

PHƯƠNG PHÁP LẬP SONG SONG RUNGE-KUTTA HAI BƯỚC

Nguyễn Thu Thủy

Khoa Toán - Tin, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội

Tóm tắt. Bài báo xây dựng lớp các phương pháp lập song song Runge-Kutta (RK) hai bước có cấp chính xác cao để giải bài toán giá trị ban đầu không cưỡng của hệ phương trình vi phân cấp một: $y'(t) = f(t, y(t))$ cho máy tính song song. Bắt đầu với một phương pháp Runge-Kutta s -nấc ẩn hai bước (TSRK) có cấp chính xác p , chúng ta áp dụng quá trình lập song song dự báo- hiệu chỉnh $P(EC)^m E$. Bằng cách này có thể thu được một phương pháp Runge-Kutta hai bước hiện có cấp chính xác p với mọi m và có $s(m+1)$ lần tính hàm về phải mà trong đó s giá trị có thể tính song song. Bằng các thử nghiệm số chúng tôi chứng tỏ được phương pháp lập song song trong bài báo này hiệu quả hơn các phương pháp tuần tự và song song hiện có.

Từ khóa: Phương pháp Runge-Kutta ẩn, dự báo- hiệu chỉnh, tính ổn định, song song.

1. Mở đầu

Xét bài toán giá trị ban đầu của hệ phương trình vi phân cấp một:

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq T, \quad (1.1)$$

trong đó $y: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ và $f: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$.

Các phương pháp số hiệu quả nhất để giải bài toán (1.1) là các phương pháp Runge-Kutta (RK). Trước đây là các phương pháp RK hiện (xem [1]), sau này, khi máy tính song song ra đời là các phương pháp RK song song (xem [2]). Một phương pháp RK song song thường được xây dựng từ một phương pháp RK ẩn (IRK). Giải phương trình vec tơ nấc của phương pháp IRK bằng một phép lặp hiện song song kiểu dự báo- hiệu chỉnh, ta sẽ thu được một phương pháp lập song song RK (PIRK). Do giá của các phương pháp PIRK tập trung chủ yếu vào số lần tính toán hàm về phải nên các nghiên cứu về phương pháp PIRK thường hướng đến tiêu chí là giảm số lần tính toán tuần tự hàm về phải. Với mục đích này phương pháp lập song song RK hai bước (PITRK) là một phương pháp song song tốt vì nó sử dụng đầy đủ thông tin của bước trước và có cấp chính xác khá cao.

Trong mục 2.1 chúng tôi sẽ giới thiệu lại phương pháp TSRK theo cách trình bày của Nguyễn Hữu Công [3-5]. Trong mục 2.2 chúng tôi sẽ giải phương trình vec tơ nấc ẩn của phương pháp TSRK bằng một phép lặp hiện song song kiểu dự báo hiệu chỉnh, trong đó công thức dự báo

cũng sử dụng đầy đủ thông tin của một bước trước. Kết quả chúng tôi thu được một phương pháp PITRK có cấp chính xác cao với số lần tính toán hàm về phải tương đối nhỏ ở mỗi bước. Trong mục 2.3 chúng tôi trình bày các kết quả số khi áp dụng phương pháp PITRK vào một số bài toán thử thường gặp và so sánh kết quả với các mã tuần tự và phương pháp song song tốt nhất hiện có.

2. Nội dung nghiên cứu

2.1. Phương pháp Runge-Kutta hai bước

Các phương pháp TSRK đã được xét trong [6, 7, 8]. Trong phần này, chúng ta trình bày khái quát các phương pháp TSRK này.

Giả sử ta có vector trùng khớp s chiều $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_s)^T$ với các thành phần phân biệt c_i . Phương pháp Runge-Kutta hai bước (TSRK) s nấc cho bài toán (1.1) được xác định bởi:

$$\mathbf{Y}_n = \mathbf{w}\mathbf{y}_{n-1} + (\mathbf{e} - \mathbf{w})\mathbf{y}_n + h\mathbf{A}\mathbf{f}(\mathbf{Y}_{n-1}) + h\mathbf{B}\mathbf{f}(\mathbf{Y}_n), \quad (2.1a)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \theta\mathbf{y}_{n-1} + (1 - \theta)\mathbf{y}_n + h[\mathbf{b}^T\mathbf{f}(\mathbf{Y}_{n-1}) + \mathbf{d}^T\mathbf{f}(\mathbf{Y}_n)] \quad (2.1b)$$

Trong công thức (2.1), $\mathbf{y}_{n+1} \approx \mathbf{y}(t_{n+1})$, $\mathbf{y}_n \approx \mathbf{y}(t_n)$, h là bước lưới, $\mathbf{A} = (a_{ij})$, $\mathbf{B} = (b_{ij})$ là các ma trận cỡ $s \times s$ và các vectơ s chiều $\mathbf{w} = (w_j)$, $\mathbf{b} = (b_j)$, $\mathbf{d} = (d_j)$ là các ma trận, các vectơ tham số của phương pháp. $\theta \in \mathbb{R}$ là hệ số của phương pháp. Vec tơ s chiều $\mathbf{e}$ có các thành phần bằng 1. Các vectơ s chiều $\mathbf{Y}_n$, $\mathbf{Y}_{n-1}$ và $\mathbf{Y}_{n-2}$ được kí hiệu là các vectơ nấc biểu diễn xấp xỉ số của vectơ nghiệm chính xác $\mathbf{y}(t_n\mathbf{e} + h\mathbf{c})$, $\mathbf{y}(t_{n-1}\mathbf{e} + h\mathbf{c})$ và $\mathbf{y}(t_{n-2}\mathbf{e} + h\mathbf{c})$, tương ứng. Các ma trận tham số $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, các vectơ $\mathbf{u}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{d}$ và số thực θ được xác định bởi điều kiện bậc (xem mục 2.1.1.).

Chúng ta biểu diễn phương pháp này bằng bảng Butcher sau:

$$\begin{array}{c|cc} \mathbf{w} & \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \hline \theta & \mathbf{b} & \mathbf{d} \end{array}.$$

Để có thể áp dụng được phương pháp (2.1), ta cần khởi tạo các giá trị xấp xỉ ban đầu $\mathbf{Y}_{0,j}$, $j = 1, \dots, s$ và giá trị $\mathbf{y}_1$ từ $\mathbf{y}_0$ với độ chính xác cần thiết. Điều này có thể thực hiện được, ví dụ bằng cách sử dụng phương pháp PIRK (đã xét trong [9]) hoặc phương pháp RK tuần tự. Đối với phương pháp TSRK (2.1), tại mỗi bước, chúng ta cần $2s$ lần tính toán tuần tự hàm về phải $\mathbf{f}$ là $\mathbf{f}(t_{n-1} + hc_j, \mathbf{Y}_{n-1,j})$, $\mathbf{f}(t_n + hc_j, \mathbf{Y}_{n,j})$, $j = 1, \dots, s$. Tuy nhiên, s lần đánh giá của $\mathbf{f}$ là $\mathbf{f}(t_{n-1} + hc_j, \mathbf{Y}_{n-1,j})$, $j = 1, \dots, s$ đã có sẵn từ bước trước và chỉ cần tính s giá trị của $\mathbf{f}$ là $\mathbf{f}(t_n + hc_j, \mathbf{Y}_{n,j})$, $j = 1, \dots, s$. s giá trị của $\mathbf{f}$ này có thể được tính song song trên s bộ xử lí. Do đó, phương pháp TSRK s nấc (2.1) thực hiện trên một máy tính s bộ xử lí, chỉ cần yêu cầu một tính toán tuần tự $\mathbf{f}$ tại mỗi bước. Như vậy, với phương pháp TSRK số lần tính toán tuần tự hàm về phải $\mathbf{f}$ tại mỗi bước là $s^* = 1$.

Phương pháp TSRK (2.1) bao gồm s nấc ẩn. Cấp chính xác của phương pháp này có thể được xét tương tự như khi nghiên cứu cấp chính xác của các phương pháp RK. Giả sử rằng $\mathbf{y}_n = \mathbf{y}(t_n)$, $\mathbf{Y}_{n-1} = \mathbf{y}(t_{n-1}\mathbf{e} + h\mathbf{c})$, thì chúng ta định nghĩa cấp chính xác như sau (tương tự như trong [5-10]).

Định nghĩa 2.1. Phương pháp TSRK (2.1) được gọi là có cấp chính xác p^* nếu:

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{n+1} = O(h^{p^*+1}),$$

và có cấp chính xác bậc $q^* = \min\{p^*, q\}$ nếu thỏa mãn điều kiện,

$$y(t_n \mathbf{e} + h\mathbf{c}) - \mathbf{Y}_n = O(h^{q+1})$$

Trong mục tiếp theo, chúng ta xét điều kiện bậc cho phương pháp TSRK.

2.1.1. Điều kiện bậc

Trong mục này, chúng ta xét điều kiện bậc của phương pháp TSRK. Điều kiện bậc q cho công thức (2.1a) và điều kiện bậc p cho (2.1b) được xác định bằng cách thay thế các giá trị $\mathbf{Y}_{n-1,j}$, $\mathbf{y}_{n-1}$, $\mathbf{y}_n$, $\mathbf{Y}_{n,j}$ và $\mathbf{y}_{n+1}$ bởi các giá trị nghiệm chính xác $\mathbf{y}(t_{n-1} + hc_j) = \mathbf{y}(t_n + h(c_j - 1))$, $\mathbf{y}(t_{n-1}) = \mathbf{y}(t_n - h)$, $\mathbf{y}(t_n)$, $\mathbf{y}(t_n + hc_j)$ và $\mathbf{y}(t_{n+1}) = \mathbf{y}(t_n + h)$, tương ứng. Thay các giá trị nghiệm chính xác này vào hệ thức (2.1), chúng ta thu được hệ thức sau:

$$\mathbf{y}(t_n + hc_i) - w_i \mathbf{y}(t_n - h) - (1 - w_i) \mathbf{y}(t_n) - h \sum_{j=1}^s a_{ij} \mathbf{y}'(t_n + h(c_j - 1)) \quad (2.2a)$$

$$- h \sum_{j=1}^s b_{ij} \mathbf{y}'(t_n + hc_j) = O(h^{q+1}), \quad i = 1, \dots, s,$$

$$\mathbf{y}(t_n + h) - \theta \mathbf{y}(t_n - h) - (1 - \theta) \mathbf{y}(t_n) - h \sum_{j=1}^s b_j \mathbf{y}'(t_n + h(c_j - 1)) \quad (2.2b)$$

$$- h \sum_{j=1}^s d_j \mathbf{y}'(t_n + hc_j) = O(h^{p+1}).$$

Khai triển Taylor về trái của (2.2) tại lân cận của điểm t_n theo lũy thừa của h ta được:

$$\sum_{l=1}^q C_i^{(l)} \left(h \frac{d}{dt}\right)^l \mathbf{y}(t_n) + C_i^{(q+1)} \left(h \frac{d}{dt}\right)^{q+1} \mathbf{y}(t_i^*) = O(h^{q+1}), \quad (2.3a)$$

$$\sum_{l=1}^p D^{(l)} \left(h \frac{d}{dt}\right)^l \mathbf{y}(t_n) + D^{(p+1)} \left(h \frac{d}{dt}\right)^{p+1} \mathbf{y}(t^*) = O(h^{p+1}), \quad (2.3b)$$

trong đó, t_i^* và t^* là các điểm nào đó thuộc đoạn $[t_{n-1}, t_{n+1}]$ và

$$C_i^{(l)} = \frac{(c_i)^l}{l} - w_i \frac{(-1)^l}{l} - \sum_{j=1}^s a_{ij} (c_j - 1)^{l-1} - \sum_{j=1}^s b_{ij} (c_j)^{l-1}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (2.3c)$$

$$D^{(l)} = \frac{1}{l} - \theta \frac{(-1)^l}{l} - \sum_{j=1}^s b_j (c_j - 1)^{l-1} - \sum_{j=1}^s d_j (c_j)^{l-1}. \quad (2.3d)$$

Với cấp chính xác và cấp chính xác bậc của phương pháp TSRK, chúng ta có định lí sau:

Định lí 2.1. Nếu $\mathbf{f}$ là hàm liên tục Lipschitz, và nếu

$$\frac{(c_i)^l}{l} = w_i \frac{(-1)^l}{l} + \sum_{j=1}^s a_{ij} (c_j - 1)^{l-1} + \sum_{j=1}^s b_{ij} (c_j)^{l-1}, \quad i = 1, \dots, s, \quad l = 1, \dots, q, \quad (2.4a)$$

$$\frac{1}{l} = \theta \frac{(-1)^l}{l} + \sum_{j=1}^s b_j (c_j - 1)^{l-1} + \sum_{j=1}^s d_j (c_j)^{l-1}, \quad l = 1, \dots, p, \quad (2.4b)$$

thì phương pháp TSRK (2.1) có cấp chính xác $p^* = \min\{p, q + 1\}$ và cấp chính xác nấc $q^* = \min\{p, q\}$ với mọi vectơ trùng khớp $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_s)^T$ với các tọa độ c_i phân biệt.

Chứng minh. Giả sử $\mathbf{y}_n = \mathbf{y}(t_n)$ và $\mathbf{Y}_{n-2,i} = \mathbf{y}(t_{n-2} + hc_i)$, $\mathbf{Y}_{n-1,i} = \mathbf{y}(t_{n-1} + hc_i)$, $i = 1, \dots, s$. Các hệ thức (2.3) và (2.4) đảm bảo rằng hệ thức (2.2) là thỏa mãn, khi đó chúng ta có mối quan hệ bậc địa phương sau:

$$\mathbf{y}(t_n + hc_i) - \mathbf{Y}_{n,i} = O(h^{q+1}), \quad i = 1, \dots, s. \quad (2.5)$$

Hơn nữa,

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}(t_{n+1}) - \theta \mathbf{y}(t_n - h) - (1 - \theta) \mathbf{y}(t_n) - h \sum_{j=1}^s b_j \mathbf{y}'(t_n + h(c_j - 1)) \\ &\quad - h \sum_{j=1}^s d_j \mathbf{y}'(t_n + hc_j) \\ &\quad + h \sum_{j=1}^s b_j [\mathbf{f}(t_n + h(c_j - 1), \mathbf{y}(t_n + h(c_j - 1))) - \mathbf{f}(t_n + h(c_j - 1), \mathbf{Y}_{n-1,j})] \\ &\quad + h \sum_{j=1}^s d_j [\mathbf{f}(t_n + hc_j, \mathbf{y}(t_n + hc_j)) - \mathbf{f}(t_n + hc_j, \mathbf{Y}_{n,j})] \\ &= O(h^{p+1}) + O(h^{q+2}) + O(h^{q+2}). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Từ Định nghĩa 2.1 và hệ thức (2.5), (2.6) suy ra $p^* = \min\{p, q + 1\}$, $q^* = \min\{p, q\}$ và Định lí 2.1 được chứng minh. $\square$

Để biểu thị vec tơ tham số $\mathbf{w}, \mathbf{b}, \mathbf{d}$, ma trận tham số $A = (a_{ij}), B = (b_{ij})$ và tham số θ , chúng ta định nghĩa các ma trận và vec tơ sau:

$$\begin{aligned} P &:= \left(\mathbf{c}, \frac{\mathbf{c}^2}{2}, \frac{\mathbf{c}^3}{3}, \dots, \frac{\mathbf{c}^{2s+1}}{2s+1} \right), & Q &:= \left(\mathbf{e}, (\mathbf{c} - \mathbf{e}), \dots, (\mathbf{c} - \mathbf{e})^{2s} \right), \\ R &:= \left(\mathbf{e}, \mathbf{c}, \mathbf{c}^2, \mathbf{c}^3, \dots, \mathbf{c}^{2s} \right), & \mathbf{g} &:= \left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \dots, \frac{1}{2s+1} \right)^T, \\ \mathbf{k} &:= \left(-1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \dots, -\frac{1}{2s+1} \right)^T. \end{aligned}$$

Áp dụng với $p = q = 2s + 1$, điều kiện bậc (2.4) trong Định lí 2.1 có thể được viết ở dạng:

$$\mathbf{w} \mathbf{k}^T + A Q + B R = P, \quad (2.7a)$$

$$\theta \mathbf{k}^T + \mathbf{b}^T Q + \mathbf{d}^T R = \mathbf{g}^T. \quad (2.7b)$$

Đặt $H = \begin{pmatrix} \mathbf{k}^T \\ Q \\ R \end{pmatrix}$. Khi đó điều kiện (2.7) trở thành:

$$\begin{bmatrix} w & A & B \end{bmatrix} H = P, \quad (2.8a)$$

$$\begin{bmatrix} \theta & \mathbf{b}^T & \mathbf{d}^T \end{bmatrix} H = \mathbf{g}^T. \quad (2.8b)$$

Nếu ma trận H khả nghịch thì

$$\begin{bmatrix} w & A & B \end{bmatrix} = PH^{-1}, \quad \begin{bmatrix} \theta & \mathbf{b}^T & \mathbf{d}^T \end{bmatrix} = \mathbf{g}^T H^{-1}. \quad (2.9)$$

Định lý 2.2. Nếu hàm $\mathbf{f}$ liên tục Lipschitz và nếu điều kiện (2.9) thỏa mãn thì phương pháp TSRK có cấp chính xác $p = q = 2s + 1$.

Do vec tơ $\mathbf{b}, \mathbf{d}$ và tham số θ được xác định trong (2.9) là vec tơ trọng số của phương pháp RK ẩn trùng khớp dựa trên vec tơ trùng khớp $\mathbf{c}$, vì vậy $p \geq 2s$. Với một sự lựa chọn đặc biệt cho $\mathbf{c}$, nó có thể làm tăng cấp chính xác p vượt quá $2s$ (siêu hội tụ) bằng cách thỏa mãn hệ thức trực giao (xem [11]). Định lý sau đây là một hệ quả trực tiếp của Định lý 2.1, biểu thức hiển của tham số của phương pháp TSRK và việc áp dụng của hệ thức trực giao.

Định lý 2.3. Giả sử vectơ trùng khớp $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_s)^T$ với các tọa độ c_i phân biệt và thuộc khoảng $(0; 1)$, thì phương pháp TSRK s bậc xác định bởi (2.1) có cấp chính xác là $p^* \geq 2s$ và cấp chính xác bậc $q^* \geq 2s$ nếu các ma trận tham số A, B và vectơ $\mathbf{w}, \mathbf{b}, \mathbf{d}$ và số thực θ thỏa mãn hệ thức (2.9). Nó có cấp chính xác $p^* = 2s + r$ và cấp chính xác bậc $q^* = 2s + r$ nếu thỏa mãn thêm điều kiện trực giao:

$$P_j(1) = 0, \quad P_j(x) := \int_0^x \xi^{j-1} \prod_{i=1}^s (\xi - c_i) d\xi, \quad j = 1, \dots, r. \quad (2.10)$$

Theo phân tích của sai số địa phương trong mục này, vectơ ban đầu $\mathbf{Y}_{0,j}, j = 1, \dots, s$ và giá trị $\mathbf{y}_1$ cần phải thỏa mãn hệ thức:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t_0 + hc_j) - \mathbf{Y}_{0,j} &= O(h^{q^*+1}), \\ \mathbf{y}(t_1) - \mathbf{y}_1 &= O(h^{p^*+1}), \quad j = 1, \dots, s, \end{aligned} \quad (2.11)$$

trong đó p^* là cấp chính xác của phương pháp TSRK cơ bản.

2.1.2. Tính ổn định của phương pháp

Tính ổn định của phương pháp được khảo sát bằng việc áp dụng phương pháp (2.1) vào phương trình thử $y'(t) = \lambda y(t)$, trong đó λ là giá trị riêng thuộc nửa mặt phẳng phức trái của ma trận Jacobian $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$. Với phương trình thử phương pháp TSRK (2.1) được viết ở dạng:

$$\mathbf{Y}_n = \mathbf{w} \mathbf{y}_{n-1} + (\mathbf{e} - \mathbf{w}) \mathbf{y}_n + z A \mathbf{Y}_{n-1} + z B \mathbf{Y}_n, \quad (2.12a)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \theta \mathbf{y}_{n-1} + (1 - \theta) \mathbf{y}_n + z [\mathbf{b}^T \mathbf{Y}_{n-1} + \mathbf{d}^T \mathbf{Y}_n] \quad (2.12b)$$

trong đó $z := \lambda h$.

Từ (2.12a) ta có: $(I - zB) \mathbf{Y}_n = \mathbf{w} \mathbf{y}_{n-1} + (\mathbf{e} - \mathbf{w}) \mathbf{y}_n + z A \mathbf{Y}_{n-1}$.

Giả sử $I - zB$ khả nghịch. Khi đó:

$$\mathbf{Y}_n = (I - zB)^{-1} [\mathbf{w} \mathbf{y}_{n-1} + (\mathbf{e} - \mathbf{w}) \mathbf{y}_n + z A \mathbf{Y}_{n-1}] \quad (2.13)$$

Thay vào (2.12b) ta được:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{n+1} &= \theta \mathbf{y}_{n-1} + (1 - \theta) \mathbf{y}_n + z \{ \mathbf{b}^T \mathbf{Y}_{n-1} + \mathbf{d}^T (I - zB)^{-1} [\mathbf{w} \mathbf{y}_{n-1} + (\mathbf{e} - \mathbf{w}) \mathbf{y}_n + z A \mathbf{Y}_{n-1}] \} \\ &= (\theta + \mathbf{d}^T (I - zB)^{-1} \mathbf{w}) \mathbf{y}_{n-1} + [(1 - \theta) + z \mathbf{d}^T (I - zB)^{-1} (\mathbf{e} - \mathbf{w})] \mathbf{y}_n \\ &\quad + [z \mathbf{b}^T + z \mathbf{d}^T (I - zB)^{-1} z A] \mathbf{Y}_{n-1} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Từ (2.13) và (2.14) ta có hệ thức đệ quy:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y}_{n+1} \\ \mathbf{y}_n \\ \mathbf{Y}_n \end{pmatrix} = M(z) \begin{pmatrix} \mathbf{y}_n \\ \mathbf{y}_{n-1} \\ \mathbf{Y}_{n-1} \end{pmatrix}, \quad (2.15a)$$

trong đó $M(z)$ là ma trận cỡ $(s+2) \times (s+2)$ xác định bởi:

$$M(z) = \begin{pmatrix} 1 - \theta + z\mathbf{d}^T S(\mathbf{e} - \mathbf{w}) & \theta + z\mathbf{d}^T S\mathbf{w} & z\mathbf{b}^T + z\mathbf{d}^T S z A \\ 1 & 0 & \mathbf{0}^T \\ S(\mathbf{e} - \mathbf{w}) & S\mathbf{w} & S z A \end{pmatrix}. \quad (2.15b)$$

với $\mathbf{0} = (0, 0, \dots, 0)^T$ là vec tơ s chiều, và $S = (I - zB)^{-1}$.

Ma trận $M(z)$ cỡ $(s+2) \times (s+2)$ được gọi là *ma trận khuếch đại*, và bán kính phổ $\mathbb{R}(z) = \rho(M(z))$ được gọi là *hàm ổn định*. Miền ổn định của phương pháp TSRK, kí hiệu là $\mathbb{S}_{stab}$, được xác định bởi:

$$\mathbb{S}_{stab} := \{z : \rho(M(z)) \leq 1\}.$$

Do phương pháp TSRK (2.1) có tính chất hai bước, tính chất zero-ổn định của phương pháp được khẳng định thông qua định lí sau:

Định lí 2.4. *Phương pháp TSRK dựa trên vectơ trùng khớp $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_s)^T$ với các tọa độ c_i phân biệt luôn là zero-ổn định.*

Giá trị dương lớn nhất β_{re} để $\mathbb{R}(z) \leq 1$ với mọi z nằm trong khoảng $(-\beta_{re}, 0)$ được gọi là biên ổn định thực của phương pháp.

Giá trị dương lớn nhất β_{im} để $\mathbb{R}(z) \leq 1$ với mọi z nằm trong khoảng $(-i\beta_{im}, i\beta_{im})$ được gọi là biên ổn định ảo của phương pháp.

2.2. Phương pháp lặp song song Runge-Kutta hai bước (PITRK)

Trong mục này, chúng ta trình bày về phương pháp lặp song song kiểu dự báo-hiệu chỉnh bằng cách sử dụng phương pháp hiệu chỉnh TSRK (2.1) với công thức dự báo dạng Adams tương tự như [4, 5]. Sơ đồ lặp song song được xác định như sau:

$$\mathbf{Y}_n^{(0)} = \mathbf{w}\mathbf{u}_{n-1} + (\mathbf{e} - \mathbf{w})\mathbf{u}_n + hV\mathbf{f}(\mathbf{Y}_{n-1}), \quad (2.16a)$$

$$\mathbf{Y}_n^{(k)} = \mathbf{w}\mathbf{u}_{n-1} + (\mathbf{e} - \mathbf{w})\mathbf{u}_n + h[A\mathbf{f}(\mathbf{Y}_{n-1}) + B\mathbf{f}(\mathbf{Y}_n^{(k-1)})], k = 1, \dots, m, \quad (2.16b)$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \theta\mathbf{u}_{n-1} + (1 - \theta)\mathbf{u}_n + h[\mathbf{b}^T\mathbf{f}(\mathbf{Y}_{n-1}) + \mathbf{d}^T\mathbf{f}(\mathbf{Y}_n^{(m)})], \quad (2.16c)$$

trong đó m là số lần lặp. Ma trận $V = (v_{ij})$ cỡ $s \times s$ trong công thức dự báo (2.16a) được xác định bởi các điều kiện bậc trong mục 2.2.2. Khi công thức (2.16a) là dự báo và (2.1) là phương pháp hiệu chỉnh, chúng ta được một phương pháp dự báo-hiệu chỉnh kiểu $PE(CE)^m E$. Các giá trị $\mathbf{f}(t_{n-1} + c_j h, \mathbf{Y}_{n-1,j}^{(m)})$, $j = 1, \dots, s$ đã được tính từ bước trước đó, cho nên chúng ta có phương pháp dự báo-hiệu chỉnh kiểu $P(CE)^m E$.

Trong phương pháp dự-báo hiệu chỉnh (2.16), công thức dự báo (2.16a) là công thức dạng Adams. Giá trị dự báo này được hiệu chỉnh bằng cách sử dụng phương pháp TSRK. Tương tự như các phương pháp PC được xét trong [5], chúng ta gọi phương pháp PC (2.16) là *phương pháp lặp song song RK hai bước* (phương pháp PITRK).

Chú ý rằng s thành phần $\mathbf{f}(\mathbf{Y}_{n,j}^{(k-1)})$, $j = 1, \dots, s$ có thể được tính song song trên s bộ xử lí có sẵn, do đó số lần tính toán hàm về phải tại mỗi bước có độ dài h là $s^* = m + 1$.

2.2.1. Cấp chính xác

Định lí 2.5. Nếu phương pháp TSRK (2.1) có cấp chính xác là p , công thức dự báo (2.16a) có cấp chính xác là q thì phương pháp PITRK có cấp chính xác là $\min\{p, m + q + 1\}$.

Chứng minh. Do $\|\mathbf{Y}_n - \mathbf{Y}_n^{(0)}\| = O(h^{q+1})$ nên:

$$\|\mathbf{Y}_n - \mathbf{Y}_n^{(1)}\| = \|hB[\mathbf{f}(\mathbf{Y}_n) - \mathbf{f}(\mathbf{Y}_n^{(1)})]\| = O(h^{q+2})$$

Do đó với mỗi lần lặp thì bậc tăng lên 1. Vì vậy chúng ta thu được hệ thức về cấp chính xác (địa phương) như sau:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_n - \mathbf{Y}_n^{(m)} &= O(h^{m+q+1}), \\ \mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1} &= h \sum_{j=1}^s d_j [\mathbf{f}(t_n + c_j h, \mathbf{Y}_{n,j}) - \mathbf{f}(t_n + c_j h, \mathbf{Y}_{n,j}^{(m)})] \\ &= O(h^{m+q+2}). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Suy ra:

$$\mathbf{y}(t_{n+2}) - \mathbf{u}_{n+2} = [\mathbf{y}(t_{n+2}) - \mathbf{y}_{n+2}] + [\mathbf{y}_{n+2} - \mathbf{u}_{n+2}] = O(h^{p+1}) + O(h^{m+q+2}).$$

Từ đó suy ra điều phải chứng minh. $\square$

Từ Định lí trên ta thấy m nhỏ nhất để một phương pháp PITRK có cấp chính xác cao nhất có thể là p là: $m = p - q - 1$.

Định lí 2.5 chỉ ra rằng cấp chính xác của phương pháp PITRK sẽ không thay đổi khi tăng số lần lặp m . Vì vậy chúng ta có được những phương pháp PC rẻ nhất chỉ với một lần tính hàm về phải $\mathbf{f}$ trong mỗi bước tính tích phân của (2.16), với $m = 0$. Tuy nhiên, trong thực tế, các phương pháp PITRK thường được tính với $m = 1$ hoặc $m = 2$ để đạt được sự ổn định chấp nhận được và để bù cho sai số của quá trình lặp.

2.2.2. Điều kiện bậc

Điều kiện bậc s của công thức dự báo (2.16a) được suy ra bằng cách thay thế $\mathbf{u}_{n-1}, \mathbf{u}_n, \mathbf{Y}_{n-1,i}^{(m)}$ bởi các giá trị nghiệm chính xác $\mathbf{y}(t_{n-1}), \mathbf{y}(t_n), \mathbf{y}(t_{n-1} + c_i h)$ tương ứng. Thay thế các giá trị nghiệm chính xác vào (2.16a), chúng ta được:

$$\mathbf{y}(t_n + c_i h) - w_i \mathbf{y}(t_{n-1}) - (1 - w_i) \mathbf{y}(t_n) - h \sum_{j=1}^s v_{ij} \mathbf{y}'(t_n + (c_j - 1)h) = O(h^{s+1}), \quad i = 1, \dots, s. \quad (2.18)$$

Khai triển Taylor tại lân cận của điểm t_n và so sánh hệ số của lũy thừa h^l hai vế ta thu được phương trình:

$$\frac{(c_i)^l}{l} = \frac{(-1)^l}{l} w_i + \sum_{j=1}^s v_{ij} (c_j - 1)^{l-1}, \quad i = 1, \dots, s, \quad l = 1, \dots, s, \quad (2.19)$$

Phương trình này tương đương với

$$\frac{(\mathbf{c})^l}{l} - \frac{(-1)^l}{l} \mathbf{w} = V(\mathbf{c} - \mathbf{e})^{l-1}, \quad l = 1, \dots, s. \quad (2.20)$$

Đặt: $G = (\mathbf{e} \quad \mathbf{c} - \mathbf{e} \quad \dots \quad (\mathbf{c} - \mathbf{e})^{s-1})$ và $T = \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{c} + \mathbf{w}}{1} & \frac{\mathbf{c}^2 - \mathbf{w}}{2} & \dots & \frac{\mathbf{c}^s - (-1)^s \mathbf{w}}{s-1} \end{pmatrix}$.

Khi đó (2.20) trở thành: $T = VG$. Do $\mathbf{c}$ có các thành phần phân biệt và khác 1 nên G khả nghịch. Vì vậy:

$$V = TG^{-1} \quad (2.21)$$

Khi đó công thức dự báo (2.16a) có cấp chính xác là $q = s$. Nếu phương pháp (2.1) có cấp chính xác $p = 2s + 1$ thì m "tối ưu" là $m = s$.

2.2.3. Sự hội tụ của quá trình lặp

Cũng như các phương pháp PC song song hiển dạng RK (xem [10, 4, 5]), tốc độ hội tụ của phương pháp PITRK được khôi phục bằng cách sử dụng phương trình thử $y'(t) = \lambda y(t)$, trong đó λ là giá trị riêng của ma trận Jacobian $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$. Áp dụng (2.16b) vào phương trình thử ta thu được:

$$\mathbf{Y}_n^{(j)} - \mathbf{Y}_n = zB[\mathbf{Y}_n^{(j-1)} - \mathbf{Y}_n], \quad z := h\lambda, \quad j = 1, \dots, m. \quad (2.22)$$

Do đó sự hội tụ của phương pháp được xác định là bán kính phổ $\rho(zB)$ của ma trận lặp zB . Vì vậy, điều kiện để phương pháp hội tụ là $\rho(zB) < 1$, hay

$$|z| < \frac{1}{\rho(B)} \quad \text{hoặc} \quad h < \frac{1}{\rho(\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}) \rho(B)}. \quad (2.23)$$

Đại lượng $\rho(B)$ được gọi là *nhân tử hội tụ* và $1/\rho(B)$ được gọi là *biên hội tụ* của phương pháp PITRK.

Miền hội tụ được ký hiệu là $\mathbb{S}_{conv}$ và được xác định bởi:

$$\mathbb{S}_{conv} := \{z : z \in \mathbb{C}, |z| < 1/\rho(B)\}. \quad (2.24)$$

2.2.4. Miền ổn định

Miền ổn định tuyến tính của phương pháp PITRK (2.16) được xác định bằng cách sử dụng phương trình thử $y'(t) = \lambda y(t)$, trong đó λ thuộc nửa bên trái của mặt phẳng phức. Thay công thức dự báo (2.16a) vào phương trình thử ta được:

$$\mathbf{Y}_n^{(0)} = \mathbf{w}\mathbf{u}_{n-1} + (\mathbf{e} - \mathbf{w})\mathbf{u}_n + zV\mathbf{Y}_{n-1},$$

trong đó $z := h\lambda$. Sử dụng công thức này cho $\mathbf{Y}_n^{(0)}$ và thay (2.16b) và (2.16c) vào phương trình thử ta được:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_n^{(m)} &= \mathbf{w}\mathbf{u}_{n-1} + (\mathbf{e} - \mathbf{w})\mathbf{u}_n + zA\mathbf{Y}_{n-1} + zB\mathbf{Y}_n^{(m-1)} \\ &= [I + zB + \dots + (zB)^{m-1}]\mathbf{w}\mathbf{u}_{n-1} + [I + zB + \dots + (zB)^{m-1}](\mathbf{e} - \mathbf{w})\mathbf{u}_n \\ &\quad + [I + zB + \dots + (zB)^{m-1}]zA\mathbf{Y}_{n-1} + (zB)^m\mathbf{Y}_n^{(0)} \\ &= [I + zB + \dots + (zB)^m]\mathbf{w}\mathbf{u}_{n-1} + [I + zB + \dots + (zB)^m](\mathbf{e} - \mathbf{w})\mathbf{u}_n \\ &\quad + \{[I + zB + \dots + (zB)^{m-1}]zA + (zB)^m zV\}\mathbf{Y}_{n-1} \end{aligned} \quad (2.25a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n+1} &= \theta\mathbf{u}_{n-1} + (1 - \theta)\mathbf{u}_n + z\mathbf{b}^T\mathbf{Y}_{n-1} + z\mathbf{d}^T\mathbf{Y}_n^{(m)} \\ &= \{\theta + z\mathbf{d}^T[I + zB + \dots + (zB)^m]\mathbf{w}\}\mathbf{u}_{n-1} \\ &\quad + \{1 - \theta + z\mathbf{d}^T[I + zB + \dots + (zB)^m](\mathbf{e} - \mathbf{w})\}\mathbf{u}_n \\ &\quad + \{z\mathbf{b}^T + z\mathbf{d}^T\{[I + zB + \dots + (zB)^{m-1}]zA + (zB)^m zV\}\}\mathbf{Y}_{n-1} \end{aligned} \quad (2.25b)$$

Hệ thức (2.25) có thể viết ở dạng:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_{n+1} \\ \mathbf{u}_n \\ \mathbf{Y}_n^{(m)} \end{pmatrix} = M(z) \begin{pmatrix} \mathbf{u}_n \\ \mathbf{u}_{n-1} \\ \mathbf{Y}_{n-1} \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

trong đó $M_m(z)$ là ma trận cỡ $(s+2) \times (s+2)$ được xác định bởi:

$$M_m(z) = \begin{pmatrix} 1 - \theta + z\mathbf{d}^T T_m(\mathbf{e} - \mathbf{w}) & \theta + z\mathbf{d}^T T_m \mathbf{w} & z\mathbf{b}^T + z\mathbf{d}^T T_{1m} \\ 1 & 0 & \mathbf{0}^T \\ T_m(\mathbf{e} - \mathbf{w}) & T_m \mathbf{w} & T_{1m} \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

với $T_m = I + zB + \dots + (zB)^m$ và $T_{1m} = [I + zB + \dots + (zB)^{m-1}]zA + (zB)^m zV$.

Ma trận $M_m(z)$ xác định bởi (2.27) sẽ quyết định tính ổn định của phương pháp PITRK và được gọi là *ma trận khuếch đại*. Bán kính phổ $\rho(M_m(z))$ được gọi là *hàm ổn định* của phương pháp PITRK. Với mỗi số lần lặp m , miền ổn định $\mathbb{S}_{stab}(m)$ của phương pháp PITRK được định nghĩa là:

$$\mathbb{S}_{stab}(m) := \{z \in \mathbb{C}^- : \rho(M_m(z)) \leq 1\}.$$

Với mỗi số lần lặp m , biên ổn định thực $\beta_{re}(m)$ và biên ổn định ảo $\beta_{im}(m)$ được định nghĩa theo cách quen thuộc.

2.3. Các thử nghiệm số

Trong mục này, chúng ta trình bày về các thử nghiệm số để so sánh phương pháp PITRK với các phương pháp PC song song và các mã tuần tự đã có trong các tài liệu. Chúng ta xét các phương pháp PITRK có bước lưới cố định với $s = 1$ và $s = 2$ và chứng tỏ rằng nó hiệu quả hơn so với các phương pháp và các mã hiện có. Trong việc áp dụng các phương pháp PITRK trong bước tích phân đầu tiên, chúng ta luôn sử dụng công thức dự báo được cho bởi:

$$\mathbf{Y}_{0,i}^{(0)} = \mathbf{y}_0, \quad i = 1, \dots, s.$$

và giá trị $\mathbf{y}_1$ được tính bằng phương pháp PIRK(xem [2]) cùng bậc.

Các sai số tuyệt đối tại điểm cuối của đoạn lấy tích phân được cho ở dạng 10^{-NCD} (NCD thể hiện độ chính xác được hiểu là số trung bình các chữ số thập phân có nghĩa). Chi phí tính toán được đo bằng các giá trị của $NFUN$ biểu thị tổng số lần tính toán hàm về phải f .

Trong so sánh số, một phương pháp được cho là hiệu quả hơn nếu với cùng một chi phí tính toán được xác định bởi $NFUN$, thì nó có độ chính xác cao hơn được xác định bởi NCD hoặc tương đương, với cùng độ chính xác NCD thì chi phí tính toán $NFUN$ ít hơn.

Bỏ qua yếu tố thời gian thông tin liên lạc giữa các bộ xử lý trong phương pháp song song, sự so sánh các phương pháp khác nhau trong phần này được dựa trên các giá trị của NCD và $NFUN$. Các so sánh với các bài toán thử nghiệm được sử dụng rộng rãi từ các tài liệu dưới đây cho thấy các phương pháp PITRK mới có những ưu điểm tốt hơn so với các phương pháp và các mã đã có trong các tài liệu. Ưu điểm này sẽ rất rõ ràng nếu ta thực hiện tính toán trên máy song song cho các bài toán có kích thước đủ lớn và hoặc đánh giá hàm về phải f rất đắt (xem [2]).

Để thấy được tính hội tụ của phương pháp PITRK, chúng ta áp dụng cùng một chiến lược động trong tất cả các phương pháp lặp PC song song để xác định số lần lặp trong các bước kế tiếp.

Một cách có vẻ tự nhiên khi yêu cầu rằng sai số lặp cùng có một bậc theo h giống như bậc chính xác của phương pháp hiệu chỉnh. Điều này dẫn đến điều kiện dừng sau đây (xem [10, 3])

$$\|\mathbf{Y}_n^{(m)} - \mathbf{Y}_n^{(m-1)}\|_\infty \leq TOL = Ch^p, \quad (2.28)$$

trong đó C là một tham số phụ thuộc vào phương pháp và bài toán, p là cấp chính xác của phương pháp hiệu chỉnh.

Tất cả các tính toán được tính trên máy tính có độ chính xác tới 14 chữ số.

2.3.1. So sánh với các phương pháp song song

Chúng ta so sánh các phương pháp PITRK được xét trong chương này có cấp chính xác là 4 với $\mathbf{c} = [1.21348707; 1.749189597]$ (kí hiệu là PITRK4) với các phương pháp PIRK được đề xuất trong [9] có cùng bậc (kí hiệu là PIRK4). Các phương pháp PIRK được công nhận là các phương pháp đáng tin cậy và hiệu quả của các phương pháp PC song song. Các phương pháp PITRK và PIRK được sử dụng cùng một điều kiện dừng (2.28). Số lần lặp m trong các bước được xác định bởi điều kiện dừng này.

Chúng ta thực hiện trên hai bài toán thử:

Bài toán JACB - Bài toán Jacobi elliptic đối với các hàm sn , cn , dn cho phương trình chuyển động của một vật thể cứng không có ngoại lực (xem [11, p. 240]).

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= y_2(t)y_3(t), & y_1(0) &= 0, \\ y_2'(t) &= -y_1(t)y_3(t), & y_2(0) &= 1, \\ y_3'(t) &= -0.51y_1(t)y_2(t), & y_3(0) &= 1, \end{aligned} \quad 0 \leq t \leq 20.$$

Nghiệm chính xác được xác định bởi các hàm Jacobi elliptic $y_1(t) = sn(t; k)$, $y_2(t) = cn(t; k)$, $y_3(t) = dn(t; k)$ (xem [4]).

Bài toán FEHL - Bài toán Fehberg (xem [10, 9, 4])

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= 2ty_1(t)\log(\max\{y_2(t), 10^{-3}\}), & y_1(0) &= 1, \\ y_2'(t) &= -2ty_2(t)\log(\max\{y_1(t), 10^{-3}\}), & y_2(0) &= e, \end{aligned} \quad 0 \leq t \leq 5,$$

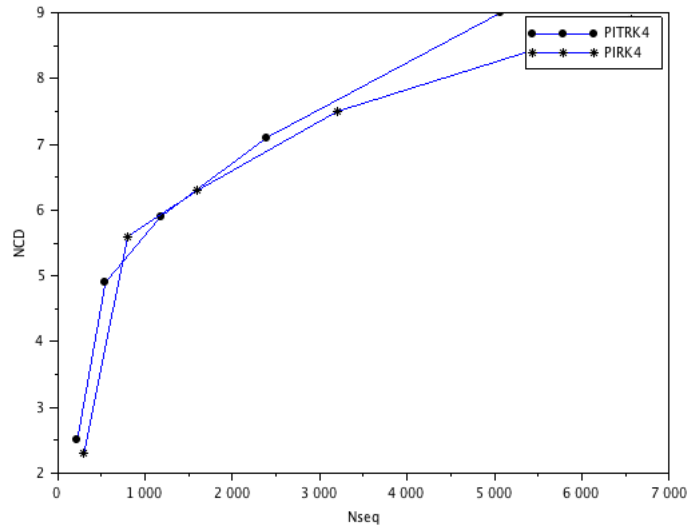
với nghiệm chính xác là: $y_1(t) = \exp(\sin(t^2))$, $y_2(t) = \exp(\cos(t^2))$.

Với bài toán **JACB**, kết quả số được trình bày trong Hình 1. Ta nhận thấy rằng phương pháp PITRK hiệu quả hơn nhiều so với phương pháp PIRK cùng cấp chính xác.

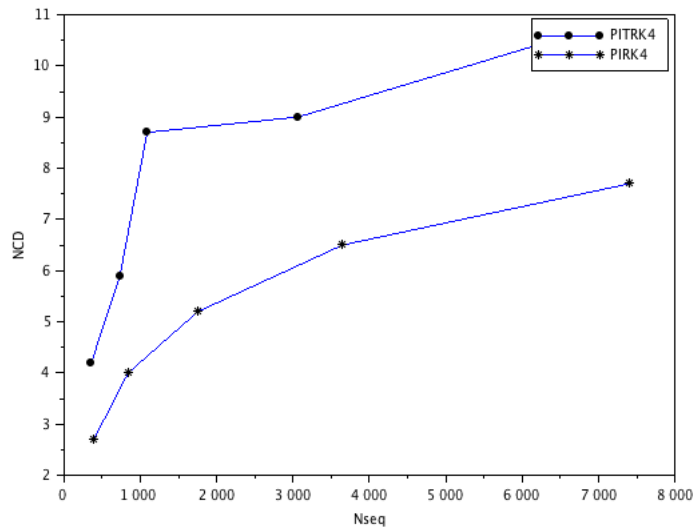
Với bài toán **FEHL**, kết quả số được trình bày trong Hình 2 cho chúng ta một kết luận giống như trong bài toán **JACB**.

2.3.2. So sánh với các mã tuần tự

Trong mục 2.3.1, chúng ta đã so sánh các phương pháp PITRK với các phương pháp PIRK. Trong mục này, chúng ta sẽ so sánh các phương pháp PITRK với một số mã tuần tự vào loại tốt nhất cho bài toán không cưỡng có trong các tài liệu.



Hình 1. So sánh với phương pháp song song cho bài toán JACB

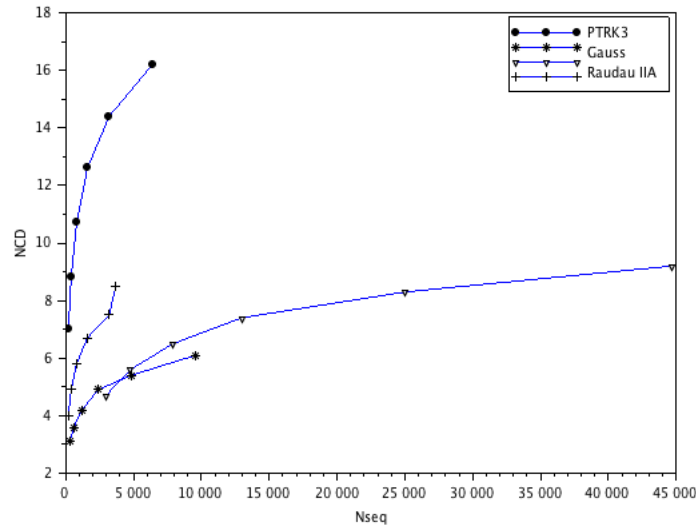


Hình 2. So sánh với phương pháp song song cho bài toán FEHL

Ở đây chúng ta hạn chế so sánh phương pháp PITRK có $\mathbf{c} = [1]$ có cấp chính xác 3 (kí hiệu là PITRK3) với các mã tuần tự Gauss, Radau IIA và BDF.

Bài toán tuyến tính (xem [7]).

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= -2y_1(t) + y_2(t) + 2\sin t, & y_1(0) &= 2, \\ y_2'(t) &= y_1(t) - 2y_2(t) + 2(\cos t - \sin t), & y_2(0) &= 3, \end{aligned} \quad 0 \leq t \leq 10.$$



Hình 3. So sánh với code tuần tự cho bài toán tuyến tính

Kết quả số cho thấy phương pháp PITRKG2 là phương pháp hiệu quả nhất.

3. Kết luận

Trong bài báo này chúng ta đã giới thiệu một lớp phương pháp mới để giải bài toán giá trị ban đầu của hệ phương trình vi phân cấp một $y'(t) = f(t, y(t))$ là phương pháp lặp song song RK hai bước (PITRK). Các kết quả số khi thử nghiệm phương pháp này trên một số bài toán thử cho thấy phương pháp PITRK tỏ ra hiệu quả hơn so với các phương pháp song song và các mã tuần tự hiện có.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] J.C. Butcher, 1987. *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, Runge-Kutta and General Linear Methods*, Wiley, New York.
- [2] K. Burrage, 1995. *Parallel and Sequential Methods for Ordinary Differential Equations*, Clarendon Press, Oxford.
- [3] N.H. Cong and T. Mitsui, 1997. A class of explicit parallel two-step Runge-Kutta methods, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, **14**, pp. 303-313.
- [4] N.H. Cong and L.N. Xuan, 2008. Twostep-by-twostep PIRK-type PC methods with continuous output formulas, *J. Comput. Appl. Math.*, **221**, pp. 165-173.
- [5] N.H. Cong and N.T. Thuy, 2011. Two-step-by-two-step PIRK-type PC methods based on Gauss-Legendre collocation points, *J. Comput. Appl. Math.*, **236**, pp. 225-233.
- [6] R. D'Ambrosio, M. Ferro and B. Paternoster, 2007. A General family of two step collocation methods for ordinary differential equations, *AIP Conference Proceedings*, **936**, pp. 45-48.

- [7] R. D'Ambrosio, M. Ferro and B. Paternoster, 2008. Collocation-Based two step Runge-Kutta methods for ordinary differential equations, *Conference: Computational Science and Its Applications-ICCSA*, Part II, pp. 736-751.
- [8] R. D'Ambrosio, M. Ferro, Z. Jackiewicz and B. Paternoster, 2010. Almost two step collocation methods for ordinary differential equations, *Numerical Algorithms*, **53**, pp. 195-217.
- [9] P.J. van der Houwen and B.P. Sommeijer, 1990. Parallel iteration of high-order Runge-Kutta methods with stepsize control, *J. Comput. Appl. Math.*, **29**, pp. 111-127.
- [10] N.H. Cong, 1994. Parallel iteration of symmetric Runge-Kutta methods for nonstiff initial-value problems, *J. Comput. Appl. Math.*, **51**, pp. 117-125.
- [11] E. Hairer, S.P. Nørsett and G. Wanner, 1993. *Solving Ordinary Differential Equations I, Nonstiff Problems*, 2nd edition, Springer-Verlag, Berlin.

ABSTRACT

Parallel iteration of two-step Runge-Kutta methods

Nguyen Thu Thuy

Faculty of Mathematics, Hanoi National University of Education

In this paper, we introduce the Parallel iteration of two-step Runge-Kutta methods for solving non-stiff initial-value problems for systems of first-order differential equations (ODEs): $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$, for use on parallel computers. Starting with an s -stage implicit two-step Runge-Kutta (TSRK) method of order p , we apply the highly parallel predictor-corrector iteration process in $P(EC)^mE$ mode. In this way, we obtain an explicit two-step Runge-Kutta method that has order p for all m , and that requires $s(m+1)$ right-hand side evaluations per step of which each s evaluation can be computed parallelly. By a number of numerical experiments, we show the superiority of the parallel predictor-corrector methods proposed in this paper over both sequential and parallel methods available in the literature.

Keywords: Runge-Kutta methods, Predictor-corrector, stability, Parallelism.