УДК 681.3

О. А. Дмитриева, канд. техн. наук
Донецкий национальный технический университет
(Украина, 83000, Донецк, ул. Артема, 58,
тел.: (062) 3010757, E-mail: dmitriv@r5.dgtu.donetsk.ua)

Об особенностях моделирования линейных динамических систем в многопроцессорных средах

Предложены подходы, позволяющие избегать последовательных участков работы многопроцессорных вычислительных систем. Первый подход основан на предварительном вычислении правых частей неоднородной линейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений, второй — на предварительном интерполировании правых частей системы с помощью сплайнов. Выявлены соотношения между порядками погрешностей методов численного интегрирования и методов интерполирования, которые позволяют осуществить оптимальный выбор подхода к параллельной реализации решения системы.

Запропоновано підходи, що дозволяють уникати послідовних ділянок роботи багатопроцесорних обчислювальних систем. Перший підхід базується на попередньому обчислюванні правих частин неоднорідної лінійної системи звичайних диференціальних рівнянь, другий — на попередній інтерполяції правих частин системи за допомогою сплайнів. Виявлено співвідношення між порядками похибок методів чисельного інтегрування і методів інтерполяції, що дозволяють здійснити оптимальний вибір підходу до паралельної реалізації розв’язування системи.

К л ю ч е в ы е с л о в а: параллельные вычисления, обыкновенные дифференциальные уравнения, неоднородная система, задача приближения, интерполирование, сплайны.

Необходимость адаптации известных численных методов решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) в вычислительных системах с параллельной архитектурой обусловлена множеством обстоятельств, к которым, в первую очередь, следует отнести тот факт, что более высокая скорость решения достигается в результате рациональной организации распараллеливания вычислений. Необходимо также отметить, что математические модели большинства научных и инженерных задач чаще всего представляют собой системы дифференциальных уравнений, как обыкновенных, так и в частных производных. Неслучайно в последние годы значительно возросло число работ по теории параллельных вычислений. Однако приходится признать, что на параллельных машинах используются, главным образом, старые, хорошо исследованные и многократно апробированные последовательные алгоритмы, которые специальным образом реструктуризированы [1]. Реструктуризация алгоритмов на уровне отдельных операций — это основная идея, которая в настоящее время активно используется при согласовании свойств программ и компьютеров для получения максимальной реальной производительности.

Данная работа является продолжением работ [2—8], которые посвящены исследованию параллельных алгоритмов численного решения систем ОДУ, используемых для моделирования сложных динамических систем с сосредоточенными параметрами. Предлагаемые алгоритмы ориентированы на использование в многопроцессорных вычислительных системах SIMD (single instruction stream — multiple data stream) структуры с решеткой или линейкой процессорных элементов. Набор процессоров известен до начала вычислений и не меняется в процессе счета, при этом каждый процессорный элемент может выполнить любую арифметическую операцию за один такт, временные затраты, связанные с обращением к запоминающему устройству, отсутствуют.

1. Постановка задачи. Представим математическую модель динамической системы в виде системы ОДУ с постоянными коэффициентами и начальными условиями:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = A\mathbf{x} + \mathbf{f}(t), \;\; \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}^0 = (x_1^0, x_2^0, ..., x_m^0)^t, \tag{1}$$

где $\mathbf{x}$ — вектор неизвестных сигналов; $\mathbf{f}(t)$ —вектор воздействий, $t \in [0, T]$; A — матрица коэффициентов системы. Здесь вычисление значения вектора неизвестных $\mathbf{x}^{n+1}$ на очередном шаге требует предварительного определения значений $\mathbf{x}^n$. В [3] рассмотрены вопросы, связанные с возможностью параллельной реализации таких алгоритмов. В частности, если система (1) является однородной, т.е. $f_i(t) = 0$, i = 1, 2, ..., m, то в зависимости от выбранного метода интегрирования, можно искать решение в виде

$$\mathbf{x}^{n+1} = G\mathbf{x}^n,$$

где G — оператор (матрица) переходов.

Полученный оператор перехода G, который необходимо определить один раз до начала вычислений, позволяет вычислять значения вектора неизвестных параллельно [3, 5]. Например, для методов Рунге—Кутты, этот оператор, в зависимости от точности метода, может иметь вид

$$G = E + \tau A\left(E + \frac{\tau A}{2}\left(E + \frac{\tau A}{3}\left(E + \frac{\tau A}{4}\right)\right)\right),$$

обеспечивающий точность 4-го порядка, или

$$G = E + \tau A\left(E + \frac{\tau A}{2}\left(E + \frac{\tau A}{3}\left(E + \frac{\tau A}{4}\left(E - \frac{\tau A}{5}\left(E - \frac{\tau A}{3}\right)\right)\right)\right)\right),$$

точность которого оценивается 6-м порядком.

При решении неоднородной системы необходимо на каждом шаге дополнительно вычислить значения всех функций $f_i(t) = 0,\ i = \overline{1,m}$, в нескольких промежуточных точках. Поскольку эти функции могут быть различными, одновременное вычисление их на SIMD компьютере невозможно. Поэтому предлагаются два различных подхода, позволяющих избежать последовательных участков счета.

2. Предварительное вычисление правых частей системы. Учитывая специфику задачи (1), а именно, независимость вектора воздействий от значений неизвестных сигналов, можно все промежуточные значения функций $\mathbf{f}_i(t)$ вычислить заранее. При этом, обозначив число промежуточных точек метода, можно оценить число тактов расчета на топологических структурах: линейке из m процессоров и решетке из $m \times m$ процессоров (размерность процессорного поля выбрана совпадающей с размерностью системы уравнений исключительно для удобства изложения). Обозначим Θ_{f_i} трудоемкость реализации правых частей системы и при расчете будем оперировать с максимальным значением $\Theta_f = \max\limits_i\{\Theta_{f_i}\}$. Если расчет осуществляется для общего числа узлов, равного N, то общее число тактов работы на линейке процессоров составит для одного уравнения ближайшее целое сверху к соотношению $\frac{r\,\Theta_f N}{m}$ или $\left\lceil \frac{r\,\Theta_f N}{m} \right\rceil + 1$. Тогда вся система может быть рассчитана за $r\,\Theta_f\, N + m$ тактов. На решетке процессоров одно уравнение будет решаться за ближайшее целое сверху к $\left\lceil \frac{r\,\Theta_f N}{m^2} \right\rceil$ число тактов, а время, которое потребуется для расчета всей системы составит $\left\lceil \frac{r\,\Theta_f N}{m} \right\rceil + 1$. По каждому уравнению системы придется хранить двумерные массивы размерностью $r \times N$ и использовать при расчете коэффициенты с нужными индексами.

При моделировании характеристик параллелизма рассматривались зависимости ускорения S и коэффициента эффективности E от размерности системы обыкновенных дифференциальных уравнений m и трудоемкости реализации правой части Q. На рис. 1, *а*, приведены кривые ускорения, а на рис. 1, *б* — кривые коэффициента эффективности для топологии 2D-тор при предварительном вычислении правых частей системы. Как видно из

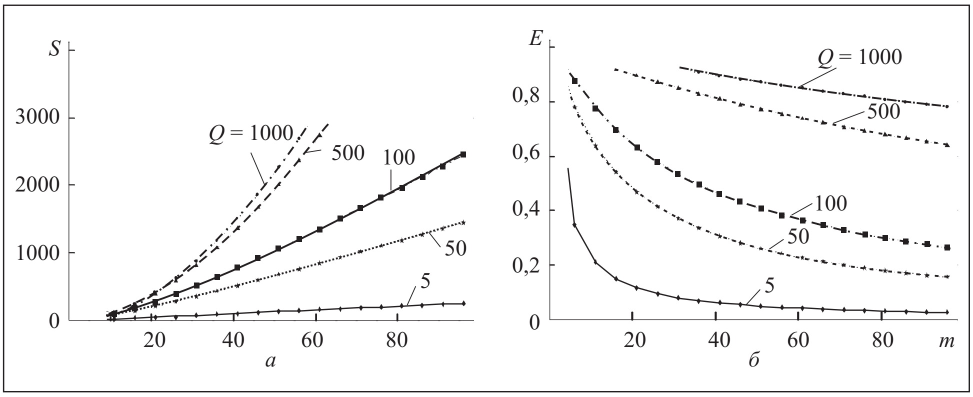

Рис. 1. Графики зависимостей ускорения (*а*) и коэффициенты эффективности (*б*) для решетки процессорных элементов

рис. 1, лучшие показатели параллелизма достигаются для систем, реализация правых частей которых требует высокой трудоемкости.

3. Интерполирование правых частей системы. Второй подход, позволяющий избежать последовательных участков при параллельной реализации системы, основан на предварительном интерполировании правых частей (1). В вычислительной практике необходимость в таком подходе возникает, если приходится заменять одну функцию $f(t)$ (известную, неизвестную или частично известную) некоторой функцией $\varphi(t)$, близкой к $f(t)$ и обладающей определенными свойствами, позволяющими выполнять с нею те или иные аналитические либо вычислительные операции. Такую замену называют приближением функции $f(t)$. Тогда при решении задачи вместо функции $f(t)$ оперируют с функцией $\varphi(t)$, а задача построения функции $\varphi(t)$ называется задачей приближения. При этом функцию $\varphi(t)$ можно построить таким образом, чтобы в заданных точках $t_0, t_1, ..., t_T$ она принимала значения, совпадающие с $f(t_0), f(t_1), ..., f(t_T)$, а в других точках промежутка $[0, T]$ приближенно представляла функцию $f(t)$ с той или иной степенью точности.

Принимая во внимание большое число рассчитываемых узлов и задаваясь требуемой точностью приближения функций, можно утверждать, что наиболее перспективным является случай, когда используются кусочно-полиномиальная аппроксимация, или сплайны, так как при этом интерполяционные многочлены действуют не на всем интервале решения задачи, а на подынтервалах, что позволяет избежать накопления ошибок приближения.

Основная идея такого подхода заключается в следующем: исходный отрезок решения для (1) $[0, T]$ разбивается на несколько подынтервалов V с

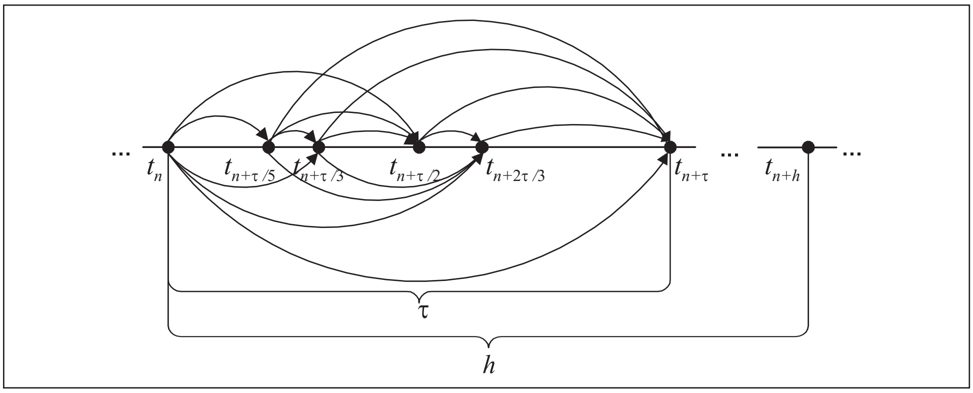

Рис. 2. Схема расчета правых частей (1) с промежуточными точками

шагом, определяемым из соотношения точности методов численного интерполирования и интегрирования (рис. 2), а затем на каждом таком интервале строится интерполяционный многочлен. Поскольку в качестве интерполяционной функции обычно выбирают многочлены не выше 4-й степени, что соответствующим образом влияет на точность интерполяции, необходимо предварительно согласовать порядки точности методов численного интегрирования и предварительного интерполирования.

Если порядок метода численного интегрирования системы (1) определяется как $O(\tau^{\nu})$, а порядок сплайна как $O(h^4)$, то между шагами двух решаемых задач должно выполняться соотношение $\tau^{\nu} = h^4$. Если порядок точности метода интегрирования ν равен четырем или более, т. е. между числом узлов задач интерполирования и интегрирования выполняется соотношение $V \geq N$, то использование интерполирования для восстановления значений правых частей является нерациональным. В этом случае проще заранее вычислить значения правых частей на промежутке $[0, T]$. Если метод интегрирования имеет порядок погрешности меньше четырех, то тогда $V < N$ и связь значений V и N можно представить с помощью некоторого коэффициента β:

$$N = \beta V, \tag{2}$$

где $\beta > 1$. При этом желательно выбирать множитель β целым, так как на одном такте расчета предпочтительнее использовать коэффициенты одного интервала сплайна, что значительно упростит алгоритм вычисления и выбор нужного интервала по заданному аргументу.

Согласно (2) узлов интерполирования в β раз меньше, чем узлов интегрирования. Кроме того, оценку погрешности для сплайна порядка

$O(h^4)$ можно считать завышенной. Тогда исходная задача может быть сведена к двум подзадачам, каждая из которых легко распараллеливается.

Первая подзадача заключается в нахождении коэффициентов сплайна. Замену исходных функций $f_i(t)$ в (1) на сплайн-функции осуществляем в виде

$$a_{il}+b_{il}t+c_{il}t^2+d_{il}t^3+e_{il}t^4,\ \ i=\overline{1,m},\ \ l=\overline{1,V}.$$

Тогда, реализуя вторую подзадачу, вместо разнородных операций (которые на SIMD структурах выполняются последовательно) все правые части системы (1) будем считать параллельно по одним и тем же аргументам t, но с разными коэффициентами сплайн-функций $a_{il}, b_{il}, c_{il}, d_{il}, e_{il}$, $i=\overline{1,m}$, $l=\overline{1,V}$.

Для нахождения неизвестных коэффициентов по каждому уравнению системы (1) придется решать систему линейных алгебраических уравнений размерностью $4V\times 4V$. При формировании системы линейных уравнений будем исходить из принципов совпадения значений функции, ее первых, вторых и третьих производных на соседних подынтервалах слева и справа от узла интерполяции.

Пусть $\{p_l\}$ — множество узлов интерполяции, $l=\overline{0,V}$. Причем, для любой правой части системы (1) это множество узлов — величина постоянная. Между узлами p_{l-1} и p_l функцию i-го уравнения системы представим в виде

$$S_i(p)=a_{il}+b_{il}(p-p_{l-1})+c_{il}(p-p_{l-1})^2+d_{il}(p-p_{l-1})^3+e_{il}(p-p_{l-1})^4,$$

$$p_{l-1}\le p\le p_l,\ \ i=\overline{1,m},\ \ l=\overline{1,V}. \tag{3}$$

Исходя из постановки задачи интерполирования, в узлах интерполяции значения исходной функции и интерполяционного многочлена совпадают, т.е.

$$S_i(p_l)=f_{il},\ \ i=\overline{1,m},\ \ l=\overline{1,V}. \tag{4}$$

Однако, если аргумент сплайна совпадает с узлом интерполяции, то из (3) и (4) следует $S_i(p_{l-1})=a_{il}=f_{il-1}$, $i=\overline{1,m}$, $l=\overline{1,V}$. Поскольку интерполяционный многочлен вводится для равноотстоящих узлов, т. е. $p_l-p_{l-1}=h$, используя полученные соотношения, можно переписать формулу для сплайна в l-м узле в виде $f_{il}=f_{il-1}+b_{il}h++c_{il}h^2+d_{il}h^3+e_{il}h^4$.

Для построения остальных соотношений воспользуемся предположением о совпадении 1-й, 2-й и 3-й производных справа и слева от узлов интерполяции, т.е. для первых производных:

$$S_i'(p) = b_{il} + 2c_{il}(p - p_{l-1}) + 3d_{il}(p - p_{l-1})^2 + 4e_{il}(p - p_{l-1})^3,\ p_{l-1} \le p \le p_l,$$

$$S_i'(p) = b_{il+1} + 2c_{il+1}(p - p_l) + 3d_{il+1}(p - p_l)^2 + 4e_{il}(p - p_l)^3,$$

$$p_l \le p \le p_{l+1}. \tag{5}$$

Для каждого уравнения системы (1) запишем (5) в точке p_l.Тогда

$$b_{il+1} = b_{il} + 2c_{il}h + 3d_{il}h^2 + 4e_{il}h^3.$$

Приравнивая значения полученных выражений для 2-й и 3-й производных в узлах интерполяции и добавляя граничные условия, аналогично получаем m систем линейных уравнений.

Сформированные системы относительно вектора неизвестных коэффициентов в общем виде представим так:

$$Q_i \mathbf{y}_i = \boldsymbol{g}_i,\ i = \overline{1, m}, \tag{6}$$

где $\mathbf{y}_i = (a_{i1}, b_{i1}, c_{i1}, d_{i1}, e_{i1}, \ldots, a_{iV}, b_{iV}, c_{iV}, d_{iV}, e_{iV}),\ i = \overline{1, m}.$

Особенностью полученных систем является ленточный вид матрицы Q, так как каждое уравнение системы (за исключением первого и последнего) содержит только четыре неизвестных. В этом случае система преобразуется так, чтобы ее можно было решать методом встречной прогонки [9]. Трудоемкость решения таких систем на параллельных SIMD структурах линейно зависит от размерности решаемой системы. Для системы размерностью k она оценивается как $Q(k)$. Следовательно, для рассмотренного случая трудоемкость нахождения коэффициентов сплайн-функции для одного уравнения системы составит $O(4V)$. Тогда для исходной задачи (1) число операций приблизительно будет $4Vm$.

Еще один возможный подход к решению системы (6), имеющей большую размерность и разреженную матрицу коэффициентов, заключается в приведении ее к блочно-диагональной форме с обрамлением [7, 10] и формировании вспомогательной системы значительно меньшей размерности, относительно вектора определяющих величин, или переменных связи. Трудоемкость реализации такого подхода на параллельных вычислительных структурах будет, как и в предыдущем случае, линейно зависеть от размерности системы.

Для интерполирования необходимо предварительно вычислить значения правых частей в V точках, которые будут использоваться в качестве исходных данных для построения интерполяционного многочлена. Тогда для системы из m уравнений потребуется $m(4V + V\Theta_f)$ тактов. Возникает также необходимость в восстановлении значений правых частей по полученным коэффициентам интерполяционных многочленов в N основных и

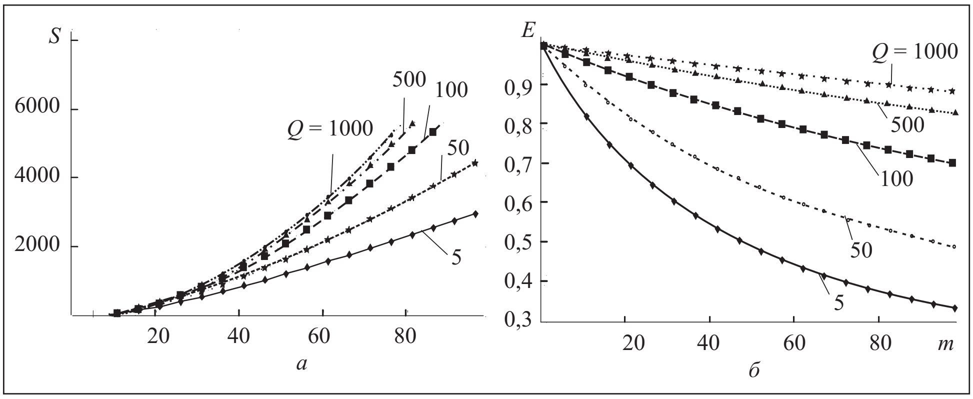

Рис. 3. Графики зависимостей ускорения (*а*) и коэффициента эффективности (*б*) для топологии 2D-тор при предварительном интерполировании правых частей системы

r вспомогательных узлах интегрирования. При этом последовательность выполняемых операций на SIMD структуре для многочлена общего вида $a+bt+ct^2+dt^3+et^4$ будет такой:

умножения

1-й такт — $t\,t$,

2-й такт — t^2t, t^2t^2— параллельно.

3-й такт — bt, ct^2, dt^3, et^4 — параллельно,

сложения

4-й такт — $a+bt, ct^2+dt^3$,

5-й такт — $a+bt+ct^2+dt^3+et^4$.

Таким образом, на определение одного значения правой части требуется пять временных тактов. Если учесть, что число точек, в которых необходимо восстанавливать значение правой части каждого уравнения определяется как rN, то всего на восстановление значений функции по интерполяционному многочлену для системы потребуется $5mrN$ временных тактов.

Сравнительные оценки числа операций при двух подходах на параллельных топологиях

Число операций	Предварительный расчет	Интерполирование
Общее	$r\Theta_f N\, m$	$m\,(4V + V\Theta_f + 5rN)$
На топологии 1D-тор	$[r\Theta_f N]+1$	$4V + V\Theta_f + 5rN$
На топологии 2D-тор	$\left[\dfrac{r\Theta_f N}{m}\right]+1$	$(4V + V\Theta_f + 5rN)\,/\,m$

При моделировании характеристик параллелизма с использованием подхода, ориентированного на предварительное интерполирование правых частей системы, рассматривались те же зависимости ускорения S и коэффициента эффективности E, что и в разделе 2. Для интегрирования использован двухстадийный метод. На рис. 3 приведены зависимости ускорения и эффективности для решетки процессорных элементов, из которых видно, что лучшие показатели параллелизма достигаются для систем, реализация правых частей которых требует высокой трудоемкости.

Полученные приближенные результаты двух описанных способов реализации правых частей приведены в таблице.

Поскольку изначально предполагалось, что трудоемкости вычисления правых частей Θ_f — высокие [6], оценку трудоемкости всего алгоритма можно осуществлять относительно этих значений. Тогда, в случае выполнения соотношения (2), предпочтительнее интерполировать правые части. Этот подход хотя и сопряжен с алгоритмическими сложностями, однако имеет безусловные преимущества.

4. Выводы. Использование операторов перехода для методов с контролем погрешности на шаге позволяет осуществлять распараллеливание алгоритмов численного решения линейных систем ОДУ. Операторы перехода для систем определяются один раз и дают возможность в несколько раз (в зависимости от порядка точности исходного метода) сократить число матричных операций, выполняемых на каждом шаге. При этом для умножения матриц используются модифицированные параллельные алгоритмы [3], позволяющие в два раза сократить число обменов между процессорными элементами, выполняемых на каждом шаге. Сокращение числа обменов достигается в результате изменения порядка начальной загрузки значений коэффициентов матриц в решающее поле микропроцессоров параллельных вычислительных систем.

Предложенные подходы позволяют избегать последовательных участков работы многопроцессорных вычислительных SIMD систем. Один из них основан на предварительном вычислении правых частей неоднородной линейной системы ОДУ. Он тем более эффективен, если точность метода интегрирования, с помощью которого решается задача, высока. Другой подход, исключающий последовательные вычисления, основан на предварительном интерполировании правых частей системы (1) с помощью сплайнов. Выявленные соотношения между порядками погрешностей методов численного интегрирования системы (1) и методами интерполирования позволяют определить оптимальный выбор метода параллельной реализации правых частей.

The approaches are proposed which allow to avoid the sequential sections of multiprocessor computer work. The first approach is based on the preliminary computation of right parts of the nonuniform linear system of the ordinary differential equations. The second approach is based on the preliminary interpolation of right parts of the system by splines. The relations between error orders of the numerical integration and interpolation methods are found which permit the optimal choice of the approach to the parallel realization of the system solution.

1. *Воеводин В. В.* Информационная структура алгоритмов. — М.: Изд. МГУ, 1997. — 139 с.
2. *Feldman L., Dmitrieva O., Gerber S.* Abbildung der blockartigen Algoritmen auf die Parallelrechnerarchitekture // 16 Symposium Simulationstechnik ASIM 2002, Rostock, 10.09 bis 13.09.2002. — Erlangen: Gruner Druck, 2002. — P. 359—364.
3. *Дмитриева О. А.* Анализ параллельных алгоритмов численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений методами Адамса—Башфорта и Адамса—Моултона // Математическое моделирование. — 2000. — **12**, № 5. — С. 81—86.
4. *Дмитриева О. А.* Параллельное моделирование динамических объектов с сосредоточенными параметрами // Тез. докл. XII Юбилейной международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным средствам. — М. : МГИУ, 2003. — С. 242—243.
5. *Дмитриева О. А.* Параллельные блочные многошаговые алгоритмы численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности // Науч. тр. Донецкого гос. техн. ун-та. Серия: Проблемы моделирования и автоматизации проектирования динамических систем. Вып. 15: — ДонГУ. — Донецк: 2000. — С. 53—58.
6. *Дмитриева О. А.* Особенности параллельной реализации динамических моделей // Вісн. Східноукраїнського національного ун-ту ім. Володимира Даля. — 2005. — № 5 (87). — С. 61—68.
7. *Дмитриева О. А.* Распределение ресурсов многопроцессорных систем при работе с разреженными матрицами коэффициентов//Материалы междунар. науч.-техн. конф. «Интеллектуальные и многопроцессорные системы 2005», 26 сент. — 1 окт. 2005 г. — Таганрог : Изд. ТРТУ. — С. 162—166.
8. *Фельдман Л. П., Дмитриева О. А.* Эффективные методы распараллеливания численного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений // Математическое моделирование. — 2001. — **13**, № 7, — С. 66—72.
9. *Гаранжа В. А., Коньшин В. Н.* Прикладные аспекты параллельных высокоточных алгоритмов решения задач вычислительной гидродинамики// Тез. докл. Всерос. науч. конф. «Фундаментальные и прикладные аспекты разработки больших распределенных программных комплексов». — М. : Изд-во МГУ, 1998. — С. 34—38.
10. *Джорт А., Лю Д.* Численное решение больших разреженных систем уравнений. — М.: Мир, 1984. — 333 с.

Поступила 04.09.06;
после доработки 26.12.06

ДМИТРИЕВА Ольга Анатольевна, канд. техн. наук, доцент кафедры прикладной математики и информатики Донецкого национального технического университета. В 1988 г. окончила Донецкий политехнический ин-т. Область научных исследований — моделирование динамических систем большой размерности с сосредоточенными параметрами, разработка численных алгоритмов, ориентированных на реализацию в многопроцессорных вычислительных системах.