

Комбинированная MPI+threads параллельная реализация метода блоков для моделирования тепловых процессов в структурно-неоднородных средах

Д.Б. Волков-Богородский, Г.Б. Сушко, С.А. Харченко

В работе разрабатываются комбинированные MPI+threads параллельные алгоритмы аппроксимации решений нестационарного уравнения теплопроводности с фазовыми переходами на основе аналитического метода блоков. Метод блоков основан на приближении решения краевой задачи специальными функциями, являющимися фундаментальными решениями уравнения Гельмгольца. При этом возникает система линейных алгебраических уравнений с блочно-разреженной структурой и плотными подматрицами. Интенсивные вычисления с плотными подматрицами распараллеливаются на основе потоков вычислений с использованием общей памяти. Относительно независимые вычисления с блочно разреженной структурой распараллеливаются по распределенной памяти с помощью MPI. Предлагаемый комбинированный подход к организации параллельных вычислений позволяет эффективно использовать неоднородную структуру организации памяти в современных кластерных системах.

1. Введение

В настоящей работе развиваются численно-аналитические методы для моделирования теплофизических процессов в структурно-неоднородных средах. Эти методы основаны на аппроксимации решений соответствующих краевых задач механики сплошных сред рядами по специальным системам функций, являющимися фундаментальными решениями уравнения Гельмгольца, и обладают высокой степенью точности. В структуре аппроксимирующих функций, для построения которых предложен конструктивный метод квазиразделения переменных, учитываются аналитические особенности геометрии области, что обуславливает эффективность аппроксимации. Метод построения фундаментальной системы функций позволяет выявить аналитические свойства используемых систем, в частности получить простые рекуррентные соотношения между функциями и их производными, что эффективно используется в алгоритмах вычисления необходимых при решении задач характеристик (температура, теплопотоки, внутренняя энергия).

В качестве механизма аппроксимации используется несколько обобщений метода наименьших квадратов на многоблочные структуры; в этом случае область разбивается на подобласти более простой структуры, в каждой из которых используется своя аппроксимирующая система функций. Сам по себе метод наименьших квадратов является эффективным, к сожалению, только для областей простой геометрии, однако его обобщение на многоблочные структуры позволяет существенно расширить область применимости этого метода. Для задач теории упругости и акустики многоблочный вариант метода наименьших квадратов был предложен в работе [1], и получил дальнейшее развитие в [2-5]. Метод позволяет контролировать точность аппроксимации по невязке между решениями на границе блоков.

Рассматриваются регулярные среды с периодической структурой и с тремя основными видами включений, имеющими форму слоя, цилиндра или шара, см. рис. 1-3. Для расчета тепловых процессов в таких средах применяется или асимптотический метод усреднения Бахвалова [6], или непосредственное моделирование, когда с каждым отдельным включением связывается свой отдельный блок. Могут быть рассмотрены также среды и с нерегулярной структурой.

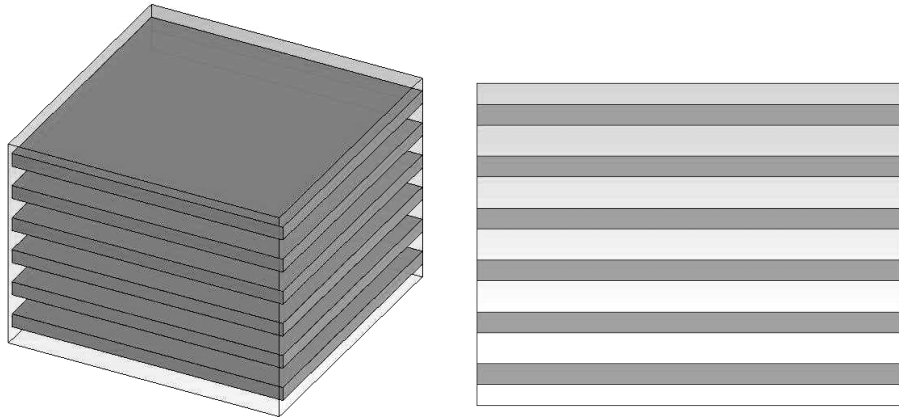


Рис. 1. Примеры регулярной структуры – слои

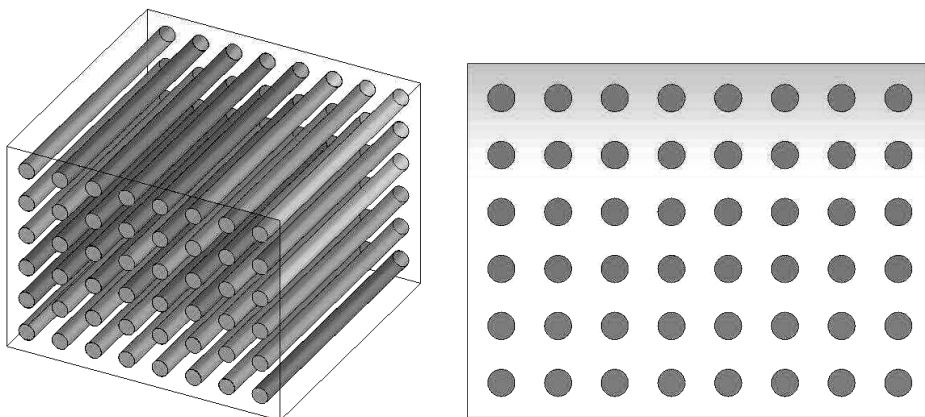


Рис. 2. Примеры регулярной структуры – цилиндры

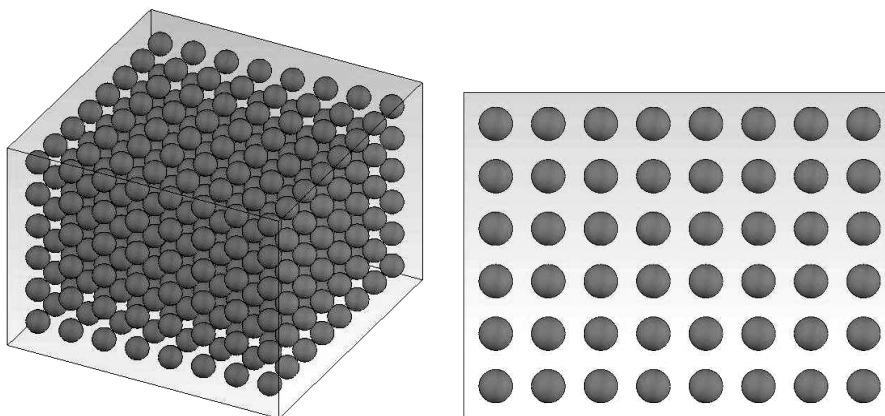


Рис. 3. Примеры регулярной структуры – сферические включения

Метод позволяет получать решение с высокой степенью точности и в аналитическом виде, однако требует больших вычислительных затрат. Поэтому актуальной задачей является разработка параллельной версии блочного метода наименьших квадратов.

Основным моментом в блочном методе является необходимость решения системы линейных алгебраических уравнений, структура которой соответствует структуре блочного разбиения исходной области: система линейных уравнений имеет блочно-разреженную структуру с плотными блоками-подматрицами. Естественным образом здесь возникает два уровня вычислений: интенсивные вычисления с плотными подматрицами на уровне общей памяти и относительно независимые вычисления между блоками на уровне распределенной памяти. В работе разрабатывается соответствующая реализация метода решения блочной системы уравнений.

2. Аппроксимация решений нестационарного уравнения теплопроводности

2.1 Фундаментальная система решений уравнения Гельмгольца

Аппроксимация тепловых процессов в структурно-неоднородных средах основана на представлении общего решения исходного уравнения в каждой из фаз материала в виде суперпозиции частных решений следующего вида:

$$\theta(P, t) = \Phi(P) e^{-\kappa^2 \xi}, \quad \nabla^2 \Phi(P) + \kappa^2 \Phi(P) = 0, \quad P = (x, y, z) \quad (1)$$

где $\xi = \frac{\lambda}{C} t$ – безразмерное время Фурье, λ – теплопроводность, C – теплоемкость, κ – постоянная, определяющая скорость установления температуры; представление (1) для частных решений уравнения теплопроводности согласуется с известными аналитическими представлениями.

Таким образом, аппроксимация основана на фундаментальных решениях уравнения Гельмгольца. Решения вида (1) характерны для тепловых процессов, составляя в частности ядро интегрального преобразования Лапласа по временной координате, являющегося эффективным аналитическим инструментом для получения решений уравнения теплопроводности [7,8].

На поверхности включения для частного решения (1) выполняются условия сопряжения – непрерывность температуры и нормальной составляющей теплового потока $\chi(P, t) = -\lambda \nabla \theta(P, t)$; для функции Φ эти условия приобретают следующий вид:

$$\left[\frac{\lambda \kappa^2}{C} \right] = 0, \quad [\Phi] = 0, \quad \left[\lambda \frac{\partial \Phi}{\partial n} \right] = 0. \quad (2)$$

Таким образом, мы рассматриваем среды с естественными условиями сопряжения для тепловой составляющей решения на поверхности включений.

Необходимая для аппроксимации система функций строится в настоящей работе при помощи метода квазиразделения переменных [5] (комплексных или вещественных). Таким путем строится несколько стандартных классов фундаментальных решений уравнения Гельмгольца, позволяющих получить эффективную аппроксимацию решения в средах, содержащих включения в виде слоя, цилиндра или шара.

Метод квазиразделения переменных позволяет построить теорию специальных функций – решений уравнения Гельмгольца, включающую детальное рассмотрение аналитических свойств используемых классов функций (рекуррентные соотношения при дифференцировании и при вычислении специальных функций). Эти свойства эффективно используются при численной реализации методов решения краевых задач.

Система аппроксимирующих функций определяется с помощью формального ряда на основе анализа уравнения Гельмгольца в переменных x, y, z или $w = x + iy, \bar{w} = x - iy$ и z :

$$\Phi(P) = \Phi(x, y, z) = \sum_p \phi_p(x, y) U_p(z), \quad (3)$$

$$\nabla^2 \Phi + \kappa^2 \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} + \kappa^2 \Phi = 0. \quad (4)$$

Между функциями $\phi_p(x, y)$ и $U_p(z)$ устанавливаются рекуррентные соотношения так, чтобы ряд (3) в целом удовлетворял уравнению (4). При этом применяются разные подходы, при которых по направлению z выполняется или интегрирование, или дифференцирование (а по оставшимся направлениям – наоборот). В зависимости от этого получаются разные системы функций, наиболее подходящие для определенной геометрии включений.

Подход, при котором по направлению z выполняется интегрирование, соответствует средам со слоистой структурой, для них условия сопряжения (2) обеспечиваются в замкнутом конечном виде:

$$U_p'' + \kappa^2 U_p = U_{p-1}, \quad U_0'' + \kappa^2 U_0 = 0, \quad (5)$$

$$\nabla^2 \phi_p + \phi_{p+1} = 0, \quad \phi_0 - \text{любая}. \quad (6)$$

Подход, при котором по направлению z выполняется дифференцирование:

$$\nabla^2 \phi_p + \kappa^2 \phi_p + \phi_{p-1} = 0, \quad \nabla^2 \phi_0 + \kappa^2 \phi_0 = 0, \quad (7)$$

$$U_p'' = U_{p+1}, \quad U_0 - \text{любая}; \quad (8)$$

соответствует средам с цилиндрической и сферической структурой, поскольку здесь получают системы функций, для которых условия сопряжения (2) выполняются аналитически на поверхности цилиндра или шара.

Нетрудно убедиться, что при выполнении условий (5) – (6) или (7) – (8) ряд (3) автоматически удовлетворяет уравнению (4). Система рекуррентных соотношений (5), (6) определяет процедуру продолжения решений одномерного уравнения Гельмгольца (плоской волны) по заданному закону в ортогональной плоскости, определяемому функцией ϕ_0 . Соответственно система рекуррентных соотношений (7), (8) определяет процедуру продолжения некоторых решений ϕ_0 двумерного уравнения Гельмгольца во все пространство по заданному закону, определяемому функцией $U_0(z)$.

Отметим, что система (5) разрешается в аналитическом виде при помощи простых рекуррентных соотношений. А система (7) может быть решена явно в комплексных координатах w и \bar{w} для функций Бесселя [9], что предопределяет построение необходимых для аппроксимации классов функций в средах с включениями цилиндрической и сферической формы:

$$U_p = \frac{z \mathcal{U}_{p-1}}{2p}, \quad \mathcal{U}_p = \frac{(2p-1)\mathcal{U}_{p-1} - zU_{p-1}}{2p\kappa^2}, \quad U_0 = \cos(\kappa z), \quad \mathcal{U}_0 = \sin(\kappa z)/\kappa, \quad (9)$$

$$\phi_p(w, \bar{w}) = \frac{\Gamma(\mu+1)}{(\kappa/2)^{\mu/2}} \frac{(-1)^p w^{p+\mu/2} \bar{w}^{p-\mu/2}}{4^p p! (\mu+1)_p} J_{\mu+p}(\kappa r), \quad r = \sqrt{w\bar{w}}. \quad (10)$$

С помощью (10) мы можем выразить окончательное решение (3) для случая (7), (8) в виде бесконечного ряда, который определяется комплексной функцией $\psi_0 = w^\mu$, являющейся главным членом в представлении (10) для функции ϕ_0 , и законом продолжения $U_0(z)$:

$$\Phi(P) = \sum_p \frac{(-1)^p \bar{w}^p}{4^p p!} \psi_0^{(-p)}(w) \left(\frac{d^2}{dz^2} + \kappa^2 \right)^{(p)} U_0(z); \quad (11)$$

здесь $\psi_0^{(-p)}$ обозначает первообразную порядка p ; функция $\Phi(P)$ имеет структуру ряда (3) и тождественно удовлетворяет уравнению (4) при любых начальных функциях ψ_0 и U_0 .

Окончательное решение (3) для случая (5), (6) может быть также записано в виде бесконечного ряда, который определяется начальной функцией ϕ_0 и одним из решений (9), симметричным $U_0^{(+)} = U_0$ или антисимметричным $U_0^{(-)} = \mathcal{U}_0$:

$$\Phi^{(\pm)}(P) = \sum_p (-1)^p \nabla^{2p} \phi_0(x, y) U_p^{(\pm)}(z); \quad (12)$$

здесь $\nabla^{2p} = (\nabla^2)^{(p)}$. Отметим, что ряд (12) будет конечным, если ϕ_0 будет полиномиальной функцией; аналогично ряд (3), (8), (10) будет конечным, если U_0 будет многочленом. Представления (11), (12) наряду с формулами (9) позволяют построить системы рекуррентных соотношений для вычисления функций и их производных, используемые в алгоритмах блочного метода [5].

Выбирая разные начальные функции ψ_0 , U_0 , ϕ_0 в (11), (12) мы получаем необходимые для аппроксимации фундаментальные системы уравнения Гельмгольца. Для слоистых сред (рис. 1) выбираем полиномиальное представление для ϕ_0 , тогда функции, отвечающие условиям сшивки температуры и тепловых потоков на границе слоя, записываются в виде конечной суммы:

$$\Omega_n^{(\pm)m} = \sum_{k,l} (-n+m)_{2k-2l} (-m)_{2l} A_{kl}^{(\pm)} \Phi_{n-2k}^{(\pm)m-2l}, \quad |z| < b, \quad l \leq k, \quad (13)$$

$$\Omega_n^{(\pm)m} = \Phi_n^{(\pm)m} + \sum_{k,l} (-n+m)_{2k-2l} (-m)_{2l} B_{kl}^{(\mp)} \Phi_{n-2k}^{(\mp)m-2l}, \quad |z| > b, \quad (14)$$

где $\Phi_n^{(\pm)m}$ является решением (12) при $\phi_0 = x^{n-m} y^m$, b – полуширина слоя, а коэффициенты $A_{kl}^{(\pm)}$, $B_{kl}^{(\pm)}$ вычисляются последовательно по рекуррентным формулам через параметры задачи. Здесь система функций $\Omega_n^{(+m)}(P)$ – четная по z , система $\Omega_n^{(-m)}(P)$ – нечетная по z (соответственно меняется знак у коэффициентов $B_{kl}^{(\mp)}$ при симметричном продолжении); слой расположен симметрично относительно оси z .

Аналогичное представление получаем для цилиндрических включений, если в качестве функций $\Phi_n^{(\pm)m}$ будут выбраны решения (11) при $\psi_0 = w^{\pm m}$ и $U_0 = z^{n-m}$:

$$\Omega_n^m = \sum_{k,l} (-n+m)_{2k-2l} (-m)_{2l} A_{kl}^{(+)} \Phi_{n-2k}^{(+m-2l)}, \quad |w| < r_0, \quad l \leq k, \quad (15)$$

$$\Omega_n^m = \Phi_n^{(+m)} + \sum_{k,l} (-n+m)_{2k-2l} (-m)_{2l} B_{kl} \Phi_{n-2k}^{(-m-2l)}, \quad |w| > r_0; \quad (16)$$

здесь r_0 – радиус цилиндрического включения, система координат связана с центральной осью цилиндра. Отметим, что $\psi_0 = w^m$, $m \geq 0$, соответствует функциям Бесселя первого рода, а $\psi_0 = w^{-m}$ соответствует функциям Бесселя второго рода.

И наконец, для сферических включений решение, отвечающее условиям сшивки температуры и тепловых потоков выражается через обобщенные шаровые функции Φ_n^m , которые соответствуют решениям (11) при $\psi_0 = w^m$ и $U_0 = J_{n+1/2}(\kappa z) / z^{m+1/2}$ (см. [5]):

$$\Omega_n^m = A_n \Phi_n^m, \quad R < R_0, \quad R = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (17)$$

$$\Omega_n^m = \Phi_n^m + B_n \Phi_{-n-1}^m, \quad R > R_0; \quad (18)$$

здесь R_0 – радиус сферического включения, система координат связана с центром шара.

Таким образом, с помощью метода квазиразделения переменных мы получаем необходимый аналитический аппарат для аппроксимации тепловых полей в подобластях-блоках, содержащих включения сферической, цилиндрической или пластинчатой формы с другими теплофизическими свойствами. Соответствующие функции (13) – (18) аналитически точно удовлетворяют уравнению (1) и естественным условиям сопряжения (2), и записываются в виде конечной суммы через функции Бесселя первого, второго рода или тригонометрические функции. Для этих функций, с помощью следующих из представлений (11), (12) рекуррентных соотношений, реализованы эффективные алгоритмы их вычисления и дифференцирования, необходимые для формирования блочной системы линейных алгебраических уравнений, возникающей при аппроксимации тепловых полей методом блоков.

2.2 Блочный метод наименьших квадратов

При аппроксимации процесса теплопередачи в структурно-неоднородных средах надо иметь в виду, что общее решение уравнения теплопроводности (в ограниченной области) может быть представлено в виде суммы равновесной и неравновесной составляющей [11]:

$$\theta(P, t) = \theta_0(P, t) + \sum_{p=1}^{\infty} \Phi_p(P) e^{-\kappa_p^2 t}, \quad (19)$$

где равновесная составляющая $\theta_0(P, t)$ удовлетворяет уравнению без начальных условий, а неравновесная представляет собой сумму отдельных гармоник, каждая из которых убывает

экспоненциальным образом со своей скоростью $\kappa_p^2 \lambda / C$; причем функции $\Phi_p(P)$ являются собственными функциями уравнения Гельмгольца соответствующими собственным значениям κ_p^2 и однородным краевым условиям на границе области.

Равновесная составляющая решения определяется единственным образом как решение задачи без начальных условий, и является функцией, обратимой по времени, характеризующей устойчивую реакцию системы на внешние краевые условия; для постоянных граничных условий T_0 не зависит от времени. Неравновесная составляющая определяется начальными и граничными условиями и характеризует инерционность системы по отношению к изменению внешних условий. Характерной особенностью является необратимость по времени, определяемая экспоненциальным характером зависимости от времени: решение экспоненциально возрастает при обращении времени.

Исходя из этих особенностей, решение в каждом блоке, содержащем неоднородность, представляется в виде конечной суммы:

$$\theta(P, t) = \sum_{p=0}^L \Phi_p(P) e^{-p^2 \xi}, \quad \Phi_p(P) = \sum_{n=0}^M \sum_{m=0}^n \left[a_{nm} \Omega_n^{(+m)}(P - P_0) + b_{nm} \Omega_n^{(-m)}(P - P_0) \right], \quad (20)$$

где функции $\Omega_n^{(\pm)m}$ из формул (13) – (18) соответствуют показателю $\kappa = p$, P_0 – центр блока; функции $\Omega_n^{(\pm)m}$ для формул (15) – (18) определяются как $\Omega_n^{(+m)} = \text{Re } \Omega_n^m$, $\Omega_n^{(-m)} = \text{Im } \Omega_n^m$. Комбинация (20) аппроксимирует одновременно равновесную и неравновесную составляющие решения на некотором ограниченном интервале времени $t \in (0, t_0)$; расширение этого интервала предполагает итерационное применение схемы аппроксимации (20).

Сшивка локальных решений в блоках осуществляется при помощи блочного варианта метода наименьших квадратов (см. [1,2]), или при помощи модифицированного функционала метода наименьших квадратов, содержащего энергетические слагаемые, выполняющие роль регуляризатора Тихонова для вырожденного функционала наименьших квадратов [3-5].

Одновременная минимизация всей системы функционалов реализуется в виде блочной системы линейных алгебраических уравнений для нахождения неизвестных коэффициентов в представлениях (20) для каждого блока:

$$(T_k + \varepsilon B_k) \vec{X}_k + \sum_l T_{kl} \vec{X}_l = \vec{H}_k, \quad k = 1, 2, \dots, N; \quad (21)$$

здесь T_k – комплексная матрица Грама аппроксимирующей системы функций, B_k – матрица жесткости для функционала энергии, ε – параметр регуляризатора Тихонова, \vec{X}_k – неизвестные коэффициенты в разложении (20), T_{kl} – матрицы, обеспечивающие сшивку локальных решений между блоками V_k , V_l и состоящие из скалярных произведений аппроксимирующих функций этих блоков, \vec{H}_k – вектор граничных условий в блоке, N – общее число блоков. Размер каждого блока $L \times M_k$ совпадает с числом неизвестных коэффициентов в локальном представлении решения (20).

Разбиение расчетной области на подобласти-блоки, $\bar{G} = \bigcup \bar{B}_k$, $B_k \cap B_l = \emptyset$, $k \neq l$, т.е. введение блочной структуры, должно соответствовать структуре неоднородностей в материале. Для областей с регулярной структурой метод асимптотического усреднения [6] сводит задачу к одной ячейке с включением. В этом случае ячейка трактуется как представительный элемент неоднородного материала; в принципе она может иметь сложную структуру, и тогда она разбивается на более простые подобласти-блоки.

С каждым блоком V_k в блочной структуре разбиения расчетной области связывается норма наименьших квадратов, соответствующая скалярному произведению в интегральной норме по границе области в классе функций, аналитически точно удовлетворяющих оператору задачи:

$$F_k(\theta_k, \theta_l) = \left\| \theta_k \right\|_{B_k}^2 \Big|_{t=0} + \int_0^{t_0} \left\| \alpha_k \theta_k + \beta_k \frac{\partial \theta_k}{\partial n} \right\|_{S_k}^2 + \sum_l \left\| \alpha_{kl} (\theta_k - \theta_l) + \beta_{kl} \frac{\partial (\theta_k - \theta_l)}{\partial n} \right\|_{S_{kl}}^2 dt, \quad (22)$$

где $S_{kl} = \partial B_k \cap \partial B_l$ – общая часть границы для соседних блоков, $S_k = \partial B_k \cap \partial G$ – общая часть границы блока и границы области G .

Коэффициенты α_{kl} , β_{kl} , α_k , β_k должны обеспечить, с одной стороны, невырожденность нормы в блоке при условии равенства нулю функций из соседних блоков, а с другой стороны, сшивку функций и нормальных производных на границах между блоками; это, в частности, предполагает, что матрица сшивочных коэффициентов является невырожденной:

$$F_k(\theta_k, 0) = 0 \Leftrightarrow \theta_k \equiv 0, \quad P \in B_k, \quad (23)$$

$$\det \begin{vmatrix} \alpha_{kl} & \beta_{kl} \\ \alpha_{lk} & \beta_{lk} \end{vmatrix} \neq 0, \quad P \in S_{kl}. \quad (24)$$

Для области в целом водится норма наименьших квадратов на многоблочной структуре по следующей формуле:

$$F(\theta) = \max_k F_k, \quad \theta = \theta_k, \quad P \in B_k. \quad (25)$$

Аппроксимация решения обеспечивается сходимостью к точному решению по норме на многоблочной структуре: $F(\theta - \theta_0) \rightarrow 0$, где θ_0 – точное решение задачи. Одновременная минимизация функционалов F_k (составляющих общую норму) на своем наборе функций дает алгоритм для оценки сверху абсолютного минимума нормы $F(\theta - \theta_0)$ и сводится к решению блочной системы уравнений (21) (при $\varepsilon = 0$).

Изложенный подход к аппроксимации обеспечивает удовлетворение начальным условиям, а также одновременную сшивку температуры и теплоточков на границе блоков, однако не учитывает потери энергии в случае фазовых превращений; при этом предполагается, что граница включений проходит по границе блоков. Фазовые переходы связываются с модификацией функционала энергии задачи, который должен учитывать еще скрытую энергию фазовых превращений в области или на поверхности, где происходят превращения.

Эти моменты могут быть учтены в подходе к аппроксимации [3-5], основанном на введении полунормы $F(\theta)$, обеспечивающей только начальное распределение и сшивку температуры, и функционала энергии $E(\theta)$, выполняющего роль регуляризатора для полунормы $F(\theta)$ и учитывающего фазовые превращения в материале; при таком подходе минимизируется модифицированный функционал с регуляризатором, $F(\theta) + \varepsilon E(\theta) = \min$. При достаточно малом ε модифицированный функционал обеспечивает одновременную сшивку функций и минимизацию энергии с учетом энергии фазовых превращений и приводит к блочной системе уравнений (21) при $\varepsilon \neq 0$.

3. Комбинированный параллельный алгоритм решения блочной системы уравнений

Основной операцией при формировании блочной системы (21) является вычисление скалярных произведений моментных характеристик аппроксимирующей системы функций (температура, теплоточки, общая энергия), они вычисляются через производные до второго порядка с помощью интегрирования по границе блоков. Здесь содержится значительный ресурс параллелизма, поскольку формирование блочной системы производится с помощью коллокационного вектора, составленного из значений аппроксимирующей системы функций в одной точке. Поэтому операции полностью независимы на уровне разных блоков и даже на уровне разных узлов квадратуры Гаусса для поверхностного интегрирования. Вычисление же моментных характеристик сводится к рекуррентным преобразованиям коллокационного вектора на основе особых дифференциальных свойств используемой системы функций, следующих из представлений (11), (12).

Основная специфика системы линейных уравнений (21) состоит в следующем:

- 1) аппроксимация строится на относительно небольшом числе элементов;
- 2) качество аппроксимации достигается, прежде всего, за счет увеличения числа базисных функций в блоке.

С точки зрения линейной алгебры матрица системы уравнений является вещественной или комплексной плотно блочно разреженной матрицей, с относительно небольшим числом блоков и относительно большим размером каждого блока. Кроме того, в силу специфики построения системы уравнений среди диагональных блоков матрицы системы встречаются очень плохо обусловленные.

Блочная система уравнений (21) решается масштабированным блочно-предобусловленным алгоритмом GMRES, в котором в качестве переобуславливания использовалось блочное неполное LU разложение второго порядка точности. Предварительно, перед вычислением неполного разложения матрицы, проводится блочно-диагональное масштабирование системы уравнений, в результате которого диагональные блоки коэффициентов становятся единичными матрицами.

Неполное блочное разложение для системы уравнений строится на основе соотношения

$$A + E = L * U + L * R + W * U, \quad (26)$$

где блочно-треугольные матрицы L и U содержат блочные элементы разложения “первого порядка” точности, а блочно-треугольные матрицы W и R содержат блочные элементы “второго порядка” точности; E – некоторая матрица ошибки. Это разложение строится как несимметричное блочное обобщение алгоритма из работы [11].

Итерации по решению системы уравнений проводятся с использованием переобусловленного варианта алгоритма GMRES [12]. Алгоритм GMRES основан на следующих матричных соотношениях:

$$b = P_1 g_1, \quad (27)$$

$$A * (LU)^{-1} * P_k = P_{k+1} * H_k, \quad (28)$$

где H_k – верхняя хессенбергова форма с размером $(k+1) \times k$, b – вектор правой части, P_k – матрица с ортонормированными столбцами размера $N \times k$. Для построения матричных соотношений (27) и (28) требуется на каждой итерации алгоритма: умножение на матрицу A , решение систем уравнений с блочно треугольными матрицами L и U , а также ортогонализация. Для обеспечения численной устойчивости вычислений ортогонализации осуществляются неявным образом на основе преобразований Хаусхолдера. Новое приближение к решению системы линейных уравнений строится по формуле $x_k = (LU)^{-1} * P_k * y_k$, где y_k есть решение задачи минимизации $\|H_k y_k - e_1 g_1\| = \min$.

Генерация и решение блочной системы уравнений (21) является наиболее затратной частью метода блоков. Вычислительные затраты в описанном алгебраическом алгоритме растут как минимум кубическим образом в зависимости от числа базисных функций в блоке. По этой причине для уменьшения времени счета необходимо подходящим образом распараллелить вычисления.

Современные суперкомпьютерные вычислительные системы как правило имеют неоднородную архитектуру. С одной стороны, имеется набор вычислительных узлов с распределенной памятью, обмен данными между которыми может быть осуществлен по быстрой обменной сетке. С другой стороны, каждый узел представляет собой многопроцессорный/многоядерный компьютер с общим доступом к оперативной памяти.

Специфической особенностью метода блоков является относительно малое число используемых блоков и как правило большое число базисных функций в каждом блоке. На малом числе блоков непросто обеспечить эффективность параллельных вычислений по распределенной памяти при использовании большого числа процессоров/ядер. С другой стороны, огромная необходимая вычислительная работа с плотными подматрицами может быть относительно просто распараллелена по общей памяти.

Для снижения доли распределенных параллельных вычислений и увеличения использования общей памяти в алгоритме блоков для распараллеливания вычислений была выбрана комбинированная модель параллельного программирования MPI+threads. В этой модели при рас-

параллелизации вычислений между узлами для организации обменов и синхронизаций используется стандарт обмена сообщениями MPI. При этом на каждом узле имеется только один MPI процесс, который затем порождает на этом узле нужное количество потоков вычислений, одновременно работающих по общей памяти.

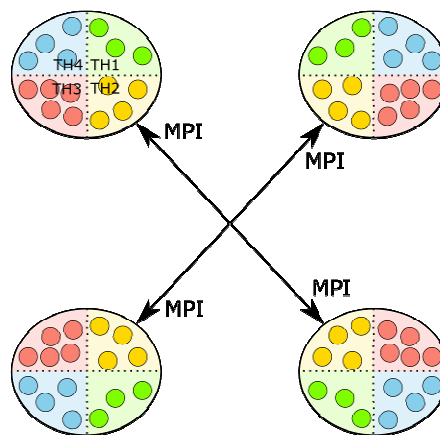


Рис. 4. Комбинированная MPI+threads организация параллельных вычислений.

При параллельном решении системы уравнений (21) использовалась методика распараллеливания, аналогичная представленной в работе [13]. Распределение вычислительной работы по процессорам/ядрам осуществляется и на этапе генерации, и на этапе решения систем линейных уравнений на основе анализа графа блочной разреженности матрицы по блочным строкам/столбцам матрицы исходной системы уравнений. Граф блочной разреженности матрицы содержит информацию о геометрических связях между блоками расчетной сетки. Области, в которых решается задача, как правило, существенно трехмерные, а значит, декомпозиция задачи должна существенным образом учитывать эту трехмерность. В данной работе мы следуем технике декомпозиции задачи решения системы уравнений на основе упорядочивания типа вложенных сечений ND (Nested Dissection) [14] с учетом декомпозиции поверхностных межпроцессорных границ [15].

Упорядоченная блочная структура матрицы для некоторой тестовой задачи имеет вид в построенном крупно-блочном биении, показанный на Рис. 5 а), а результирующая крупно-блочная структура матрицы в терминах крупно-блочного биения для параллельных вычислений показана на рис. 5 б).

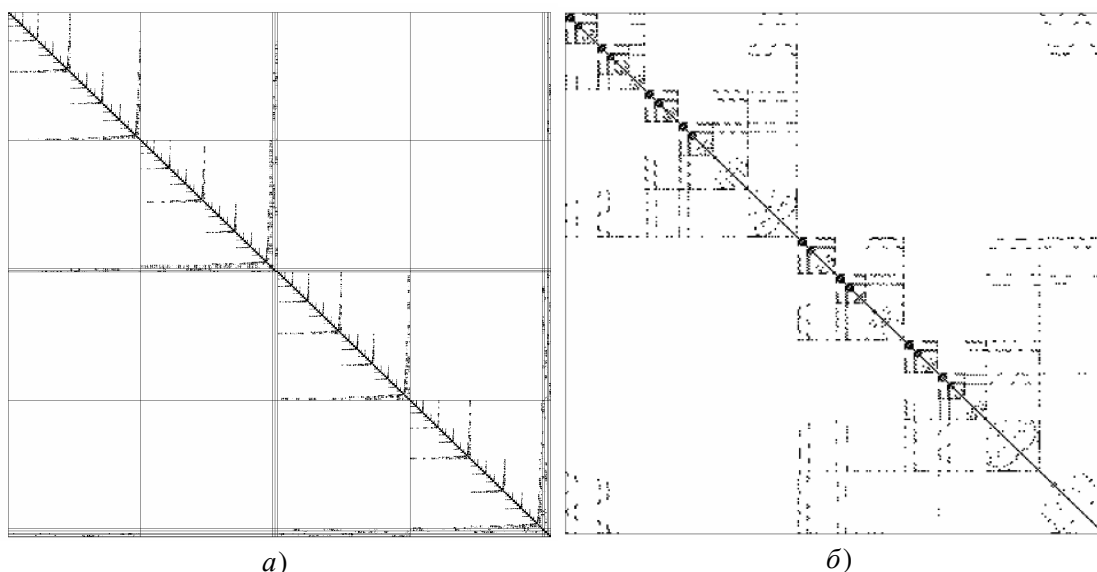


Рис. 5. Структура разреженности матрицы: а) при блочном биении, б) при крупно-блочном биении

Следует отметить, что крупно-блочная структура разреженности матрицы, показанная для тестовой задачи на рис. 5 б), демонстрирует также все основные зависимости между собой крупно-блочных вычислений в описанном выше алгоритме решения системы уравнений. Это утверждение имеет место при условии, что неполное разложение строится в крупно-блочном смысле “по позициям”.

Основная идея комбинированного распараллеливания вычислений при решении системы уравнений в методе блоков заключается в различной трактовке основных вычислений. С точки зрения распределенной памяти зависимости в вычислениях трактуются в терминах крупно-блочного разбиения. И наоборот, с точки зрения общей памяти зависимости в вычислениях трактуются в терминах блоков, блочных строк и блочных столбцов. По этой причине разбиение задачи на набор гиперблоков осуществляется в соответствии с числом MPI процессов. Каждая гиперблочная строка/столбец матрицы и предобуславливателя приписывается соответствующему узлу вычислений. Вычисления внутри гиперблочной строки распараллеливаются по потокам следующим образом.

При вычислении неполного блочного разложения проводится update каждой блочной строки через некоторые предыдущие. При этом требуется произвести некоторое количество независимых умножений плотной подматрицы на плотную подматрицу, эти вычисления распараллеливаются по потокам вычислений. Число таких независимых вычислений равно числу блоков в блочной строке, по этой причине это ограниченный ресурс распараллеливания вычислений. Тем не менее, при небольшом числе вычислительных ядер в узле этого ресурса параллелизма оказывается достаточно при вычислении неполного блочного треугольного разложения. Возможно дальнейшее распараллеливание неполной блочной факторизации по общей памяти для большого числа ядер в узле. Для этого необходимо распараллелить по потокам собственно умножение плотной подматрицы на плотную подматрицу. Однако в этом случае для обеспечения масштабируемости вычислений потребуются также распараллелить по потокам вычислений сингулярное разложение при факторизации диагонального блока.

При распараллеливании вычислений по общей памяти в итерационной схеме также использовались зависимости вычислений между собой, которые описываются блочной структурой разреженности соответствующих матриц. Зависимости в вычислениях по распределенной памяти на разных узлах разрешались в соответствии с зависимостями по данным в крупно-блочном разбиении.

4. Численные эксперименты

Численные эксперименты проводились на компьютере, имеющем два 6-ти ядерных процессора AMD Opteron 8435 (Istanbul), работающие по общей памяти на одной плате. Каждый процессор был подключен к двухканальной памяти DDR2 533, 12 Gb.

В качестве тестовой была рассмотрена задача по определению эффективных теплофизических свойств в регулярной среде с включениями пластинчатой, цилиндрической или сферической формы (рис. 1-3) методом асимптотического усреднения Бахвалова [6]. Для этого нужно решить в классе периодических функций задачу на ячейке периодичности с контактными условиями на границе включений Γ :

$$L_{\xi\xi}^{\xi\xi}(N_{i_1} + \xi_{i_1}) = 0, \quad \xi \notin \Gamma; \quad \left[N_{i_1} \right]_{\xi \in \Gamma} = \left[\lambda_{ij} \frac{\partial (N_{i_1} + \xi_{i_1})}{\partial \xi_j} n_i \right]_{\xi \in \Gamma} = 0, \quad i_1 = 1, 2, 3; \quad (29)$$

$$L_{\xi\xi}^{\xi\xi} = \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\lambda_{ij}(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right), \quad \lambda_{ij}(\xi) = \lambda_I \delta_{ij}, \quad \xi \in G_I, \quad \lambda_{ij}(\xi) = \lambda_M \delta_{ij}, \quad \xi \in G_M,$$

и вычислить эффективный тензор теплопроводности по формуле $\mathcal{K}_{i_1 i_2}^{\xi} = \langle \lambda_{i_1 i_2} + \lambda_{i_1 j} \partial N_{i_2} / \partial \xi_j \rangle$, где λ_I – коэффициент теплопроводности во включении G_I , а λ_M – коэффициент теплопроводности в матрице G_M , $\langle \cdot \rangle$ – среднее значение величины по объему ячейки.

Для решения краевой задачи (29) использовались обычные функции $\Phi_n^{(\pm)m}$ из раздела 2, а также блочное разбиение ячейки с включением на криволинейные блоки, как это показано для примера круглого включения на рис 6; результаты расчета этих характеристик блочным методом и их сопоставление между собой приведены на рис. 7. Даны графики эффективного модуля $\hat{\kappa}$ в сопоставлении с правилом смеси $\hat{\kappa} = \lambda_I f + \lambda_M (1 - f)$, где f – коэффициент объемного наполнения.

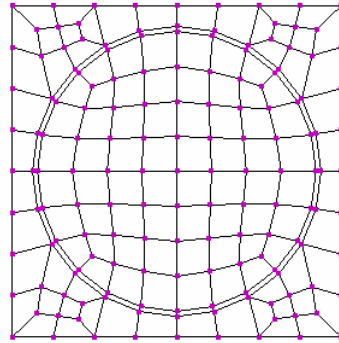


Рис. 6. Разбиение на криволинейные блоки ячейки с включением:

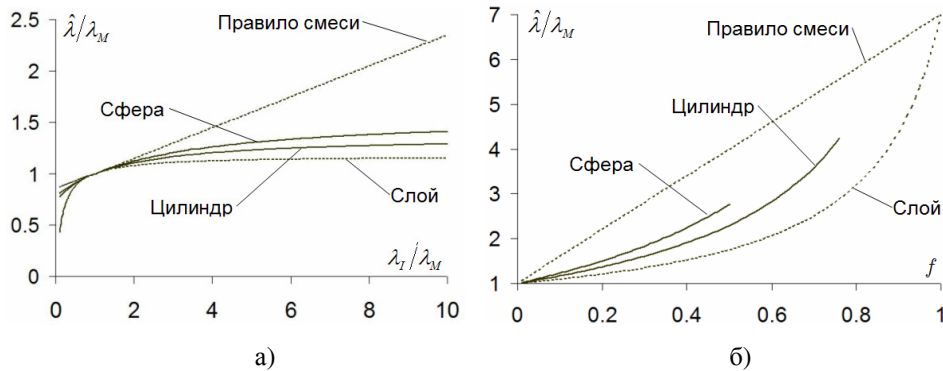


Рис. 7. Эффективные характеристики периодических структур:

а) $f = 0.15$, б) $\lambda_I / \lambda_M = 7$

Как видим, простое правило смеси дает верхнюю границу и является грубым приближением для эффективного модуля теплопроводности; это обосновывает необходимость разработки специальных математических методов, учитывающих структуру и геометрию области.

Таблица 1 содержит результаты численных экспериментов для тестовой задачи с числом блоков $N = 1148$ при различном числе MPI процессов и потоков на один MPI процесс. Недостаточно высокая масштабируемость при решении тестовой задачи по видимому связана с недостаточной пропускной способностью подсистемы доступа к оперативной памяти при большом числе используемых ядер.

Таблица 1 Результаты численных экспериментов.

MPI x Threads	1x1	2x1	1x2	4x1	1x4	2x2	1x6	2x6	4x3	8x1
Ускорение	1	1.9	1.6	2.8	2.2	3.0	2.4	4.8	5.8	4.2

5. Заключение

В работе представлена комбинированная MPI+threads параллельная реализация метода блоков для моделирования теплофизических процессов в структурно-неоднородных средах. На приме-

ре тестовой задачи показана его эффективность по сравнению с чисто MPI параллельной реализацией [4], представленной ранее. Текущая параллельная реализация ориентирована на адекватный учет особенностей блочного метода, порождающего одновременно плотные блоки и разреженную структуру матрицы.

Работа поддержана программой Президиума РАН П-2, а также грантом № 09-01-135333 офи-ц..

Литература

1. *Волков-Богородский Д.Б.* Разработка блочного аналитико-численного метода решения задач механики и акустики // Сборник трудов школы-семинара “Композиционные материалы”. – М.: ИПРИМ РАН, 2000. – С. 44-56.
2. *Волков-Богородский Д.Б.* Подход к задачам о взаимодействии акустической и упругой среды с помощью блочного метода мультиполей // “Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред”. Материалы XI Международного симпозиума. – М.: МАИ, 2005. - Т. 2. - С. 17-22.
3. *Волков-Богородский Д.Б.* О вычислении эффективных характеристик композиционных материалов с помощью блочного аналитико-численного метода // “Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред”. Материалы XII Международного симпозиума. Избранные доклады. - М.: МАИ, 2006. - С. 41-47.
4. *Волков-Богородский Д.Б., Харченко С.А.* Параллельные вычисления в методе блоков для связанных задач волновой виброакустики // Труды Международной научной конференции “Параллельные вычислительные технологии”, Санкт-Петербург, 28 января – 1 февраля 2008 г. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2008. – С. 347-352.
5. *Волков-Богородский Д.Б.* Применение аналитических расчетов на основе метода блоков в связанных задачах механики сплошных сред // “Прикладные исследования в механике”. Труды всероссийской научно-практической конференции “Инженерные системы-2008”, 7-11 апреля 2008. – М.: Российский университет дружбы народов, 2008. – С. 123-138.
6. *Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П.* Осреднение процессов в периодических средах. – М.: Наука, 1984. – 352с.
7. *Карслоу Г., Егер Д.* Теплопроводность твёрдых тел. – М.: Наука, 1964. – 488с.
8. *Лыков А.В.* Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1967. – 599с.
9. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. – Т. 1. М.: Наука, 1973. – Т. 2. М.: Наука, 1974.
10. *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1977. – 735с.
11. *Kaporin I.E.* High quality preconditioning of a general symmetric positive definite matrix based on its $U^T U + U^T R + R^T U$ decomposition // Numer. Linear Algebra Appl. – 1998. – V. 5. – P. 483-509.
12. *Saad Y., Schultz M.H.* GMRES: A generalized minimum residual algorithm for solving non-symmetric linear systems // SIAM J. Sci. Comput. – 1986. – V. 7. – P. 856-869.
13. Сушко Г.Б., Харченко С.А. “ Экспериментальное исследование на СКИФ МГУ "Чебышев" комбинированной MPI+threads реализации алгоритма решения систем линейных уравнений, возникающих во FlowVision при моделировании задач вычислительной гидродинамики” // Труды международной научной конференции Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2009), Нижний Новгород, 30 марта – 3 апреля 2009 г. Челябинск, Изд. ЮУрГУ, 2009, с.316-324.

14. *George A., Liu J.W.* Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems // Series in Computational Mathematics. – Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1981.
15. *Харченко С.А.* Влияние распараллеливания вычислений с поверхностными межпроцессорными границами на масштабируемость параллельного итерационного алгоритма решения систем линейных уравнений на примере уравнений вычислительной гидродинамики // Труды Международной научной конференции “Параллельные вычислительные технологии”, Санкт-Петербург, 28 января – 1 февраля 2008 г. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2008. – С. 494-499.