

МЕТОД МАССОВОГО РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ РЕШЕНИИ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

А.Н. Супрун

Нижегородский государственный архитектурно-строительный университет

Разработанной для расчета сложных строительных объектов метод деления на проектные единицы распространяется на краевые задачи математической физики. В качестве примера приводится последовательность решения краевой задачи теории потенциала.

Положим, что некоторая вычислительная система CS (рабочая станция, кластер рабочих станций и т.п.) использует для решения краевых задач математической физики прикладной программный комплекс P . Пусть далее программа $p \in P$ использует какой-либо метод дискретизации, сводящий некоторую стационарную краевую задачу B для области Ω к решению системы S линейных алгебраических уравнений. Следует заметить, что обычно значительную часть общей трудоёмкости решения задачи B будут составлять операции формирования, решения и обработки результатов решения системы уравнений S . Поэтому можно условно принять, что время t , затрачиваемое вычислительной системой CS (“стоимость” процедуры [1]), будет определяться некоторой возрастающей функцией f от числа n уравнений:

$$t = f(n). \quad (1)$$

Предположим далее, что из некоторых разумных соображений принята максимально допустимая продолжительность t_* вычислений для одной задачи на CS . Тогда из (1) можно получить следующее ограничение на порядок дискретизации Ω :

$$n \leq n_* = f^{-1}(t_*),$$

где f^{-1} – обратная f функция.

Известно, что решение нестационарных и нелинейных краевых задач со сложными геометрическими и физическими особенностями (задачи класса H) не обеспечивается современными многопроцессорными вычислительными системами даже с пиковой производительностью в тысячи Tflops. Это связано, прежде всего, с низкой производительностью современных мультипроцессорных систем применительно к актуальным задачам класса H . К таким, например, как моделирование возможных чрезвычайных ситуаций при оценке живучести проектируемых технических объектов, реконструкция техногенных катастроф и террористических актов и т.п. При этом главным препятствием к существенному повышению производительности вычислительных систем на задачах H является отсутствие математических методов, позволяющих строить вычислительные процессы по технологии массового распараллеливания.

В связи с этим, в настоящее время назрела необходимость в переосмыслении традиционных подходов к построению параллельных процедур. Однако в настоящее время в этом направлении уже получены некоторые обнадеживающие результаты. Так для расчета сложных стержневых строительных конструкций был разработан метод разделения объекта на проектные единицы [1, 2], продемонстрировавший возможность построения эффективных алгоритмов массового распараллеливания.

Суть метода состоит в условном разделении сложного строительного объекта на составляющие элементы – проектные единицы с последующим построением вычисли-

тельного процесса в распределенных вычислительных средах или на многомашинных комплексах в виде параллельных и согласующихся решений задач уменьшенной статической неопределенности. Указанный метод может быть распространен на сплошные среды и широкий класс краевых задач математической физики.

Пусть p – прикладная программа, разработанная на базе некоторого метода дискретизации, обеспечивающего достаточно точное решение корректно поставленной краевой задачи B с начальными C_0 и краевыми C_B условиями для допустимых программой p областей Ω . Для решения задачи B разделим Ω на конечное множество E из M элементов $e_1, \dots, e_m, \dots, e_M$, каждый из которых допустим для расчета программой p . Взаимосвязь элементов E можно иллюстрировать графом смежности (рис.1).

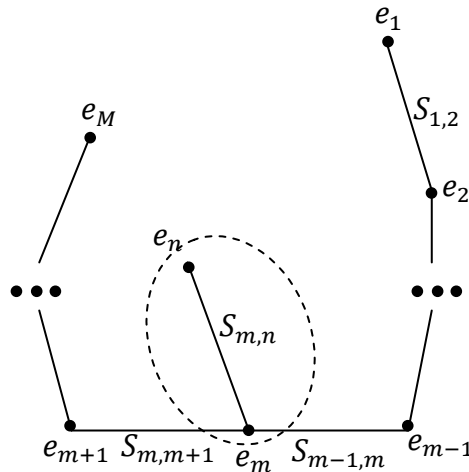


Рис.1. Граф смежности элементов (вершины – элементы, рёбра – поверхности раздела элементов)

Положим для определенности, что прикладная программа p позволяет получать численные решения третьей краевой задачи. Требуется решить первую краевую задачу: найти потенциал $U(x)$, удовлетворяющий уравнению Лапласа в области Ω по заданным его значениям $U(x) = \varphi(x)$ на границе $\bar{\Omega}$. При этом программа p использует замену областей изменения независимых переменных Ω и $\bar{\Omega}$ на дискретные множества точек, соответственно, ω и $\bar{\omega}$. В результате этой процедуры исходной задаче сопоставляется система конечного числа n линейных алгебраических уравнений. Тем самым p будет выполнять преобразование дискретного множества численных значений $U(x) = \varphi(x)$ на $\bar{\Omega}$ (обозначим $\bar{U}_{\bar{\omega}}$) в численное множество значений $U(x)$ на Ω (U_{ω}):

$$U_{\omega} = A \bar{U}_{\bar{\omega}}, \quad (2)$$

где A – линейный оператор.

Разделением Ω на элементы выполняется первый шаг к распараллеливанию вычислений:

$$U_{\omega} = \sum_{m=1}^M (A \bar{U}_m^* + A \bar{U}_m^{**}),$$

где

$$\bar{U}_m^* = \begin{cases} \varphi(x) & \text{на } S_m^-, \\ 0 & \text{на } \bar{\omega}_m^+, \end{cases} \quad \bar{U}_m^{**} = \begin{cases} 0 & \text{на } S_m^-, \\ \bar{U}_m^+ & \text{на } \bar{\omega}_m^+, \end{cases}$$

S_m^- – часть общей поверхности S_m элемента e_m , исключая поверхности S_m^+ , образованные отделением e_m от других элементов, $\bar{\omega}_m^+$ – дискретное множество точек на S_m^+ , \bar{U}_m^+ – граничные условия на $\bar{\omega}_m^+$. Для определения \bar{U}_m^+ рассмотрим выделенный пунктиром на рис.1 фрагмент объекта расчёта в условно разделённом состоянии (рис.2), где S_m^-, S_n^- – “свободные” и $S_{m,n}^+, S_{m,m-1}^+, S_{n,m}^+$ – “смежные” поверхности, $S_{m,n}$ – поверхность разделения элементов m и n ($m < n$).

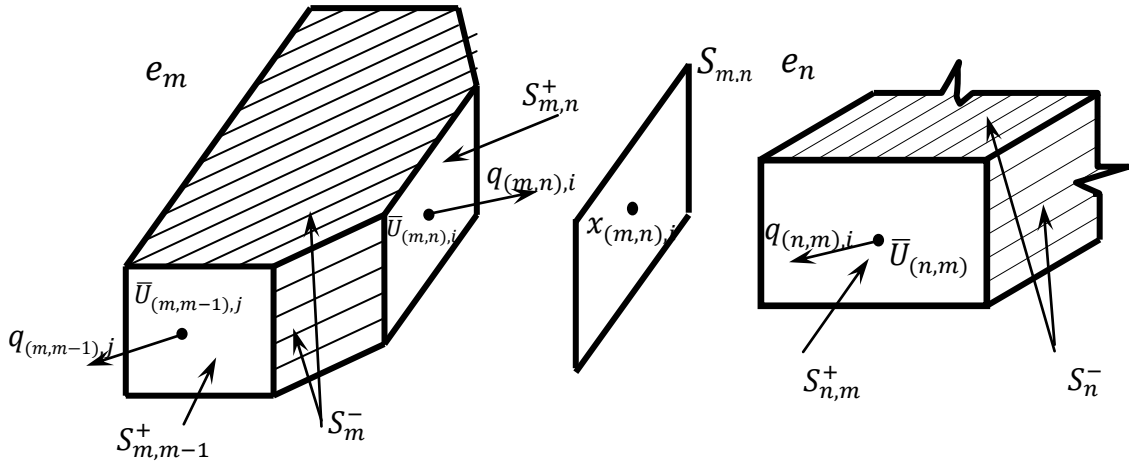


Рис.2. Фрагмент области Ω в разделённом состоянии

Используя общие соображения, обосновывающие применение уравнения Лапласа для описания физических процессов, введём условия сопряжения элементов e_m и e_n в виде уравнений совместности (3) и баланса (4):

$$\bar{U}_{(m,n),i} - \bar{U}_{(n,m),i} = 0, \quad (3)$$

$$q_{(m,n),i} + q_{(n,m),i} = 0 \quad (4)$$

для всех $x_{(m,n),i} \in \bar{\omega}_{m,n}$, где $\bar{\omega}_{m,n}$ – дискретное множество точек на поверхности $S_{m,n}$ разделения элементов e_m и e_n (рис.2), $\bar{U}_{(m,n),i}$ и $\bar{U}_{(n,m),i}$ – потенциалы в точке $x_{(m,n),i}$ соответственно на $S_{m,n}^+$ и $S_{n,m}^+$, $q_{(m,n),i} = \lambda \cdot \partial U_{(m,n),i} / \partial v_{m,n}$, $q_{(n,m),i} = \lambda \cdot \partial U_{(n,m),i} / \partial v_{n,m}$, λ – физическая константа, $v_{m,n}$ и $v_{n,m}$ – нормали в точке $x_{(m,n),i}$ к поверхностям соответственно $S_{m,n}^+$ и $S_{n,m}^+$. В задаче теплопроводности $q \dots$ – тепловой поток, λ – коэффициент теплопроводности.

Решим поставленную задачу в 6 этапов.

1. Для всех $e_m \in E$ определим потенциалы $\beta_{m,j}$ в точках $x_j \in \bar{\omega}_m^+$. Для этого воспользуемся программой p

$$\bar{U}_{m,\varphi}^+(x) = A \begin{pmatrix} \varphi(x) \text{ на } S_m^- \\ q_j = 0 \quad \forall x_j \in \bar{\omega}_m^+ \end{pmatrix} \quad (5)$$

и программой аппроксимации D

$$\bar{U}_{m,\varphi}^+(x) \xrightarrow{D} (\beta_{m,j}, \forall x_j \in \bar{\omega}_m^+). \quad (6)$$

2. Для всех $e_m \in E$ вычислим потенциалы $\alpha_{m,i,j}$ в каждой точке $x_i \in \bar{\omega}_m^+$ от единичного тестирования q_j на всех $x_j \in \bar{\omega}_m^+$. Для этого воспользуемся программой p

$$\bar{U}_{m,i,j}^+(x) = A \begin{pmatrix} 0 \text{ на } S_m^- \\ q_j = 1, \quad x_j \in \bar{\omega}_m^+ \\ q = 0 \quad \forall x_k \in \bar{\omega}_m^+, k \neq j \end{pmatrix} \quad (7)$$

и программой аппроксимации

$$\bar{U}_{m,i,j}^+(x) \xrightarrow{D} (\alpha_{m,i,j}, \forall (x_i \text{ и } x_j) \in \bar{\omega}_m^+). \quad (8)$$

3. Построим систему уравнений для определения параметров взаимосвязи между элементами. Положим для определённости, что элемент e_m имеет два смежных элемента: e_{m^*} ($m^* < m$) и $e_{m^{**}}$ ($m^{**} > m$). При этом величина потенциала $\bar{U}_{(m,n),i}$ в точке $x_i \in \bar{\omega}_{m,n}^+$ зависит от всех q_j при $x_j \in \bar{\omega}_{m,n}^+ \cup \bar{\omega}_{m,n^*}^+ \cup \bar{\omega}_{m,n^{**}}^+$.

$$\bar{U}_{(m,n),i} = \beta_{m,i} + \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{m,n}^+} \alpha_{m,i,j} q_{(m,n),j} + \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{m,m^*}^+} \alpha_{m,i,j} q_{(m,m^*),j} + \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{m,m^{**}}^+} \alpha_{m,i,j} \cdot \quad (9)$$

Аналогично для $\bar{U}_{(n,m),j}$ элемента e_n с двумя смежными $e_{n^*}(n^* < n)$ и $e_{n^{**}}(n^{**} > n)$ будем иметь:

$$\bar{U}_{(n,m),i} = \beta_{n,i} + \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{n,m}^+} \alpha_{n,i,j} q_{(n,m),j} + \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{n,n^*}^+} \alpha_{n,i,j} q_{(n,n^*),j} + \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{n,n^{**}}^+} \alpha_{n,i,j} q_{(n,n^{**}),j} \cdot \quad (10)$$

Используя условия (3), (4) и формулы (9), (10), получим уравнение, связывающее неизвестные, оказывающие влияние на потенциал в каждой точке x_i на поверхности S_{mn} :

$$\begin{aligned} & \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{m,n}^+} (\alpha_{m,i,j} + \alpha_{n,i,j}) q_{(m,n),j} - \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{m^*,m}^+} \alpha_{m,i,j} q_{(m,m^*),j} + \\ & + \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{m,m^{**}}^+} \alpha_{m,i,j} q_{(m,m^{**}),j} - \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{n^*,n}^+} \alpha_{n,i,j} q_{(n,n^*),j} + \\ & + \sum_{x_j \in \bar{\omega}_{n,n^{**}}^+} \alpha_{n,i,j} q_{(n,n^{**}),j} = \beta_{n,i} - \beta_{m,i}. \end{aligned} \quad (11)$$

Условие (4) позволило вдвое уменьшить в (11) число неизвестных: $q_{(r,l),k}$ при $r > l$ заменено на $-q_{(l,r),k}$. Уравнение (11) символически можно записать в математической форме:

$$A_{m,n} Q_{m,n} = B_{m,n}. \quad (12)$$

4. Преобразуем совокупность уравнений (12) в систему алгебраических уравнений стандартного вида

$$A^* Q_N = B_N, \quad (13)$$

где A^* – квадратная матрица порядка N , Q_N и B_N – матрицы–столбцы соответственно неизвестных и свободных членов, N – общее число неизвестных. Решаем систему (13).

5. Подставляя вычисленные значения q_{\dots} в (9), находим потенциалы на дискретном множестве точек взаимодействия всех элементов разделения объекта.

6. Воспользовавшись программой p , параллельно решаем задачу Дирихле для каждого элемента e_m ($m=1,2,\dots,M$).

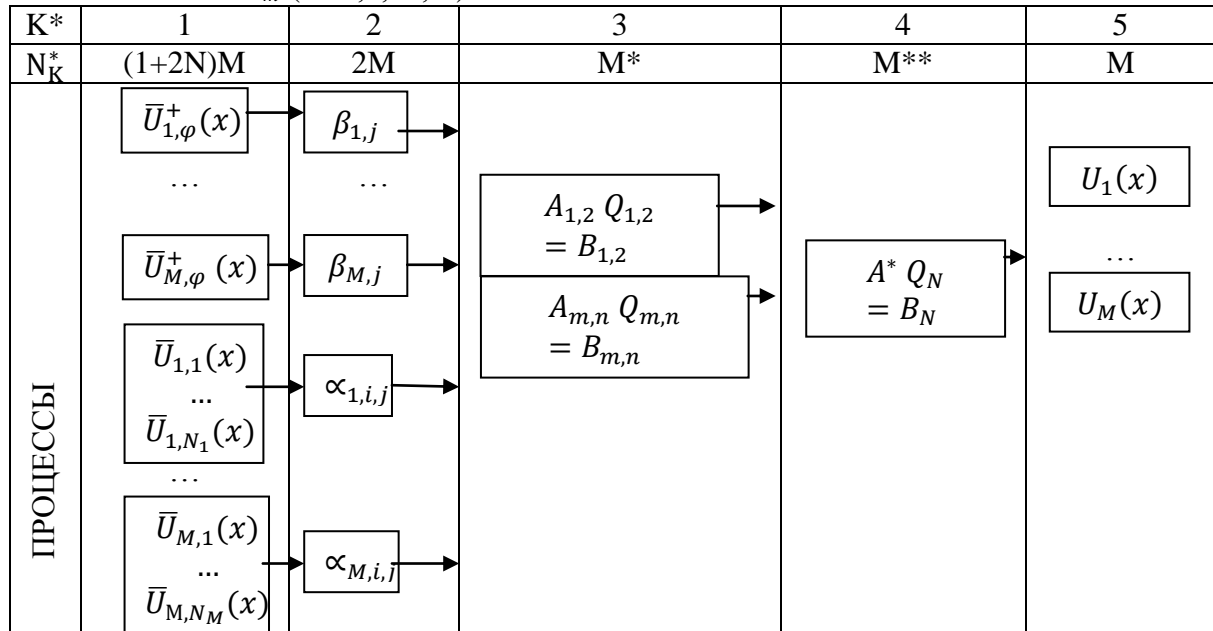


Рис.3. Последовательность решения задачи

Вычислительный процесс решения поставленной задачи можно построить по схеме, указанной на рис. 3, где K^* – порядковый номер последовательно выполняемых блоков программы, N_K^* – число параллельных вычислительных процессов в K -ом блоке.

В 1-ом блоке программами p параллельно выполняется $(1+2N)M$ операций вида (5), (7) 1-го и 2-го этапов решения задачи. При этом, используя (1), можно определить время T_1 , затрачиваемое на вычислительные операции блока:

$$T_1 = f(n^*), \quad n^* = \max_{m \in M} n_m, \quad \bar{M} = 1, 2, \dots, M,$$

n_m – число неизвестных при решении краевой задачи для элемента e_m .

Во 2-м блоке параллельно выполняется $2M$ операций аппроксимации вида (6), (8).

Время выполнения блока

$$T_2 = f_1(N^*), \quad N^* = \max_{m \in \bar{M}} N_m,$$

N_m – количество точек контакта e_m со всеми смежными элементами.

3-й блок (3-й этап решения) в параллельном режиме формирует системы уравнений (12), M^* – число поверхностей разделения элементов. При этом

$$T_3 = f_2(N^{**}), \quad N^{**} = \max_{\forall S_{m,n}} N_{m,n},$$

$N_{m,n}$ – число точек контакта элементов e_m и e_n .

4-й блок (4-й этап) формирует и решает систему (13) из N линейных алгебраических уравнений. Примем $T_4 = f_3(N)$, где f_3 и M^{**} определяются используемой программой решения уравнений.

5-й блок (5-й и 6-й этапы) параллельно выполняет M операций решения задачи Дирихле для элементов e_1, \dots, e_M . При этом $T_5 = f(n^*)$.

Введём характеристику ускорения

$$v = \frac{T_0}{T_*}, \quad T_0 = f(n), \quad T_* = \sum_{i=1}^5 T_i,$$

показывающую во сколько раз возрастает (при $v > 1$) производительность вычислений при решении задачи предлагаемым методом.

При разделении Ω не исключён вариант, когда e_1, \dots, e_M будут иметь одинаковые количества неизвестных: $n_1 = n_2 = \dots = n_M = n/M$. Кроме того, нельзя исключить и такой случай, когда общее число точек связи элементов будет настолько малым, что $T_2 + T_3 + T_4 \ll T_1 + T_5$ и поэтому $T_* \cong T_1 + T_5 = 2f(n/M)$. Примем $f(\chi) = c\chi^\gamma$, где $c, \gamma > 0$ – константы. При этом будем иметь пиковое значение v :

$$v_p = \frac{n^\gamma}{2(n/M)^\gamma} = \frac{1}{2} M^\gamma. \quad (14)$$

При применении расчётной программы “Лира” на ПК (3,2 ГГц, 512 Мб) до 2 млн. неизвестных получена $\gamma = 3,8393$. Из (14) при $M = 2$ будет $v_p = 7$. Расчёт на 2-х параллельных ПК при $n = 2\,034\,372$ уравнений показал $v = 5,8$.

Литература

1. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 608 с.
2. Suprun A.N., Kislitsyn D.I. Distributed computing for construction project design by division into project design units // Computing in Civil and Building Engineering, Proceedings of the International Conference, 30 June - 2 July – Nottingham, 2010. P. 325–326.
3. Suprun A.N., Kislitsyn D.I. The multilevel parallelization of structural design calculation in distributed computing environment // 14th International Conference on Computing in Civil and Building Engineering (14th ICCBE), 27 – 29 June – Moscow, 2012. P. 382–383.