ИПХФ РАН

Новые подходы к построению высокоэффективных параллельных алгоритмов для численного решения краевых задач на структурированных сетках

В.М. Волохов, С.И. Мартыненко, П.Д. Токталиев, Л.С. Яновский

ФГБУН Институт проблем химической физики Российской академии наук,
Российская Федерация, 142432 Московская обл., г. Черноголовка, ул. Академика Семёнова, д. 1

ПАВТ 2016, г. Архангельск, 31 марта 2016 г.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект №15-11-30012)

ИПХФ РАН

Цель работы: построение вычислительных технологий для численного решения краевых и начально-краевых задач, обладающих

- минимальным количеством проблемно-зависимых компонент
- высокой скоростью сходимости (близкой к оптимальной)
- возможностью эффективного распараллеливания вычислений

Область применения: задачи теплопроводности, гидродинамики, физической кинетики, электрофизики, теории упругости и другие приложения

Содержание:

1. Введение
2. Универсальная Многосеточная Технология
3. Комбинированное построение матрицы расщепления
4. Геометрическое построение матрицы расщепления
5. Выводы

Введение

Разностная краевая задача сводится к СЛАУ

$$\boldsymbol{A}\phi = \boldsymbol{b}.$$

Для решения СЛАУ использован итерационный метод

$$\boldsymbol{W}\left(\phi^{(\nu+1)} - \phi^{(\nu)}\right) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\phi^{(\nu)},$$

где $\boldsymbol{W}$ есть некоторая матрица расщепления. Положим, что итерационный метод сходится к точному решению $\phi = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$.

Алгебраический метод построения матрицы расщепления

$$A = \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ \hline * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ \hline * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * & * \end{array}\right) \qquad W = \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} * & * & * & & & & & & \\ * & * & * & & & & & & \\ * & * & * & & & & & & \\ \hline & & & * & * & * & & & \\ & & & * & * & * & & & \\ & & & * & * & * & & & \\ \hline & & & & & & * & * & * \\ & & & & & & * & * & * \\ & & & & & & * & * & * \end{array}\right)$$

Достоинства: простота построения

Недостатки: низкая вычислительная эффективность

Меры параллелизма

Определение 1. Ускорением параллельного алгоритма называется отношение времени выполнения алгоритма на одном процессоре $T(1)$ к времени выполнения алгоритма в системе из p процессоров $T(p)$

$$\bar{S}_p = \frac{T(1)}{T(p)}.$$

Определение 2. Эффективностью параллельного алгоритма называется величина

$$\bar{\varepsilon}_p = \frac{\bar{S}_p}{p}.$$

Меры параллелизма

Определение 3. Ускорением параллельного алгоритма по сравнению с наилучшим последовательным алгоритмом называется отношение

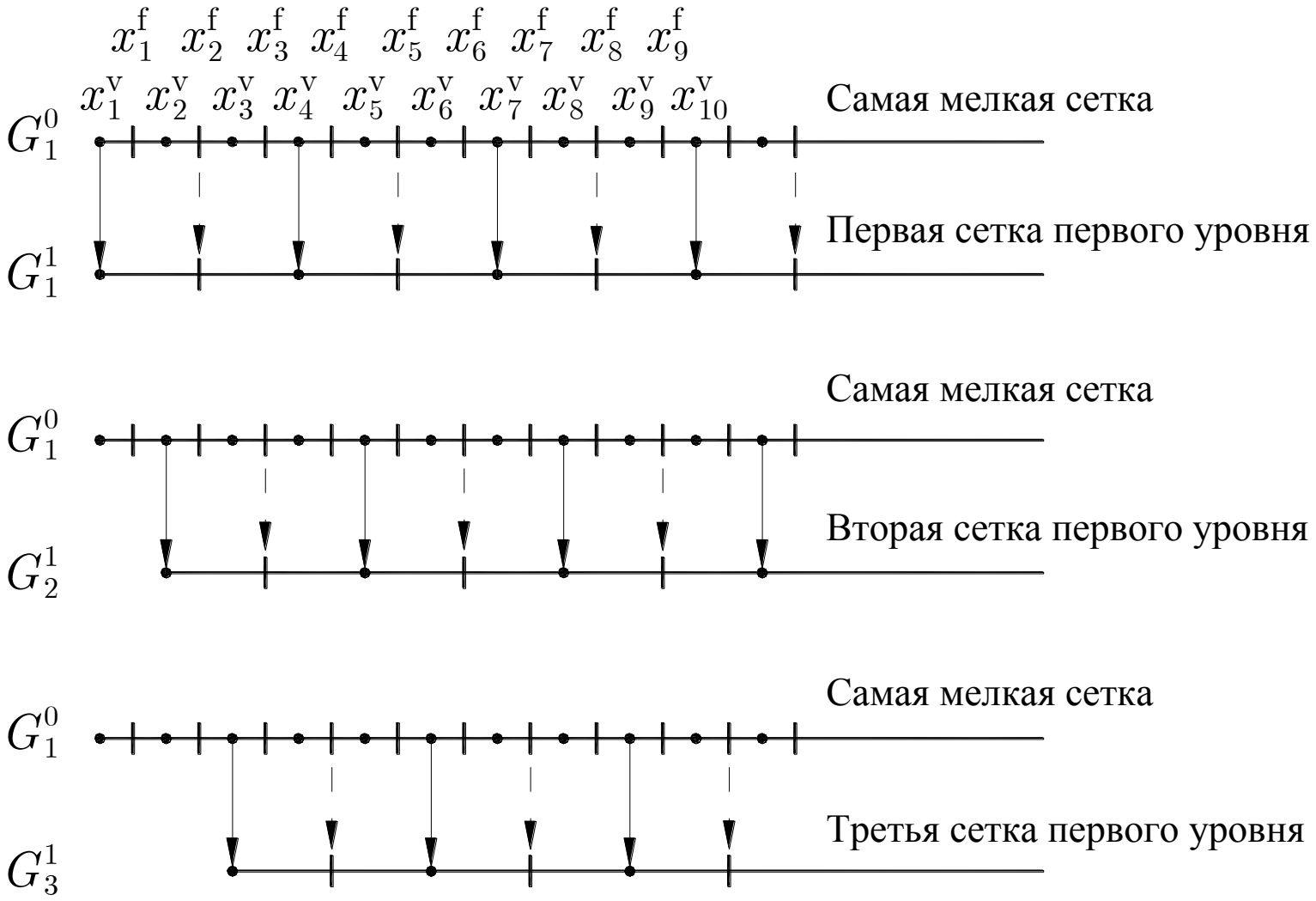
$$\tilde{S}_p = \frac{\tilde{T}(1)}{T(p)},$$

где $\tilde{T}(1)$ есть время выполнения быстрейшего последовательного алгоритма на одном процессоре и $T(p)$ есть время выполнения параллельного алгоритма на системе из p процессоров.

Определение 4. Эффективностью параллельного алгоритма по отношению к наилучшему последовательному алгоритму называется величина

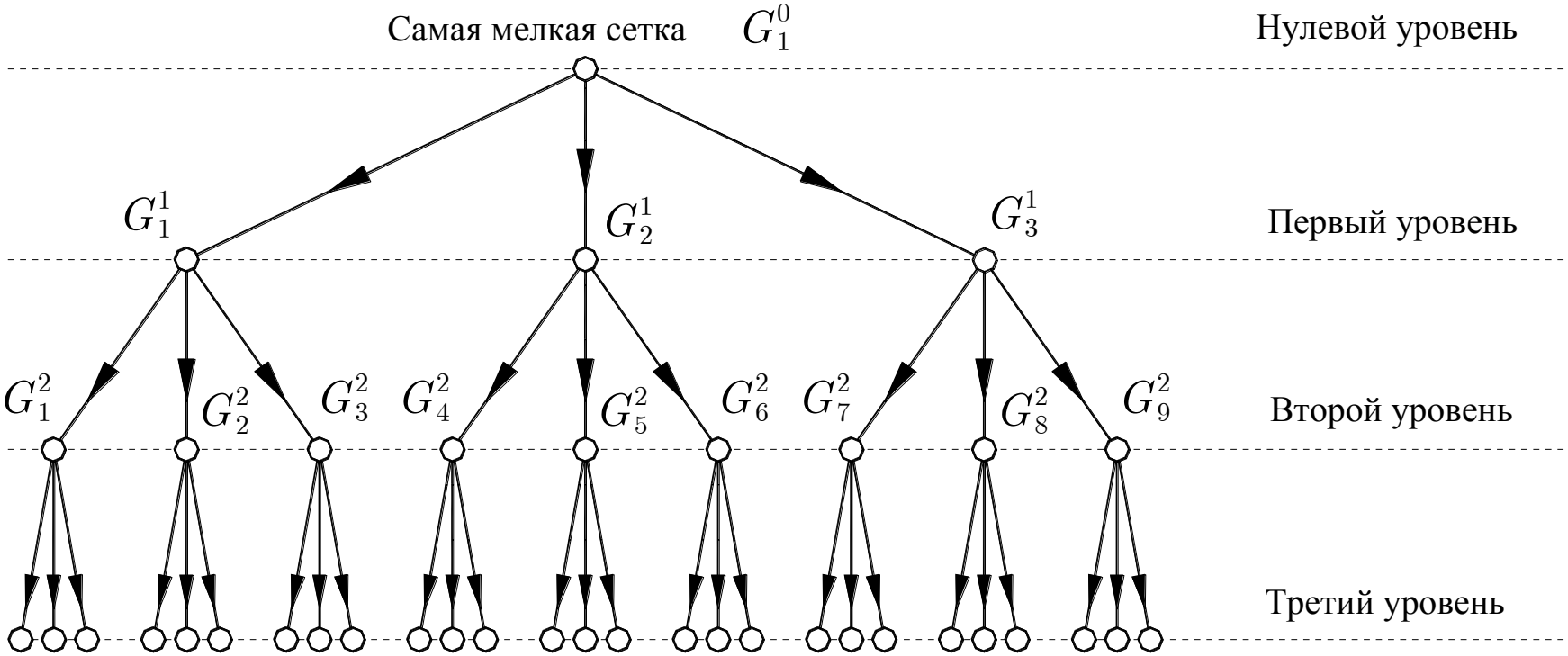
$$\tilde{\varepsilon}_p = \frac{\tilde{S}_p}{p}.$$

Построение грубых сеток

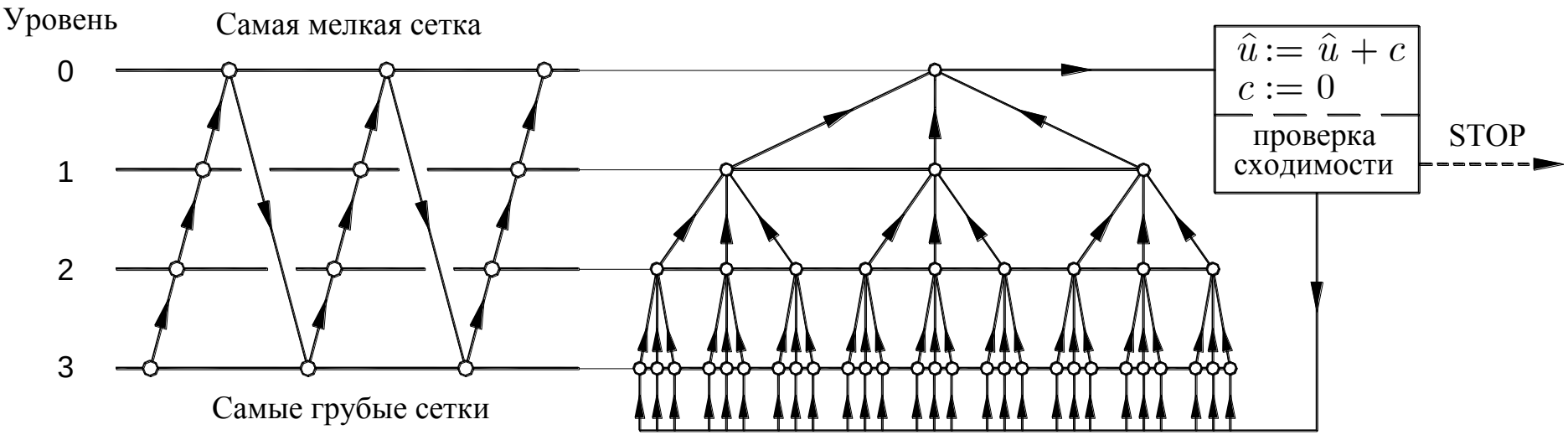


УМТ – односеточный алгоритм!!!

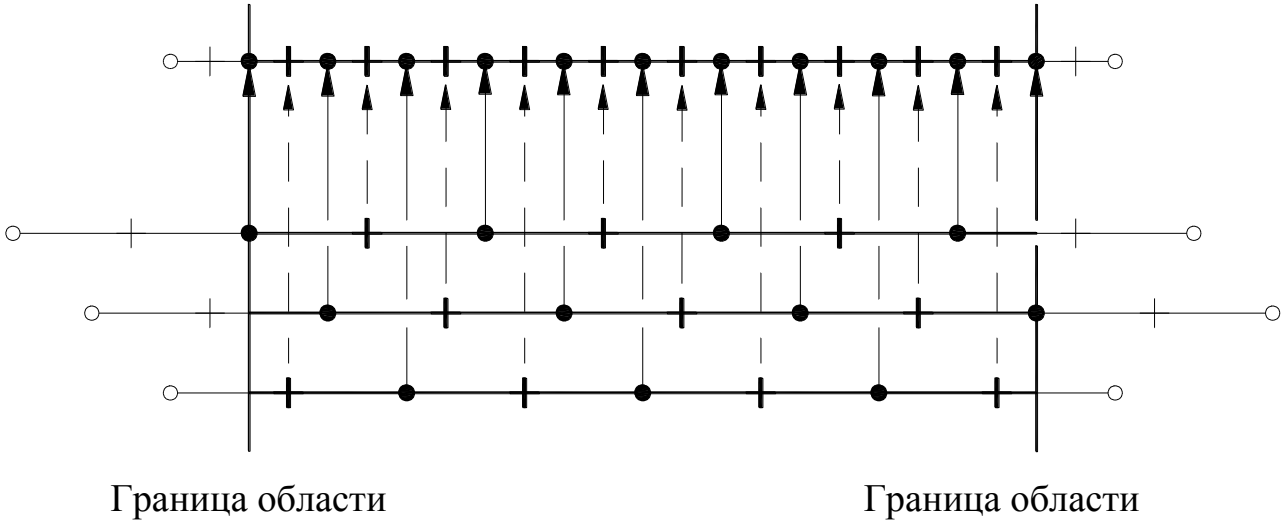
Многосеточная структура



Многосеточный цикл



Оператор пролонгации



Универсальная Многосеточная Технология (УМТ) – односеточный метод Зейделя для численного решения краевых и начально-краевых задач.

Трудоёмкость УМТ составляет $O(N \lg N)$ арифметических операций, где N есть количество узлов сетки.

Сглаживание на уровне l состоит из решения 3^{ld} (d = 2,3) независимых задач, которое можно выполнять параллельно.

Переход от уровня с более грубыми сетками к уровню с мелкими сетками не вносит дополнительной погрешности в поправку, что снижает требования, предъявляемые к сглаживателю.

Комбинированное построение матрицы расщепления

Параметр $l^* \in [0, L^+]$ называют глубиной распараллеливания УМТ, L^+ есть номер уровня с самыми грубыми сетками.

Случай $l^* = 0$ соответствует последовательному алгоритму.

Количество вычислительных узлов составит $p = 3^{dl^*}$, $d = 2, 3$.

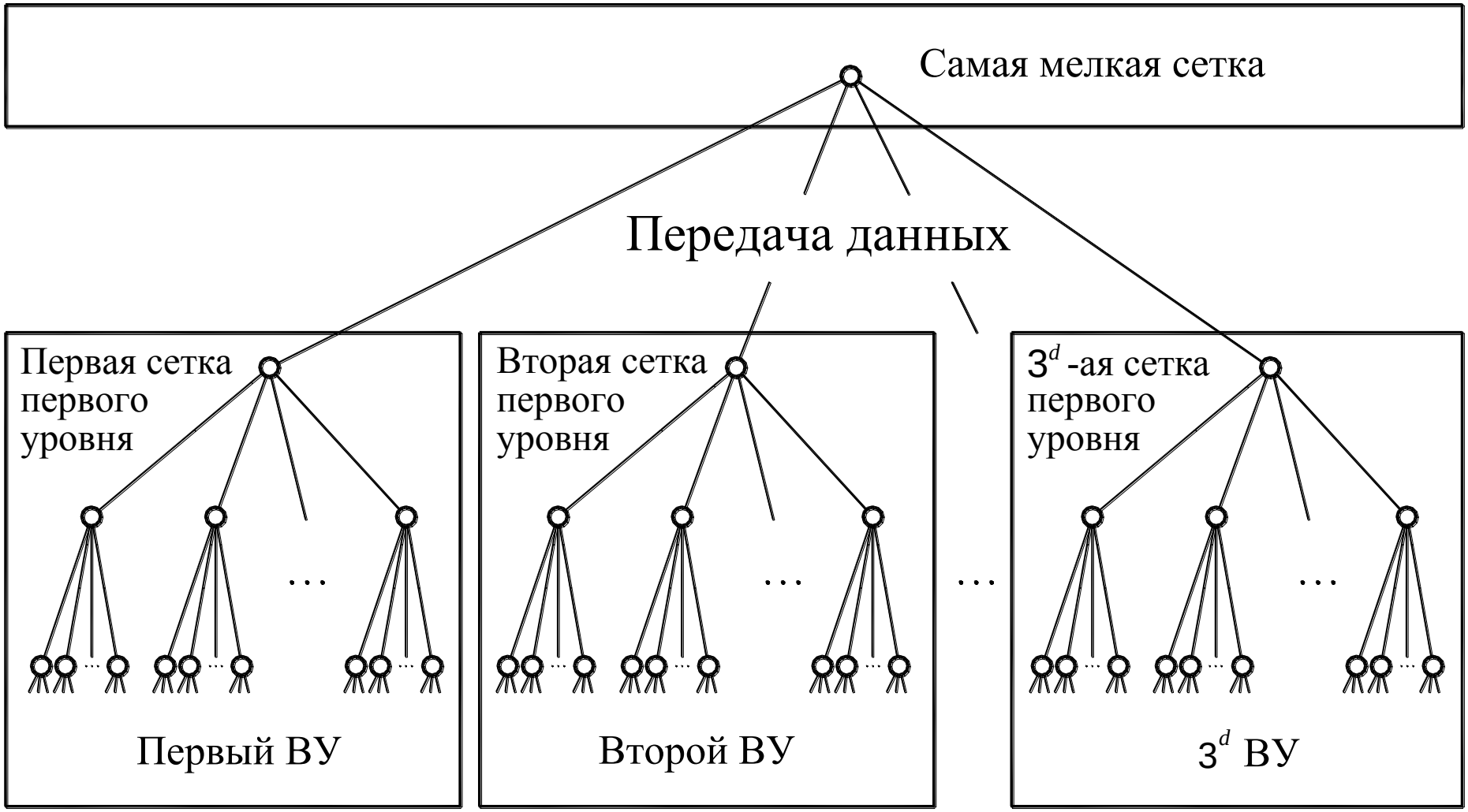
Комбинированное построение матрицы расщепления:

$l < l^*$ – алгебраическое построение,

$l \geqslant l^*$ – геометрическое построение.

Комбинированное построение

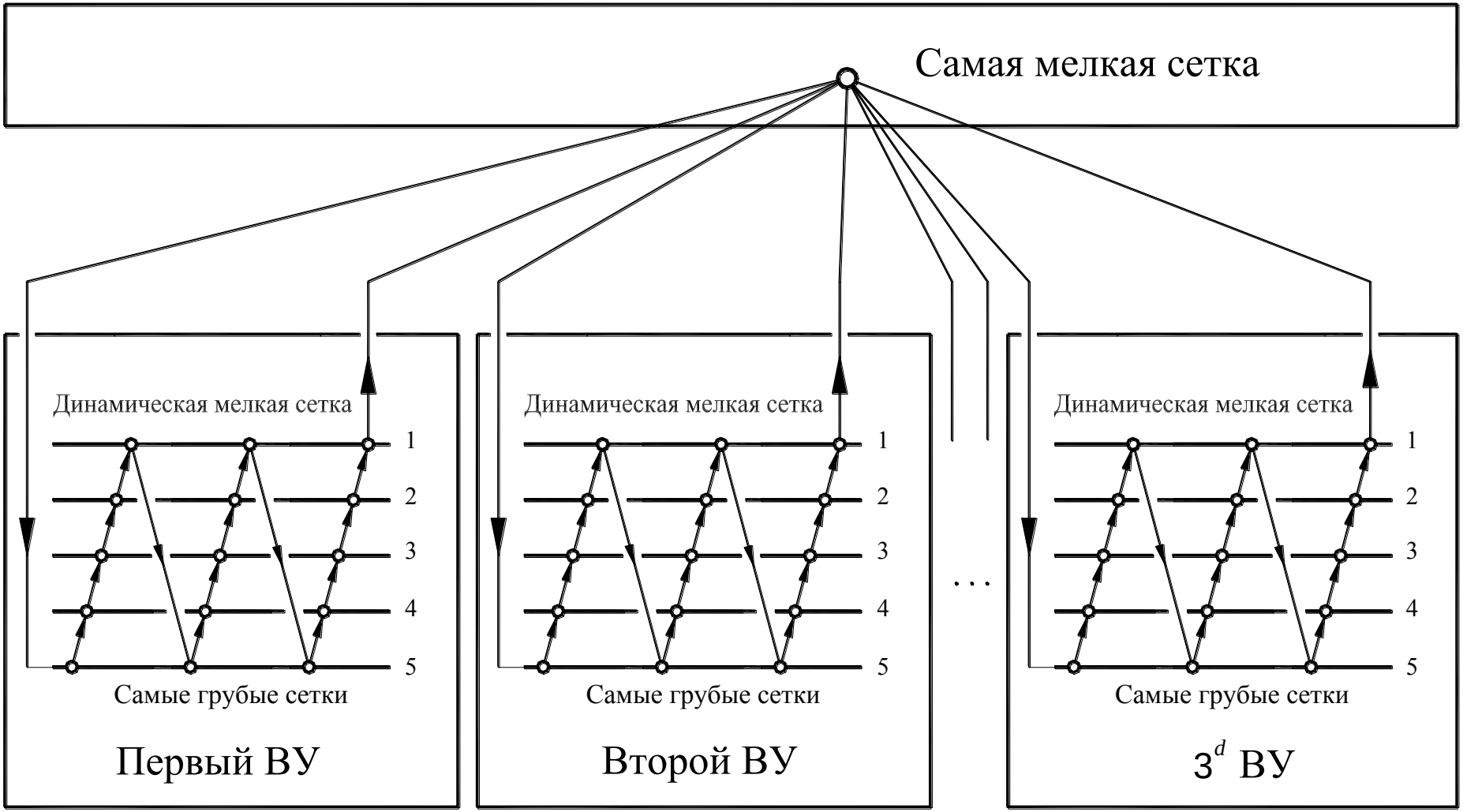
Распараллеливание первой глубины ($l^* = 1$, $p = 3^d$, $d = 2,3$)



Независимые задачи!

Комбинированное построение

Распараллеливание первой глубины ($l^* = 1$, $p = 3^d$, $d = 2,3$)



Дополнительные многосеточные итерации на грубых сетках!

Комбинированное построение

Определение 5. Ускорением ($\mathcal{S}_l$) и эффективностью ($\mathcal{E}_l$) параллельного сглаживания на сетках уровня l по отношению к последовательному сглаживанию на тех же сетках называется величина

$$\mathcal{S}_l = p\mathcal{E}_l = \frac{T_l(1)}{T_l(p)},$$

где $T_l(1)$ есть время выполнения последовательного сглаживания (и оператора перехода) на одном процессоре, а $T_l(p)$ – время выполнения параллельного сглаживания (и оператора перехода) на системе из p процессоров.

Оценки мер параллелизма

Допущение 1. На всех сетках использована одна и та же сглаживающая процедура и выполнено одинаковое количество сглаживающих итераций. Время исполнения сглаживающих итераций пропорционально количеству узлов сетки.

Допущение 2. На уровнях $l \geqslant l^*$ УМТ обладает полным параллелизмом.

$$\bar{\mathcal{S}} = 3^d \bar{\mathcal{E}} < 3^d \frac{1 + q^* L^+}{\dfrac{1}{\mathcal{E}_0} + q^* L^+},$$

Оценки ускорения $\tilde{\mathcal{S}}$ и эффективности $\tilde{\mathcal{E}}$ параллельной УМТ отношению к V-циклу:

$$\tilde{\mathcal{S}} = 3^d \tilde{\mathcal{E}} < \frac{3^d}{1 - 2^{-d}} \frac{1}{\dfrac{1}{\mathcal{E}_0} + q^* L^+}.$$

Вычислительный эксперимент

Первая краевая задача для трёхмерного уравнения Пуассона в единичном кубе.

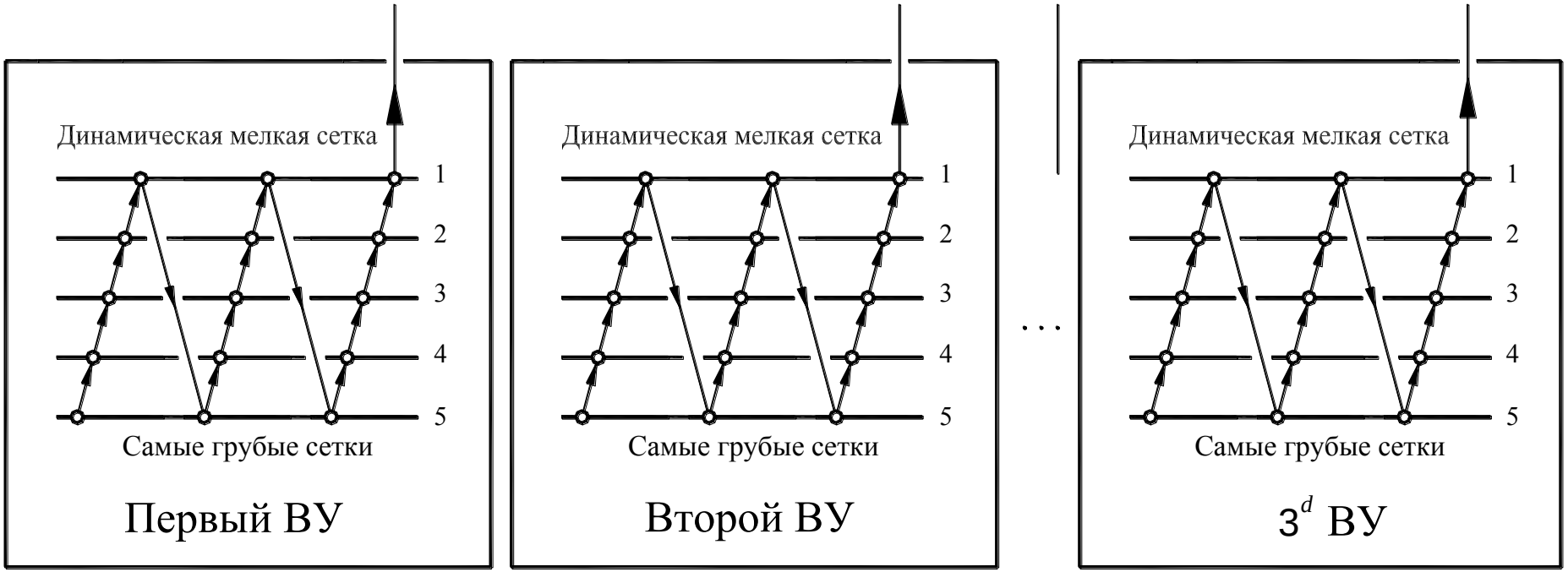
Вычислительная сетка состоит из $245^3 = 14706125$ узлов.

$l^* = 1$, $d = 3$, $p = 3^{l^* d} = 27$, $q^* = 2$, $L_3^+ = 4$.

Эффективность параллельной УМТ составила 0.92, в то время, согласно оценке $\bar{\mathcal{E}} = \bar{\mathcal{S}} 3^{-d} = 0.98$.

Если сравнивать с последовательным V-циклом при одинаковом количестве многосеточных итераций, то эффективность параллельной УМТ составит 0.112, в то время как согласно оценке $\tilde{\mathcal{E}} = 0.125$. Таким образом, время решения модельной краевой задачи для уравнения Пуассона при помощи параллельной УМТ с привлечением 27 процессоров оказывается в три раза меньше, чем при помощи последовательного V-цикла.

Геометрическое построение матрицы расщепления



Использование схем более высокого порядка аппроксимации!

$$\bar{\mathcal{E}}_{\min} = \left(1 + 2\frac{3^{l^*}}{N+1}\right)^{-d}.$$

Вычислительный эксперимент

Первая краевая задача для трёхмерного уравнения Пуассона в единичном кубе. Вычислительная сетка состоит из 451^3 узлов.

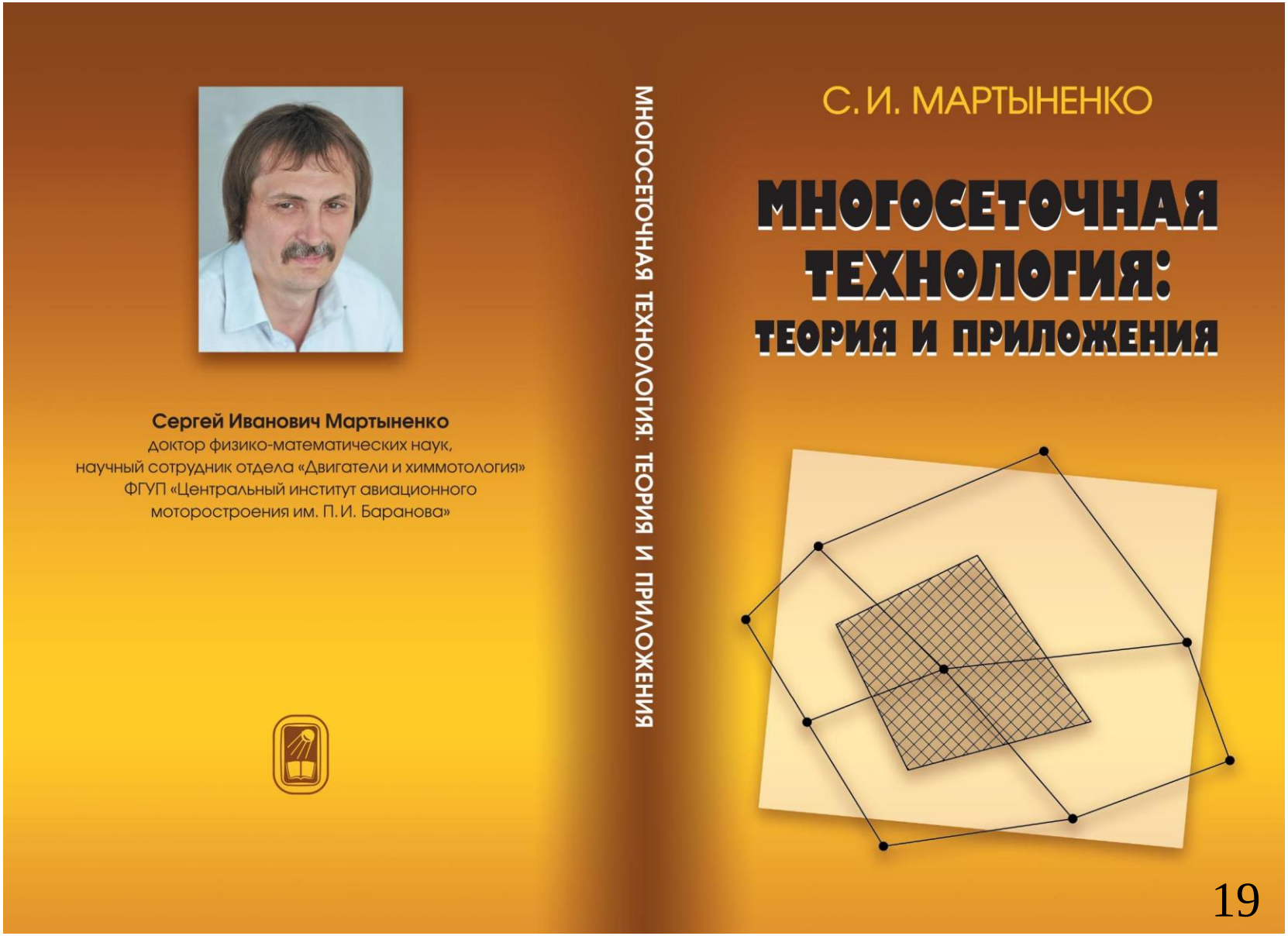
Для аппроксимации уравнения Пуассона использована схема шестого порядка аппроксимации, основанная на аппроксимациях Паде. Однако в вычислительном эксперименте вместо разностной краевой задачи на сетке $451 \times 451 \times 451$ решены 729 разностных задач на сетках $\sim 50 \times 50 \times 50$.

Вычисления производились на системе с общей памятью (4 процессора AMD Opteron 6176 и объемом RAM 128 Gb).

Значения эффективности параллельной УМТ 88% и 90% в эксперименте и теории соответственно.

ИПХФ РАН

Литература по УМТ



Выводы:

1. Традиционный способ построения параллельных многосеточных алгоритмов, основанный на распараллеливании сглаживающей процедуры и операторов переходов (алгебраический метод построения матрицы расщепления), не позволяет достичь высокой эффективности параллелизма из-за уменьшения отношения объёма вычислительной работы к объёму пересылаемых данных и возможного простоя процессоров на уровнях с грубыми сетками.
2. Многосеточная структура (комбинированное построение матрицы расщепления) позволяет выполнять сглаживание на уровнях с грубыми сетками параллельно, причём независимо от выбора сглаживающей процедуры.
3. Геометрическое построение матрицы расщепления есть редукция к 3^{l*d} независимым задачам.

Спасибо за внимание!