

РАЗРАБОТКА И ОБОСНОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ БЛОЧНЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ НА SIMD-СТРУКТУРАХ

Фельдман Л.П., Дмитриева О.А.

Кафедра ПМИИ ДонГТУ

E-mail: feldman@r5.dgtu.donetsk.ua, dmitriv@r5.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Feldman L.P., Dmitriewa O. Elaboration and basing of parallel block decision methods of usual differential equations on SIMD structures. In represented article is offered approach, allowing to generate the block decision methods of usual differential equations on parallel calculable systems with set exactness degree. Generalization on systems of equations is performed without difficulties. The convergence proofs and error estimations of onesteps and multysteps of block methods are got. In considered methods decision of differential equation is got in all of block points, herewith in first method only a last block point uses in following, whereas in second method use all of points of precedent block. The Coefficients of difference equations for blocks with any amount of points determine by the medium of packet Mathematica®. The decision on 2-x and 4-pointwise blocks are modelled. The estimations are got, describing a parallelism degree of generate methods: acceleration coefficients and effectiveness.

Введение

В последнее время появилось большое количество численных методов интегрирования дифференциальных уравнений, которые ориентированы на вычислительные системы с параллельной архитектурой. Однако практическое использование большинства методов не всегда оправдано, поскольку многие из них либо обладают численной неустойчивостью, либо имеют очень сложную структуру, приводящую к потере эффективности. К методам, лишенным указанных недостатков, можно отнести блочные [1]. Блочным будем называть метод, при котором для блока из k точек новые значения функции вычисляются одновременно. Эта особенность методов, во-первых, согласуется с архитектурой параллельных вычислительных систем, а, во-вторых, позволяет вычислять коэффициенты разностных формул не в процессе интегрирования, а на этапе разработки метода, что значительно увеличивает эффективность счета. В то же время для этих методов отсутствуют оценки погрешностей и условия сходимости. Поэтому данная работа посвящена исследованию сходимости и получению оценок погрешностей параллельных блочных методов решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Рассмотрим решение задачи Коши

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad x(t_0) = x_0 \quad (1)$$

к точечным блочным разностным методом. Множество M точек равномерной сетки t_m , $m=1, 2, \dots, M$, $t_M=T$ с шагом h разобьем на N блоков, содержащих по k точек, при этом $kN=M$. В каждом блоке введем номер точки $i=0, 1, \dots, k$ и обозначим через (i, n) точку n -го блока с номером i . Точку $(0, n)$ назовем началом блока n , а (k, n) - концом блока. Очевидно, что имеет место $(i, n) = (i+k, n-1)$. Условимся начальную точку в блок не включать. Если для расчета значений в новом блоке используется только последняя точка

предшествующего - будем говорить об одношаговых, а если все точки предшествующего блока - многошаговых блочных методах.

В общем случае уравнения многошаговых разностных методов для блока из k точек с учетом введенных обозначений можно записать в виде

$$\frac{u_{n,i} - u_{n,0}}{i\tau} = \sum_{j=1}^k b_{i,j} F_{n-1,j} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j}, \quad i = \overline{1, k}, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (2)$$

где $F_{n,j} = f(t_n + j\tau, u(t_n + j\tau))$.

Для одношаговых разностных методов уравнения могут быть представлены как

$$\frac{u_{n,i} - u_{n,0}}{i\tau} = b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j}, \quad i = \overline{1, k}, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (3)$$

Погрешность аппроксимации многошаговых блочных методов

Выражение для погрешности аппроксимации рассматриваемого разностного метода (2) на решении уравнения (1) запишем следующим образом

$$r_{n,i} = -\frac{x_{n,i} - x_{n,0}}{i\tau} + \sum_{j=1}^k b_{i,j} x'_{n-1,j} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} x'_{n,j}, \quad i = \overline{1, k}, \quad (4)$$

где $x_{n,i} = x(t_n + i\tau)$, $x'_{n,j} = f(t_{n,j}, x_{n,j}) = f(t_n + jt, x(t_n + j\tau))$,

$$x'_{n-1,j} = f(t_{n-1,j}, x_{n-1,j}) = f(t_n - (k-j)\tau, x(t_n - (k-j)\tau)).$$

Воспользуемся подходом, предложенным в работе [2]. Разлагая $x_{n,i}$, $x'_{n,j}$ в ряды Тейлора в окрестности точки t , получим

$$\frac{x_{n,i} - x_{n,0}}{i\tau} = \sum_{l=1}^p \frac{(i\tau)^{l-1}}{l!} x^{(l)}_{n,0} + O(\tau^p), \quad i = \overline{1, k},$$

$$x'_{n-1,j} = \sum_{l=1}^p \frac{((j-k)\tau)^{l-1}}{(l-1)!} x^{(l)}_{n,0} + O(\tau^p), \quad i = \overline{1, k},$$

$$x'_{n,j} = \sum_{l=1}^p \frac{(j\tau)^{l-1}}{(l-1)!} x^{(l)}_{n,0} + O(\tau^p), \quad i = \overline{1, k}.$$

Подставляя эти разложения в выражение (4) для погрешности аппроксимации и учитывая, что конечная точка предыдущего блока совпадает с начальной точкой следующего блока, будем иметь

$$\begin{aligned} r_{n,i} = & -\sum_{l=1}^p \frac{(i\tau)^{l-1}}{l!} x^{(l)}_{n,0} + \sum_{j=1}^{k-1} b_{i,j} \sum_{l=1}^p \frac{((j-k)\tau)^{l-1}}{(l-1)!} x^{(l)}_{n,0} + b_{i,k} x'_{n,0} \\ & + \sum_{j=1}^k a_{i,j} \sum_{l=1}^p \frac{(j\tau)^{l-1}}{(l-1)!} x^{(l)}_{n,0} + O(\tau^p) \end{aligned} \quad (5)$$

Сгруппируем члены с одинаковыми производными и изменим порядок суммирования в последнем выражении, тогда получим

$$\begin{aligned} r_{n,i} = & x'_{n,0} \left(\sum_{j=1}^k b_{i,j} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} - 1 \right) + \sum_{l=2}^p \frac{\tau^{l-1}}{(l-1)!} x^{(l)}_{n,0} * \\ & * \left[\sum_{j=1}^k a_{i,j} * j^{l-1} + \sum_{j=1}^{k-1} b_{i,j} (j-k)^{l-1} - \frac{i^{l-1}}{l} \right] + O(\tau^p). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что погрешность аппроксимации имеет порядок p , если выполнены условия

$$\sum_{j=1}^k b_{i,j} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} = 1, \quad \sum_{j=1}^k j^{l-1} a_{i,j} + \sum_{j=1}^{k-1} (j-k)^{l-1} b_{i,j} = \frac{i^{l-1}}{l}, \quad i = \overline{1, k}, l = \overline{2, p}. \quad (7)$$

Система уравнений (7) для каждого фиксированного i содержит p уравнений и $2k$ неизвестных $b_n, b_{ib}, \dots, b_{ik}, a_{jk}, a^{\wedge}, \dots, a^{\wedge}$. Потребуем, чтобы $p=2k$, тогда из системы (7) можно будет определить все неизвестные коэффициенты. Отсюда следует, что наивысший порядок аппроксимации многошагового k - точечного блочного метода равен $2k$. Его погрешность в соответствии с (6) определяется формулой

$$r_{n,i} = \frac{\tau^{2k}}{(2k)!} x_{n,0}^{(2k+1)} \left[\sum_{j=1}^k j^{2k} a_{i,j} + \sum_{j=1}^{k-1} (j-k)^{2k} b_{i,j} - \frac{i^{2k}}{2k+1} \right] + O(\tau^{2k+1}), \quad i = \overline{1, k}. \quad (8)$$

Для одношаговых блочных методов аппроксимацию порядка p обеспечивают следующие условия [3]

$$b_i + \sum_{j=1}^k a_{i,j} = 1, \quad \sum_{j=1}^k j^{l-1} a_{i,j} = \frac{i^{l-1}}{l}, \quad i = \overline{1, k}, l = \overline{2, p}. \quad (9)$$

Система уравнений (9) для каждого фиксированного i содержит p уравнений и $k+1$ неизвестных $b_j, d_j, i, a_{i2}, \dots, a_{jk}$. Если потребовать, чтобы $p=k+1$, тогда из системы (9) можно будет определить все неизвестные коэффициенты. Отсюда следует, что наивысший порядок аппроксимации одношагового k - точечного блочного метода равен $k+1$. Его погрешность определяется формулой

$$r_{n,i} = \frac{\tau^{k+1}}{(k+1)!} x_{n,0}^{(k+2)} \left[\sum_{j=1}^k j^{k+1} a_{i,j} - \frac{i^{k+1}}{k+2} \right] + O(\tau^{k+2}), \quad i = \overline{1, k}. \quad (10)$$

Примеры многоточечных разностных методов

Элементы b_{ij} и $O_{ij}, i, j = \overline{1, 2, \dots, k}$ матриц B и A соответственно можно найти в зависимости от выбранного метода, решая системы (7) или (9) для конкретной размерности блока k . Решение систем выполним с помощью пакета *Mathematica*® (Wolfram Research Inc.). Получившиеся при этом коэффициенты блочных методов будут иметь следующий вид

- для двухточечного блока многошагового метода

$$B = \left\{ \left\{ -\frac{1}{24}, \frac{13}{24} \right\}, \left\{ 0, \frac{1}{6} \right\} \right\} \quad A = \left\{ \left\{ \frac{13}{24}, -\frac{1}{24} \right\}, \left\{ \frac{2}{3}, \frac{1}{6} \right\} \right\}$$

- для четырехточечного блока многошагового метода

$$B = \left\{ \left\{ -\frac{191}{120960}, \frac{1879}{120960}, -\frac{353}{4480}, \frac{68323}{120960} \right\}, \left\{ 0, \frac{1}{1512}, -\frac{1}{105}, \frac{167}{840} \right\}, \right. \\ \left. \left\{ -\frac{13}{13440}, \frac{39}{4480}, -\frac{171}{4480}, \frac{2777}{13440} \right\}, \left\{ \frac{2}{945}, -\frac{16}{945}, \frac{2}{35}, -\frac{53}{1890} \right\} \right\} \\ A = \left\{ \left\{ \frac{68323}{120960}, \frac{353}{4480}, \frac{1879}{120960}, -\frac{191}{120960} \right\}, \left\{ \frac{586}{945}, \frac{167}{840}, -\frac{1}{105}, \frac{1}{1512} \right\}, \right. \\ \left. \left\{ \frac{1299}{4480}, \frac{369}{896}, \frac{337}{2688}, -\frac{3}{896} \right\}, \left\{ \frac{446}{945}, \frac{2}{35}, \frac{362}{945}, \frac{139}{1890} \right\} \right\}$$

В случае выбора одношагового метода с размерностью блока $A=4$ элементы матрицы A и вектора B , примут следующий вид

$$\mathbf{B} = \left\{ \frac{251}{720}, \frac{29}{180}, \frac{9}{80}, \frac{7}{90} \right\}$$

$$\mathbf{A} = \left\{ \left\{ \frac{323}{360}, -\frac{11}{30}, \frac{53}{360}, -\frac{19}{720} \right\}, \left\{ \frac{31}{45}, \frac{2}{15}, \frac{1}{45}, -\frac{1}{180} \right\}, \right. \\ \left. \left\{ \frac{17}{40}, \frac{3}{10}, \frac{7}{40}, -\frac{1}{80} \right\}, \left\{ \frac{16}{45}, \frac{2}{15}, \frac{16}{45}, \frac{7}{90} \right\} \right\}$$

Аналогично определяются коэффициенты разностных уравнении для блоков с любым количеством точек. Погрешности аппроксимации многошагового или одношагового блочных методов могут быть получены по формулам (8) или (10). В качестве примера можно привести значения погрешностей для четырехточечных многошагового

$$r_{n,1} = -\frac{2497\tau^8}{3628800} x_{n,0}^{(9)} + O(\tau^9), r_{n,2} = -\frac{23\tau^8}{226800} x_{n,0}^{(9)} + O(\tau^9), r_{n,3} = -\frac{27\tau^8}{44800} x_{n,0}^{(9)} + O(\tau^9), r_{n,4} = O(\tau^9)$$

и одношагового

$$r_{n,1} = -\frac{3\tau^5}{160} x_{n,0}^{(6)} + O(\tau^6), r_{n,2} = -\frac{\tau^5}{180} x_{n,0}^{(6)} + O(\tau^6), r_{n,3} = -\frac{3\tau^5}{160} x_{n,0}^{(6)} + O(\tau^6), r_{n,4} = O(\tau^6)$$

блочных методов в соответствующих точках блока.

Сходимость и оценка погрешности многошаговых блочных методов

Обозначим через u_n , - вектор значений приближенного решения в точках n -го блока с компонентами u_{nj} , $i=1,2,\dots,k$ и через u'_n вектор, компоненты которого $u'_i = f(t_n, u_n) = F_{nj}$ и $u'_i, y = f(t_n, u_n, y) = F_{n,y}$ равны значениям правых частей уравнения (1) в точках, соответствующих значениям приближенного решения. Запишем систему (2) в векторной форме

$$\mathbf{D}^{-1}(u_n - u_{n,0}\mathbf{e}) / \tau = \mathbf{B}u'_{n-1} + \mathbf{A}u'_n$$

где $\mathbf{D} = (d_{ij})$ - диагональная матрица с элементами $d_{i,i} = 1$, $i=1,2,\dots,k$,

\mathbf{e} - единичный вектор столбец, \mathbf{B} и \mathbf{A} - матрицы размерности $k \times k$ с компонентами $b_{i,j}$ и $a_{i,j}$ соответственно, $i=1,2,\dots,k, j=1,2,\dots,k$.

Обозначим через x_n , - вектор значений точного решения задачи (1) в точках блока n . Получим уравнение, которому удовлетворяет вектор погрешностей в блоке $Z_n = U_n - X_n$. Подставим в левую часть уравнения (11) выражение $u_n = Z_n + x_n$, добавим к правой части и вычтем из нее $\mathbf{B}x'_{n-1} + \mathbf{A}x'_n$, тогда уравнение для погрешности примет вид

$$\mathbf{D}^{-1}(Z_n - Z_{n,0}\mathbf{e}) / \tau = -\mathbf{D}^{-1}(x_n - x_{n,0}\mathbf{e}) / \tau + \mathbf{B}x'_{n-1} + \mathbf{A}x'_n + \mathbf{B}(u'_{n-1} - x'_{n-1}) + \mathbf{A}(u'_n - x'_n).$$

Входящее в правую часть выражение

$$r_n = -\mathbf{D}^{-1}(x_n - x_{n,0}\mathbf{e}) / \tau + \mathbf{B}x'_{n-1} + \mathbf{A}x'_n \quad (12)$$

представляет собой вектор невязок разностных уравнений (2) на точном решении уравнения (1). Поскольку разностные уравнения (11) аппроксимируют исходное уравнение в точках блока с порядком $O(\tau^{2k})$, то имеет место оценка

$$\|r_n\|_C = O(\tau^{2k}) \quad (13)$$

Оставшиеся члены правой части уравнения для погрешности обозначим через

$$\omega_n = \mathbf{B}(u'_{n-1} - x'_{n-1}) + \mathbf{A}(u'_n - x'_n)$$

Тогда уравнение для погрешности запишется короче

$$z_n = z_{n,0}e + \tau \mathbf{D} (r_n + \omega_n) \quad (15)$$

Вектор функция ω_n от погрешности z_n зависит нелинейно. Вид этой зависимости определяется функцией $f(t,x)$. В дальнейшем будем предполагать, что $f(t,x)$ удовлетворяет условию Липшица ПО ВТОРОМУ аргументу, т. е.

$$|f(t, x_1) - f(t, x_2)| \leq L|x_1 - x_2| \quad (16)$$

для всех t, x_i рассматриваемой области. Согласно формуле конечных приращений Лагранжа для компоненты i имеем

$$u'_{n,i} - x'_{n,i} = f(t_{n,i}, u_{n,i}) - f(t_{n,i}, x_{n,i}) = l_{n,i} z_{n,i},$$

где $l_{n,i} = f_x(t_{n,i}, x_{n,i} + \theta z_{n,i})$, $0 \leq \theta \leq 1$, $i = 0, k$.

Подставляя последние в (14), получим

$$\omega_n = \mathbf{B} \mathbf{D}_i z_{n-1} + \mathbf{A} \mathbf{D}_i z_n,$$

где \mathbf{D} - диагональная матрица с элементами $d_{ii} = l_{n,i}$, $i=1,2,\dots,k$ и ее норма имеет в силу (13) следующую оценку

$$\|\mathbf{D}_i\|_c \leq L \quad (17)$$

Заменим ω_n в уравнении (15) полученным для него выражением, запишем его в виде

$$z_n = z_{n,0}e + \tau \mathbf{D} r_n + \tau \mathbf{D} (\mathbf{B} \mathbf{D}_i z_{n-1} + \mathbf{A} \mathbf{D}_i z_n)$$

Введем нормы

$$\|z_n\|_c = \max_{1 \leq i \leq k} |z_{n,i}| \quad \text{и} \quad \|z_{n-1}\|_c = \max_{1 \leq i \leq k} |z_{n-1,i}|.$$

Далее, учитывая (13), (17) и то, что $|z_{n,i}| < p^{\wedge} \Pi$, получим неравенство

$$\|z_n\|_c \leq C \tau^{2k+1} + kL \tau \left[\|\mathbf{B}\|_c \|z_{n-1}\|_c + \|\mathbf{A}\|_c \|z_n\|_c \right],$$

которое преобразуем к виду

$$(1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c) \|z_n\|_c \leq C \tau^{2k+1} + (1 + kL \tau \|\mathbf{B}\|_c) \|z_{n-1}\|_c$$

Если на τ наложить ограничение

$$\tau < \tau_0 = \frac{1}{kL \|\mathbf{A}\|_c}, \quad (18)$$

то оценка, связывающая нормы погрешностей соседних блоков примет вид

$$\|z_n\|_c = \frac{(C \tau^{2k+1} + (1 + kL \tau \|\mathbf{B}\|_c) \|z_{n-1}\|_c)}{1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c} \quad (19)$$

т. к. в силу условия (18) имеет место $1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c > 0$. Подставляя последовательно в (19) значения погрешностей для блоков $n-1, n-2, \dots, 1$, получим

$$\|z_n\|_c \leq [C \tau^{2k+1} \left(1 + \frac{1 + kL \tau \|\mathbf{B}\|_c}{1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c} + \left(\frac{1 + kL \tau \|\mathbf{B}\|_c}{1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c} \right)^2 + \dots + \left(\frac{1 + kL \tau \|\mathbf{B}\|_c}{1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c} \right)^{n-1} \right) + \left(\frac{1 + kL \tau \|\mathbf{B}\|_c}{1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c} \right)^n \|z_0\|_c] / (1 - kL \tau \|\mathbf{A}\|_c),$$

где $\|z_0\|_c$ - норма погрешности приближенного решения, полученного каким-либо методом в начальном блоке. Упростим последнее выражение

$$\|z_n\|_c \leq C\tau^{2k} \frac{\left(\frac{1+kL\tau\|B\|_c}{1-kL\tau\|A\|_c}\right)^n - 1}{\left(\frac{L\|B\|_c + L\|A\|_c}{k}\right)} + \frac{E^{nk\tau(L\|B\|_c + L\|A\|_c)}}{1-k\tau L\|A\|_c} \|z_0\|_c \leq C\tau^{2k} \frac{E^{kn\tau(L\|B\|_c + L\|A\|_c)} - 1}{\left(\frac{L\|B\|_c + L\|A\|_c}{k}\right)} + E^{T(L\|B\|_c + L\|A\|_c)} \|z_0\|_c, \quad T = k(n+1)\tau$$

Последнее неравенство справедливо для любого n , $0 < n < N$, из этого следует:

$$\|z_n\|_c \leq C\tau^{2k} \frac{E^{T(L\|B\|_c + L\|A\|_c)} - 1}{\left(\frac{L\|B\|_c + L\|A\|_c}{k}\right)} + E^{T(L\|B\|_c + L\|A\|_c)} \|z_0\|_c \quad (20)$$

Таким образом, доказана

Теорема. Пусть правая часть уравнения (1) $f(t,y)$ удовлетворяет условию Липшица по второму аргументу с константой L и z_0 - невязка многошагового к-точечного блочного метода (2) определенная согласно (3) с оценкой (13). Тогда при

$$\tau < \tau_0 = \frac{1}{kL\|A\|_c} \quad \text{и} \quad kn\tau < T \quad \text{для погрешности метода имеет место оценка} \quad (20).$$

Следствие. Если разностное уравнение (2) аппроксимирует исходное уравнение (1), то решение разностной задачи (2) сходится при $\tau \rightarrow 0$ к решению исходной задачи (1), причем порядок точности совпадает с порядком аппроксимации.

После проведения соответствующих преобразований можно получить оценку погрешности одношаговых блочных методов. При тех же ограничениях на длину шага она будет иметь следующий вид [3]

$$\|z\|_c \leq C\tau^{k+1} \frac{E^{T(\|b\|_c + L\|A\|_c)} - 1}{\left(\|b\|_c + L\|A\|_c\right)}. \quad (21)$$

Алгоритм параллельного решения нелинейной разностной задачи

Для вычисления приближенных значений решения задачи Коши (1) необходимо решить нелинейную систему уравнений (2). Используем для этого следующий итерационный процесс

$$u_{n,i,0} = u_{n,0} + i\tau \sum_{j=1}^k c_{i,j} F_{n-1,j}, \quad i = \overline{1, k}, \quad n = \overline{1, 2}, \dots$$

$$u_{n,i,s+1} = u_{n,0} + i\tau \left(\sum_{j=1}^k b_{i,j} F_{n-1,j} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j,s} \right), \quad i = \overline{1, k}, \quad s = \overline{0, 2k-1}, \quad n = \overline{1, 2}, \dots, \quad (22)$$

который позволяет проводить вычисления параллельно для каждого узла блока. Покажем, что после выполнения $2k$ шагов вычислений по формулам (23) локальная ошибка в узлах блока будет иметь порядок $O(\tau^{2M})$. Обозначим через u^h значение решения в точке $t_{n,j}$, найденное с локальной погрешностью $O(\tau^M)$, а через

$$F_{n,i}^{[p]} = f(t_{n,i}, u_{n,i}^{[p]}), \quad (23)$$

вычисленное при этом значение правой части уравнения (1). Допустим, что значения $u_{n,0}$ вычислены с локальной ошибкой $O(\tau^{2l+1})$, тогда и правая часть уравнения может быть вычислена с такой же погрешностью, т. е. имеем $F^{h,k,*1}$. Выполнив первый шаг вычислений по первой формуле (22), получим

$$u_{n,i,0}^{[k+1]} = u_{n,0}^{[2k+1]} + i\tau \sum_{j=1}^k c_{i,j} F_{n,j,0}^{[2k+1]}, i = \overline{1, k},$$

так как локальная ошибка экстраполяционной формулы Адамса имеет порядок $O(\tau^{k+1})$. Параллельные вычисления по второй формуле (22) при $i=0$ дадут следующие результаты:

$$u_{n,i,1}^{[k+2]} = u_{n,0}^{[2k+1]} + i\tau \left(\sum_{j=1}^k b_{i,j} F_{n-1,j}^{[2k+1]} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j,0}^{[k+1]} \right), i = \overline{1, k},$$

так как функции $F^{(l)} = f(t_{nj}, u^{(j)}), j = \overline{1, k}$ могут быть вычислены с локальной ошибкой $O(m^m)$. Вычисления на следующем шаге $s=1$ улучшат точность результатов на один порядок. Продолжая вычисления до $i = k-1$, получим результаты, соответствующие локальным предельным точностям приближенных формул (22), т. е.

$$u_{n,i,k}^{[2k+1]} = u_{n,0}^{[2k+1]} + i\tau \left(\sum_{j=1}^k b_{i,j} F_{n-1,j}^{[2k+1]} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j,2k-1}^{[2k]} \right), i = \overline{1, k},$$

поскольку разностные уравнения (2) аппроксимируют дифференциальное уравнение (1) с порядком $O(\tau^{2k})$, дальнейшие шаги не дадут повышения порядка точности результатов.

Для одношаговых блочных методов формулы итерационного процесса могут быть получены в следующем виде

$$\begin{aligned} u_{n,i,0} &= u_{n,0} + i\tau F_{n,0}, i = \overline{1, k}, n = 1, 2, \dots \\ u_{n,i,s+1} &= u_{n,0} + i\tau \left(b_i F_{n,0} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,i,s} \right), i = \overline{1, k}, s = \overline{0, k-1}, n = 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (24)$$

Покажем, что после выполнения $k+1$ шагов вычислений по формулам (24) локальная ошибка в узлах блока будет иметь порядок $O(\tau^{k+2})$. Допустим, что значения $u_{n,0}$ вычислены с локальной ошибкой $O(\tau^{k+2})$, тогда и правая часть уравнения может быть вычислена с такой же погрешностью, т. е. имеем $F^{(k+2)}$. Выполнив первый шаг вычислений по первой формуле (24), получим

$$u_{n,i,0}^{[2]} = u_{n,0}^{[k+2]} + i\tau F_{n,i,0}^{[k+2]}, i = \overline{1, k},$$

так как локальная ошибка формулы Эйлера имеет порядок $O(\tau^2)$. Параллельные вычисления по второй формуле (24) при $i=0$ дадут следующие результаты:

$$u_{n,i,1}^{[3]} = u_{n,0}^{[k+2]} + i\tau \left(b_i F_{n,0}^{[k+2]} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j,0}^{[2]} \right), i = \overline{1, k},$$

так как функции $F^{(j)} = f(t_{nj}, u^{(j)}), j = \overline{1, k}$ могут быть вычислены с локальной ошибкой $O(\tau^2)$. Вычисления на следующем шаге $s=1$ улучшат точность результатов на один порядок. Продолжая вычисления до $s = k-1$, получим результаты соответствующие локальным предельным точностям приближенных формул (24), т. е.

$$u_{n,i,k}^{[k+2]} = u_{n,0}^{[k+2]} + i\tau \left(b_i F_{n,0}^{[k+2]} + \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j,k-1}^{[k+1]} \right), i = \overline{1, k},$$

поскольку разностные уравнения (3) аппроксимируют дифференциальное уравнение (1) с порядком $O(\tau^{k+1})$. Последующие итерации повышения порядка точности результатов не дадут.

Алгоритм решения нелинейной разностной задачи методом Ньютона

Систему нелинейных уравнений (2) с неизвестными $u_{n,i-1,k}$ в фиксированном блоке n перепишем в виде

$$u_{n,i} = u_{n,0} + \tau i \sum_{j=1}^k b_{i,j} F_{n-1,j} + \tau i \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j}, \quad i = \overline{1, k}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (25)$$

Определим начальные приближения для неизвестных по формуле Адамса

$$u_{n,i}^{(0)} = u_{n,0} + i\tau \sum_{j=1}^k c_{i,j} F_{n-1,j}, \quad i = \overline{1, k}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Предположим теперь, что найдены на шаге s приближенные значения решения уравнений $u_n^{(s)}, i = \overline{1, k}$. Найдем поправки ε_n^s , уточняющие полученные приближенные значения, т. е. следующие приближенные значения будут равны

$$u_{n,i}^{(s+1)} = u_{n,i}^{(s)} + \varepsilon_{n,i}^{(s)}, \quad i = \overline{1, k}. \quad (26)$$

Подставим выражения (26) в уравнения (25) и, ограничиваясь линейными членами разложений в ряды по приращениям $\varepsilon_{n,i}^{(s)}$, получим

$$u_{n,i}^{(s)} + \varepsilon_{n,i}^{(s)} = u_{n,0} + \tau i \sum_{j=1}^k b_{i,j} F_{n-1,j} + \tau i \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j}^{(s)} + \tau i \sum_{j=1}^k a_{i,j} \varepsilon_{n,j}^{(s)} \frac{\partial F_{n,j}^{(s)}}{\partial u_{n,j}}, \quad i = \overline{1, k}, \quad (27)$$

$$\text{где } F_{n,j}^{(s)} = f(t_{n,j}, u_{n,j}^{(s)}), \quad \frac{\partial F_{n,j}^{(s)}}{\partial u_{n,j}} = \frac{\partial f(t_{n,j}, u_{n,j}^{(s)})}{\partial u_{n,j}}.$$

Таким образом, для определения поправок $\varepsilon_{n,i}^{(s)}$ получена следующая система линейных алгебраических уравнений

$$\varepsilon_{n,i}^{(s)} - \tau i \sum_{j=1}^k a_{i,j} \varepsilon_{n,j}^{(s)} \frac{\partial F_{n,j}^{(s)}}{\partial u_{n,j}} = u_{n,0} + \tau i \sum_{j=1}^k b_{i,j} F_{n-1,j} + \tau i \sum_{j=1}^k a_{i,j} F_{n,j}^{(s)} - u_{n,i}^{(s)}, \quad i = \overline{1, k}. \quad (28)$$

Используем обозначения, введенные в п.3 формула (11), для записи уравнений (28) в матричной форме.

$$(\mathbf{E} - \tau \mathbf{D} \mathbf{A} \partial \mathbf{F}_n^{(s)}) \varepsilon_n^{(s)} = u_{n,0} \mathbf{e} + \tau \mathbf{D} (\mathbf{B} \mathbf{F}_{n-1} + \mathbf{A} \mathbf{f}_n^{(s)}) - u_n^{(s)}, \quad (29)$$

здесь дополнительно введены обозначения:

\mathbf{e} - вектор столбцекомпонентами $(1, \dots, 1)$, $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, \dots, d_k)$ - диагональная матрица,

элементы которой равны соответственно $\frac{\partial F_{n,i}^{(s)}}{\partial u_{n,i}}$, $i = \overline{1, k}$.

Тогда погрешность решения задачи на s -том шаге

$$\varepsilon_n^{(s)} = (\mathbf{E} - \tau \mathbf{D} \mathbf{A} \partial \mathbf{F}_n^{(s)})^{-1} (u_{n,0} \mathbf{e} + \tau \mathbf{D} (\mathbf{B} \mathbf{F}_{n-1} + \mathbf{A} \mathbf{f}_n^{(s)}) - u_n^{(s)}) \quad (30)$$

Для одношаговых разностных методов (3) уравнение погрешности на s -том шаге можно представить в виде

$$\varepsilon_n^{(s)} = (\mathbf{E} - \tau \mathbf{D} \mathbf{A} \partial \mathbf{F}_n^{(s)})^{-1} (u_{n,0} \mathbf{e} + \tau \mathbf{D} (\mathbf{F}_{n,0} \mathbf{b} + \mathbf{A} \mathbf{f}_n^{(s)}) - u_n^{(s)}) \quad (31)$$

Пример численного решения задачи Коши

Выберем в качестве иллюстрации решения блочными методами умеренно устойчивую задачу [4]

$$x' = -10(t-1)x, \quad x(0) = 1,$$

решение которой многозначным методом приводит к значительным вычислительным погрешностям. Аналитическое решение рассматриваемой задачи имеет вид

$$x(t) = \text{Exp}(-5t(t-2)) \quad (33)$$

Найдем решение задачи (32) одношаговым (с размерностью блока $A=4$), многошаговым (с блоками 4×4) блочными методами и методом Ньютона (с размерностью блоков 4×4). Шаги интегрирования T_1 для метода (2) и T_2 для метода (3) выберем из условия (18). Для этого потребуются значения норм матриц A , приведенных в п.2.. Оценим значение константы L , найдем для уравнения (32) $\text{Sup} \frac{d^n}{dx^n}$ на отрезке интегрирования $0 < t < 2$.

Примем $L=10$. Решение выполним в системе *Mathematica*®.

Для одношагового четырехточечного метода $\|A\|_c = 1.4375$, $T_g = 4.10 \cdot 10^{-4.375} = 0.0174$. Для многошагового четырехточечного метода $\|A\|_g = 0.9857$, $T_0 = 4.10 \cdot Q_{9857} \sim 0.02536$. Шаг

для метода Ньютона выберем таким же, как и для многошагового метода. Поскольку точное решение известно (33), то по результатам приближенного решения можно оценить максимальную ошибку, которая всеми методами достигается в точке $t=1$. Сведем полученные результаты решения в таблицу, характеризующую зависимость ошибки от числа выполненных итераций, и сравним погрешность, полученную в процессе вычислений с априорной, рассчитанной по (8,10) с помощью системы *Mathematica*®.

Таблица 1. Ошибка в критической точке $t=1$ в зависимости от числа итераций

Число итераций	Максимальная ошибка одношагового многоточечного блочного метода		Максимальная ошибка многошагового многоточечного блочного метода		Максимальная ошибка блочного метода Ньютона
	Априорная	Экспер.	Априорная	Экспер.	Экспер.
1	21.445	15	0.4285	0.2987	0.2987
2	4.8223	2.3	$4.78 \cdot 10^{-3}$	$3.35 \cdot 10^{-1}$	$9.04 \cdot 10^{-1}$
3	0.4311	0.25	$7.29 \cdot 10^{-4}$	$1.05 \cdot 10^{-4}$	$1.52 \cdot 10^{-4}$
4	$2.78 \cdot 10^{-2}$	0.025	$1.49 \cdot 10^{-5}$	$2.93 \cdot 10^{-4}$	$2.01 \cdot 10^{-6}$
5	$3.59 \cdot 10^{-1}$	$2.01 \cdot 10^{-3}$	$2.80 \cdot 10^{-3}$	$7.58 \cdot 10^{-8}$	$2.4234 \cdot 10^{-7}$
6	$4.12 \cdot 10^{-1}$	$1.40 \cdot 10^{-4}$	$6.54 \cdot 10^{-7}$	$1.61 \cdot 10^{-8}$	$2.2866 \cdot 10^{-1}$
7	$7.97 \cdot 10^{-3}$	$7.02 \cdot 10^{-6}$	$1.42 \cdot 10^{-7}$	$1.15 \cdot 10^{-8}$	$2.2849 \cdot 10^{-7}$

Решение задачи (32) методом Рунге- Кутты четвертого порядка точности шагом m , дает максимальную ошибку равную $s=0.00168$, что значительно хуже, чем в одношаговом блочном методе, максимальная ошибка которого самая высокая среди приведенных в таблице значений. Максимальная ошибка многошагового блочного метода и метода Ньютона значительно меньше, хотя интегрирование было выполнено с большим шагом.

Заключение

Для параллельного выполнения вычислений по формулам (22) и (24) будем использовать вычислительную систему SIMD-структуры с линейкой процессорных элементов [5]. При реализации алгоритма каждый процессорный элемент может выполнить любую арифметическую операцию за один такт; временные затраты, связанные с обращением к запоминающему устройству, отсутствуют. Для простоты

изложения рассматривается случай, когда количество процессорных элементов совпадает с размерностью блока. Закрепим за каждым узлом блока процессор. При реализации алгоритма на k процессорах можно одновременно вычислять значения правых частей F_{i+iiA} , а затем, также одновременно, получить по формулам (22) значения u_m, i_s для каждого фиксированного номера итерации s . Объединим процессоры в кольцо, чтобы иметь возможность одновременной передачи данных соседним процессорам.

Ускорение параллельных многоточечных алгоритмов можно будет теперь вычислить по формуле $WO^{\wedge}) = T_s / T_p$. Для оценки ускорения определим времена выполнения алгоритмов, описываемых формулами (22) и (24) на одном процессоре. Обозначим через t_{ad} - время передачи числа соседнему процессору, через t_{\wedge} - время вычисления значения функции $f(t, x)$, t_{ad} , t_{mur} время выполнения операций сложения и умножения соответственно. Время последовательного вычисления приближенных значений решения по формулам (22) с локальной точностью $O(\tau^{2i+1})$ составит

$$T_{\wedge, \text{одношаг}} = k(2k+1) t_{\wedge} + 4k^2 t_{ad} + 2k(2k+1) t_{mur}$$

Время вычисления с локальной точностью $O(x^{k+2})$ во всех k узлах блока по формулам (24) на одном процессоре составит

$$T_{\wedge \text{одношаг}} = O(\tau^{k+1}) t_{\wedge} + k[kf(t-l) + 2] t_{ad} + (k+1) t_{mur}$$

Время параллельного вычисления приближенных значений решения с той же точностью для всех узлов блока составит в первом случае

$$T_{\wedge \text{многшаг}} = 2kf(t) t_{\wedge} + 2[k(2k+1) + 1] t_{ad} + 3[k(2k+1) + 1] t_{mur} + k(2k+1) t_{ad}$$

$$T_{\wedge \text{многшаг}} = (k+1) t_{\wedge} + 0 \leq -k+3 t_{ad} + 0 \leq +3 t_{mur} + k(2k+1) t_{ad}$$

Если учитывать только время вычислений правой части уравнений, т.к. времена выполнения арифметических операций и обмена значительно меньше, то ускорение к точечного многошагового параллельного алгоритма можно считать приближенно равным

$$T_{\wedge \text{многшаг}} \sim k(2k+1)/(2k+1) \sim k$$

Ускорение параллельного одношагового к точечного алгоритма можно будет теперь считать приближенно равным

$$W_i \sim (f(c+1) / 0 c + 1) \sim k$$

В качестве еще одной оценки степени параллелизма алгоритма используется коэффициент эффективности, который определяется отношением ускорения к числу используемых процессорных элементов. Нетрудно видеть, что для двух типов рассмотренных в статье блочных методов этот коэффициент близок к единице.

Литература

1. Системы параллельной обработки: Пер. с англ./ Под. ред. Ивенса Д.- М.: Мир, 1985-416с.
2. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы.- М.: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989.-432 с.
3. Фельдман Л.П. Сходимость и оценка погрешности параллельных одношаговых блочных методов моделирования динамических систем с сосредоточенными параметрами Научн. тр. ДонДТУ. Серия: Проблемы моделирования и автоматизации проектирования динамических систем, выпуск 10: - Донецк:, 2000, с. 15-22.
4. Каханер Д., Моулдер К., Нэш С. Численные методы и математическое обеспечение: Пер. с англ.-М.: Мир, 1998.- 575 с.
5. Дмитриева О.А. Анализ параллельных алгоритмов численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений методами Адамса-Башфорта и Адамса-Моултона.// Математическое моделирование 2000, Т. 12, № 5, с. 81-86.