчислень, розробкою сучасних паралельних чисельних методів і адаптацією існуючих, аналізом збіжності, стійкості і обчислювальної складності, реалізацією методів в паралельних системах з різними архітектурами.

Протягом багатьох років на кафедрі прикладної математики і інформатики ДВНЗ «ДонНТУ» проводилися наукові дослідження, які були спрямовані на розробку алгоритмічного й програмного забезпечення високопродуктивних обчислювальних систем і мереж. Під керівництвом професора кафедри Фельдмана Л.П. виконувалися фундаментальні дослідження за напрямками, що сприяли розробці нових та модифікації існуючих чисельних методів паралельного моделювання динамічних задач, топологічного відображення й оптимізації структур паралельних і розподілених обчислювальних систем. Науковці кафедри також приймали участь у роботах, що виконувалися під керівництвом професора кафедри комп'ютерної інженерії Святого В.А. і були присвячені розробці концепції створення розподіленого паралельного моделюючого середовища. Однак проведений аналіз свідчить, що проблема, пов'язана з розробкою чисельних методів, орієнтованих на паралельні обчислення, залишається актуальною на світовому рівні й потребує нових рішень із врахуванням запитів на паралельне моделювання динамічних систем надвеликої розмірності, високої жорсткості та поганої обумовленості. Розв'язання таких завдань за допомогою стандартних аналітичних методів або відомих комерційних пакетів програм являє собою складну проблему через величезні розмірності систем, отриманих в результаті тієї чи іншої дискретизації вихідних моделей. Матеріал, представлений в роботі, є узагальненням і розвитком досліджень, представлених в [3-4], орієнтований на розробку і обґрунтування методів моделювання динамічних систем великої розмірності з розширеною областю стійкості та високими показниками паралелізму.

1. Розробка і обґрунтування паралельних однокрокових блокових методів типу Бікарта.

Найбільш поширеним класом завдань в практиці математичного моделювання динамічних процесів, які спостерігаються в об'єктах як з зосередженими, так і з розподіленими параметрами, є задача Коші

$$x' = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0, \quad t \in [t_0, T]. \quad (1)$$

Через велику розмірність і нелінійність систем диференціальних рівнянь (1), якими часто описуються динамічні процеси, пошук аналітичних розв'язків таких систем є неможливим, що призводить до необхідності застосування чисельних методів [5]. Необхідно відзначити існування широкого класу задач, розв'язання яких за допомогою класичного (послідовного) моделювання відзначається неприйнятними часовими витратами, а також недостатньою продуктивністю [6]. У зв'язку з цим одним з визначальних чинників сучасного розвитку галузі математичного моделювання є використання високопродуктивних паралельних і розподілених обчислювальних систем. При цьому особливої актуальності набувають питання, пов'язані з розробкою сучасних паралельних чисельних методів і адаптацією для паралельної реалізації існуючих. Як правило, розробка паралельних алгоритмів пошуку розв'язків задачі Коші зводиться до розробки паралельних алгоритмів пошуку розв'язків нелінійних систем алгебраїчних рівнянь, породжуваних чисельними методами дискретизації [7]. При цьому безпосередній вплив обраного методу на ефективність його паралельної реалізації залишається без уваги дослідників, тому матеріал даної статті орієнтований на розробку і обґрунтування методів моделювання динамічних систем з розширеною областю стійкості, що відзначаються високими показниками паралелізму. В якості вихідного було обрано клас методів з однією випереджаючою точкою типу Бікарта [5] і здійснена спроба збільшити кількість розрахункових точок, які формують блок.

1.1. Генерування різницевої схем однокрокових блокових методів типу Бікарта.

Як правило, для використання в паралельних обчислювальних системах намагаються адаптувати багатокрокові або багатоточкові чисельні методи розв'язання задачі (1), структура яких добре узгоджується з топологією процесорного поля.

Однак наявність бар'єрів Далквіста [5], які характеризуються обмеженням порядком А-стійких багатокрокових методів, призводить до необхідності розробки нових підходів, пов'язаних з використанням похідних від розв'язків вищих порядків [8], з введенням додаткових етапів, додаткової стадійної, та (або) випереджаючої точки (методи з забіганням вперед). Якщо в якості випереджаючої ввести не одну, а кілька точок, блок розмірністю s , $T_n^s = \{t_{n,1}, t_{n,2}, \dots, t_{n,s}\}$, то наближені значення розв'язків в них $U_n^s = \{u_{n,1}, u_{n,2}, \dots, u_{n,s}\}$ можна буде визначати паралельно з співвідношень, побудованих за методами типу Бікарта, але із збільшеною кількістю розрахункових точок

$$\frac{1}{\tau} \sum_{j=0}^s a_{i,j} u_{n,j} = f_{n,i}, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2)$$

де τ - крок інтегрування,

$$f_{n,i} = f(x(t_n + i\tau), t_n + i\tau),$$

$a_{i,j}$, $i = 1, 2, \dots, s$, $j = 1, 2, \dots, s$ - невідомі коефіцієнти різницевої рівнянь.

Для визначення коефіцієнтів різницевої схеми формуються вирази для нев'язок на розв'язанні $x(t)$ вихідного диференціального рівняння

$$r_{n,i} = -\frac{1}{\tau} \sum_{j=0}^s a_{i,j} x_{n,j} + x'_{n,i}, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (3)$$

де $x_{n,i} = x(t_n + i\tau)$, $x'_{n,i} = x'(t_n + i\tau)$.

Для i -го рівняння будемо вимагати його апроксимації в точці $t_{n,0}$. Розкладаючи $x(t_n + i\tau)$ і $x'(t_n + i\tau)$ в ряди Тейлора в околі точки $t_{n,0}$, підставляючи ці розкладання в співвідношення (2) і групуючи члени з однаковими ступенями по τ , отримаємо систему рівнянь для визначення коефіцієнтів різницевої схеми

$$\sum_{j=0}^s a_{i,j} = 0, \quad 1 - \sum_{j=0}^s j * a_{i,j} = 0, \quad (4)$$

$$i^{l-1} - \frac{1}{l} \sum_{j=0}^l a_{i,j} j^l = 0, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad l = 2, 3, \dots, s.$$

За допомогою системи (4) можна отримати розрахункові коефіцієнти для довільної кількості шуканих точок в блоці, при цьому точність апроксимації буде обмежена порядком $O(\tau^{s+1})$. Таким чином можна згенерувати різницеву розрахункову схему, орієнтовану на кількість доступних процесорів в паралельній реалізації. Так, для розмірності блоку $s=2$ (відповідно, при наявності двох процесорів) система рівнянь (2) прийме вигляд

$$\frac{-u_{n,0} + u_{n,2}}{2\tau} = f_{n,1}, \quad (5)$$

$$\frac{u_{n,0} - 4u_{n,1} + 3u_{n,2}}{2\tau} = f_{n,2}.$$

Значення нев'язків в кожній точці розрахункового блоку будуть визначатися співвідношеннями

$$r_{n,1} = -\frac{1}{6} x^{(3)}[0] \tau^3 + O[\tau]^4,$$

$$r_{n,2} = \frac{1}{3} x^{(3)}[0] \tau^3 + O[\tau]^4.$$

При збільшенні кількості розрахункових точок система різницевої рівнянь ускладнюється. Для блоку $s=5$ система рівнянь буде виглядати так:

$$\begin{aligned} & -\frac{12u_{n,0} + 65u_{n,1} - 120u_{n,2} + 60u_{n,3} - 20u_{n,4} + 3u_{n,5}}{60\tau} = f_{n,1}, \\ & \frac{3u_{n,0} - 30u_{n,1} - 20u_{n,2} + 60u_{n,3} - 15u_{n,4} + 2u_{n,5}}{60\tau} = f_{n,2}, \\ & \frac{-2u_{n,0} + 15u_{n,1} - 60u_{n,2} + 20u_{n,3} + 30u_{n,4} - 3u_{n,5}}{60\tau} = f_{n,3}, \\ & \frac{3u_{n,0} - 20u_{n,1} + 60u_{n,2} - 120u_{n,3} + 65u_{n,4} + 12u_{n,5}}{60\tau} = f_{n,4}, \\ & \frac{-12u_{n,0} + 75u_{n,1} - 200u_{n,2} + 300u_{n,3} - 300u_{n,4} + 137u_{n,5}}{60\tau} = f_{n,5} \end{aligned} \quad (6)$$

з відповідними нев'язками

$$\begin{aligned} r_{n,1} &= \frac{1}{30} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7, \quad r_{n,2} = -\frac{1}{60} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7, \\ r_{n,3} &= \frac{1}{60} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7, \quad r_{n,4} = -\frac{1}{30} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7 \\ r_{n,5} &= \frac{1}{6} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7. \end{aligned}$$

Таким же чином можна згенерувати систему різницевих рівнянь, розмірність якої буде погоджена з топологією процесорного поля.

1.2. Оцінка стійкості за початковими даними.

Для оцінки стійкості за початковими даними введемо відповідні вектори

$$\begin{aligned} U_n &= \{u_{n,0}\}, & n &= 1, 2, \dots \\ U_{n+1} &= \{u_{n+1,i}\}, & n &= 1, 2, \dots, & i &= 1, 2, \dots, s, \\ F_{n+1} &= \{f_{n+1,i}\}, & n &= 1, 2, \dots, & i &= 1, 2, \dots, s. \end{aligned}$$

Тоді в векторній формі рівняння (2) будуть мати вигляд

$$A_1 e U_n + A_2 U_{n+1} = \tau F_{n+1}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (7)$$

Розв'яжемо (7) щодо U_{n+1} і визначимо матрицю переходу відповідної однорідної системи рівнянь виду

$$U_{n+1} = Q U_n, \quad (8)$$

де $Q = -A_2^{-1} A_1$,

$$A_1 = (a_{1,0}, a_{2,0}, \dots, a_{s,0})^T.$$

Щоб система однорідних різницевих рівнянь, відповідна (7), була лінійно незалежна, вимагатимемо, щоб матриця

$$A_2 = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,s} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,s} \\ \dots & \dots & & \dots \\ a_{s,1} & a_{s,2} & \dots & a_{s,s} \end{pmatrix}$$

була невиродженою.

Стійкість або нестійкість рівняння (8) за початковими даними визначається розташуванням коренів характеристичного рівняння матриці $\tilde{Q}$, яка для однокрокових методів з числом розрахункових точок s буде сформована у вигляді:

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & Q_1 \\ 0 & \dots & 0 & Q_2 \\ \dots & \dots & & \dots \\ 0 & \dots & 0 & Q_s \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Вважається [9], що для матриці $\tilde{Q}$ виконана умова коренів, якщо всі корені її характеристичного рівняння лежать всередині або на границі одиничного кола, причому на границі кола немає кратних коренів. Ця умова є необхідною і достатньою для стійкості рівняння (7) за початковими даними.

Перевіримо стійкість двоточкового методу типу Біккарта (5), що визначається наступними розрахунковими коефіцієнтами

$$A_1 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)^T, A_2 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ -2 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}.$$

Відповідно

$$Q = -A_2^{-1} A_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \tilde{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Приведемо $\bar{Q}$ до нормальної жорданової форми:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Характеристичне рівняння матриці $\bar{Q}$ має корені $q_1 = 0$, $q_2 = 1$, тому метод стійкий за початковими даними. Виконавши аналогічні перетворення для методу типу Біккарта з довільною розмірністю блоку, отримаємо форму Жордана для матриці $\bar{Q}$ виду

$$\begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Таким чином, характеристичне рівняння матриці $\bar{Q}$ має корені, що дорівнюють $q_1 = 0$, $q_2 = 0, \dots, q_s = 1$, ця властивість завжди забезпечує стійкість розроблених методів за початковими даними.

1.3. Дослідження стійкості по правій частині.

У підрозділі 1.2 була отримана оцінка стійкості розв'язання однорідного рівняння (8) за початковими даними. Отримаємо оцінку розв'язання неоднорідного рівняння (7). Для дослідження стійкості по правій частині вводиться модельне одномірне рівняння

$$x'(t) = \lambda x(t), t > 0, \quad (10)$$

где λ - комплексне число ($\lambda < 0$).

Чисельний розв'язок модельного рівняння знаходиться в вигляді (8) або

$$U_{n+1} = Q^{n+1} U_0,$$

а стійкість розв'язання при $n \rightarrow \infty$ гарантується за умови $\|Q\| < 1$. Метод вважається А-стійким, якщо границею області стійкості методу в комплексному просторі є уявна вісь, і А(α)-стійким, якщо область його стійкості містить кут $|\arg(-\mu)| < \alpha, \mu = \lambda\tau$. Для розглянутих методів типу Біккарта будується функція стійкості Q . Визначаються праві частини (2) відповідно до (10)

$$f_{n,i} = f(t_{n,i}, u_{n,i}) = \lambda u_{n,i},$$

і після введення заміни $\mu = \lambda\tau$, будується система рівнянь виду (7), для якої матриця переходу Q матиме вигляд:

$$Q = -(A_2 - \mu E)^{-1} A_1.$$

Матриця $\bar{Q}$, за характеристичним рівнянням якої можна визначити тип стійкості методу, буде визначатися поданням (9). Перевіримо стійкість методу типу Біккарта (5). Визначимо матрицю переходу $\bar{Q}$

$$\bar{Q} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\mu - 2}{2 - 3\mu + 2\mu^2} \\ 0 & -\frac{\mu + 2}{2 - 3\mu + 2\mu^2} \end{pmatrix}$$

і приведемо її до нормальної жорданової форми

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\mu + 2}{2 - 3\mu + 2\mu^2} \end{pmatrix}.$$

Характеристичне рівняння матриці $\bar{Q}$ має корені, рівні

$$q_1(\mu) = 0, q_2(\mu) = -\frac{\mu + 2}{2 - 3\mu + 2\mu^2}.$$

Визначимо область стійкості методу, яка визначається другим власним числом, графічно (рис. 1), поклавши

$$e^{i\varphi} = -\frac{\mu + 2}{2 - 3\mu + 2\mu^2}.$$

Границею G області стійкості G є множина таких точок, для яких $|q(\mu)| = 1$. Для методу (5) границею G є уявна вісь, тобто множина точок $\mu = i\xi$, де ξ довільне дійсне число. Областю стійкості методу є ліва півплощина $\text{Re}(\mu) < 0$, так як для дійсних від'ємних значень μ має місце $0 \leq q(\mu) < 1$. Отже, метод абсолютно стійкий. У міру збільшення розмірності блоку методи характеризуються $A(\alpha)$ – стійкістю, причому значення кута α скорочується (рис. 1 - 4) від граничного значення $\alpha = 90^\circ$ для випадку $s=2$ (рис. 1), до $\alpha = 82,4^\circ$ для випадку $s=6$ (рис. 4). Необхідно відзначити, що методи з такими високими показниками величин кутів α , що визначають область стійкості, можуть бути використані при моделюванні об'єктів, описуваних жорсткими, погано зумовленими, швидко осцилюючими системами звичайних диференціальних рівнянь.

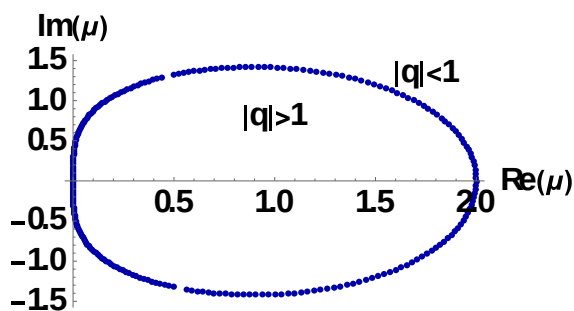


Рис. 1. Область стійкості блокового методу типу Бікарта, $s=2$, $\alpha = 90^\circ$

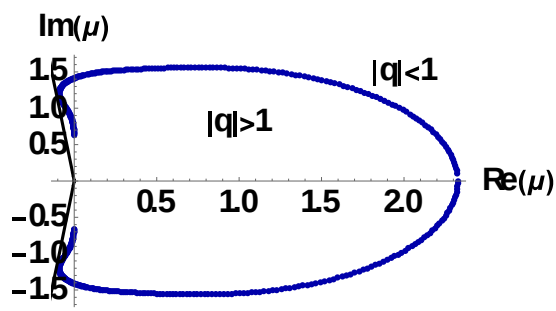


Рис. 3. Область стійкості блокового методу типу Бікарта, $s=5$, $\alpha = 84,8^\circ$

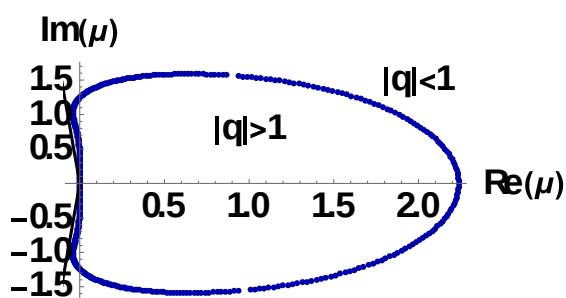


Рис. 2. Область стійкості блокового методу типу Бікарта, $s=4$, $\alpha = 85,9^\circ$

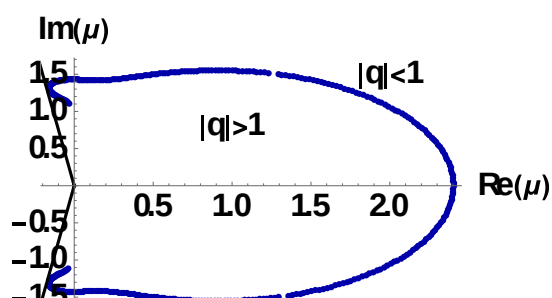


Рис. 4. Область стійкості блокового методу типу Бікарта, $s=6$, $\alpha = 82,4^\circ$

1.4. Тестова реалізація паралельних блокових методів типу Бікарта.

Тестування розроблених методів з метою виявлення їх робочих характеристик і областей застосування в роботі здійснювалося шляхом чисельної реалізації як традиційних тестових завдань, так і математичних моделей, які описують поведінку реальних динамічних об'єктів: повітряних потоків в шахтних вентиляційних мережах, утворення стійких агрегатів з молекул поверхнево-активних речовин, росту поверхні кристалів і т.п. Всі розглянуті моделі характеризуються великою розмірністю, яка може варіюватися, і наявністю жорстких компонент. Ефективність розроблених методів оцінювалася, як і в [7], шляхом зіставлення двох характеристик:

похибки і часу обчислення. Якщо для тестової задачі точний розв'язок відомий, оцінка проводилася за глобальною похибкою, в іншому випадку оцінювалася норма похибки.

Варіація розміру кроку забезпечувалася, як і в [6], що дозволяло просуватися відразу на s або на $s+1$ розрахункових точок в залежності від нормованих величин розбіжностей, отриманих при формуванні чергового блоку. Одним з тестових завдань була модель, наведена в [10], за якою може бути згенерована система довільної розмірності виду

$$x'(t) = J_N(x(t)) + D_N(x(t-1)) + f(t), \quad (11)$$

де

$$J_N = \begin{pmatrix} -10 & 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 2 & -10 & 2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -10 & 2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -10 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -10 \end{pmatrix},$$

$$D_N = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

матриці розмірності $N \times N$,

$$f(t) = (\sin(t), \sin(2t), \dots, \sin(Nt))^T,$$

початкові умови

$$x(t_0) = (\sin(x), 1, \dots, 1)^T, \quad 0 \leq t \leq 7.$$

Окремі результати моделювання однокроковим методом типу Біккарта ($s=6$) для фіксованої розмірності задачі ($N=10000$) наведені на рис. 5 а), б).

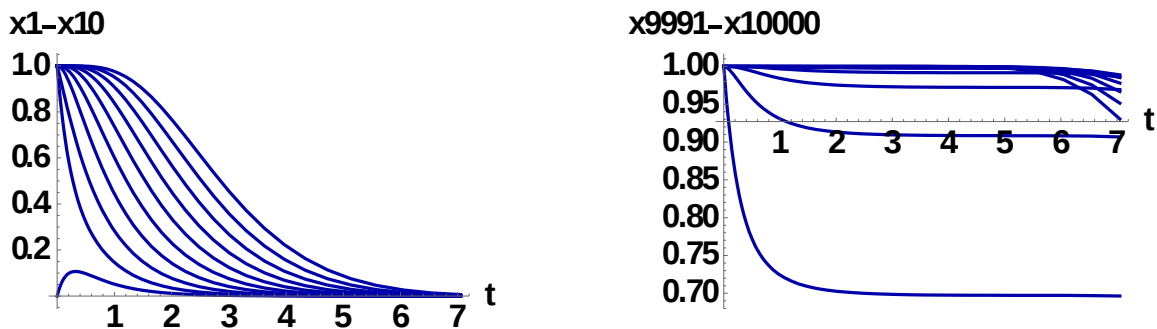


Рис. 5. Чисельна реалізація системи (11) однокроковими методами типу Біккарта

2. Розробка і обґрунтування паралельних багатокрокових блокових методів типу Біккарта.

2.1. Генерування різницевої схем багатокрокових блокових методів типу Біккарта.

Якщо ввести в розгляд на додаток до множини розрахункових точок $U_n^s = \{u_{n,1}, u_{n,2}, \dots, u_{n,s}\}$, не одну, а кілька опорних точок попереднього (попередніх) блоків $U_{n-1}^m = \{u_{n-(m-1)}, u_{n-(m-2)}, \dots, u_{n,0}\}$, наближені значення шуканих розв'язань можна буде визначати паралельно з співвідношень, що визначають багатокрокові методи типу Біккарта

$$\frac{1}{\tau} \sum_{j=-(m-1)}^s a_{i,j} u_{n,j} = f_{n,i}, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad n = 1, 2, \dots \quad (12)$$

де τ - крок інтегрування,

$$f_{n,i} = f(x(t_n + i\tau), t_n + i\tau),$$

$a_{i,j}$, $i = 1, 2, \dots, s$, $j = -(m-1), -(m-2), \dots, 0, 1, 2, \dots, s$ - невідомі коефіцієнти різницьових рівнянь.

Для визначення коефіцієнтів різницьової схеми, як і для однокрокового методу, формуються вирази для нев'язок на вирішенні $x(t)$ вихідного диференціального рівняння

$$r_{n,i} = -\frac{1}{\tau} \sum_{j=-(m-1)}^s a_{i,j} x_{n,j} + x'_{n,i}, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (13)$$

де $x_{n,i} = x(t_n + i\tau)$, $x'_{n,i} = x'(t_n + i\tau)$.

Для i -го рівняння будемо вимагати його апроксимації в точці $t_{n,0}$. Розкладаючи $x(t_n + i\tau)$ та $x'(t_n + i\tau)$ в ряди Тейлора в околі точки $t_{n,0}$, підставляючи ці розкладання в вираз (12) і групуємо члени з однаковими степенями по τ , отримаємо систему рівнянь для визначення коефіцієнтів різницьової схеми

$$\sum_{j=1-m}^s a_{i,j} = 0, \quad 1 - \sum_{j=1-m}^s j a_{i,j} = 0, \quad (14)$$

$$i^{l-1} - \frac{1}{l} \sum_{j=1-m}^s a_{i,j} j^l = 0, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad l = 2, 3, \dots, s + m - 1.$$

За допомогою системи (14) можна отримати розрахункові коефіцієнти для довільної кількості шуканих точок в блоці, при цьому точність апроксимації буде обмежена порядком $O(\tau^{s+m})$. Керуючись співвідношеннями (14), згенеруємо різницьову схему для розмірності блоку $s=2$ з числом опорних точок $m=4$:

$$\begin{aligned} \frac{3u_{n,-3} - 20u_{n,-2} + 60u_{n,-1} - 120u_{n,0} + 65u_{n,1} + 12u_{n,2}}{60\tau} &= f_{n,1}, \\ \frac{-12u_{n,-3} + 75u_{n,-2} - 200u_{n,-1} + 300u_{n,0} - 300u_{n,1} + 137u_{n,2}}{60\tau} &= f_{n,2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Порядок апроксимації методу в відповідних розрахункових точках блоку складе:

$$\begin{aligned} r_{n,1} &= -\frac{1}{30} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7, \\ r_{n,2} &= \frac{1}{6} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7. \end{aligned}$$

Збільшення кількості розрахункових точок ($s=3$) і скорочення опорних ($m=3$) призведе до наступної модифікації схеми (15):

$$\begin{aligned} \frac{-2u_{n,-2} + 15u_{n,-1} - 60u_{n,0} + 20u_{n,1} + 30u_{n,2} - 3u_{n,3}}{60\tau} &= f_{n,1}, \\ \frac{3u_{n,-2} - 20u_{n,-1} + 60u_{n,0} - 120u_{n,1} + 65u_{n,2} + 12u_{n,3}}{60\tau} &= f_{n,2}, \\ \frac{-12u_{n,-2} + 75u_{n,-1} - 200u_{n,0} + 300u_{n,1} - 300u_{n,2} + 137u_{n,3}}{60\tau} &= f_{n,3} \end{aligned} \quad (16)$$

з порядками апроксимації в відповідних розрахункових точках:

$$\begin{aligned} r_{n,1} &= \frac{1}{60} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7, \quad r_{n,2} = -\frac{1}{30} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7, \\ r_{n,3} &= \frac{1}{6} x^{(6)}[0] \tau^6 + O[\tau]^7. \end{aligned}$$

Порядок апроксимації методу можна нарощувати, збільшуючи кількість розрахункових або (та) опорних точок. Підвищення порядку апроксимації за рахунок нарощування кількості розрахункових точок доцільно при збільшенні числа доступних процесорів, в іншому випадку рекомендується збільшення числа опорних. Так для методу з числом розрахункових точок блоку $s=5$ і двох опорних точок $m=2$ система різницьових рівнянь буде виглядати як

$$\begin{aligned} -\frac{-2u_{n,-1} + 24u_{n,0} + 35u_{n,1} - 80u_{n,2} + 30u_{n,3} - 8u_{n,4} + u_{n,5}}{60\tau} &= f_{n,1}, \\ \frac{-u_{n,-1} + 9u_{n,0} - 45u_{n,1} + 45u_{n,3} - 9u_{n,4} + u_{n,5}}{60\tau} &= f_{n,2}, \\ \frac{u_{n,-1} - 8u_{n,0} + 30u_{n,1} - 80u_{n,2} + 35u_{n,3} + 24u_{n,4} - 2u_{n,5}}{60\tau} &= f_{n,3}, \\ \frac{-2u_{n,-1} + 15u_{n,0} - 50u_{n,1} + 100u_{n,2} - 150u_{n,3} + 77u_{n,4} + 10u_{n,5}}{60\tau} &= f_{n,4}, \\ \frac{10u_{n,-1} - 72u_{n,0} + 225u_{n,1} - 400u_{n,2} + 450u_{n,3} - 360u_{n,4} + 147u_{n,5}}{60\tau} &= f_{n,5}, \end{aligned} \quad (17)$$

а порядки апроксимації визначаються у відповідних розрахункових точках співвідношеннями:

$$\begin{aligned} r_{n,1} &= \frac{1}{105} x^{(7)}[0] \tau^7 + O[\tau]^8, \\ r_{n,2} &= -\frac{1}{140} x^{(7)}[0] \tau^7 + O[\tau]^8, \\ r_{n,3} &= \frac{1}{105} x^{(7)}[0] \tau^7 + O[\tau]^8, \\ r_{n,4} &= -\frac{1}{42} x^{(7)}[0] \tau^7 + O[\tau]^8, \\ r_{n,5} &= \frac{1}{7} x^{(7)}[0] \tau^7 + O[\tau]^8. \end{aligned}$$

Коефіцієнти різницьових рівнянь (2) і (12) можна визначити не тільки з розв'язань систем (4) або (14) відповідно, але і за допомогою інтегро-інтерполяційного методу. Для цього будеться інтерполяційний багаточлен $L_{m+s-1}(t)$ з вузлами інтерполяції $t_{n,j-m}$ і відповідними їм значеннями сіткової функції $u_{n,j}$, $j = -(m-1), -(m-2), \dots, s$. Далі необхідно знайти похідні отриманого інтерполяційного багаточлена в вузлах сітки $t_{n,i}$, $i = 1, 2, \dots, s$. Прирівнявши їх відповідним значенням правої частини диференціального рівняння, можна отримати різницеві рівняння для блоку. Найвищий порядок апроксимації різницьових методів диференціювання, що розглядаються як особистий вид загальних багатокрокових методів, також буде визначатися порядком $O(\tau^{m+s})$.

2.2. Дослідження стійкості за початковими даними.

Для оцінки стійкості за початковими даними введемо відповідні вектори

$$\begin{aligned} U_n &= \{u_{n,i}\}, \quad i = -(m-1), -(m-2), \dots, 0, \\ U_{n+1} &= \{u_{n+1,i}\}, \quad n = 1, 2, \dots, i = 1, 2, \dots, s, \\ F_{n+1} &= \{f_{n+1,i}\}, \quad n = 1, 2, \dots, i = 1, 2, \dots, s. \end{aligned}$$

Тоді в векторній формі рівняння (12) буде мати вигляд

$$A_1 U_n + A_2 U_{n+1} = \tau F_{n+1}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (18)$$

Вирішимо його щодо U_{n+1} :

$$U_{n+1} = Q U_n + \tau G F_{n+1}, \quad (19)$$

де $Q = -A_2^{-1} A_1$, $G = A_2^{-1}$.

Для оцінки стійкості отриманих методів за початковими умовами необхідно визначити матрицю переходу відповідної однорідної системи рівнянь виду (8). Оскільки в загальному випадку число опорних і розрахункових точок може не збігатися, то систему (8) потрібно перетворити до еквівалентної

$$W_{n+1} = \tilde{Q}W_n, \quad (20)$$

$$\text{де } W_n = \{u_{n, -(m-1)}, u_{n, -(m-2)}, \dots, u_{n, 0}\}, \\ W_{n+1} = \{u_{n, s-m+1}, u_{n, s-m+2}, \dots, u_{n, 0}, \dots, u_{n, s}\}.$$

Матриця Q в (8) має розмірність $s \times m$, а матриця $\tilde{Q}$ з (20) – квадратна, і її розмірність визначається $\max(s, m)$. Якщо число опорних і розрахункових точок збігається $s = m$, то $\tilde{Q} = Q$. Для випадку, коли опорних точок менше, ніж розрахункових ($m < s$), в матриці $\tilde{Q}$ перші $s - m$ стовпців слід покласти рівними 0, а останні m стовпців збігаються з Q :

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & q_{1, -(m-1)} & q_{1, -(m-2)} & \dots & q_{1, 0} \\ 0 & \dots & 0 & q_{2, -(m-1)} & q_{2, -(m-2)} & \dots & q_{2, 0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & q_{s, -(m-1)} & q_{s, -(m-2)} & \dots & q_{s, 0} \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Для випадку, коли опорних точок більше, ніж розрахункових ($m > s$), матрицю $\tilde{Q}$ слід привести до вигляду (22). Стійкість чисельного методу (20) визначається власними значеннями матриці $\tilde{Q}$. Для стійкості за початковими даними повинна бути виконана умова коренів. Тобто для деякої норми матриці $\tilde{Q}$ справедлива нерівність $\|\tilde{Q}\| \leq 1$, або все корені характеристичного рівняння матриці $\tilde{Q}$ лежать всередині або на границі одиничного кола, причому на границі кола немає кратних коренів. Ця умова є необхідною і достатньою для стійкості рівняння (18) за початковими даними.

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ q_{1,1} & q_{1,2} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & q_{1,m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{s,1} & q_{s,2} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & q_{s,m} \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Перевіримо стійкість отриманого методу (16) за початковими даними. Для цього сформуємо матрицю переходу $\tilde{Q}$, яка в силу збігу кількості опорних і розрахункових точок набуде вигляду $\tilde{Q} = Q = -A_2^{-1}A_1$:

$$\begin{pmatrix} 413 & 1467 & 10539 \\ 8018 & 4009 & 8018 \\ 153 & 1184 & 5040 \\ 4009 & 4009 & 4009 \\ 234 & 1575 & 5350 \\ 4009 & 4009 & 4009 \end{pmatrix}.$$

Використовуючи декомпозицію Жордана, отримаємо множину власних чисел матриці $\tilde{Q}$ у вигляді:

$$\begin{pmatrix} 1. & 0. & 0. \\ 0. & -0.001355 & 0. \\ 0. & 0. & 0.092026 \end{pmatrix}.$$

Характеристичне рівняння матриці $\tilde{Q}$ має коріння $q_1 = 1, q_2 = -0.001355, q_3 = 0.092026$, тому метод стійкий за початковими даними.

Для випадків, коли розмірність блоку s не збігається з кількістю опорних точок m матриця переходу $\tilde{Q}$ може бути отримана шляхом перетворення матриці $Q = -A_2^{-1}A_1$. Покажемо це. Розглянемо випадок, коли розмірність блоку менше, ніж кількість опорних точок. Виберемо схему (15), у якій $s=2, m=4$. Для такого випадку матриці Q і $\tilde{Q}$ відповідно

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{111}{2501} & \frac{728}{2501} & -\frac{2124}{2501} & \frac{4008}{2501} \\ -\frac{24}{2501} & \frac{225}{2501} & -\frac{1000}{2501} & \frac{3300}{2501} \end{pmatrix},$$

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{111}{2501} & \frac{728}{2501} & -\frac{2124}{2501} & \frac{4008}{2501} \\ -\frac{24}{2501} & \frac{225}{2501} & -\frac{1000}{2501} & \frac{3300}{2501} \end{pmatrix},$$

а декомпозиція Жордана

$$\begin{pmatrix} 1. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & -0.525762 & 0. & 0. \\ 0. & 0. & -0.002013 - 0.0477i & 0. \\ 0. & 0. & 0. & -0.002013 + 0.0477i \end{pmatrix}$$

дозволяє стверджувати, що і розрахункова схема (15) є стійкою за початковими даними.

При перевищенні кількості розрахункових точок матриця перетворюється виходячи з визначення (21). Так, для випадку $s=5, m=2$ система рівнянь (17) дозволить сформувати відповідні матриці:

$$Q = \begin{pmatrix} -\frac{475}{4277} & \frac{4752}{4277} \\ \frac{64}{675} & \frac{611}{4736} \\ -\frac{4277}{64} & \frac{4277}{675} \\ \frac{611}{475} & \frac{4752}{4277} \end{pmatrix}, \quad \tilde{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\frac{475}{4277} & \frac{4752}{4277} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{64}{675} & \frac{611}{4736} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{4277}{64} & \frac{4277}{675} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{611}{475} & \frac{4752}{4277} \end{pmatrix}.$$

Декомпозиція Жордана

$$\begin{pmatrix} 0. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 0.00631 & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 0. & 1. \end{pmatrix}$$

з коренями $q_1 = 0, q_2 = 0, q_3 = 0, q_4 = 0.00631, q_5 = 1$ також визначає стійкість різницевого методу (17) за початковими даними.

2.3. Оцінка стійкості по правій частині.

Для дослідження стійкості по правій частині, як і в однокроковому випадку, вводиться модельне рівняння виду (10). Система (18) перетворюється до еквівалентної системи, так як це було зроблено в п. 1.3 з урахуванням того, що $f_{n+1,i} = f(t_{n+1,i}, u_{n+1,i}) = \lambda u_{n+1,i}$, і після введення заміни $\mu = \lambda \tau$, будеться система рівнянь виду (19), для якої матриця переходу Q матиме вигляд:

$$Q = -(A_2 - \mu E)^{-1} A_1.$$

Чисельний розв'язок модельного рівняння знаходиться в вигляді (19), а стійкість розв'язання при $n \rightarrow \infty$ гарантується за умови $\|Q\| < 1$. В силу можливого неспівпадіння опорних і розрахункових точок систему (19) потрібно перетворити до еквівалентного вигляду (20), де матриця $\tilde{Q}$ матиме вигляд (21) або (22). Таким чином, стійкість чисельного методу (18) визначиться власними значеннями матриці $\tilde{Q}$. Видно, що елементи цієї матриці є раціональними функціями від μ , і власні значення матриці $\tilde{Q}$ також будуть залежати від μ . Тому необхідно знайти ті області для власних значень μ , в яких $|q(\mu)| \leq 1$.

Перевіримо стійкість методу типу Бікарта ($s=2, m=2$). Визначимо матрицю $\tilde{Q}$

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} \frac{-5 + 2\mu}{23 - 28\mu + 12\mu^2} & \frac{28 - 12\mu}{23 - 28\mu + 12\mu^2} \\ -\frac{4(1 + \mu)}{23 - 28\mu + 12\mu^2} & \frac{9(3 + 2\mu)}{23 - 28\mu + 12\mu^2} \end{pmatrix}$$

і приведемо її до нормальної жорданової форми

$$\begin{pmatrix} \frac{11 + 10\mu - 4\sqrt{9 + 12\mu + 7\mu^2}}{23 - 28\mu + 12\mu^2} & 0 \\ 0 & \frac{11 + 10\mu + 4\sqrt{9 + 12\mu + 7\mu^2}}{23 - 28\mu + 12\mu^2} \end{pmatrix}.$$

Характеристичне рівняння матриці $\tilde{Q}$ має корені, що дорівнюють відповідно:

$$q_1(\mu) = \frac{11 + 10\mu - 4\sqrt{9 + 12\mu + 7\mu^2}}{23 - 28\mu + 12\mu^2},$$

$$q_2(\mu) = \frac{11 + 10\mu + 4\sqrt{9 + 12\mu + 7\mu^2}}{23 - 28\mu + 12\mu^2}.$$

Представимо область стійкості методу, яка визначається власними числами, графічно. Границею G області стійкості G є множина таких точок, для яких $|q(\mu)| = 1$. З рис. 6 видно, що границею G є уявна вісь, а областю стійкості методу є вся ліва півплощина $\text{Re}(\mu) < 0$, отже, метод абсолютно стійкий. Зі збільшенням кількості опорних та (або) розрахункових точок (рис. 7) абсолютна стійкість методів не порушується.

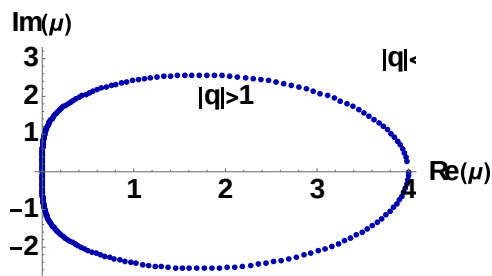


Рис. 6. Область стійкості багато-крокового методу типу Бікарта, $s=2, m=2$

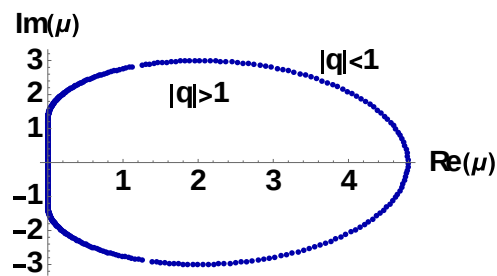


Рис. 7. Область стійкості багато-крокового методу типу Бікарта, $s=5, m=2$

Висновки

Матеріал, наведений у роботі, орієнтований на створення паралельних чисельних методів моделювання динамічних систем з зосередженими параметрами. В якості вихідного обрано клас методів з однією випереджаючою точкою типу Бікарта і здійснена спроба збільшити кількість розрахункових точок, які формують блок. Використання виразів для нев'язків і розкладів в ряд Тейлора дозволило сформулювати загальний вигляд системи алгебраїчних рівнянь, що забезпечують визначення розрахункових коефіцієнтів для будь-якої кількості випереджальних точок. Для деяких розмірностей блоків наведені різницеві схеми, які орієнтовані на кількість доступних процесорів в паралельній реалізації.

Доведена абсолютна стійкість побудованих однокрокових багатоточкових методів за початковими даними і $A(\alpha)$ -стійкість по правій частині. Досліджено залежності стійкості по правій частині від кількості розрахункових точок в блоці. Показано, що величини кутів α скорочуються з ростом розмірності блоку, але, тим не менш, залишаються прийнятними для моделювання об'єктів, описуваних жорсткими, погано обумовленими, швидко осцилюючими системами звичайних диференціальних рівнянь. Для багатокрокових багатоточкових методів доведена абсолютна стійкість за початковими даними і по правій частині. На відомих тестових завданнях з довільною розмірністю виконана паралельна реалізація розроблених методів.

Теоретичні положення, наведені в роботі, підкріплені експериментальними дослідженнями на тестових завданнях з відомими точними розв'язаннями. Експерименти здійснювалися на мультиосновних машинах з використанням програмного інтерфейсу MathLink середовища паралельних обчислень в Mathematica Wolfram Research.

Бібліографічний список

1. The Federal Networking and Information Technology Research and Development Program: Background, Funding, and Activities [Electronic resource] // Reports Congressional Research Service. – 2015. – Access mode: <https://www.fas.org/sfp/crs/misc/RL33586.pdf>
2. Networking and Information Technology Research and Development. [Electronic resource] // Report by the Subcommittee on Networking and Information Technology Research and Development National Science and Technology Council. – 2012. – Access mode: <http://www.nitrd.gov/pubs/2012supplement/FY12NITRD.pdf>.
3. Дмитриева О.А. Разработка и обоснование параллельных одношаговых блочных методов типа Биккарта / О.А. Дмитриева // Системы обработки информации. – 2014. – № 7(123). – С. 121–126.
4. Дмитриева О.А. Разработка и исследование параллельных колокационных блочных методов / О.А. Дмитриева, Л.П. Фельдман // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка». – 2012. – № 16 (204). – С. 28–35.
5. Hairer E. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems / E. Hairer, G. Wanner. – Springer-Verlag, 1999. – 685p.
6. Дмитриева О.А. Параллельные численные методы моделирования динамических объектов / О.А. Дмитриева. – Красноармейск: ГВУЗ «ДонНТУ», 2016. – 384 с.
7. Дмитриева О.А. Паралельне моделювання динамічних об'єктів зі сконцентрованими параметрами / О.А. Дмитрієва. – Х.: «Ноулідж», 2014. – 336 с.
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. Самарский А.А. Численные методы / А.А. Самарский, А.В. Гулин. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
10. Ishak F. Parallel Block Method for Solving Delay Differential Equations / F. Ishak, M.B. Suleiman // IMF. – 2010. – Vol. 55, №5. – P. 2707-2772.

References

1. The Federal Networking and Information Technology Research and Development Program: Background, Funding, and Activities [Electronic resource] / Reports Congressional Research Service. (2015). – Access mode: <https://www.fas.org/sfp/crs/misc/RL33586.pdf>
2. Networking and Information Technology Research and Development. [Electronic resource] / Report by the Subcommittee on Networking and Information Technology Research and Development National Science and Technology Council. (2012). – Access mode: <http://www.nitrd.gov/pubs/2012supplement/FY12NITRD.pdf>.
3. Dmitrieva O.A. (2014). Development of parallel one-step block methods of Bickart type [Razrabotka i obosnovanie parallel'nyh odnoshagovykh blochnykh metodov tipa Bikkarta] / Sistemy obrabotki informacii. – № 7(123). – S. 121–126.
4. Dmitrieva O.A., Fel'dman L. P.(2012). A study of parallel collocation block methods [Razrabotka i issledovanie parallel'nyh kolokacionnykh blochnykh metodov] / Nauchnye trudy Doneckogo nacional'nogo

- tehnicheskogo universiteta. Serija «Informatika, kibernetika i vychislitel'naja tehnika». – № 16 (204). – S. 28–35.
5. Hairer E., Wanner G. (1999). Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. – Springer-Verlag. – 685 p. – ISBN 5-03-003117.
 6. Dmitrieva O.A. (2016). Parallel numeric methods of dynamic objects modeling [Parallel'nye chislennye metody modelirovanija dinamicheskikh ob'ektov] / Krasnoarmejsk: GVUZ «DonNTU». – 384 p.
 7. Dmitrieva O.A. (2014). Parallel numeric methods of dynamic objects modeling with concentrated parameters [Parallel'noe modelirovanie dinamicheskikh ob'ektov s sosredotochennymi parametrami]. – Kharkiv: «Noulidzh». – 336 p.
 8. Vajner R., Kulikov G. Ju. (2014). Effective control of the accuracy of numeric integration of ordinary differential equations and optimal interpolation block methods with variable step. [Jeffektivnoe upravlenie tochnost'ju chislennogo integrirovaniya obyknovennykh differencial'nyh uravnenij i optimal'nye interpolacionnye ravnoznachnye blochnye metody s peremennym shagom] / Zhurnal vychislitel'noj matematiki i matematicheskoy fiziki. – Vol. 54, № 4 – P. 591–607
 9. Samarskij A.A., Gulin A. V. (1989). Numeric methods [Chislennye metody]. – Moscow: Nauka. – 432 p.
 10. Ishak F., Suleiman M. B. (2010). Parallel Block Method for Solving Delay Differential Equations / IMF. – Vol. 55, №5. – P.2707-2772

Надійшла до редакції 28.03.2016

O.A. Dmitrieva

Donetsk National Technical University

ABOUT BLOCK MODIFICATION METHODS OF BICKART TYPE

The work is devoted to the problems of numerical implementation of a wide range of tasks that are described by the systems of ordinary differential equations. Solving them by means of classical (consistent) modeling is characterized by unacceptable time spending and (or) lack of productivity. With that the main attention is paid to the questions associated with design of modern parallel numerical methods of Cauchy problem solution and with adaptation for parallel realization of the existed one.

The material of this article is focused on design and rationale of the methods of modeling the dynamic systems with extended area of stability that have a high index of parallelism. As the original a class of methods with one anticipatory point of a Bickart type was chosen. The attempt to increase the number of calculation points that form the unit was implemented. On the base of the known methods of a Bickart type the one-step and multi-step modifications of differential schemes with organization of billing units were performed. To form differential schemes a general view of the system of algebraic equations was formed. It allows defining the unknown coefficients for any number of reference and calculation points. An absolute stability of the designed one-step multi-point methods on the initial data and $A(\alpha)$ – stability by the right side were proved. The dependence of stability by the right side on the number of calculation points in a unit was explored. It was showed that the values of angles α are shortened with the growing of a unit dimension. Nevertheless they remain acceptable for modeling of the objects that are described as being tough, badly caused, fast oscillating systems of ordinary differential equations. For multi-step multi-point methods an absolute stability by the initial data and by the right side was proved. The ratio for evaluation of maximum order of approximation of differential schemes was obtained.

For some dimensions of the units the differential schemes were given. They are focused on the number of available processors in parallel realization. A parallel realization of designed methods was performed on the known test items with arbitrary dimension.

Theoretical theses that are performed in the work are backed up by the experimental researches on the known test items with the known exact solutions. The experiments were realized on the multi basic machines with the help of the programming interface MathLink of a parallel computing system in Mathematica Wolfram Research.

Keywords: approximation order, Bickart method, calculation unit, differential scheme, discrepancy, Cauchy problem, stability.