

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Наукові праці
Донецького національного технічного
університету

**Серія: “Інформатика, кібернетика
та обчислювальна техніка”**

Всеукраїнський науковий збірник

Заснований у травні 1996 року

Виходить 2 рази на рік

№ 1(38) ' 2024

Луцьк – 2024

Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: "Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка" : Всеукр. наук. зб. - Луцьк : ДонНТУ, 2024. - № 1(38). - 76 с.

Публікується згідно з рішенням Вченої ради ДВНЗ «Донецький національний технічний університет» (протокол № 5 від 25.04.2024).

Збірник містить наукові статті співробітників ДонНТУ та інших навчальних і наукових закладів України, які є науковими партнерами ДонНТУ. Публікації висвітлюють результати наукових досліджень і розробок в таких напрямках, як інформатика, чисельні методи, паралельні обчислення, програмування, розробка засобів обчислювальної техніки, дослідження комп'ютерних мереж, машинна графіка і обробка зображень, математичне моделювання в різних галузях. Матеріали збірника призначені для наукових співробітників, викладачів, інженерно-технічних працівників, аспірантів та студентів.

Засновник та видавець – Донецький національний технічний університет (ДонНТУ)

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ:

Д-р техн. наук, проф. Є.О. Башков (головний редактор); канд. техн. наук, доц. Н.О. Маслова, (заступник головного редактора); член-кореспондент НАН України, д-р техн. наук, проф. В.П. Боюн; д-р техн. наук, проф. О.А. Дмитрієва, д-р техн. наук, проф. О.О. Баркалов; д-р техн. наук, проф. О.В. Вовна; д-р техн. наук, проф. С.Д. Погорілий; д-р техн. наук, проф. О.Н. Романюк; д-р техн. наук, проф. В.А. Святний; д-р техн. наук, проф. Г.Г. Швачич; д-р техн. наук, доц. І.С. Лактіонов; канд. техн. наук, доц. І.Я. Зеленцова; канд. техн. наук, доц. І.А. Назарова (відп. секретар випуску).

Адреса редакції:

Юридична адреса: 85300, Україна, Донецька область, м. Покровськ, пл. Шибанкова, 2, ДВНЗ «ДонНТУ».

Фактична адреса: 43003, Україна, Волинська область, м. Луцьк, вул. Потебні, 56, ДВНЗ «ДонНТУ».

E-mail: yevhen.bashkov@donmtu.edu.ua

Збірник зареєстровано в Державному комітеті інформаційної політики, телебачення та радіомовлення України. Свідоцтво: серія КВ, №7374 від 03.06.2003.

Збірник включено до переліку наукових фахових видань України, в яких можуть публікуватися результати дисертаційних робіт на здобуття наукових ступенів доктора наук, кандидата наук та ступеня доктора філософії за спеціальностями 121 Інженерія програмного забезпечення, 122 Комп'ютерні науки, 123 Комп'ютерна інженерія (наказ Міністерства освіти і науки України №409 від 17 березня 2020 р.)

Збірник "Наукові праці ДонНТУ, серія "Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка" за наказом № 409 МОНУ від 17. 03.2020 отримав категорію Б.

ЗМІСТ

О.А. Дмитрієва, В.Г. Гуськова Застосування багаточленів Лежандра для підвищення порядку апроксимації блокових методів	4
В.І. Масол, Н.О. Маслова, Є. Котереу Ймовірнісний аналіз одночасного виникнення кількох подій в контексті схеми Бернуллі	12
І.А. Назарова, І.В. Ярош Керування кроком інтегрування при паралельному розв'язанні багатовимірних жорстких задач Коші	19
С.Л. Нікулін, В.Ю. Каштан, В.В. Гнатушенко, О.В. Коробко Оцінка інформативності контрастних границь яскравості даних дистанційного зондування Землі при вирішенні геологічних задач	29
М.О. Александров, О.В. Александрова Групова синхронізація користувачів з використанням деревоподібних машин парності	39
О.А. Золотухіна, О.Ю. Ільїн, Т.В. Горячев Автоматизована обробка спеціалізованих запитів користувачів	44
О.В. Самощенко Додавання і віднімання цілих чисел при зміщеному кодуванні з додатним нулем	51
Т.М. Дивак, В.В. Забчук Огляд і аналіз методів та засобів моделювання процесів у біогазових установках	57
М.Ю. Тягунова, Д.М. Карнаух Доцільність розробки інтелектуальних систем регулювання руху на перехрестях	71

І.А. Назарова, канд. техн. наук, доц.,
І.В. Ярош, старший викладач
Донецький національний технічний університет, м. Луцьк, Україна
iryna.nazarova@donmtu.edu.ua, iryna.yarosh@donmtu.edu.ua

Керування кроком інтегрування при паралельному розв'язанні багатовимірних жорстких задач Коші

В статті розглянуті питання розробки, обґрунтування та дослідження ефективності паралельних методів чисельного розв'язання жорстких задач Коші з вбудованими механізмами оцінки локальної апостеріорної похибки та контролем кроку інтегрування. Наведено загальний алгоритм управління величиною кроку інтегрування. Розроблено та проаналізовано паралельні ітераційні блоки та повністю неявні методи в скалярному випадку з контролем локальної похибки на основі подвоєння кроку та ідеї вкладеності форм. Проведено узагальнення для систем звичайних диференціальних рівнянь та побудовано відображення методів на паралельні архітектури з розподіленою пам'яттю.

Ключові слова: крок інтегрування, локальна апостеріорна похибка, вкладені формули, подвоєння кроку, жорсткі задачі, паралельні системи, розподілена пам'ять

DOI: 10.31474/1996-1588-2024-1-38-19-28

Вступ

Сучасні чисельні методи розв'язання задачі Коші здебільшого мають вбудовані механізми контролю локальної похибки та кроку інтегрування, і за цей рахунок пристосовані для вирішення жорстких завдань. Однак при використанні методів на основі явних схем цей підхід призводить до втрати ефективності та надійності, тому що внаслідок суперечливості вимог точності та стійкості крок інтегрування «розгойдується». У кращому випадку це призводить до великої кількості повернень (повторних обчислень рішення), і вибору кроку значно менше припустимого. Тому побудова ефективних паралельних методів на основі неявних різницьових схем, незважаючи на їх достатню обчислювальну складність, є актуальним питанням чисельного розв'язання жорстких задач Коші великого розміру [1-4].

Очевидно, що навіть спрощенні оцінки похибки, які спираються на використання ряду Тейлора, не мають практичного інтересу, внаслідок того, що потребують обчислення та оцінювання похідних високих порядків. Актуальними на сьогодні є такі наступні методи оцінки апостеріорних локальних похибок розв'язку, як подвоєння або дублювання кроку на основі правила Рунге та методи, що використовують ідею вкладеності чисельних схем. Узагальненням цих двох підходів є технологія локальної екстраполяції Річардсона (ЛЕР), яка дає можливість отримати одразу цілу таблицю апроксимацій розв'язку в одній точці різного порядку та з різними кроками інтегрування. Дослідження застосування ЛЕР до різних опорних

методів та способів керування кроком інтегрування заслуговує на окремий детальний опис [5-6]. В даній статті розглядаються питання розробки, обґрунтування та оцінки ефективності паралельних методів розв'язання задачі Коші з автоматичним вибором кроку інтегрування як для одного, так і для системи звичайних диференціальних рівнянь (СЗДР).

Метою дослідження є підвищення ефективності паралельного розв'язання жорстких багатовимірних задач Коші та задач з особливостями за рахунок застосування методів оцінки локальної апостеріорної похибки для керування кроком інтегрування.

До основних завдань дослідження слід віднести розробку та аналіз якості паралельних методів контролю кроку інтегрування у застосуванні до:

- 1) неявних багатостадійних ітераційних методів з використанням правила Рунге та вкладених схем;
- 2) неявних блокових методів з подвоєнням кроку для одного та системи ЗДР;
- 3) неявних блокових методів на основі ідеї вкладеності також для одного та системи ЗДР двох типів: при комбінації незалежних схем різних порядків точності і на основі підходу послідовного підвищення порядку;
- 4) порівняння ефективності паралельного розв'язку двох класів неявних методів.

Загальний підхід до контролю над кроком інтегрування для однокрокових методів

Розглядається нелінійна початкова задача Коші (ЗК), що асоціюється в загальному випадку з

розв'язанням СЗДР першого порядку:

$$\frac{dY(x)}{dx} = F(x, y(x)), y(x_0) = y_0, \quad (1)$$

$$x_0 \leq x \leq x_{end}.$$

Основний підхід до автоматичного вибору кроку інтегрування базується на порівнянні допущеної та допустимої локальних похибок (ЛП). Вводиться певний діапазон (коридор) похибок, у межах якого крок зберігається незмінним. Якщо допущена похибка перевищує верхню межу діапазону, крок зменшується, якщо ж виходить за нижню межу, то крок збільшується. Зауважимо, що коридор похибки може бути як симетричним, так і не симетричним.

Зазвичай наближене вирішення завдання (1) на «великому» відрізку інтегрування розбивається на N частин сіткою вузлів: $x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_N = x_0 + H$, і будується набір наближених значень $y_k \approx y(x_k)$ за правилом [1]:

$$y_{k+1} = \Phi(x_k, y_k, x_{k+1}), k = \overline{0, N-1}.$$

Очевидно, що точність наближеного рішення залежить від «частоти» сітки, а саме від величини:

$$\tilde{h} = \min_{k=1, \dots, N} (x_k - x_{k-1}).$$

Як правило, потрібно знайти наближене рішення з якоюсь точністю. «Ідеальний» критерій точності можна сформулювати, наприклад, як порівняння суми абсолютних значень різниць точного та наближеного розв'язків у кожному вузлі сітки інтегрування із заданою точністю:

$$\sum_{k=1}^N |y_k - y(x_k)| < \varepsilon.$$

На жаль, така постановка завдання у загальному випадку виявляється занадто складною. На практиці вимагається лише, щоб на кожному кроці головна частина локальної похибки не перевищувала заданої (або розрахованої) величини, яку позначають: tol :

$$|C_k h_{k+1}^{p+1}| \leq tol, k = \overline{0, N-1},$$

$$h_k = x_k - x_{k-1}.$$

Найпростіше розбиття інтервалу інтегрування – рівномірна сітка:

$$\{x_k\} = \{x_0 + kh\}_{k=0}^N,$$

$$h = H / N,$$

такий простий підхід має очевидні переваги при програмній реалізації, але на практиці є по-перше, надмірним і, по-друге, неефективним. Припустимо, що необхідно знайти наближене рішення, щоб задовольнити tol (розглянемо скалярний випадок $m = 1$). Для цього, очевидно, необхідно мати апіорну інформацію про величину C_{max} у

розкладі похибки в ряд Тейлора: $C_{max} = \max_k |C_k|$.

Отримання такої інформації в загальному випадку досить серйозна проблема. Якщо все ж таки C_{max} знайдено, то крок рівномірної сітки слід обирати за формулою:

$$h = \sqrt[r+1]{tol / C_{max}},$$

де r – порядок чисельного методу. Зрозуміло, що у випадку, коли головний член похибки істотно змінюється на відрізку інтегрування, то така сітка буде не оптимальною: робляться дуже маленькі кроки там, де можливе використання набагато більшого кроку для досягнення потрібної точності. З цієї причини, ефективний процес покрокового інтегрування ЗК повинен використовувати величину кроку, що залежить від величини константи похибки C_k . Чим більше константа, тим менше має бути крок, і навпаки. Це означає, що потрібний механізм оцінки величини C_k на кожному кроці.

Таким чином, алгоритм автоматичного (адаптивного) вибору кроку чисельного інтегрування має загальний вигляд, що представлено на рис. 1, де n – номер поточного кроку інтегрування, r – порядок методу.

1. Задається x_0, y_0 ; $x_{end} := x_0 + H$; $n := 0$.
2. $x := x_n$; $y := y_n$; $h := h_n$.
3. Якщо $x := x_{end}$, то кінець алгоритму.
4. Розраховуються апроксимації розв'язку в точці x_{n+1} (як і скільки залежить від способу оцінки ЛП).
5. Обчислюється оцінка локальної похибки err .
6. Визначається максимально допустима похибка, tol .
7. Якщо $|err| \leq tol$, то обчислена апроксимація розв'язку приймається, $h_{n+1} := h_n$, $n := n + 1$; перехід на пункт 2.
8. Якщо $|err| > tol$, то обчислена апроксимація розв'язку відкидається, обчислюється довжина кроку h_{new} :

$$h_{new} = h_n \cdot \text{Min}\{fac_{max}; \delta\},$$

$$\delta = \max \left(fac_{min}; fac \cdot \sqrt[r+1]{\frac{tol}{err}} \right).$$

Повернення на крок 4.

Рисунок 1 – Загальний алгоритм контролю кроку інтегрування у скалярному випадку для однокрокових чисельних схем

Детальніше: по-перше, величина допуску може бути задана двома способами: симетричним

$(-tol; +tol)$, як на рисунку 1, або не симетричним $(tol_L; tol_U)$, $tol_L \neq tol_U$. Друге зауваження стосується вибору так званого «гарантуючого фактору» або «страхуючого множника» – fac . Величина fac забезпечує певну стабільність як у зменшенні, так і в зростанні кроку інтегрування, і гарантує відсутність різких коливань в цьому процесі. В багатьох випадках ця величина є константою (0.7-0.9) або функцією від порядку чисельного методу $(^{r+1}\sqrt{0.25}; ^{r+1}\sqrt{0.38})$. Максимальне значення страхуючого множника обирається з інтервалу від 1 до 5, таким чином можна уникнути дуже швидкого зростання кроку інтегрування при його автоматичному виборі. У випадку, коли кроки відкидаються, рекомендується для підвищення надійності програмного додатку покласти: $fac_{max} = 1$.

Дуже багато варіантів виникає при обчислення величини допущеної похибки err . Підхід до її підрахунку суттєво залежить від способу оцінки локальної апостеріорної похибки (подвоєння кроку, вкладені формули тощо) та самого конкретного чисельного методу інтегрування (порядок методу, виду головного члену або константи похибки).

Особливості при застосуванні описаного підходу виникають також у разі системи ЗДР, тому, що оцінка похибки err буде векторною величиною. В цьому випадку в формулах для підрахунку кроку інтегрування слід використовувати будь-яку векторну норму:

$$\text{– абсолютну } (l_1: \|y\| = \sum_{i=1}^n |y_i|);$$

$$\text{– максимальну } (l_\infty: \|y\| = \max_{i=1, \dots, n} |y_i|);$$

$$\text{– евклідову } (l_2: \|y\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n y_i^2}).$$

Крім того, для деяких задач величина відносної похибки може бути більш інформативною, тому використовують масштабуючий множник d_i . При абсолютній похибці $d_i = 1$, при відносній, наприклад, модуль екстрапольованого значення розв'язку в новій точці або якійсь змішаний варіант. Детально, деякі з описаних рішень, описуються в [1-2].

Зауваження до пункту 4:

– у разі застосування правила Рунге використовується три апроксимації розв'язку за однією чисельною схемою;

– для вкладених формул – максимально дві апроксимації за різними чисельними схемами.

Розробка багатостадійних неявних методів з адаптивним кроком інтегрування

Жорсткі системи ЗДР описують, як правило, динамічні процеси, які одночасно містять швидкі та повільні складові (задачі хімічної кінетики – відмінності в швидкостях реакцій до 10^{15} разів).

Виявляється, що складні динамічні процеси, навіть по закінченні перехідного етапу, продовжують суттєво впливати на чисельне рішення задачі Коші, змушуючи розраховувати досить гладкий розв'язок з дуже малим кроком. Тому чисельні методи, що базуються на неявних схемах, також, і в першу чергу, не можуть бути застосовані без механізму керування кроком інтегрування. Для цього потрібно, розробити методи оцінки локальної похибки, процес обчислення кроку інтегрування суттєво не зміниться у порівнянні з загальним підходом.

Головна перевага багатостадійних методів типу Рунге-Кутти у порівнянні з методом розкладання в ряд ряду Тейлору, полягає в тому, що вони не потребують обчислення похідних високих порядків для оцінки похибки розв'язку. Унаслідок цього, використовуються більш ефективні способи оцінки похибки на кроці, такі, як вкладені формули, подвійного перерахунку та багаторазовий екстраполяційний підхід [6].

Нехай чисельно розв'язується задача Коші на основі s -стадійного методу типу Рунге-Кутти:

$$Y_{n+1} = Y_n + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i \cdot K_i, i = \overline{1, s}, \quad (2)$$

$$K_i = F[x_n + c_i h; Y_n + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j], \quad (3)$$

де $C = (c_1, \dots, c_s)^T$, $B = (b_1, \dots, b_s)^T$ та $A = (a_{ij}), i, j = \overline{1, s}$ – коефіцієнти методу; $K_i, i = \overline{1, s}$ – вектор стадійних коефіцієнтів; h – крок інтегрування; s – кількість стадій методу, що визначає його порядок апроксимації; Y_n – вектор наближеного розв'язку в точці n . Вочевидь, що в даному випадку, метод є повністю неявним (ПНМ), бо має повністю заповнену матрицю Батчера.

Для отримання s -розмірного вектору стадійних коефіцієнтів потрібно розв'язати систему нелінійних алгебраїчних рівнянь (СНАР) за допомогою, наприклад, наступної ітераційної обчислювальної стратегії:

$$K_i^{(0)} = F[x_n + c_i h; G_i^{(0)}], \quad (4)$$

$$K_i^{(l+1)} = F[x_n + c_i h; G_i^{(l)}], \quad (5)$$

$$\text{де } G_i^{(0)} = Y_0, G_i^{(l)} = Y_n + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j^{(l)}, \quad (6)$$

$$i = \overline{1, s}, l = \overline{1, N},$$

тут верхній індекс дає номер поточної ітерації, N – граничне значення числа ітерацій.

Паралельне розв'язання ЗДР на базі ПНМ концентрується на виконанні одного кроку інтегрування. Алгоритм складається з двох складових: визначення стадійних коефіцієнтів та наближеного розв'язку на наступному кроці. Зауважимо, що в неявних методах на відміну від явних, навіть для одного рівняння є можливість використовувати паралелізм методу. Обчислення кожного зі стадійних векторів розподіляються по

процесорам у межах одного кроку ітерації [6]. Максимальний ступінь паралелізму цього алгоритму складає: $Dop = s$. Час, необхідний на реалізацію міжпроцесорних обмінів при таких умовах, визначається $N + 1$ раз повтореною множинною операцією за типом "усі-усім" для p процесорів.

Для розв'язання систем диференціальних рівнянь пропонується кілька паралельних алгоритмів на основі ПНМ-методу [6], що поєднують різні способи розподілу обчислювальної роботи та даних між процесорами. Всі методи базуються на очевидному випадку, що кількість доступних процесорів більша за кількість стадій методу, тобто $p \geq s$.

Перший спосіб: множина процесорів розподіляється на s груп (див. рис. 2). Кожна група містить $\hat{p} = \lceil p/s \rceil \vee \lfloor p/s \rfloor$ процесорів, і, відповідно, кожен процесор обчислює $\hat{m} = \lceil m/\hat{p} \rceil \vee \lfloor m/\hat{p} \rfloor$ компонент векторів стадійних коефіцієнтів та апроксимацій розв'язку. Ітераційний процес виконується суцільно послідовно, але на кожній ітерації є можливість використовувати внутрішній паралелізм методу.

```

/* Рівняння 4 */
forall i = 1, s do
forall j = 1, p do {
0-ітерація: обчислити  $\hat{m} = \lceil m/\hat{p} \rceil$  компонент
вектору стадійних коефіцієнтів:  $K_i^{(0)}$ 
/* Рівняння 5-6 */
for l = 1, L do {
forall i = 1, s do
forall j = 1, p do {
l-ітерація: обчислити  $\hat{m} = \lceil m/\hat{p} \rceil$  компонент
вектору стадійних коефіцієнтів:  $K_i^{(l)}$ ;
обмін «all-to-all» компонентами:  $K_i^{(l)}$ ;
} } }
/* Рівняння 2 */
forall i = 1, s do
forall j = 1, p do {
обчислити  $\hat{m} = \lceil m/\hat{p} \rceil$  компонент вектору
вирішення  $Y_{n+1}$ 

```

Рисунок 2 – Псевдокод паралельного неявного багатостадійного методу для СЗДР

Другий спосіб розв'язання СЗДР на основі повністю неявних багатостадійних методів в першу чергу використовує системний паралелізм. Число нелінійних рівнянь, як і кількість невідомих компонентів стадійних векторів $k_{ij}, i = \overline{1, s}, j = \overline{1, m}$ дорівнює $s \times m$. Як і для більшості методів, що розв'язують початкову задачу, розпаралелювання повністю неявних методів базується на виконанні одного кроку інтегрування.

Для здобуття ефективного паралельного алгоритму розв'язання поставленої задачі

проаналізуємо внутрішній паралелізм. Для цього всі $m \times s$ компонент стадійних коефіцієнтів рівномірно розподіляються на p процесорів. Початкова задача, що використовує неявну різницеву схему, складається з двох підзадач: розв'язання СНАР та розрахунок апроксимації вирішення. Ітераційний процес, що обчислює стадійні коефіцієнти, є суто послідовним. Проте він дозволяє розподілити обчислення l -тої ітерації на s незалежних процесів по кількості стадійних векторів, де кожен вектор має розмірність, що дорівнює розміру системи m .

Зрозуміло, що максимальний ступінь паралелізму цієї частини ПНМ складає $Dop_1 = s \times m$, тоді як для другої підзадачі – $Dop_2 = m$. Якщо скористатися шириною всього паралельного алгоритму $p = s \times m$, то при реалізації другої підзадачі велика частина процесорів простоюватиме. Якщо за основу узяти $p = Dop_2$, то не буде використаний у повному обсязі внутрішній паралелізм першої задачі.

Таким чином, розпаралелювання на основі першого підходу (рис. 2) є очевидно більш ефективним, бо дає більш збалансоване навантаження процесорів і не потребує перерозподілу даних.

Керування кроком інтегрування при реалізації ПНМ може бути реалізовано на базі ідеї подвійного перерахунку. Для цього виконаємо перший крок процесу чисельного інтегрування методом Ф порядку p . Виберемо якусь величину початкового кроку h , і зробимо спочатку один великий крок довжини $2h$: $\tilde{y}_2 = \Phi(x_n, y_n, x_n + 2h)$. А також два кроки довжини h :

$$\begin{aligned} y_1 &= \Phi(x_n, y_n, x_n + h), \\ y_2 &= \Phi(x_n + h, y_1, x_n + 2h). \end{aligned}$$

Наша мета – порівняти похибки наближень y_2 та $\tilde{y}_2$:

$$y_2 - \tilde{y}_2 = 2C_0(2^p - 1)h^{p+1} + O(h^{p+2}).$$

Оцінка головної частини похибки в цьому випадку:

$$err = \frac{y_2 - \tilde{y}_2}{(2^p - 1)} = 2C_0h^{p+1} + O(h^{p+2}),$$

наближене значення константи похибки:

$$C_0 = \frac{err}{(2^p - 1)} + O(h).$$

Величину $\hat{y}_2$ називають екстрапольованим наближенням, оскільки її порядок $= p + 1$:

$$\hat{y}_2 = y_2 + err.$$

Дві останні формули дозволяють:

- оцінити локальну похибку;
- уточнити наближене рішення y_2 ;
- вибрати оптимальний крок інтегрування для подальших обчислень.

Загальний алгоритм вибору оптимального кроку інтегрування, що детально описаний вище

(див. рис. 1), при подвійному перерахунку залишається без змін. Основна відмінність полягає у способі оцінки локальної похибки (див. рис. 3).

1. Визначити: $y_{2i}; \tilde{y}_{2i}; \hat{y}_{2i}$.
2. Обчислити локальну похибку:

$$err = \frac{1}{(2^p - 1)} \max_{i=1, n} \frac{|y_{2i} - \tilde{y}_{2i}|}{d_i},$$

d_i – масштабуючий множник:

 - абсолютна похибка: $d_i = 1$;
 - відносна похибка: $d_i = |\hat{y}_{2i}|$;
 - змішаний варіант :
$$d_i = \text{Max}(|\hat{y}_{2i}|, |y_{0i}|, 10^{-6}).$$
3. Обчислена величина err порівнюється з допустимою похибкою на кроці tol (може бути задана або також обчислена):

$$tol = \max(|y_n|, |y_{n+1}|).$$
4. Крок інтегрування:

$$h_{new} = h \cdot \text{Min}\{5; \delta\},$$

$$\delta = \text{Max}\left(\frac{1}{3}; 0.9 \cdot \sqrt[p+1]{\frac{tol}{err}}\right).$$

Рисунок 3 – Особливості застосування контролю над кроком інтегрування при подвійному перерахунку

Застосування вкладених формул для повністю неявних багатостадійних методів (ВПНМРК) містить особливості внаслідок того, що для отримання рішення необхідно розв'язати СНАР на основі деякого ітераційного процесу. Оцінка похибки для паралельних вкладених повністю неявних багатостадійних алгоритмів розв'язання нелінійної задачі Коші для ЗДР може бути реалізована за рахунок:

1) використання двох незалежних неявних методів типу Рунге-Кутти суміжних порядків точності;

2) використання двох апроксимацій розв'язку різних порядків точності на базі методу Крилова, послідовного підвищення порядку точності.

Перший підхід (ВПНМ1) полягає у комбінації двох різних незалежних неявних методів суміжних порядків точності на одній і тій же сітці інтегрування:

$$Y_{n+1} = Y_n + h \cdot \sum_{i=1}^s b_i K_i, i = \overline{1, s}, \quad (7)$$

$$K_i = F[x_n + c_i h; Y_n + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j], \quad (8)$$

$$\hat{Y}_{n+1} = \hat{Y}_n + h \cdot \sum_{i=1}^{\hat{s}} \hat{b}_i \hat{K}_i, i = \overline{1, \hat{s}}, \quad (9)$$

$$\hat{K}_i = F[x_n + c_i h; \hat{Y}_n + h \cdot \sum_{j=1}^{\hat{s}} a_{ij} \hat{K}_j]. \quad (10)$$

Тут перша чисельна схема визначає апроксимацію розв'язку на основі s -стадійного, а друга $\hat{s}$ -стадійного однокрокового методу. Другий

наближений розв'язок у відповідних точках інтегрування використовується для оцінки апостеріорної локальної похибки і дає порядок на одиницю більше ніж перший:

$$K_i^{(0)} = F[x_n + c_i h; G_i^{(0)}], \quad (11)$$

$$K_i^{(l+1)} = F[x_n + c_i h; G_i^{(l)}] \quad (12)$$

$$\text{де } G_i^{(0)} = Y_0, G_i^{(l)} = Y_n + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j^{(l)}, \quad (13)$$

$$i = \overline{1, s}, l = \overline{1, N};$$

$$\hat{K}_i^{(0)} = F[x_n + c_i h; \hat{G}_i^{(0)}], \quad (14)$$

$$\hat{K}_i^{(l+1)} = F[x_n + c_i h; \hat{G}_i^{(l)}], \quad (15)$$

$$\text{де } \hat{G}_i^{(0)} = \hat{Y}_0, \hat{G}_i^{(l)} = \hat{Y}_n + h \cdot \sum_{j=1}^{\hat{s}} a_{ij} \hat{K}_j^{(l)}, \quad (16)$$

$$i = \overline{1, \hat{s}}, l = \overline{1, \hat{N}}.$$

Другий підхід (ВПНМ2) розглядає дві послідовні ітерації одного ПНМРК в рамках використаного ітераційного процесу, очевидно номери ітерації менше ніж максимальна кількість, що дає порядок методу.

$$K_i^{(0)} = F[x_n + c_i h; G_i^{(0)}], \quad (17)$$

$$K_i^{(l1)} = F[x_n + c_i h; G_i^{(l1-1)}], \quad (18)$$

$$K_i^{(l2)} = F[x_n + c_i h; G_i^{(l2-1)}], l1, l2 \leq N, \quad (19)$$

$$\text{де } G_i^{(0)} = Y_0, G_i^{(l)} = Y_n + h \cdot \sum_{j=1}^s a_{ij} K_j^{(l)}, \quad (20)$$

$$i = \overline{1, s}, l = \overline{1, N}.$$

Даний спосіб оцінки головної частини похибки більш простий, але менш універсальний, ніж правило Рунге. Він вимагає застосування двох методів: методу Φ порядку r і методу $\hat{\Phi}$ порядку $\hat{r} > r$:

$$y_1 = \Phi(x_n, y_n, x_n + h),$$

$$\hat{y}_1 = \hat{\Phi}(x_n, y_n, x_n + h).$$

Вочевидь, що за визначенням:

$$y(x_n + h) - y_1 = Ch^{r+1} + O(h^{r+2}),$$

$$y(x_n + h) - \hat{y}_1 = \hat{C}h^{\hat{r}+1} + O(h^{\hat{r}+2}).$$

З цієї причини і за умови, що $\hat{r} > r$:

$$\hat{y}_1 - y_1 = Ch^{r+1} + O(h^{r+2}).$$

Таким чином, головна частка локальної похибки $y(x_n + h) - y_1$ з точністю до $O(h^{r+2})$ може бути підрахована, як: $err = \hat{y}_1 - y_1$. В подальшому, розміркування повністю співпадають з правилом дублювання кроку та загальний алгоритм вибору кроку інтегрування також не буде містити принципових змін.

Динамічні характеристики отриманих повністю неявних багатостадійних методів, характер їх поведінки, залежать від багатьох параметрів методу, задачі та паралельної архітектури. Теоретичний аналіз та проведений експеримент на модельних рівняннях [2] із

застосуванням інтерфейсу передачі повідомлень MPI, дають можливість зробити наступні висновки. Коефіцієнти ефективності та прискорення паралельних вкладених ПНМ для СЗДР суттєво залежать від розміру системи та складності правої частини: обидві характеристики зростають з зростанням розміру системи рівнянь та складності її правої частини. Для тривіальних правих частин та невеликих за розміром систем рівнянь розпаралелювання стає неефективним.

Особливий вплив на поведінку динамічних характеристик має обсяг та кількість операцій обміну, машино-залежні константи комунікаційної системи паралельної архітектури: латентність та час передачі одного слова. Щодо топологій з'єднання процесорів, то із досліджених, кільце є найгіршим варіантом, топології гіперкуб і 2D-тор дають практично ідентичні результати (рис. 4).



Рисунок 4 – Доля операцій обміну даними в загальному часі виконання ВПНМ для різних топологій з'єднання процесорів при розподіленій пам'яті

Частка обмінних операцій зменшується зі зростанням складності правої частини СЗДР для всіх типів паралельних систем та топологій.

Порівняння складності розроблених паралельних алгоритмів розв'язання початкової задачі з вбудованими методами оцінки локальної похибки та керуванням кроком інтегрування, показує, що найкращим є другий підхід до вкладених форм, який комбінує спеціально підібрані стадійні коефіцієнти, як у послідовній, так і в паралельній реалізаціях (див. рис. 5).

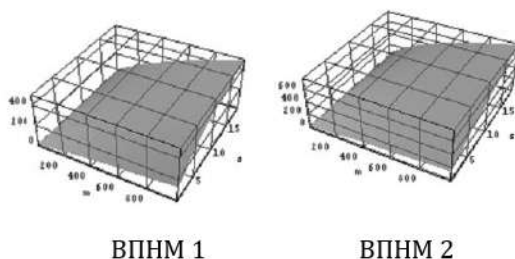


Рисунок 4 – Коефіцієнти прискорення вкладених ПНМРК від s кількості стадій методу

Узагальнюючи отримані результати необхідно відзначити, що, незважаючи на те, що неявні багатостадійні методи вирішення СЗДР використовуються в обчислювальній практиці досить давно, розробка нових ефективних паралельних обчислювальних схем для розв'язання

конкретних динамічних задач залишається актуальною проблемою.

Блокові однокрокові неявні методи з адаптивним кроком

Рівняння однокрокових блокових різнищевих методів у вживанні до ЗДР для блоку з k точок можуть бути записані таким чином [6]:

$$y_{n,i} = y_{n,0} + ih[b_i f(x_{n,0}; y_{n,0}) + \sum_{j=1}^k a_{ij} f(x_{n,j}; y_{n,j})], i = \overline{1, k}, n = \overline{1, N}, \quad (21)$$

n – номер блоку, N – кількість блоків на відрізьку інтегрування, i – номер точки в блоці. Розкладом в ряд Тейлора нев'язок показується, що однокроковий k -точковий блоковий метод має максимальний порядок апроксимації: $O(h^{k+1})$. Таким чином, локальна похибка у вузлах блоку має порядок $O(h^{k+2})$ [6]. Блокові паралельні методи базуються на неявних чисельних схемах, тому для обчислення наближеного розв'язку задачі Коші також необхідно вирішити відповідну СНАР. Одним із засобів розв'язку може бути наступний ітераційний процес:

$$\begin{cases} y_{n,i,0} = y_{n,0} + ih y_{n,0}, i = \overline{1, k} \\ y_{n,i,l+1} = y_{n,0} + ih(b_i f_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{ij} f_{n,j,l}), \end{cases} \quad (22)$$

де l – номер поточної ітерації, L – максимальне число ненульових ітерацій, $l = \overline{0, L}$.

На відміну від неявних багатостадійних методів розв'язання СЗДР, реалізація альтернативних засобів оцінки апостеріорної локальної похибки на основі блокових методів пов'язана з рядом особливостей:

- немає відповідних послідовних аналогів, отже, потрібно розробити і обґрунтувати метод оцінки локальної похибки;

- зміна кроку інтегрування можлива лише після виконання обчислень у всіх k вузлах поточного n -го блоку;

- при умові незадовільної оцінки локальної похибки практично всі обчислення для точок блоку виявляться даремними (деякі звернення до правої частини СЗДР можуть бути використані знову).

Ідея вкладених форм, що запропонована для оцінки локальної похибки чисельного розв'язання звичайних диференціальних рівнянь методами Рунге-Кутти, може бути використана і для однокрокових блокових багатоточкових методів.

У даному розділі наведено обґрунтування способу оцінки похибки для паралельних вкладених блокових методів розв'язання нелінійної задачі Коші для ЗДР на основі двох різних підходів:

- 1) комбінації незалежних формул суміжних порядків точності розв'язку (БМ1);

2) комбінації спеціально підібраних формул різних порядків на базі методу послідовного підвищення порядку точності (БМ2).

Перший підхід (БМ1) полягає у використанні двох різних незалежних блокових методів суміжних порядків точності $r(\hat{r})$ на одній і тій же сітці інтегрування Ω_h :

$$Y_{n,i} = Y_{n,0} + ih [b_i F(x_{n,0}; Y_{n,0}) + \sum_{j=1}^k a_{ij} F(x_{n,j}; Y_{n,j})], i = \overline{1, \bar{k}}, n = \overline{1, \bar{N}}; \quad (23)$$

$$\hat{Y}_{n,i} = \hat{Y}_{n,0} + ih [\hat{b}_i F(x_{n,0}; \hat{Y}_{n,0}) + \sum_{j=1}^{\hat{k}} \hat{a}_{ij} F(x_{n,j}; \hat{Y}_{n,j})], i = \overline{1, \hat{k}}, n = \overline{1, \hat{N}}. \quad (24)$$

При цьому перший метод (23) визначає апроксимацію розв'язку на основі k -точкового однокрокового методу, а другий (24) $\hat{k}$ -точкового, також однокрокового, методу. Другий наближений розв'язок у співпадаючих вузлах блоків сітки Ω_h використовується для оцінки апостеріорної локальної похибки. Обчислювальна схема БМ1 у відображенні на паралельну архітектуру топології кільце показана на рисунку 6.

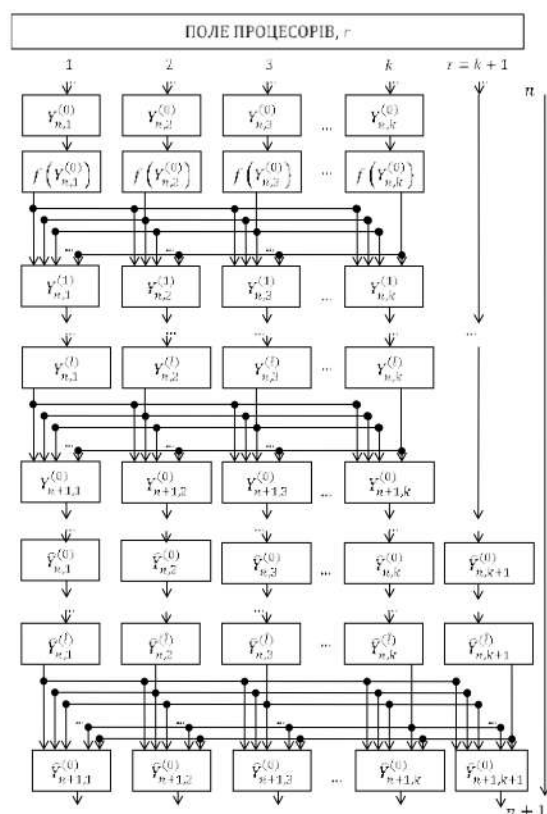


Рисунок 6 – Відображення обчислювальної схеми багатоточкового неявного методу БМ1 на паралельну архітектуру з топологією 1D-тор

Локальна похибка наближеного розв'язку за однокроковим k -точковим методом у i -тому вузлі блоку визначається наступною формулою:

$$y(x_{n,i}) - y_{n,i}^r = O(h^{k+2}), i = \overline{1, \bar{k}},$$

і для $(k+1)$ -точкового методу у тому ж вузлі дорівнює:

$$y(x_{n,i}) - y_{n,i}^{\hat{r}} = O(h^{k+3}), i = \overline{1, \hat{k}}.$$

З отриманих співвідношень виходить, що оцінка локальної похибки формули меншого порядку точності k -точкового методу, приблизно може бути обчислена, як: $\|y_{n,i}^r - y_{n,i}^{\hat{r}}\|, i = \overline{1, \bar{k}}$.

Такий підхід до оцінки локальної похибки є більш ефективним у порівнянні з правилом Рунге, оскільки при достатній простоті дозволяє зменшити обчислювальні витрати. Так, для вживання правила дублювання кроку необхідно вирішити три системи нелінійних алгебраїчних рівнянь розмірності k , а для застосування вкладеного методу дві нелінійні алгебраїчні системи: одну тієї ж розмірності: k , другу, як правило, на одиницю більше, тобто розміру: $k+1$.

Другий підхід до розробки блокових вкладених методів оснований на використанні ідеї послідовного підвищення порядку точності [5-6], і має своєю метою скорочення обчислювальних витрат за рахунок комбінації спеціально підібраних формул суміжних порядків. Нехай розв'язання задачі Коші для звичайного диференційного рівняння на деякому інтервалі інтегрування виконується на основі k -точкового однокрокового блокового методу. Покажемо, що у якості оцінки локальної похибки у кожному вузлі поточного n -го блоку може бути прийнята наступна величина:

$$d_{n,i} = \|y_{n,i} - \hat{y}_{n,i}^r\| = \|y_{n,i,\hat{l}} - y_{n,i,\hat{l}}^r\|,$$

$$i = \overline{1, \bar{k}}, \hat{l} = \hat{l} \pm 1,$$

де $y_{n,i,\hat{l}}$ і $y_{n,i,\hat{l}}^r$ – $\hat{l}$ -та апроксимації, які отримані при вирішенні ітераційним методом.

Технологія підвищення порядку точності для довільних ітераційних чисельних методів,

1) $y_{n,i}^{[v]}, i = \overline{1, \bar{k}}$ – значення чисельного розв'язку в i -тому вузлі $x_{n,i}$ n -го блоку, що обчислене з локальною похибкою $O(h^v)$,

2) $F_{n,i}^{[v]} = f(x_{n,i}, y_{n,i}^{[v]})$ – звернення до правої частини початкового диференційного рівняння, яке обчислене в точці $(x_{n,i}, y_{n,i}^{[v]})$.

Нехай наближене значення вирішення $y_{n,0}$ в початковій точці n -го блоку обчислене з деякою локальною помилкою $O(h^v)$, що забезпечує достатню для поставленої задачі точність. Тоді, звернення до правої частини початкового диференційного рівняння може бути обчислене з такою ж похибкою: $F_{n,0}^{[v]}$. Виконавши обчислення для нульової ітерації за першою формулою ітераційного методу, отримаємо $y_{n,i,0}^{[2]} = y_{n,0}^{[v]} + ihF_{n,0}^{[v]}, i = \overline{1, \bar{k}}$.

Оскільки локальна похибка формули Ейлера має порядок $O(h^2)$. Кожне подальше обчислення дає підвищення порядку точності для методу простих ітерацій на 1:

$$l = 0: y_{n,i,1}^{[3]} = y_{n,0}^{[v]} + ih(b_i F_{n,0}^{[v]} + \sum_{j=1}^k a_{ij} F_{n,j,0}^{[2]}),$$

$$l = 1: y_{n,i,2}^{[4]} = y_{n,0}^{[v]} + ih(b_i F_{n,0}^{[v]} + \sum_{j=1}^k a_{ij} F_{n,j,1}^{[3]}),$$

оскільки $F_{n,j,0}^{[v]} = f(x_{n,j}, y_{n,j,0}^{[v]})$, $j = \overline{1, k}$.

Цей процес не може бути продовжений нескінченно, при $l = k - 1$, отримаємо результати, відповідні граничній локальній точності наближених формул. Оскільки різницеві схеми, відповідні блоковим однокроковим k -точковим методам, апроксимують вхідне диференціальне рівняння (1) з порядком $O(h^{k+1})$, то подальші ітерації підвищення порядку точності результатів не дають:

$$l = k - 1: y_{n,i,k}^{[k+2]} = y_{n,0}^{[v]} + ih(b_i F_{n,0}^{[v]} + \sum_{j=1}^k a_{ij} F_{n,j,k-1}^{[k+1]}).$$

Таким чином, для оцінки локальної похибки можуть бути вибрані дві довільні суміжні апроксимації вирішення $y_{n,i,l}$ і $y_{n,i,l+1}$ із урахуванням міркувань точності і обмежень:

$$\tilde{l} < l \leq L - 1 = k - 1,$$

зазвичай, $\tilde{l} = l$, $\hat{l} = l + 1$. При описаному вкладеному блоковому k -точковому методі, усі додаткові СНАР мають розмірність k . В результаті, для одного диференціального рівняння внутрішній паралелізм методу обмежується точками блоку і вичерпується окремим обчисленням кожної точки в блоці.

У випадку розв'язання систем ЗДР з'являється можливість використовувати системний паралелізм (m), блоковий (k) і внутрішній паралелізм методу. Розрахункові формули розрахунку апроксимацій для точок n -го блоку вкладеного багатоточкового алгоритму №2 у випадку СЗДР мають вигляд:

$$\bar{y}_{n,i,0} = \bar{y}_{n,0} + ihF_{n,0}, i = \overline{1, k}, \quad (25)$$

$$\bar{y}_{n,i,l+1} = \bar{y}_{n,0} + ih(b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{ij} F_{n,j,l}), \quad (26)$$

$$l = \tilde{l} - 1,$$

$$\hat{y}_{n,i,\tilde{l}} = \bar{y}_{n,0} + ih(b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{ij} F_{n,j,\tilde{l}}), \quad (27)$$

$$\tilde{l} = l, \hat{l} = l + 1.$$

Для розв'язання систем ЗДР пропонується кілька паралельних алгоритмів на основі БМ2-методу, що поєднують різні способи розподілу обчислювальної роботи та даних між процесорами. Всі методи базуються на випадку, що кількість доступних процесорів багато більша за кількість точок блоку, тобто $p \gg k$.

Розв'язання СЗДР за блоковими неявними чисельними схемами містить три типи

паралелізму: системний, блоковий та невеликий паралелізм методу дозволяє розподілити обчислення поточної l -тої ітерації векторів розв'язку наступними способами:

1) на k незалежних процесів за кількістю точок у блоці ($Dop = k$);

2) на m за кількістю компонент у системі ЗДР ($Dop = m$);

3) на mk процесів за максимальною можливою шириною паралельного методу і системи ($Dop = mk$).

За першим підходом кожен процесор обчислює всі компоненти вектору розв'язку деякої точки блоку на кожному кроці ітераційного процесу. За другим – кожен процесор обчислює одну компоненту вектору розв'язку для всіх точок блоку на кожному кроці ітераційного процесу. Описані обчислювальні схеми блокового вкладеного методу вирішення СЗДР мають обмеження на кількість використаних процесорів. Розробимо паралельний алгоритм, що не містить таких обмежень і враховує всі типи паралелізму.

Перший паралельний метод: множина процесорів розподіляється на k груп за кількістю точок в блоці. Кожна група $Gr_i, i = \overline{1, k}$ буде містити $\hat{p} = \lfloor p/k \rfloor$ або $\hat{p} = \lceil p/k \rceil$ процесорів, на кожному процесорі обчислюється $\hat{m} = \lfloor m/\hat{p} \rfloor$ компонент векторів наближеного розв'язку. Псевдокод для паралельного багатоточкового вкладеного методу БМ2 для СЗДР наведено на рисунку 7.

```
/* Рівняння 25 */
forall i = 1, k do
forall j = 1, p do {
обчислити  $\hat{m} = \lfloor m/\hat{p} \rfloor$  компонент
0-ітерації вектору розв'язку:  $\bar{y}_{n,i,0}$ ;
обмін «all-to-all» компонентами:  $\bar{y}_{n,i,0}$  }

/* Рівняння 26-27 */
for l = 1, l̃ {
forall i = 1, k do
forall j = 1, p do
{обчислити  $\hat{m} = \lfloor m/\hat{p} \rfloor$  компонент
l-ітерації вектору розв'язку:  $\bar{y}_{n,i,l}$ ;
обмін «all-to-all» компонентами:  $\bar{y}_{n,i,l}$  } };
обчислити  $\hat{m} = \lfloor m/\hat{p} \rfloor$  компонент
l̂-ітерації вектору розв'язку:  $\hat{y}_{n,i,\hat{l}}$ 
```

Рисунок 7 – Псевдокод паралельного багатоточкового вкладеного методу БМ2 (№3) для СЗДР з використанням блокового паралелізму

Контроль за зміною величини h виконується на кожному кроці інтегрування і в основному відповідає загальному алгоритму, що наведений на рисунку 1. Для цього використовуються дві апроксимації наближеного розв'язку на кроці n за

рахунок вкладених формул та найбільш частіше норма l_{∞} :

$$err = h \times \max_{q=1,m} \left(\sum_{i=1}^k |y_{n,i,\tilde{l},q} - y_{n,i,l,q}| \right).$$

Допустимий коридор похибки також обчислюється як локальний максимум на кроці:

$$tol = \max(\|y_n\|, \|y_{n+1}\|).$$

Потенційно динамічні характеристики всіх трьох алгоритмів при довільних правих частинах близькі до ідеальних за умови, що $p = Dor$ для кожного методу. Але через різну складність обмінних операцій і максимально можливу кількість процесорів: перша обчислювальна схема, що використовує тільки паралелізм методу, має найгірші характеристики реального паралелізму. Третя обчислювальна схема володіє безперечною перевагою перед двома іншими (рис. 8-9).

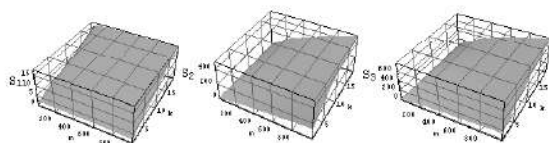


Рисунок 8 – Коефіцієнт прискорення для паралельної реалізації трьох обчислювальних схем від кількості точок у блоці і розміру задачі

Вочевидь, що якість розроблених алгоритмів розв'язання СЗДР істотно залежить від декількох параметрів, в першу чергу від співвідношення розміру задачі, властивостей чисельного методу та паралельної багатопроекторної системи.

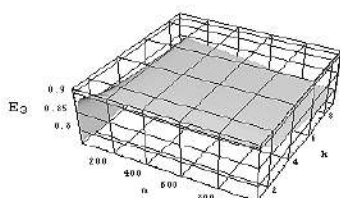


Рисунок 9 – Коефіцієнт ефективності обчислювальної схеми №3

Таким чином, найкращі характеристики паралелізму при розв'язанні СЗДР блоковими вкладеними методами мають місце при виконанні декількох умов: багатовимірність задач, складність правих частин, наявність високошвидкісних мереж передачі даних із топологією гіперкуб, застосування обчислювальної схеми №3 для БМ2,

що використовує як системний паралелізм, так і внутрішній паралелізм методу.

Висновки

В роботі досліджено ефективність двох класів паралельних методів розв'язання багатовимірних жорстких задач Коші для систем звичайних диференціальних рівнянь на основі неявних однокрокових чисельних схем: блокових та повністю неявних багатостадійних методів. Для перерахованих методів розроблено паралельні алгоритми в умовах необмеженого паралелізму, схеми відображення на реальні архітектури з розподіленою пам'яттю та різними топологіями, досліджено їх динамічні характеристики. Основною метою дослідження була розробка, обґрунтування та реалізація вбудованих способів оцінки апостеріорної локальної похибки та методів контролю кроку інтегрування при розв'язанні жорстких задач Коші.

Наукова новизна роботи полягає у підвищенні ефективності паралельного розв'язку багатовимірних жорстких задач Коші за рахунок розробки, обґрунтування та застосування методів контролю за кроком інтегрування на основі вбудованих методів оцінки локальної похибки. Дослідження показали, що не зважаючи на те, що принцип подвоєння кроку є найбільш універсальним і простим в реалізації, вкладені формули володіють меншими обчислювальними витратами і кращими характеристиками паралелізму, особливо при застосуванні ідеї послідовного підвищення порядку в неявних ітераційних чисельних схемах.

Практична значимість полягає в розробці програмних додатків розв'язку початкових задач з використанням інтерфейсу передачі повідомлень на основі блокових та багатостадійних неявних однокрокових методів, реалізації різних способів оцінки локальної похибки: дублювання кроку та вкладені форми, дослідження різних практичних підходів у контролі над кроком інтегрування.

Основними напрямками майбутніх досліджень є підвищення ефективності паралельного розв'язання задачі Коші не тільки за рахунок адаптивного кроку інтегрування, але й динамічної зміни порядку і, особливо, стійкості методу (використання матриці Якобі та її власних значень). Такий підхід може бути реалізований для використання явних схем для застосування у жорстких системах, а також в рамках технології локальної екстраполяції.

Список літератури

1. Hairer E., Nørsett S.P., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems. Springer Science & Business Media. 2008. 528 p.
2. Hairer E., Wanner, G. Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems, Springer Verlag, 2010. 586 p.

3. Mitsui T., Guang-Da Hu. Introduction in Numerical Analysis of Ordinary and Delay Differential Equations. 2023. URL: https://doi.org/10.1007/978-981-19-9263-6_1
4. Vuik C., Vermolen F.J., Gijzen M.B., Vuik M.J. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. 2023. TUDelft Open. 136p.
5. Назарова І.А., Дмитрієва О.А. Паралельні обчислення. Покровськ: ДВНЗ «ДонНТУ», 2020. 246 с.
6. Фельдман Л.П., Назарова І.А. Паралельні однокрокові методи чисельного розв'язання задачі Коші: монографія. Донецьк: «ДВНЗ» ДонНТУ, 2011. 183 с.

References

1. Hairer, E., Nørsett, S.P., Wanner, G. (2008), "Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems". *Springer Science & Business Media*. 528 p.
2. Hairer, E., Wanner, G. (2010), "Solving Ordinary Differential Equations", *SpringerVerlag*, 586 p.
3. Mitsui, T., et al, (2023), "Introduction in Numerical Analysis of Ordinary and Delay Differential Equations", available at: https://doi.org/10.1007/978-981-19-9263-6_1
4. Vuik, C., Vermolen, F.J., Gijzen, M.B., Vuik, M.J. (2023), "Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. *TUDelft Open*. 136p.
5. Nazarova, I.A., Dmitrieva, O.A. (2020), "Parallel calculations", [Paralelni obchyslennia], *Pokrovsk: State Higher Educational Institution "DonNTU"*, 246 p.
6. Feldman, L.P., Nazarova, I.A. (2011), "Parallel one-step methods of numerical solution of the task of Cauchy", [Paralelni odnokrokovy metody chyselnoho rozv'iazannia zadachi Koshi], *State Higher Educational Institution "DonNTU", Donetsk*, 185 p.

Надійшла до редакції 01.02.2024

I.A. NAZAROVA, I.V. YAROSH

Donetsk National Technical University, Luts'k, Ukraine
iryna.nazarova@donntu.edu.ua, iryna.yarosh@donntu.edu.ua

CONTROL OF INTEGRATION STEP IN THE PARALLEL SOLUTION OF MULTIDIMENSIONAL STIFF CAUCHY PROBLEMS

The article deals with the issues of development, substantiation, and effectiveness research of parallel methods for the numerical solution of stiff Cauchy problems with built-in mechanisms for estimating the local a posteriori error and control of the integration step. A general algorithm for controlling the integration step value is given. Parallel iterative block and fully implicit methods in the scalar case with local error control based on step doubling and the idea of embedded forms have been developed and analyzed. A generalization for systems of ordinary differential equations is carried out and a mapping of the methods to parallel architectures with distributed memory is constructed. The paper investigates the effectiveness of two classes of parallel methods for solving multidimensional stiff Cauchy problems for systems of ordinary differential equations based on implicit one-step numerical schemes: block and fully implicit multistage methods. For the methods, parallel algorithms have been developed under conditions of unlimited parallelism, mapping schemes to real architectures with distributed memory and different topologies, and their dynamic characteristics have been investigated. The main goal of the study was the development, justification and implementation of built-in methods for estimating the a posteriori local error and methods for controlling the integration step when solving stiff Cauchy problems.

The scientific novelty of the work consists in increasing the efficiency of the parallel solution of multidimensional stiff Cauchy problems due to the development, justification and application of integration step control methods based on built-in local error estimation methods. Studies have shown that despite the fact that the principle of doubling the step is the most universal and simple to implement, embedded formulas have lower computational costs and better parallelism characteristics, especially when applying the idea of successively increasing the order in implicit iterative numerical schemes.

The practical significance lies in the development of software applications for the solution of initial problems using MPI based on block and multi-stage implicit one-step methods, the implementation of various methods of local error estimation: step duplication and embedded forms, the study of various practical approaches in the control of the integration step. The main directions of future research are to increase the efficiency of the parallel solution of the Cauchy problem not only due to the adaptive step of integration, but also the dynamic change of the order and, especially, the stability of the method (using the Jacobi matrix and its eigenvalues). This approach can be implemented to use explicit schemes for application in stiff systems, as well as within the framework of local extrapolation technology.

Key words: integration step, local posterior error, embedded formulas, step doubling, stiff problems, parallel systems, distributed memory