

Повышение эффективности параллельного численного решения жестких задач на основе неявных блочных одношаговых методов

Назарова И.А.

Донецкий национальный технический университет
nazarova@r5.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Nazarova I.A. Rise of efficiency for parallel numerical decision of stiff tasks on basis implicit block one-step methods. In the article parallel block one-step methods with control of local error on the basis of extrapolations idea are discussed. The potential system and algorithm parallelism is exploited. Obtained algorithms are realized on parallel structures with ring, mesh and hypercube topolosrsy. The estimations of the execution time, acceleration and efficiency parallel solution are defined.

Введение

Исследование методов решения динамических задач с сосредоточенными параметрами показало, что параллельные свойства таких методов во многом определяются видом лежащей в их основе численной схемы. Наименее трудоемкими являются явные методы, однако присущие этим схемам недостатки, в частности условная устойчивость, существенно ограничивают область их применения. В этой связи значительный интерес представляют неявные схемы, которые, несмотря на большую вычислительную сложность, не имеют альтернативы среди одношаговых методов при решении жестких задач [1-6].

Данная статья посвящена разработке, обоснованию параллельных алгоритмов решения задачи Коши с встроенными способами оценки локальной погрешности на основе неявных одношаговых блочных многоточечных методов, а также построению и исследованию эффективности их отображений на реальные параллельные системы SIMD, MIMD-архитектуры и кластерные системы с распределенной памятью.

1. Параллельные одношаговые блочные методы с дублированием шага

Рассматривается численное решение задачи Коши, ассоциируемое с решением СОДУ первого порядка с известными начальными условиями:

$$\begin{cases} \frac{d\bar{y}(x)}{dx} = \bar{f}(x, \bar{y}(x)), \\ \bar{y}(x_0) = \bar{y}_0, \end{cases} \quad (1)$$

где правая часть системы есть в общем случае нелинейная функция, задающая отображение $F = \bar{f} : R \times R^m \rightarrow R^m$. Блочные многоточечные

методы решения задачи Коши особенно актуальны, поскольку хорошо согласуются с архитектурой параллельных ВС и не требуют вычисления значений в промежуточных точках, что значительно повышает эффективность счета. Данные методы обладают высокой устойчивостью и являются изначально параллельными [7-9], так как позволяют получать решение одновременно в нескольких точках сетки интегрирования.

Пусть множество точек равномерной сетки $\Omega_h : \{x_j\}, j = \overline{1, M}$ разбивается на N блоков. Каждый блок содержит k точек и при этом $N \leq M$. Суммарное число точек по всем блокам равно: $M = k \times N$. В пределах блока все точки равноудалены друг от друга:

$$x_{n,i} = x_{n,0} + ih, i = \overline{1, k},$$

где i – номер точки в блоке, $i = \overline{1, k}$;

n – номер блока, $n = \overline{1, N}$;

$x_{n,i}$ – точка с номером i , принадлежащая блоку n ;

$x_{n,0}$ – начальная точка n -го блока;

$x_{n,k}$ – конечная точка n -го блока.

Множество точек n -го блока из k точек обозначается $T_n^{(k)}$. При этом имеет место равенство: $x_{n,k} = x_{n+1,0}$. Пусть $y_{n,0}$ приближенное значение решения задачи Коши в точке $x_{n,0}$ – начальной точке обрабатываемого блока. Уравнения одношаговых блочных разностных методов в применении к ОДУ для блока из k точек могут быть записаны в виде:

$$y_{ni} = y_{n,0} + ih \left[b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j} \right]; i = \overline{1, k}; n = \overline{1, N}. \quad (2)$$

Разложением в ряд Тейлора входящих в невязку функций можно показать, что одношаговый k -точечный блочный метод имеет наивысший

порядок аппроксимации, равный $k+1$, следовательно, локальная ошибка в узлах блока имеет порядок $O(h^{k+2})$ [10-13].

Блочные параллельные методы относятся к классу неявных, поэтому для вычисления приближенных значений решения задачи Коши необходимо разрешить систему нелинейных уравнений. Одним из способов получения решения является метод простой функциональной итерации:

$$\begin{cases} y_{n,i,0} = y_{n,0} + ihF_{n,0}, i = \overline{1, k}, n = \overline{1, 2, \dots, N}, \\ y_{n,i,l+1} = y_{n,0} + ih(b_l F_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j,l}), l = \overline{0, L-1}, \end{cases} \quad (3)$$

где $F_{n,i} = f(x_{n,i}, y_{n,i})$,

n – номер блока, $n = \overline{1, 2, \dots, N}$;

i – номер точки блока, $i = \overline{1, k}$;

l – номер текущей итерации $l = \overline{0, L-1}$;

L – максимальное число ненулевых итераций.

В отличие от явных методов решения СОДУ, реализация альтернативных способов оценки апостериорной локальной погрешности на основе блочных методов связана с рядом особенностей:

- нет соответствующих последовательных аналогов, следовательно, требуется разработать и обосновать метод оценки локальной погрешности;

- варьировать шаг интегрирования возможно только после вычисления всех значений в k узлах текущего n -го блока,

- при условии неудовлетворительной оценки локальной погрешности и необходимости изменения шага интегрирования практически все вычисления для точек блока окажутся напрасными (некоторые обращения к правой части могут быть использованы вновь).

Пусть решение задачи Коши для ОДУ выполняется на основе k -точечного одношагового блочного метода. При реализации правила дублирования шага необходимо произвести вычисления по одной и той же группе формул вида (2):

$$\begin{cases} y_{ni}^{(1)} = y_{n,0}^{(1)} + ih \cdot \left[b_i F_{n,0}^{(1)} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j}^{(1)} \right], n = \overline{1, N}, i = \overline{1, k} \\ y_{ni}^{(2)} = y_{n,0}^{(2)} + i \frac{h}{2} \cdot \left[b_i F_{n,0}^{(2)} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j}^{(2)} \right], n = \overline{1, N}, i = \overline{1, k} \end{cases}$$

$$F_{n,i}^{(s)} = f(x_{n,i}, y_{n,i}^{(s)}), s = \overline{1, 2}$$

на двух различных равномерных сетках:

1) $\Omega_h = \{x_j\}, j = \overline{1, M}$ с шагом h в N блоках;

2) $\Omega_{h/2} = \{x_j\}, j = \overline{1, M1}$ с половинным шагом $h/2$ в $N1$ блоках.

Аппроксимация решения с одинарным шагом обозначается $y_{n,i}^{(1)}$, а с половинным,

соответственно: $y_{n,i}^{(2)}$. Точки n -го блока сетки

Ω_h составляют множество $T_{n,k}^{(1)}$, а сетки

$\Omega_{h/2} - T_{n,k}^{(2)}$. Поскольку количество точек в

блоке для обеих сеток равно k , то для одного и

того же интервала интегрирования число блоков

второй сетки ровно в два раза больше, чем первой.

Основой счета при интегрировании является сетка

Ω_h , при этом каждый узел с четным номером в

блоках сетки $\Omega_{h/2}$ используется для вычисления

оценки локальной погрешности на этом шаге.

Более того, в качестве решения в этих узлах часто

принимается аппроксимация, полученная с

половинным шагом либо экстраполированная, как

наиболее точная. Узлы сетки $\Omega_{h/2}$ с нечетными

номерами используются только как

вспомогательные. Поскольку рассматриваемые

методы являются неявными, применение правила

Рунге к ним требует разрешения трех различных

систем нелинейных алгебраических уравнений

размерности k .

Общее время последовательной реализации

блочных методов с правилом Рунге состоит из

суммы времени вычисления решения с одинарным

шагом в блоке n плюс времена решения с

половинным шагом в n -том и $(n+1)$ -вом блоках.

Поскольку для получения каждого из трех

решений реализуется свой итерационный процесс,

введем следующие обозначения. Пусть

$Li, i = \overline{1, 3}$ – предельное количество итераций для

нахождения аппроксимации решения $y_{n,i}^{(1)}$, $y_{n,i}^{(2)}$ и

$y_{n+1,i}^{(2)}$. Тогда, соответственно, текущее число

итераций, обеспечивающее достаточную для

каждой из данных задач точность, обозначим:

$li, li \leq Li, i = \overline{1, 3}$.

Параллельный блочный k -точечный метод

с контролем локальной апостериорной

погрешности по правилу Рунге использует

максимальную степень параллелизма, равную

$Dop = k$, то есть каждый процессор вычисляет

решение в одном узле сетки. Для каждой из задач

последовательно выполняются вычисления

нулевой и последующих итераций. При этом

нулевая итерация состоит из следующих шагов:

вычисление нулевого приближения параллельно в

каждом узле нового блока по первой формуле

системы (3); вычисление правой части ОДУ

нулевого приближения; множественный обмен

вычисленными значениями правой части по типу

“все-всем”. Затем li раз выполняется аналогичная

группа операций для последующих итераций:

1) вычисление очередного приближения в каждом

узле нового блока по второй формуле (3), базовой

операцией является умножение матрицы A на

вектор значений правых частей ОДУ;

2) вычисление правой части ОДУ от полученного приближения и множественный обмен значениями правой части “все-всем”.

Потенциальные характеристики параллелизма предложенного метода можно оценить по числу обращений к правой части ОДУ.

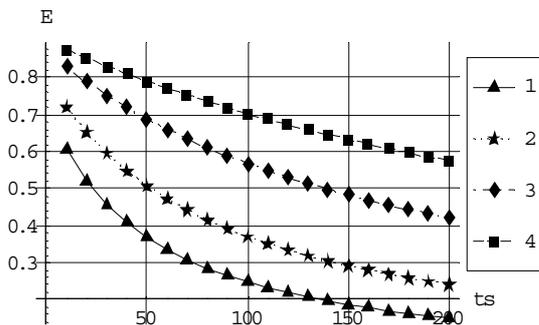
При $T_F \gg t_{op} : S_{pot} \approx k; E_{pot} \approx S_{pot}/p \approx 1$, то есть имеет место практически линейное ускорение и единичная эффективность. Такие же потенциальные характеристики могут быть получены и в случае, когда правая часть по времени вычисления соизмерима со временем выполнения одной операции с плавающей точкой.

Анализ теоретического выполнения и вычислительный эксперимент показывают, что для выполнения групповых обменных операций в предложенном алгоритме эффективными являются топологии гиперкуб и тор (рис. 1), худший вариант соединения процессоров – кольцо.



Рисунок 1 - Доля обменов к общему времени выполнения блочного метода с правилом Рунге для различных топологий

Кроме топологии соединения, на величину времени межпроцессорных обменов и динамические характеристики параллелизма существенное влияние оказывают тип параллельной архитектуры и определяемые им машинно-зависимые константы обмена, такие, как латентность и время передачи одного слова (рис. 2).



1 - $T_F=100t_{cp}$; 2 - $T_F=200t_{cp}$; 3 - $T_F=500t_{cp}$; 4 - $T_F=1000t_{cp}$

Рисунок 2 – Зависимость коэффициентов эффективности блочного метода с правилом Рунге от величины латентности, t_s

Заметим, что с ростом величины латентности коммуникационной среды время на реализацию обменов увеличивается, а ускорение и эффективность алгоритма уменьшаются

$\uparrow t_s \Rightarrow \downarrow S \Rightarrow \downarrow E$. Из временных характеристик алгоритма и исходной задачи качество параллелизма наиболее чувствительно к необходимому объему вычислений на реализацию правой части (1) и количеству точек в одном блоке. Зависимости реальных коэффициентов ускорения и эффективности параллельного процесса контроля локальной погрешности на основе правила Рунге от числа точек блока при росте сложности правых частей ОДУ представлены с помощью графиков рис. 3 и 4.

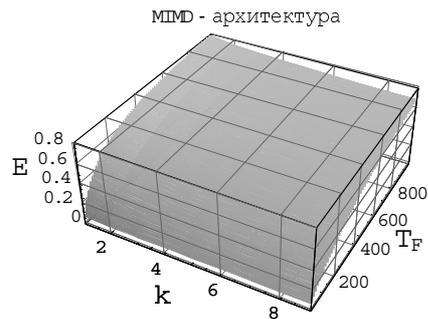


Рисунок 3 - Коэффициенты эффективности блочного метода с контролем локальной погрешности по правилу Рунге

Очевидно, чем сложнее правая часть ОДУ, тем лучше характеристики параллелизма: $\uparrow T_F \Rightarrow \uparrow S \Rightarrow \uparrow E$ и, одновременно, чем больше размерность блока, совпадающая с числом процессоров, тем больше ускорение и меньше эффективность рассматриваемого метода: $\uparrow k \Rightarrow \uparrow p \Rightarrow \uparrow S \Rightarrow \downarrow E$.

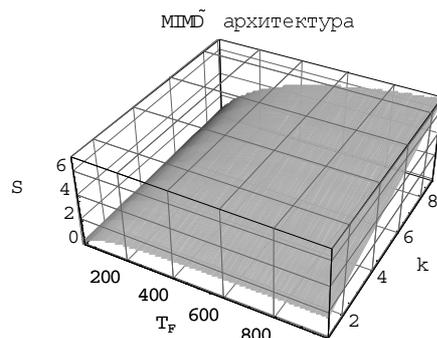


Рисунок 4 - Коэффициенты эффективности блочного метода с контролем локальной погрешности по правилу Рунге

Таким образом, наилучшие характеристики параллелизма при решении нелинейной задачи Коши для одного уравнения блочными методами с контролем локальной погрешности по правилу Рунге достигаются для любых параллельных архитектур, большой размерности задачи, сложной правой части и высокоскоростных сетей передачи информации.

2. Технология локальной экстраполяции на основе одношаговых блочных методов для ОДУ

Реализация технологии локальной экстраполяции Ричардсона для блочных методов требует многократных вычислений на одном и том же интервале интегрирования с использованием опорного блочного k_0 -точечного метода порядка r_0 на сгущающихся равномерных сетках:

а) $\Omega_{h/n_1} = \{x_j\}, j = \overline{1, M_1}$ с шагом $h_1 = h/n_1$ в N_1 блоках;

б) $\Omega_{h/n_2} = \{x_j\}, j = \overline{1, M_2}$ с шагом $h_2 = h/n_2$ в N_2 блоках;

.....
в) $\Omega_{h/n_k} = \{x_j\}, j = \overline{1, M_k}$ с шагом $h_k = h/n_k$ в N_k блоках, где k – число строк экстраполяционной таблицы.

Базовый шаг интегрирования равен $h_1 = h, n_1 = 1$, то есть основой счета является сетка: Ω_h . Для генерации вспомогательных сеток выбирается гармонический ряд $P_1 = \{n_2, \dots, n_k, \dots\} = \{2, 3, 4, 5, \dots\}$, как наименее затратный в случае опорного метода произвольного типа. Блочный опорный метод должен иметь малый порядок точности:

$$T_{11i} = y_{n,i} = y_{n,0} + ih \left[b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^{k_0} a_{i,j} F_{n,j} \right],$$

$$i = \overline{1, k_0}, k_0 \leq 4,$$

так как с ростом r_0 вычислительные затраты на технологию в целом существенно возрастают, несмотря на линейное уменьшение длины экстраполяционной таблицы. Для неявных методов, к которым относятся и рассматриваемые блочные методы, это особенно важно, поскольку увеличение порядка, а, следовательно, и числа точек блока, влечет за собой увеличение порядка многократно решаемых СНАУ.

Для блочных методов базовый интервал интегрирования – это некоторый блок с номером n основной сетки длины $H = k_0 h$. Общее число точек, вычисляемое с разными шагами интегрирования $h_i = h/i, i = \overline{1, k}$ и определяющее узлы сеток Ω_{h_i} по P_1 , равно $M_i = H/h_i = (k_0 h)/h_i = k_0/i$. Соответственно, количество блоков i -той сетки $N_i = M_i/k_0 = i$ и $n_i = N_i, i = \overline{1, k}$. Поскольку экстраполируются значения в узлах базовой сетки, необходимо установить механизм соответствия узлов сетки

Ω_h основного счета узлам сеток для экстраполяции $\Omega_{h_i}, i = \overline{2, k}$.

Для двухточечного опорного блочного метода и гармонического ряда имеем:

1) i -четное число: $x_{n,1}(h) \Leftrightarrow x_{n+\frac{i}{2}-1,2}(h_i)$;

2) i -нечетное число: $x_{n,1}(h) \Leftrightarrow x_{n+\lceil \frac{i}{2} \rceil,1}(h_i)$;

3) для любых i : $x_{n,2}(h) \Leftrightarrow x_{n+i-1,2}(h_i)$.

Значения первого столбца экстраполяционной таблицы определяются на основе следующих формул:

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{11ni} = y_{ni}^{(1)} = y_{n,0}^{(1)} + ih \cdot \left[b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^{k_0} a_{i,j} F_{n,j} \right]; n = \overline{1, N_1}, \\ T_{21ni} = y_{ni}^{(2)} = y_{n,0}^{(2)} + i \frac{h}{2} \cdot \left[b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^{k_0} a_{i,j} F_{n,j} \right]; n = \overline{1, N_2}, \\ \dots \\ T_{k1ni} = y_{ni}^{(k)} = y_{n,0}^{(k)} + i \frac{h}{k} \cdot \left[b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^{k_0} a_{i,j} F_{n,j} \right]; n = \overline{1, N_k}, \\ i = \overline{1, k_0}. \end{array} \right.$$

Каждая из аппроксимаций решения получается за счет N_i раз примененной схемы одношагового блочного k_0 -точечного метода с разными шагами интегрирования:

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{T11} = T_{\bar{y}_{n,i}^{(1)}(h)} = N_1 \cdot T_1^{r_0}(h), \\ T_{T21} = T_{\bar{y}_{n,i}^{(2)}\left(\frac{h}{2}\right)} = N_2 \cdot T_1^{r_0}(h/2), \\ \dots \\ T_{Tkl} = T_{\bar{y}_{n,i}^{(k)}\left(\frac{h}{k}\right)} = N_k \cdot T_1^{r_0}(h/k), \end{array} \right.$$

где $T_1^{r_0}(h/i), i = \overline{1, k}$ – время, необходимое для решения задачи Коши для ОДУ опорным методом порядка r_0 с шагом h_i . Затем по формуле Эйткена-Невилла вычисляются приближения T_{22}, T_{33}, \dots и $T_{k,k}$.

Коэффициенты потенциальных ускорения и эффективности параллельного алгоритма локальной экстраполяции в случае, если время обращения к правой части ОДУ доминирует над другими вычислениями, близки к идеальным. Аналогичный результат имеем для тривиальной правой части, то есть потенциально метод локальной экстраполяции для многоточечных блочных методов обладает высокой степенью внутреннего параллелизма. Анализ

коммуникационной составляющей дает основание утверждать, что наилучшей для рассмотренного метода по-прежнему является топология гиперкуба, однако обмены являются трудоемкими. Параллельный алгоритм технологии локальной экстраполяции имеет худшие характеристики параллелизма, областью его применения по-прежнему остаются высокоточные решения.

Заключение

Предложены и теоретически обоснованы новые параллельные методы оценки локальной апостериорной погрешности численного решения жестких задач Коши для одного дифференциального уравнения на основе блочных неявных одношаговых разностных схем: блочный k -точечный метод с правилом дублирования шага и локальная экстраполяция с блочным опорным методом. Построены итерационные параллельные алгоритмы численного решения нелинейной разностной задачи Коши, позволяющие получать результаты с заданной степенью точности. Приведены сравнительные характеристики численного решения тестовых задач и оценки параллелизма. Решение тестовых задач показало, что экспериментальные оценки ускорения и эффективности близки к потенциальным.

Исследована эффективность полученных вычислительных схем отображения параллельных алгоритмов на структуры ВС в зависимости от размерности СОДУ, количества процессоров, типа параллельной ВС (SIMD, MIMD и кластерные системы), латентности и времени передачи данных в сетях различных топологий.

Перспективным направлением исследований является проведение сравнительного анализа эффективности неявных одношаговых методов решения общей задачи Коши на основе блочных k -точечных методов и традиционных методов интегрирования жестких задач одного и того же порядка точности и требований к устойчивости.

Литература

1. Дж. Холл, Дж. Уатт. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. - М.: Мир, 1979. – 312с.
2. Хайрер Э., Нёрсет С., Ваннер. Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. - М.: - Мир, 1990.-512с.
3. Хайрер Э., Ваннер. Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие задачи. - М.: Мир, 1999.- 685с.
4. Молчанов И.Н. Введение в алгоритмы параллельных вычислений. АН УССР, Инст. Кибернетики им. В.М. Глушкова. Киев: Наукова думка. 1990. -128с.
5. Worland P.B. Parallel methods for the numerical solution of ordinary differential equations //

IEEE Trans. Comp. C. – 25, 10(1976). – P.1045-1048.

6. Молчанов И.Н. Введение в алгоритмы параллельных вычислений. – Киев: Наукова думка, 1990. – 128с.

7. Фельдман Л.П. Сходимость и оценка погрешности параллельных одношаговых блочных методов моделирования динамических систем с сосредоточенными параметрами // Научн. тр. ДонГТУ. Серия: Информатика, кибернетика та обчислювальна техніка, выпуск 15:- Донецк: - ДонГТУ, 2000, С. 34-39.

8. Фельдман Л.П. Сходимость и оценка погрешности параллельных одношаговых блочных методов моделирования динамических систем с сосредоточенными параметрами // Наукові праці ДонДТУ. Серія: Информатика, кибернетика та обчислювальна техніка, выпуск 15, Донецьк: ДонДТУ, 2000. – С.34-39.

9. Фельдман Л.П., Дмитриева. О.А. Разработка и обоснование параллельных блочных методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений на SIMD-структурах // Наукові праці ДонДТУ. Серія: Проблеми моделювання та автоматизації проектування динамічних систем, выпуск 29:- Донецьк: ДонДТУ, 2001. – С.70-79.

10. Feldman L., Dmitriewa O.A., Gerber S. Abbildung der blockartigen Algorithmen auf die Parallelrechnerarchitekture / Simulationstechnik, 17. Symposium in Magdeburg, Sept. 2003: SCS-Europe BVBA (ISBN 3-936150-27-3), Magdeburg, Germany, 2003. – P.359-364.

11. Feldman L., Svjatnyj V., Dmitriewa O.A. Stabilitat von parallelen Simulationsverfahren fur dynamische Systeme mit konzentrierten Parametern / Simulationstechnik, 17. Symposium in Magdeburg, Sept. 2003: SCS-Europe BVBA (ISBN 3-936150-27-3), Magdeburg, Germany, 2003. – P.105-110.

12. Фельдман Л.П. Общие линейные блочные многошаговые методы решения // Наукові праці ДонНТУ. Серія: Информатика, кибернетика і обчислювальна техніка, выпуск 8(120): – Донецьк: ДонНТУ, 2007. – С.282-297.

13. Фельдман Л.П., Назарова И.А. Параллельные алгоритмы численного решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Математическое моделирование, том 18, №6, 2006. - С. 17-31.