

УДК 519.6

МЕТОД РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ ДВУМЕРНОЙ ДЕКОМПОЗИЦИИ РАСЧЕТНОЙ СЕТКИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПО МЕТОДИКЕ КОРОНА-2D

В. В. Ляпин, Р. А. Королев, А. В. Ветчинников
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Описан метод распараллеливания с применением двумерной декомпозиции расчетной сетки с наложением в один столбец и весь диапазон строк вдоль каждого столбца, рассчитываемого на процессоре. Данный подход гарантирует полноту информации как о геометрических, так и термодинамических параметрах ячеек вне зависимости от степени неортогональности расчетной сетки.

Приведены результаты тестовых расчетов на точность и эффективность распараллеливания, полученные при различных декомпозициях расчетной сетки.

Ключевые слова: методика КОРОНА, двумерное уравнение теплопроводности, двумерная декомпозиция расчетной сетки, параллельный решатель NEWT.

Введение

В РФЯЦ-ВНИИЭФ разработана методика КОРОНА [1, 2], предназначенная для решения многомерных задач механики сплошной среды. Программная реализация данной методики позволяет проводить расчеты задач в однообластной и многообластной постановках как в последовательном, так и параллельном режиме.

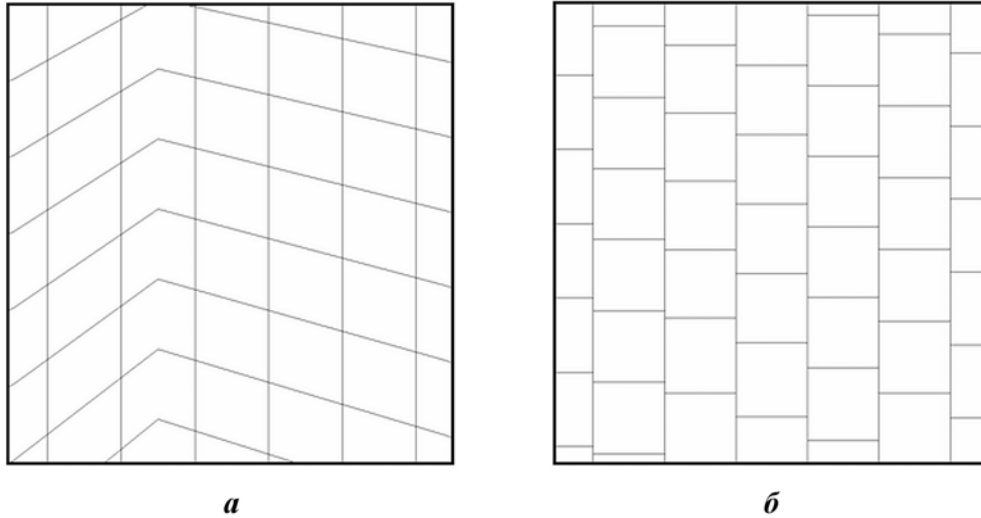
В настоящее время в методике КОРОНА для численного решения в параллельном режиме двумерных задач газовой динамики с теплопроводностью используется декомпозиция расчетной сетки по группе столбцов с наложением в один столбец. Как показала практика расчетов, данный подход обеспечивает хорошую эффективность распараллеливания.

Однако ограничение на количество используемых процессоров (их число не может превышать количества столбцов расчетной сетки) потребовало рассмотреть вариант применения двумерной декомпозиции расчетной сетки, который позволяет использовать большее количество процессоров.

Основные положения методики КОРОНА численного решения двумерного уравнения теплопроводности

Численное решение двумерного уравнения теплопроводности по методике КОРОНА базируется на следующих принципах:

1. Используется лагранжево-эйлерова расчетная сетка.
2. Для получения системы конечно-разностных уравнений применяется как основная (рис. 1, *а*), так и вспомогательная (рис. 1, *б*) расчетная сетка. Вспомогательная сетка согласована с основной и строится исходя из аппроксимации объемов ячеек.
3. Некоторые ячейки расчетной сетки могут содержать несколько веществ. Такие ячейки в дальнейшем будем называть *составными*, так как они состоят из нескольких компонентов (подъячеек), каждый из которых соответствует определенному веществу. Данные компоненты имеют свои геометрические и термодинамические параметры (координаты, объем, скорость, плотность, температуру, внутреннюю энергию и т. д.). Ячейки,

Рис. 1. Расчетные сетки: *a* — основная; *б* — вспомогательная

- содержащие одно вещество, будем называть *чистыми*.
4. Решение уравнения теплопроводности осуществляется по одинаковым формулам как для чистых, так и для составных ячеек расчетной сетки.
 5. Для аппроксимации исходного дифференциального уравнения используется неявная разностная схема с переменным по размеру разностным шаблоном. Размер разностного шаблона зависит от степени неортогональности расчетной сетки: чем она больше, тем больше ячеек привлекается для аппроксимации потоков энергии в данную ячейку.
 6. Расчет потоков энергии в ячейки осуществляется одновременно вдоль обоих пространственных направлений (радиального — соответствующего увеличению номера строки расчетной сетки — и углового — по увеличению номера столбца).
 7. Задачи, имеющие сложную геометрическую форму, разбиваются на области, каждая из которых рассчитывается на своей, наиболее подходящей расчетной сетке.
 8. В случае многообластной постановки расчета потоки энергии на границе областей рассчитываются по неявной схеме, как и внутри отдельной области.
 9. Получаемая в процессе решения система конечно-разностных уравнений методом линеаризации по уравнению состояния сводится к решению системы линейных алгебра-

- ических уравнений (СЛАУ) относительно температур в центрах ячеек/компонентов.
10. Для решения полученных СЛАУ используется решатель NEWT [3].
 11. Размерность СЛАУ может изменяться на временных шагах из-за изменения количества компонентов в составных ячейках.

Преимущества и недостатки декомпозиций расчетной сетки

Изначально в методике КОРОНА для численного решения двумерного уравнения теплопроводности использовалась одномерная декомпозиция расчетной сетки по группе столбцов. Данный подход к формированию декомпозиции обеспечивал полноту информации как о геометрических, так и термодинамических данных. Однако, как уже было упомянуто, из-за ограничения на количество используемых процессоров было решено рассмотреть вариант применения двумерной декомпозиции расчетной сетки.

Для методики КОРОНА при использовании декомпозиции по группе столбцов стандартным является наложение в один столбец. При использовании двумерной декомпозиции по группе столбцов и строк полностью аналогичный подход не применим. Если для группы столбцов использование одного столбца в качестве наложения возможно всегда, то для группы строк при наличии нескольких соседних ячеек (по угловому направлению) наложения в одну строку будет недостаточно.

Например, на рис. 2 (см. также цветную вкладку) жирная линия обозначает границы между ячейками, рассчитываемыми на разных процессорах, разными цветами отмечены следующие ячейки:

- зеленым — счетные ячейки рассматриваемого процессора;
- желтым — ячейки на столбцах и строках наложения;
- оранжевым — ячейки, информация о которых необходима для решения системы конечно-разностных уравнений, но которые не являются ячейками наложения для данного процессора.

Как видно из рис. 2, при расчете величин, необходимых для численного решения уравнения теплопроводности [2], требуются данные о геометрических и термодинамических параметрах ячеек, отмеченных оранжевым цветом. Их можно получить либо с помощью межпроцессорных обменов необходимыми данными, либо используя не одну строку наложения, а несколько, в зависимости от степени неортогональности расчетной сетки.

Однако оба подхода достаточно трудоемки при учете процессов газовой динамики, так как в силу изменения соседства ячеек в первом случае

необходимо будет рассчитывать размеры массивов для приема и отправки информации, а во втором — перестраивать декомпозицию расчетной сетки на каждом шаге. Поэтому было предложено в качестве строк наложения использовать весь диапазон строк вдоль каждого столбца, рассчитываемого на данном процессоре. Другими словами, для рассматриваемого процессора будут доступны все данные из ячеек, отмеченных на рис. 3 (см. также цветную вкладку) зеленым и желтым цветом, однако расчет необходимых величин будет выполняться только для ячеек, отмеченных зеленым цветом.

Данный подход гарантирует полноту информации как о геометрических, так и термодинамических параметрах ячеек вне зависимости от степени неортогональности расчетной сетки. Помимо этого, он позволяет применять нерегулярное разбиение на счетные области, т. е. использовать *комбинированную двумерную* декомпозицию расчетной сетки, одновременно сочетающую в себе как одномерное разбиение по группе столбцов, так и двумерное — по группе строк и столбцов расчетной сетки (рис. 4, см. также цветную вкладку). Применение комбинированной декомпозиции расчетной сетки наиболее эффективно в случае сильной разбалансировки вычислительной нагрузки процессоров, например,

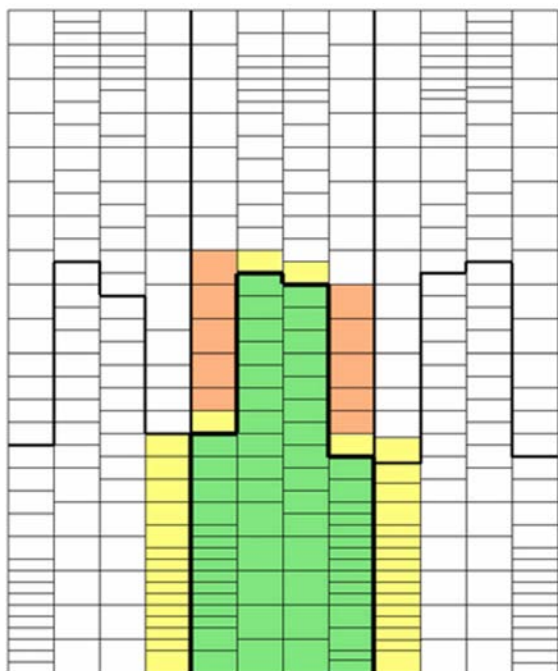


Рис. 2. Распределение ячеек расчетной сетки по процессорам при двумерной декомпозиции

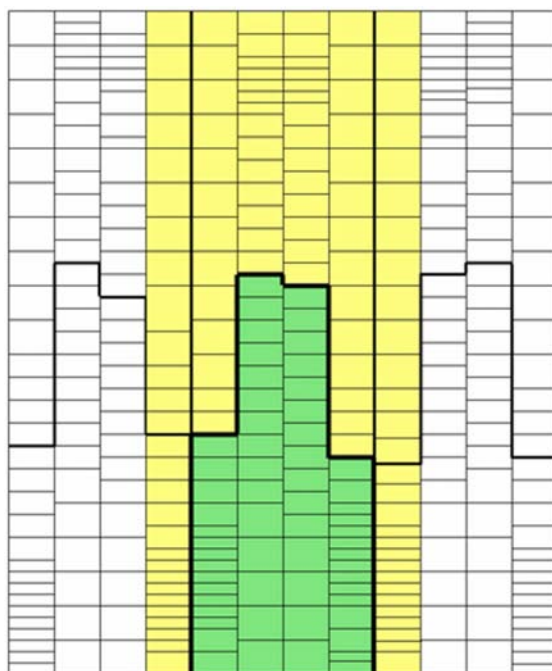


Рис. 3. Фрагмент расчетной сетки со счетными ячейками и ячейками наложения для одного процессора

для локализации участка с особо большой вычислительной нагрузкой (на рис. 4 отмечен красным контуром).

На рис. 5 (см. также цветную вкладку) приведены примеры использования одномерной, двумерной и комбинированной двумерной декомпозиций расчетной сетки для одной и той же задачи.

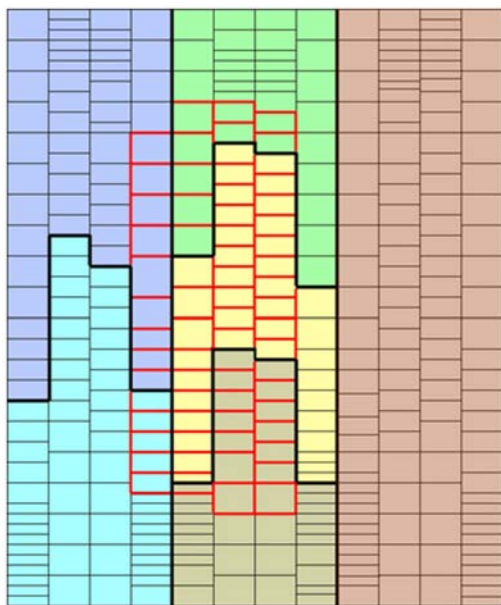


Рис. 4. Комбинированная двумерная декомпозиция

Построение двумерной декомпозиции сетки

В данной статье описание метода построения комбинированной двумерной декомпозиции приводить не будем, ограничимся построением двумерной декомпозиции расчетной сетки.

Декомпозиция расчетной сетки строится исходя из требования равномерной загрузки процессоров, которая (как и для одномерной декомпозиции) условно принимается совпадающей с количеством счетных ячеек на процессоре.

Опишем подробно построение двумерной декомпозиции для группы столбцов (для группы строк используется аналогичный подход). Отметим, что это построение проводится для основной расчетной сетки.

Будем использовать следующие обозначения: k , m — общее количество столбцов и строк расчетной сетки соответственно; n — общее число процессоров; n_x , n_y — заданное количество процессоров для расчета соответственно по угловому и радиальному направлениям; i — номер рассматриваемого процессора.

При получении формул декомпозиции граничные столбцы не учитываются, поэтому в дальнейшем будет использоваться величина $k^* = k - 2$.

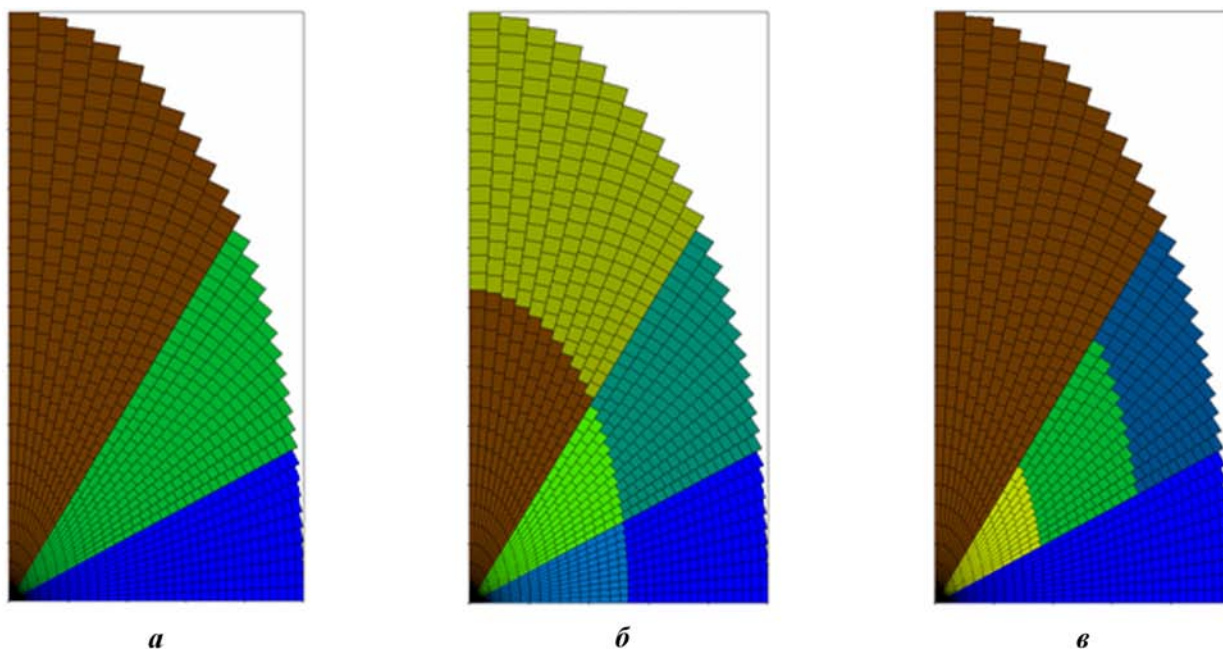


Рис. 5. Декомпозиции расчетной сетки: *a* — одномерная; *b* — двумерная; *в* — комбинированная двумерная

В случае, когда k^* делится нацело на n_x , количество счетных столбцов на каждом процессоре будет равным $k_i = k^*/n_x$ ($1 \leq i \leq n$).

Если же k^* нацело не делится на n_x , т. е. имеется остаток от деления k_0 , то на первых k_0 процессорах будут рассчитываться $k_i = k^*/n_x + 1$ ($1 \leq i \leq k_0$) столбцов, а на остальных процессорах $k_j = k^*/n_x$ ($k_0 + 1 \leq j \leq n$) столбцов.

Аналогично будут выглядеть формулы для декомпозиции строк: на каждом процессоре их рассчитывается m^*/n_y или $m^*/n_y + 1$ в зависимости от количества строк и числа разбиений по радиальному направлению.

В качестве столбцов наложения используется по одному столбцу слева от первого и справа от последнего счетного столбца на текущем процессоре (общее количество столбцов для i -го процессора равно $k_i + 2$), а в качестве строк наложения — весь диапазон строк m (см. рис. 3, а также цветную вкладку).

Таким образом, после формирования декомпозиции расчетной сетки для каждого процессора имеется информация о диапазоне рассчитываемых на нем столбцов и строк.

Постановка задач и результаты расчетов

Для того чтобы проверить правильность созданных программ, была проведена серия расчетов для стационарной двухобластной задачи с функцией источника [4].

Сфера радиусом $r = 2$ разделена сферой радиусом $r = 1$ на области 1 и 2 (рис. 6), заполненные разными веществами, холодными в начальный момент времени. В области 1 задано постоянное по времени энерговыделение:

$$W = \frac{\partial E}{\partial T} = 6.$$

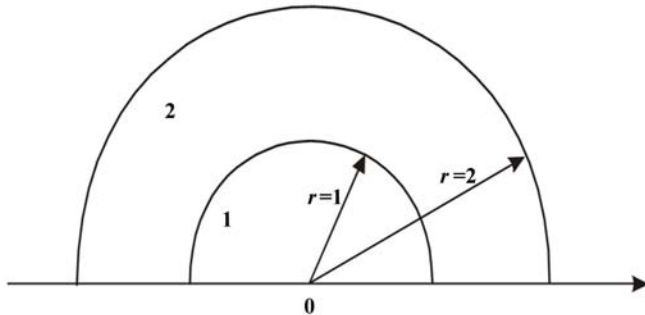


Рис. 6. Сечение геометрии стационарной двухобластной задачи с функцией источника

На верхней границе области 2 задано условие *свободной поверхности*. С течением времени в двухслойной сферической системе устанавливается стационарный тепловой режим с профилем температуры, подлежащим расчету.

Уравнение теплопроводности для данной задачи имеет вид

$$\rho_i \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \kappa_i \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad i = 1, 2.$$

Параметры веществ в областях 1 и 2 определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \rho_1 &= 1; & E_1 &= T; & \kappa_1 &= \frac{\ell_1 C}{3} 4\sigma T^3; \\ \ell_1 &= 1,82216 \cdot 10^{-4}; \\ \rho_2 &= 1; & E_2 &= T; & \kappa_2 &= \frac{\ell_2 C}{3} 4\sigma T^3; \\ \ell_2 &= 1,45772 \cdot 10^{-3} T^4. \end{aligned}$$

Расчет на точность проводился до момента времени $t = 1,6$ с шагом по времени $\tau = 0,001$ на одной расчетной сетке (рис. 7) с использованием различных типов декомпозиции:

- область 1: 10 строк \times 10 столбцов;
- область 2: 30 строк \times 30 столбцов.

На рис. 8 приведены профили температур на конечный момент времени, полученные при различных декомпозициях сетки, в сравнении с профилем, рассчитанным на одном процессоре, и с аналитическим решением.

На рис. 9 (см. также цветную вкладку) приведены поля температур, полученные на конечный момент времени в разных режимах счета.

Как показали расчеты, значения температур для различных режимов счета совпали с точностью 10^{-7} , что свидетельствует о правильности созданных программ.

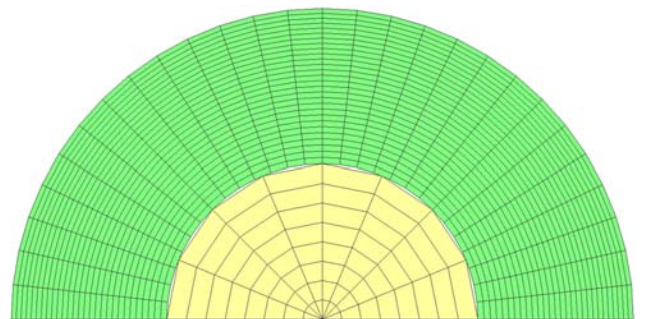


Рис. 7. Вид расчетной сетки

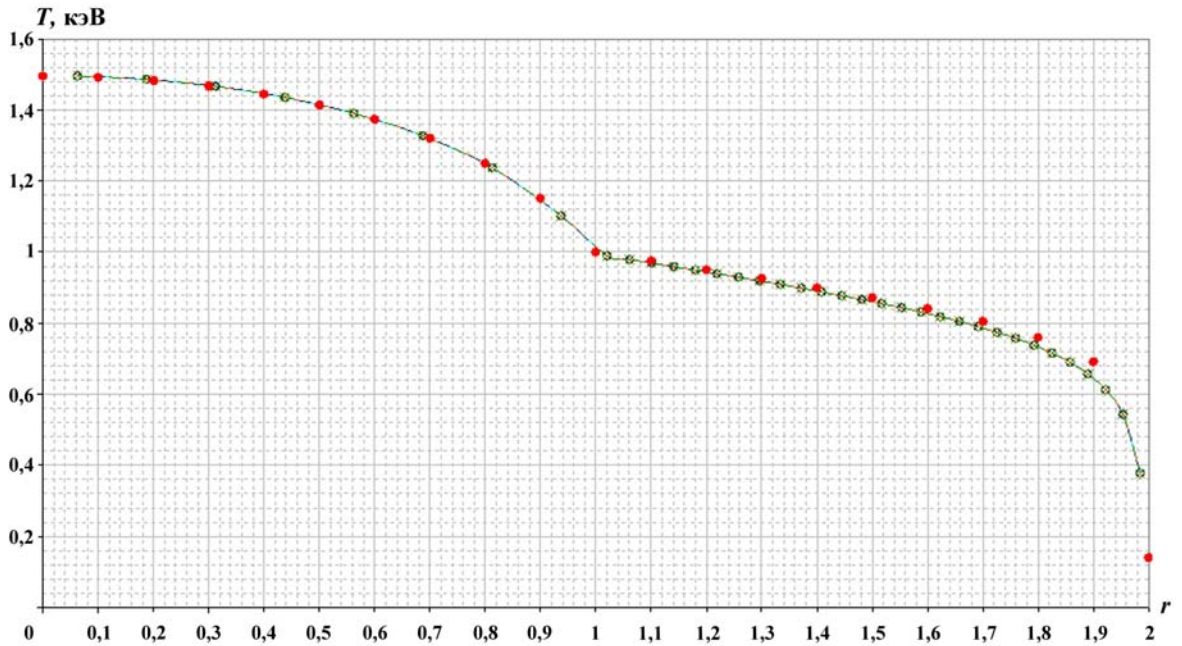


Рис. 8. Профили температур $T(t, x = 0,5, y, z = 0,5)$ для стационарной двухобластной задачи с функцией источника: — численное решение на одном процессоре; — \diamond — численное решение, двумерная декомпозиция; — \times — численное решение, одномерная декомпозиция; — \circ — численное решение, комбинированная двумерная декомпозиция; \bullet — аналитическое решение

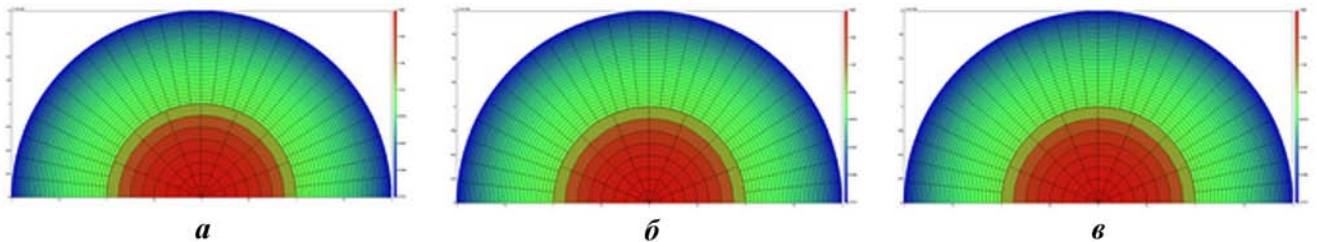


Рис. 9. Расчетное поле температур на конечный момент времени стационарной двухобластной задачи с функцией источника: а — одномерная декомпозиция; б — двумерная декомпозиция; в — комбинированная двумерная декомпозиция

Для исследования эффективности распараллеливания была проведена серия расчетов двух модельных задач с многообластной геометрией в различных системах координат. Данные задачи взяты исходя из следующих соображений:

- в задаче 1 вычислительная нагрузка распределена примерно одинаково по всей расчетной сетке;
- в задаче 2 имеются участки расчетной сетки с вычислительной нагрузкой значительно выше средней по задаче.

В табл. 1, 2 приведены распределения точек по областям для задач 1, 2.

Как для задачи 1, так и для задачи 2 рассчитывалось 100 шагов по времени с $\tau = 0,001$.

В табл. 3 приведены результаты таймирования блока теплопроводности (в том числе данные STK [5]) при расчете задачи 1 с использованием различных декомпозиций расчетной сетки. Видно, что при равномерной загрузке процессоров использование двумерной декомпозиции ускоряет время выполнения блока теплопроводности на одинаковом количестве процессоров до 34% по сравнению с одномерной декомпозицией.

На рис. 10 показаны зависимости времени расчетов и эффективности распараллеливания по данным STK от количества процессоров.

Общее время выполнения блока теплопроводности задачи 1 снижается на всем поле используемых процессоров как при одномерной, так и при двумерной декомпозиции, при этом эффек-

тивность распараллеливания по данным STK составляет ~ 50–80 %.

В табл. 4 приведены результаты таймирования блока теплопроводности при расчете задачи 2 с использованием различных декомпозиций

Таблица 1
Распределение точек по областям для задачи 1

Номер области	Количество строк	Количество столбцов	Общее число точек
1	172	62	10 664
2	185	64	11 840
3	200	406	81 200
4	325	2 698	876 850
5	196	607	118 972

Таблица 2
Распределение точек по областям для задачи 2

Номер области	Количество строк	Количество столбцов	Общее число точек
1	241	221	53 261
2	127	65	8 255
3	311	453	140 883
4	49	249	12 201

Результаты таймирования для задачи 1

Таблица 3

Количество процессоров	Тип декомпозиции	Время расчета	Ускорение программы при двумерной декомпозиции	Время работы решателя	Ускорение решателя при двумерной декомпозиции	Время расчета элементов матрицы	Эффективность по STK, %
160	Одномерная	44,95	—	17,45	—	19,34	72,29
	Двумерная	44,03	1,02	16,87	1,03	19,29	74,34
320	Одномерная	25,02	—	13,38	—	7,29	61,72
	Двумерная	21,70	1,15	10,34	1,29	7,26	61,30
460	Одномерная	22,63	—	12,97	—	5,53	57,21
	Двумерная	18,03	1,26	9,21	1,41	5,32	58,12
520	Одномерная	22,08	—	13,20	—	5,21	54,46
	Двумерная	17,38	1,27	9,26	1,43	4,92	53,93
840	Одномерная	20,70	—	13,46	—	3,76	50,08
	Двумерная	15,50	1,34	8,64	1,56	3,72	51,30

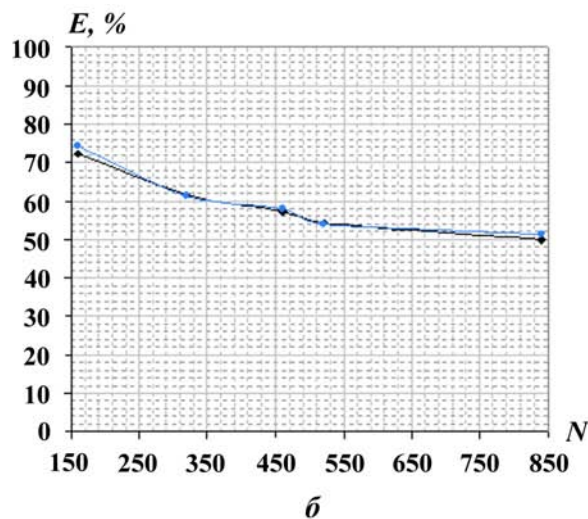
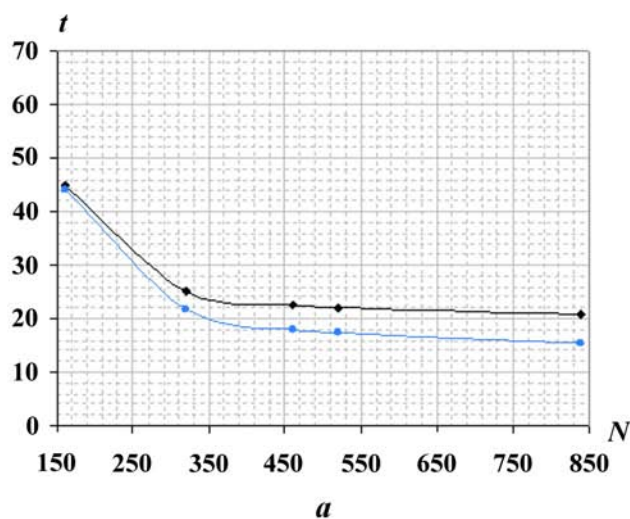


Рис. 10. Зависимости времени расчетов (а) и эффективности распараллеливания (б) от количества процессоров для задачи 1: —◆— — одномерная декомпозиция; —●— — двумерная декомпозиция

расчетной сетки. Из таблицы видно, что при несбалансированной загрузке процессоров время выполнения блока теплопроводности с использованием двумерной и одномерной декомпозиций расчетной сетки практически одинаково, но применение комбинированной двумерной декомпозиции позволяет ускорить время расчета до 20 %.

Так как в задаче 2 имеются участки расчетной сетки с большей вычислительной нагрузкой, то наблюдается сильная разбалансировка при использовании одномерной и двумерной декомпозиций. Применение комбинированной двумерной декомпозиции расчетной сетки было направлено на уменьшение данной разбалансировки.

На рис. 11 (см. также цветную вкладку) показаны зависимости времени расчетов и эффективности распараллеливания по данным STK от количества процессоров для задачи 2.

Общее время выполнения блока теплопроводности для этой задачи снижается на всем поле используемых процессоров при любой декомпозиции, при этом эффективность распараллеливания составляет ~ 50–80 %.

Заключение

В методике КОРОНА модифицирована программа численного решения двумерного уравне-

Таблица 4

Результаты таймирования для задачи 2

Количество процессоров	Тип декомпозиции	Время расчета теплопроводности	Ускорение программы теплопроводности при двумерной декомпозиции	Время работы решателя	Время расчета элементов матрицы	Эффективность по STK, %
40	Одномерная	26,34	—	7,17	14,85	79,01
	Двумерная	26,30	1,00	7,30	14,77	77,32
	Комбинированная	23,06	1,14	6,81	12,13	80,19
60	Одномерная	20,54	—	5,93	11,59	69,68
	Двумерная	20,49	1,00	6,23	11,42	70,02
	Комбинированная	17,10	1,20	6,06	8,17	74,69
80	Одномерная	15,45	—	5,15	7,98	65,61
	Двумерная	16,90	0,91	5,27	9,24	63,58
	Комбинированная	14,35	1,08	5,20	6,85	69,31
160	Одномерная	12,57	—	4,82	5,86	61,23
	Двумерная	12,50	1,01	4,58	6,05	58,67
	Комбинированная	11,20	1,12	4,46	4,70	62,78
236	Двумерная	9,53	1,31	4,22	4,02	54,97
	Комбинированная	9,13	1,04	4,21	3,68	60,07

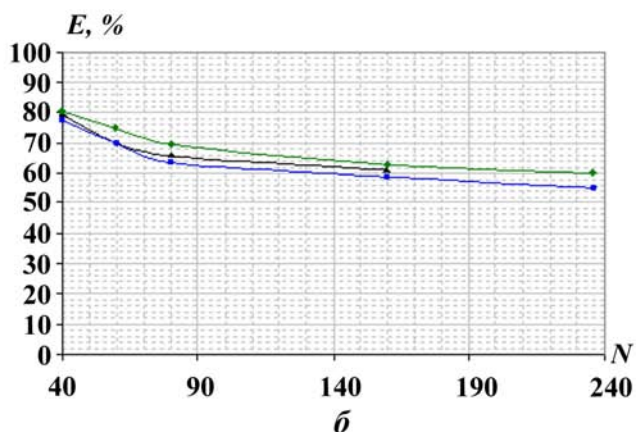
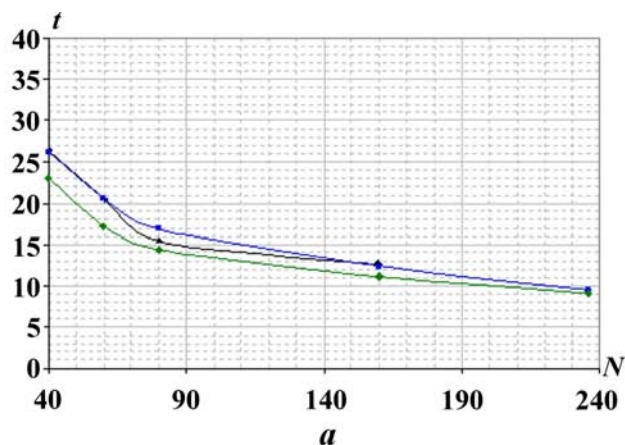


Рис. 11. Зависимости времени расчетов (а) и эффективности распараллеливания (б) от количества процессоров для задачи 2: —▲— — одномерная декомпозиция; —■— — двумерная декомпозиция; —◆— — комбинированная декомпозиция

ния теплопроводности для возможности проведения расчетов с использованием двумерной и комбинированной двумерной декомпозиций расчетной сетки.

Разработан и реализован метод формирования двумерной декомпозиции расчетной сетки, когда в качестве наложения по радиальному направлению используется весь диапазон строк. Данный подход позволяет не только избежать лишних обменов данными при сильно неортогональной сетке, но и формировать в любой момент времени произвольную, более подходящую ее декомпозицию.

Проведена серия расчетов в многопроцессорном режиме с использованием одномерной, двумерной и комбинированной двумерной декомпозиций. По их результатам сделаны следующие выводы (все сравнения проведены по отношению к одномерной декомпозиции на одинаковом количестве процессоров):

1. Для задач с равномерным распределением вычислительной нагрузки применение двумерной декомпозиции существенно ускоряет работу решателя (до 1,5 раза), тем самым уменьшая время выполнения блока теплопроводности примерно до 25 %. При этом эффективность распараллеливания по данным STK, как правило, не ниже, чем при использовании одномерной декомпозиции;
2. Для задач, имеющих участки расчетной сетки с большей вычислительной нагрузкой, применение комбинированной двумерной декомпозиции расчетной сетки за счет лучшего распределения вычислительной нагрузки по процессорам позволяет снизить время расчета элементов матрицы приблизительно до 30 %, тем самым снижая время выполнения блока теплопроводности примерно до 15 %.

Список литературы

1. *Скрыпник С. И., Рудько Н. М., Королев Р. А. и др.* Численное решение двумерных уравнений газовой динамики с теплопроводностью с использованием переменного по размеру разностного шаблона // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 1. С. 14–26.
2. *Рудько Н. М., Скрыпник С. И.* Методика и программа численного решения трехмерного (двумерного) уравнения теплопроводности по полностью неявной разностной схеме на переменном пространственном шаблоне // Там же. 1999. Вып. 3. С. 74–79.
3. *Чеботарь С. В., Сухих А. С., Королев Р. А.* Параллельная версия линейного решателя NEWT, допускающая произвольную декомпозицию счетной области по процессорам // Сб. докл. V науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. С. 199–205.
4. *Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Горев В. В. и др.* Описание набора тестов для методик и программ, предназначенных для решения двумерных задач теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1992. Вып. 2. С. 14–20.
5. *Новаев Д. А., Бартнев Ю. Г., Варгин А. М. и др.* Инструментальные средства исследования эффективности параллельных приложений — STK // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2007. Вып. 11. С. 92–99.

Статья поступила в редакцию 27.06.13.