РОЗДІЛ 1

ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ІНФОРМАТИКИ, ОБЧИСЛЮВАЛЬНОЇ ТЕХНІКИ ТА КІБЕРНЕТИКИ

УДК 621.38:681.5.09

В. В. Ладогубец,
кадидат технічних наук,
А. В. Крамар,
А. Д. Финогенов

МЕТОДЫ ВЫБОРА РАЗМЕРА ШАГА ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО АЛГОРИТМА ДИНАМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Рассмотрен метод численного интегрирования на основе разностей высших порядков с использованием всех доступных порядков и набора размеров шага. Предложены пять различных способов выбора лучшего значения рабочей точки из результатов, полученных на шаге интегрирования. Проанализированы их преимущества и недостатки, даны рекомендации по их применению на мультипроцессорных вычислительных системах.

Ключевые слова: численное интегрирование, параллельные вычисления.

Постановка проблемы выбора метода интегрирования. Использование возможностей мультипроцессорных вычислительных систем (МВС) возможно не только с точки зрения уменьшения времени решения поставленной задачи, но и с точки зрения повышения надежности тех операций, от которых зависит конечный результат. Для схемотехнических САПР в первую очередь это процедуры динамического анализа, которые часто являются лишь входными данными или составной частью других видов анализа электронных схем (например, процедур оптимизации, анализа чувствительности и т.д.).

В работах [1–3] рассматривались основные источники снижения надежности метода численного интегрирования на основе разностей высших порядков, к которым относятся:

1. Алгоритм выбора порядка метода.

Согласно [4] для выбора порядка метода K_{n+1} прогнозируется погрешность каждой составляющей вектора переменных x размерностью N для методов 1,2,…,(K_{n+1}) порядков:

$$\varepsilon_i^{(1)},\varepsilon_i^{(2)},\ldots,\varepsilon_i^{(j)},\qquad i=1(1)N, j=1(1)K_n+1,$$

где

$$\varepsilon_i^{(j)}=\frac{h}{t_{n+1}-t_{n-j}}(x_{(n+1)i}-x_{(n+1)i}^{(0)}),\tag{1}$$

– ошибка формулы дифференцирования, которая пропорциональна разности между точным значением решения уравнения $f(\dot{x},x,t)=0$ в точке t_{n+1} и прогнозированным значением $x_{(n+1)i}^{(0)}$, которые вычисляются по соотношениям:

$$x^{(0)}_{(n+1)i}=\sum_{j=o}^{K_n} p_j \delta^j_n x^i_{(n)i}, i=1(1)N,$$

$$p_j=p_{j-1}\frac{t_{n+1}-t_{n+1-j}}{t_n-t_{n-j}}, \quad j=1,..,K_n,$$

где δ^j_n — разностный оператор [5], причем $\delta^0_n=1;\ p_0=1$.

Среди вычисленных погрешностей выбираются погрешности, соответствующие наименее точным компонентам вектора x,

$$e^j=\max_i(\varepsilon^{(j)}_i), \quad i=1(1)N, j=1(1)K_n+1$$

и порядок метода выбирается равным порядку, при котором величина e^j минимальна.

$$K_{n+1}=j:\min_j(e^j), \quad j=1(1)K_n+1.$$

2. Алгоритм выбора шага.

$$h_{n+1}=\sqrt[K_{n+1}]{\frac{e_i}{E_{iK}}}h_n, \tag{2}$$

где $e_i=|\varepsilon\cdot x_i|$;

$$E_{ik}=\left|\frac{h}{t_{n+1}-t_{n-K_{n+1}}}\left(x_{(n+1)i}-x^{(0)}_{(n+1)i}\right)\right| \tag{3}$$

где ε — допустимая относительная погрешность, i — номер компоненты вектора x, t — время, K_{n+1} — порядок метода, n — номер временного шага, $x^{(0)}_{(n+1)i}$ — прогнозированное значение, E_{ik} — ошибка формулы дифференцирования.

Для устранения погрешностей базовых соотношений было предложено использование всех доступных порядков и вариацию размера шага на каждом временном шаге [2]. При этом вычисления на выборке $[K\times h]$ независимы друг от друга и могут рассчитываться параллельно.

В этом случае ключевым этапом является определение лучшего значения по результатам выборки, на котором возможны следующие варианты оценок:

1) по минимальной локальной погрешности $\min(\varepsilon^j)$;

2) по максимальному следующему шагу $\max(h_{n+1})$;

3) по минимальной локальной погрешности с максимальным следующим шагом $\min(\varepsilon^j)$ & $\max(h_{n+1})$;

4) по максимальному прогнозированному значению по времени $\max(T_n+h_{n+1})$;

5) по минимальному количеству итераций Ньютона min(*isi*1).

Необходимо учитывать, что на практике в алгоритмы численного интегрирования вводятся дополнительные ограничения, которые могут повлиять на результаты расчетов. Например, в случае малой погрешности вместо ε^j используется заранее заданная константа; при большом количестве итераций Ньютона на шаге используется коэффициент уменьшения шага и т.д. Данные меры принимаются как для обеспечения численной устойчивости процедуры, так и сходимости самого метода. При этом возможна ситуация, когда при нескольких порядках будет достигнута требуемая точность решения и локальная погрешность будет практически одинакова, но размер шага для наиболее точного решения будет уменьшен в связи с превышением заданного количества итераций Ньютона на шаге.

Рассмотрим основные преимущества и недостатки предложенных способов оценки лучшего варианта для метода с вариацией как порядка, так и шага метода. При выборе лучшего результата подразумевается, что оценка производится только для принятых шагов.

1. Оценка по минимальной локальной погрешности min (ε^j).

Использование в качестве базового критерия минимальной локальной погрешности рассчитано на максимизацию следующего шага при использовании (2). Основной недостаток данного способа выбора лучшего решения проявляется при использовании алгоритмов с вариацией шага. Очевидно, что при сходимости итерационного процесса, с уменьшением размера шага будет уменьшаться погрешность решения (1), что приведет к использованию малых размеров шагов из выборки и увеличит вычислительные затраты. Однако возможно использование данного способа оценки для алгоритма, использующего только вариацию порядка метода.

2. Оценка по максимальному следующему шагу max(h_{n+1})**.**

Для алгоритмов с вариацией порядка данная оценка часто совпадает с оценкой по минимальной локальной погрешности [2]. Действительно, согласно (2) максимизация размера шага достигается при минимизации локальной погрешности (3). Различия между оценкой по минимальной локальной погрешности и максимальному следующему шагу сказываются в случае использования коэффициента уменьшения при превышении заданного количества итераций на шаге (коэффициент демпфирования). В случае если для одного из порядков при определении следующего размера шага использовался коэффициент уменьшения, он автоматически будет исключен. Однако такая ситуация чаще всего свидетельствует о том, что размер шага становится слишком большим и сходимость процесса интегрирования ухудшается, что может привести к росту количества итераций Ньютона. При этом для данной оценки свойственны недостатки оценки по минимальной локальной погрешности при использовании выборки шагов.

3. Оценка по минимальной локальной погрешности с максимальным следующим шагом min(ε^j) & max(h_{n+1}).

Идея данного способа оценки состоит в том, что если хотя бы для одного из порядков метода следующий шаг максимален из всей выборки, то использование при этом данных, при которых была получена минимальная погрешность, должно улучшить сходимость для выбранного размера шага (рис. 1). В целом данный способ оценки, который по существу является комбинацией предыдущих, продемонстрировал достаточно неплохую эффективность для алгоритма с вариацией порядка [3].

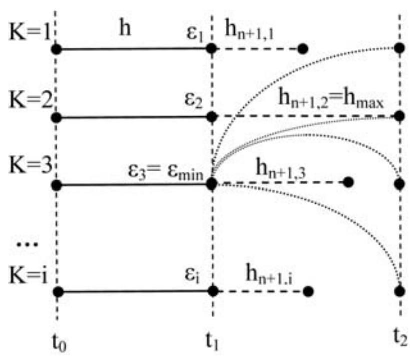

Рис. 1 — Выбор лучшего при вариации порядка метода

Однако в случае вариации шага возможна ситуация, когда минимальная погрешность получена при меньшем значении размера шага из выборки. Если при этом решение с большим размером шага даст при расчете больший размер прогнозированного значения h_{n+1}, то данный способ оценки будет эквивалентен проведению анализа на выборке с вариацией размера шага с увеличением (рис. 2) и может привести к снижению устойчивости и срыву процедуры анализа.

В общем случае область применения способов оценки лучшего варианта 1–3 ограничена методами с вариацией порядка и иногда (оценка 2) вариацией размера шага. При одновременном варьировании и шага, и порядка метода использование данных оценок затруднено, а в ряде случаев невозможно. Поэтому для их применения необходимо использовать некоторые ограничения при рассмотрении результатов, полученных на выборке. Например, определять лучший из вариантов по минимальной локальной погрешности в пределах одного размера шага или проводить оценку среди одного порядка метода при различных шагах и по максимальному спрогнозированному размеру шага и т.д.

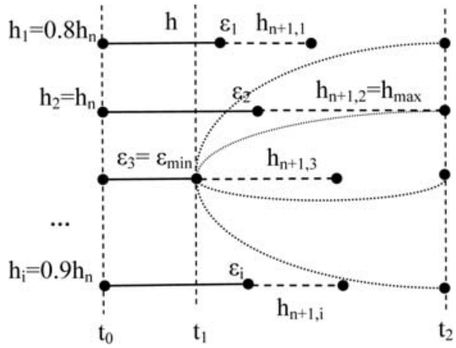

Рис. 2 — Выбор лучшего при вариации шага метода

4. Оценка по максимальному прогнозированному значению по времени $\max(T_n + h_{n+1})$***.***

Преимущество данной оценки заключается в том, что она позволяет сравнивать результаты, полученные при вариации порядка и шага метода. При этом достигается максимальное прогнозированное продвижение по времени интегрирования. Однако данный способ оценки не позволяет использовать выборки с большим разбросом шага, т.к. хорошая сходимость и большой прогнозированный размер шага h_{n+1} может компенсироваться большим значением текущего времени T_n для большего размера шага h_n.

Положим, что используется выборка из двух размеров шагов h = [h, 0,5h] и по результатам расчетов оба шага были приняты и, соответственно, получены два значения времени для следующего шага: t_1^1 — для шага 0.5h_n и t_1^2 — для шага h_n. Допустим, что в случае минимального значения погрешности $\varepsilon = \varepsilon_{min}$ шаг максимально может увеличиться в 2 раза (для сохранения устойчивости метода), а в случае максимальной допустимой погрешности $\varepsilon = \varepsilon_{max}$, при которой еще соблюдается условие принятия шага, уменьшиться не более чем в 2 раза. Пусть для шага $h_1 = 0,5h_n$ в точке t_1^1 значение погрешности будет $\varepsilon_1 = \varepsilon_{min}$, а для шага $h_2 = h_n$ в точке t_1^2 значение погрешности составляет $\varepsilon_2 = \varepsilon_{max}$. В этом случае прогнозированное время t_2 составит $t_2 = t_0 + 1,5h$ (рис. 3).

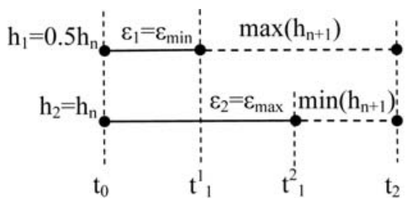

Рис. 3 — Ограничение на вариацию размера шага

Очевидно, что при изменении значений погрешностей $\varepsilon_1 > \varepsilon_{min}$ или $\varepsilon_1 < \varepsilon_{max}$, вариант с $h_1 = 0,5h_n$ будет исключен. При этом практически не учитывается количество итераций Ньютона, которые потребовались для получения решения с заданной точностью (кроме ситуации, когда размер шага уменьшается в связи с большим количеством итераций Ньютона). Учет большего количества итераций можно проводить лишь в случае равенства значений $\max(T_n + h_{n+1})$ для различных компонентов выборки [$K \times h$].

5. Оценка по минимальному количеству итераций Ньютона min(*isi*1)***.***

Данный способ оценки интересен тем, что для базового метода отсутствует соответствующий прямой аналог. Основную идею проще рассмотреть на следующем примере (рис. 4):

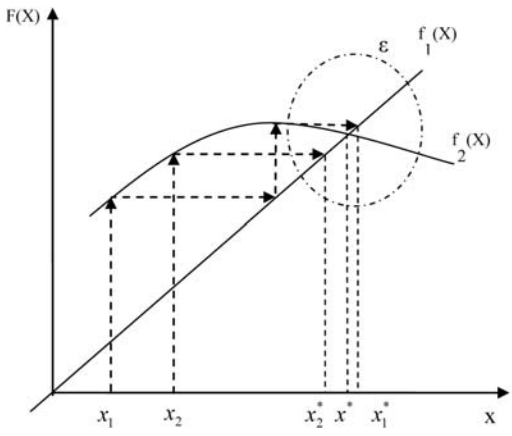

Рис. 4 — Использование количества итераций Ньютона в качестве оценки лучшего

Пусть x_1 и x_2 — начальные значения для метода Ньютона, а x_1^* и x_2^* — соответствующие решения, которые удовлетворяют заданной погрешности e. Очевидно, что для решения с начальным условием x_1 потребовалось 3 итерации, а в случае x_2 — всего одна. Однако достигнутая точность с использованием первого значения оказалась выше.

Учитывая квадратичную зависимость скорости сходимости метода Ньютона, можно получить оценку по точности при равном количестве итераций Ньютона. Однако такая оценка может быть получена только в случае соответствующих ограничений на вид функции, в пределах которых соблюдаются условия квадратичной сходимости. При этом в ряде случаев, например, в пакетах схемотехнического проектирования, предусмотрены ограничения на размер малых величин для контроля инструментальных погрешностей. При достижении некоторой пороговой величины данные переменные получают заранее определенные значения, сравнение которых становится невозможным.

Минимальное количество итераций Ньютона на шаге, которое потребовалось для получения решения с заданной точностью, свидетельствует о наиболее удачном выборе порядка и шага интегрирования. При этом можно считать, что идеальным вариантом является случай, когда процесс интегрирования идет с максимальным шагом, при этом решение получаемой системы нелинейных алгебраических уравнений достигается за одну итерацию Ньютона. В случае равенства количества итераций Ньютона для различных компонентов (K, h) в качестве критерия выбора лучшего могут выступать локальная погрешность, размер текущего шага и т.д.

Таким образом, повышение надежности и эффективности параллельного алгоритма численного интегрирования может базироваться на одновременном варьировании шага и порядка метода, что позволяет добиться практически неограниченной масштабируемости метода и использовать все доступные ресурсы МВС. В этом случае, для выбора лучшего варианта из полученных на шаге, наиболее целесообразно использовать оценки 4–5, которые позволяют применять выборки с одновременной вариацией, как шага, так и порядка метода. Предложенные методы реализованы в составе пакета схемотехнического САПР Allted [6].

Выводы. Использование методов на основе оценок 1–3 при одновременной вариации как размеров шага, так и порядков ограничено, поэтому при наличии большого количества доступных вычислительных ресурсов рекомендуется использовать методы на основе оценок 4–5.

Розглянуто метод чисельного інтегрування на основі різниць вищих порядків з використанням усіх доступних порядків і набору розмірів кроку. Запропоновано п'ять різних способів вибору кращого значення робочої точки з результатів, отриманих на кроці інтегрування. Проаналізовано їхні переваги та недоліки, дано рекомендації щодо їх застосування на мультипроцесорних обчислювальних системах.

Ключові слова: чисельне інтегрування, паралельні обчислення.

The method of numerical integration on the basis of differences of higher orders using all a vailable orders and set the size of the step. We propose five different ways of choosing the best value of the operating point of the results obtained in step integration. Analyzed their strengths and weaknesses, recommendations for their use in multiprocessor computer systems.

Key words: numerical integration, parallel computing.

Литература

1. *Крамар А. В.* Анализ эффективности выбора порядка в неявном методе численного интегрирования на основе разностей высших порядков / А. В. Крамар, В. В. Ладогубец, А. Д. Финогенов // Системный анализ и информационные технологии: материалы XI Международной научно-технической конференции (26–30 мая 2009 г., Киев). — К. : УНК «ИПСА» НТУУ «КПИ», 2009. — С. 436. — Языки: укр., рус., англ.
2. *Ладогубец В. В.* Параллельный алгоритм численного интегрирования математических моделей сложных систем / В. В. Ладогубец, А. Д. Финогенов // Электроника и связь. Тематический выпуск «Проблемы электроники». — 2007. — Ч.1. — С. 101–104.
3. *Фіногенов О. Д.* Паралельний метод чисельного інтегрування жорстких систем диференційних рівнянь з визначенням кращого порядку на кроці / О.Д.Фіногенов // Комп’ютерні технології друкарства : зб. наук. праць. — Львів : МОНУ Українська академія друкарства, 2008. — С. 108–113.
4. *Петренко А. И.* Основы автоматизации проектирования / А. И. Петренко — К.: Техника, 1982. — 295 с.
5. *Петренко А. И.* Табличные методы моделирования электронных схем на ЭЦВМ / А. И. Петренко, А. И. Власов, А. П. Тимченко. — К. : Вища школа, 1977. — 188 с.
6. *Petrenko A.* ALLTED — a computer-aided engineering system for electronic circuit design / A.Petrenko, V. Ladogubets, V. Tchkalov, Z. Pudlowski. — Melbourne: UICEE, 1997. — 205 p.