PHƯƠNG PHÁP SONG SONG DẠNG RKN VỚI MỘT SỐ MÔ HÌNH SIÊU MÁY TÍNH CÓ SỐ LƯỢNG BỘ XỬ LÍ KHÁC NHAU

Nguyễn Thị Hồng Minh

Khoa Toán-Cơ-Tin học

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà nội

1. Mục đích, đối tượng và phương pháp nghiên cứu của đề tài

Một hướng nghiên cứu đang được quan tâm hiện nay trong toán học tính toán cũng như tin học là phát triển các phương pháp hỗ trợ cho các hệ thống tính toán trên siêu máy tính (thường được gọi là các phương pháp song song - *parallel methods*). Trong đề tài này chúng tôi nghiên cứu và phát triển một số phương pháp song song để giải trực tiếp bài toán Cauchy của một lớp hệ phương trình vi phân cấp 2 dạng sau đây:

$$\begin{gathered}\mathbf{y}''(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)), \qquad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{y}'(t_0) = \mathbf{y}'_0, \\ t_0 \le t \le T, \quad \mathbf{y}, \mathbf{f} \in \mathbb{R}^d.\end{gathered} \tag{1}$$

Áp dụng cách tiếp cận của N.H. Cong, P.J. van der Houwen, B.P. Sommeijer (1993) chúng tôi xây dựng một số phương pháp song song kiểu Dự báo-Hiệu chỉnh (Predictor-Corrector (PC)) dạng Runge-Kutta-Nyström (RKN) với các lược đồ tính toán có khả năng chia sẻ khối lượng tính toán lớn giữa các bộ xử lí của một siêu máy tính. Các phương pháp được xây dựng và nghiên cứu nhằm thích ứng với một số mô hình siêu máy tính với số lượng bộ xử lí khác nhau.

2. Các kết quả chính

Đề xuất và nghiên cứu ba lớp phương pháp song song mới rất hiệu quả cho siêu máy tính để giải trực tiếp bài toán (1). Mỗi lớp phương pháp đều được nghiên cứu chi tiết từ mục tiêu xây dựng phương pháp, cách thiết lập phương pháp, độ phức tạp tính toán theo thời gian và các đặc trưng của phương pháp. Mỗi phương pháp đều được lập trình thử nghiệm và các kết quả chạy chương trình được sử dụng để so sánh với các phương pháp tuần tự và song song vào loại tốt nhất hiện có. Các kết quả thu được đã khẳng định khối lượng tính toán chính (số lần tính toán hàm vế phải) khi áp dụng các phương pháp mới này giảm đi rất nhiều.

Lược đồ của ba lớp phương pháp đã được xây dựng như sau:

- Lớp phương pháp lặp song song Dự báo Hiệu chỉnh hội tụ nhanh dạng Runge-Kutta-Nyström (phương pháp PIRKN-A) được xây dựng với lược đồ như sau:

$$\begin{aligned}
\mathbf{Y}_n^{(0)} &= y_n\mathbf{e} + hy'_n\mathbf{c} + h^2Bf(t_n\mathbf{e} + h\mathbf{c}, \mathbf{Y}_{n-1}^{(m)}) \\
\mathbf{Y}_n^{(j)} &= y_n\mathbf{e} + hy'_n\mathbf{c} + h^2Af(t_n\mathbf{e} + h\mathbf{c}, \mathbf{Y}_n^{(j-1)}), \quad j = 1, \ldots, m, \\
y_{n+1} &= y_n + hy'_n + h^2\mathbf{b}^T f(t_n\mathbf{e} + h\mathbf{c}, \mathbf{Y}_n^{(m)}), \\
y'_{n+1} &= y'_n + h\mathbf{d}^T f(t_n\mathbf{e} + h\mathbf{c}, \mathbf{Y}_n^{(m)}).
\end{aligned} \tag{2}$$

$B_{s\times s}$ là ma trận tham số của công thức Dự báo dạng Adams (2).

Lớp phương pháp này được xây dựng theo cách tiếp cận như các phương pháp lặp song song truyền thống (phương pháp PIRKN) nhưng nhờ việc xây dựng phương pháp Hiệu chỉnh mới, dựa trên sự cực tiểu hoá bán kính phổ của ma trận lặp, đồng thời với việc sử dụng công thức Dự báo cấp cao dạng Adams nên tốc độ hội tụ của quá trình lặp Hiệu chỉnh được cải thiện đáng kể. Số bộ xử lí cần thiết để áp dụng phương pháp này bằng số chiều của vectơ nấc.

- Lớp phương pháp lặp song song Dự báo Hiệu chỉnh Runge-Kutta-Nystrőm dạng khối (phương pháp BPIRKN-A) đượcxây dựng với giả thiết máy tính song song có đủ nhiều bộ xử lí có thể làm việc đồng thời. Lược đồ của phương pháp BPIRKN-A như sau:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{Y}_{n,i}^{(0)} &= \mathbf{e}\mathbf{e}_1^T\mathbf{X}_n + hB_i\mathbf{X}_n', \\
\mathbf{Y}_{n,i}^{(j)} &= \mathbf{e}\mathbf{e}_1^T\mathbf{X}_n + a_ih\mathbf{c}\mathbf{e}_1^T\mathbf{X}_n' + a_i^2h^2Af(t_n\mathbf{e} + a_ih\mathbf{c}, \mathbf{Y}_{n,i}^{(j-1)}), \quad j = 1,\dots,m \\
y_{n+1,i} &= \mathbf{e}_1^T\mathbf{X}_n + a_ih\mathbf{e}_1^T\mathbf{X}_n' + a_i^2h^2\mathbf{b}^Tf(t_n\mathbf{e} + a_ih\mathbf{c}, \mathbf{Y}_{n,i}^{(m)}), \qquad (3) \\
y_{n+1,i}' &= \mathbf{e}_1^T\mathbf{X}_n' + a_ih\mathbf{d}^Tf(t_n\mathbf{e} + a_ih\mathbf{c}, \mathbf{Y}_{n,i}^{(m)}), \quad i = 1,\dots,r.
\end{aligned}
$$

Với kí hiệu:

$$\mathbf{X}_n := (y_{n,1},\dots,y_{n,r})^T, \ \mathbf{X}_n' := (y_{n,1}',\dots,y_{n,r}')^T, \qquad y_{n,1} = y_n, \ y_{n,1}' = y_n'$$

Phương pháp này yêu cầu số bộ xử lí cần thiết là $r.s$ trong đó s là số chiều của vectơ nấc và r là số điểm khối (ngoài lưới). Số bộ xử lí yêu cầu nhiều hơn các phương pháp dạng PIRKN khác nhưng bù lại ta có thể thu được phương pháp với cấp chính xác của cả phương pháp Dự báo lẫn phương pháp Hiệu chỉnh cao tuỳ ý. Các kết quả thử nghiệm cho thấy phương pháp BPIRKN-A rất hiệu quả, nhất là khi giải bài toán cần cấp chính cao.

- Lớp phương pháp lặp song song Dự báo Hiệu chỉnh giả Runge-Kutta-Nystrőm hai bước (phương pháp PIPTRKN) được xây dựng để phù hợp với điều kiện máy tính song song có ít bộ xử lí. Theo cách tiếp cận mới, với một số lượng bộ xử lí cho trước (có thể không cần nhiều) phương pháp PIPTRKN có thể được xây dựng sao cho có cấp chính xác bằng với các phương pháp lặp song song truyền thống, nhưng vẫn có các đặc trưng tốt về tính ổn định và cấp chính xác. Lược đồ phương pháp PIPTRKN có dạng như sau:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{W}_n^{(0)} &= y_n\mathbf{e}_w + hy_n'\mathbf{c}_w + h^2B_{wv}f(\mathbf{V}_{n-1}) + h^2B_{ww}f(\mathbf{W}_{n-1}),\\
\mathbf{V}_n &= y_n\mathbf{e}_v + hy_n'\mathbf{c}_v + h^2A_{vv}f(\mathbf{V}_{n-1}) + h^2A_{vw}f(\mathbf{W}_{n-1}),\\
\mathbf{W}_n^{(j)} &= y_n\mathbf{e}_w + hy_n'\mathbf{c}_w + h^2A_{wv}f(\mathbf{V}_n) + h^2A_{ww}f(\mathbf{W}_n^{(j-1)}),\\
&\qquad\qquad j = 1,\ldots,m, \qquad (4)\\
z_{n+1} &= z_n + hz_n' + h^2\mathbf{b}_v^T f(\mathbf{V}_n) + h^2\mathbf{b}_w^T f(\mathbf{W}_n),\\
z_{n+1}' &= z_n' + h\mathbf{d}_v^T f(\mathbf{V}_n) + h\mathbf{d}_w^T f(\mathbf{W}_n).
\end{aligned}
$$

3. Kết luận

Các phương pháp đã được nghiên cứu nhằm góp phần hoàn thiện việc nghiên cứu các phương pháp song song dạng Runge-Kutta-Nyström, phát triển hơn nữa các phương pháp hỗ trợ hệ thống tính toán trên các máy tính song song, tạo tiền đề cho việc triển khai xây dựng các phần mềm tính toán thực sự có thể áp dụng được trong các bài toán thực tế và cung cấp cho thị trường phần mềm.

Các kết quả chính của đề tài đã được tổng hợp trong luận án Tiến sĩ với đề tài "Một số thuật toán giải số hệ phương trình vi phân trên siêu máy tính" thuộc chuyên ngành "Đảm bảo toán học cho máy tính và các hệ thống tính toán" dưới sự hướng dẫn của PGS.TSKH Nguyễn Hữu Công. Luận án đã được chúng tôi bảo vệ thành công trước hội đồng đánh giá luận án cấp nhà nước họp ngày 29 tháng 8 năm 2001 tại trường Đại học Khoa học Tự nhiên theo quyết định số 4360/QĐ BGD&ĐT-SĐH của Bộ Giáo dục và Đào tạo.