УДК 519.6

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА ПРИ ДИСКРЕТИЗАЦИИ ПО ШАБЛОНУ “КОСОЙ КРЕСТ” В ОБЛАСТЯХ С ОБРАТНОЙ СТУПЕНЬКОЙ

А. М. Рязанов[1], **С. А. Финогенов**[1]

В задачах гидродинамики для несжимаемой жидкости основным вычислительным блоком является решение уравнения Пуассона для нахождения давления. В статье предложена параллельная реализация метода фиктивных областей для уравнения Пуассона в трехмерной области с обратной ступенькой. Этот метод базируется на параллельной реализации быстрого алгоритма решения уравнения Пуассона в параллелепипеде. Рассмотрены стандартные методы решения данной задачи на основе пакета PETSc. Проведен сравнительный анализ двух подходов к обеспечению быстродействия на многопроцессорном комплексе “Ломоносов”, установленном в Научно-исследовательском вычислительном центре МГУ им. М. В. Ломоносова.

Ключевые слова: газовая динамика, гидродинамика, уравнение Пуассона, метод фиктивных компонент, параллельные вычисления, MPI, PETSc.

Введение. В настоящее время математическое моделирование активно входит в практику инженерных исследований и промышленного конструирования. Применение математического моделирования в газо- и гидродинамике играет важную роль во многих научных приложениях. Таким образом, численное решение систем дифференциальных уравнений, описывающих процессы из данных областей знаний, можно считать одной из фундаментальных проблем вычислительной математики.

Известно, что классические алгоритмы первого порядка аппроксимации приводят к слишком большой диссипации, а схемы повышенного порядка в областях с большими градиентами приводят к нефизическим осцилляциям. В последние десятилетия появились алгоритмы “высокой разрешающей способности” (TVD, TVB, ENO и др.), основанные на нелинейной коррекции потоков. Эти алгоритмы обладают улучшенными диссипативными и дисперсионными свойствами по сравнению с классическими схемами, однако не решают ряда существующих задач (например, задачи аэроакустики или в случае несжимаемой жидкости).

В настоящее время в ИБРАЭ РАН активно применяется схема КАБАРЕ, предложенная в [1]. Данная схема имеет второй порядок точности по времени и пространству и обладает хорошими диссипативными свойствами. К отличительным особенностям предложенного алгоритма также можно отнести отсутствие настроечных параметров и максимально компактный разностный шаблон.

Приведение схемы КАБАРЕ к двухслойному представлению [2] позволило обобщить ее на случаи, описываемые квазилинейными гиперболическими уравнениями. Такое двухслойное представление привело к балансно-характеристической интерпретации с разделением консервативных и потоковых переменных. В работе [3] предложен простой и эффективный алгоритм нелинейной коррекции схемы КАБАРЕ, необходимый для монотонизации решений в областях больших градиентов.

Большой вклад в расширение возможностей математического моделирования внесли бурно развивающиеся многопроцессорные вычислительные системы, быстрый рост производительности которых привел к новому этапу развития вычислительного эксперимента, при этом возникла проблема перехода на многопроцессорные системы. Этот переход связан с адаптацией существующих последовательных алгоритмов и комплексов программ к параллельным вычислительным системам, что является достаточно сложной задачей.

Другой важной и актуальной проблемой является необходимость обеспечения масштабируемости параллельных алгоритмов. Как известно, эффективность параллельных вычислений начинает резко снижаться, когда число процессоров становится больше некоторого критического числа, свойственного данному алгоритму или размерности дискретной задачи. Это происходит, в частности, из-за того, что время,

[1] Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (ИБРАЭ РАН), Большая Тульская ул., д. 52, 115191, Москва; А. М. Рязанов, мл. науч. сотр., e-mail: ram@ibrae.ac.ru; С. А. Финогенов, вед. науч. сотр., e-mail: saf@ibrae.ac.ru

затрачиваемое на обмен данными, с ростом числа процессоров начинает превосходить время, затрачиваемое непосредственно на вычисления. В этой связи достижение высокой параллельной эффективности представляется особенно сложной задачей при большом числе процессоров. Применение параллельных технологий для моделирования несжимаемого течения более сложно по сравнению со сжимаемыми течениями. Это объясняется таким физическим свойством несжимаемой жидкости, как бесконечная скорость распространения возмущений, обусловливающим необходимость обмена данными между всеми процессорами, что существенно сказывается на параллельной эффективности, особенно при большом числе процессоров.

Вместе с тем интегрирование уравнения Пуассона для определения давления (в переменных “скорость–давление”) или функции тока (в переменных “функция тока–завихренность”) является одним из наиболее трудоемких этапов численного решения системы уравнений гидродинамики сеточными методами. В большинстве случаев (практически во всех современных методах решения уравнений гидродинамики) этот этап является доминирующим.

Схема КАБАРЕ не является исключением. В отличие от стандартного 5-точечного в двумерном и 7-точечного в трехмерном случае шаблона “крест”, схема дискретизации алгоритма КАБАРЕ использует так называемый “косой крест”, являющийся 9-точечным в двумерном случае и 27-точечным в трехмерном. Помимо большего количества точек, входящих в шаблон “косой крест”, данная схема дискретизации приводит к формированию вырожденных матриц, что также осложняет процесс нахождения решения.

Таким образом, эффективное решение уравнения Пуассона при помощи масштабируемого алгоритма на многопроцессорных системах является одной из ключевых проблем моделирования (особенно для несжимаемых жидкостей).

Целью настоящей статьи является исследование быстродействия и эффективности загрузки процессоров в зависимости от размерности разностной задачи и числа используемых процессоров.

1. Математическая постановка задачи. Рассмотрим методику решения задачи

$$\Delta u = f \tag{1}$$

в случае шаблона “косой крест” для заданной области Ω с граничными условиями Неймана.

1.1. Метод фиктивных областей. Пусть $\Omega \subset \Pi$, где Π — прямоугольник (двумерный случай) или параллелепипед (трехмерный случай). Рассмотрим в Π прямоугольную сетку (вообще говоря, неравномерную), такую, что границы ступеньки совпадают с линиями сетки. Для таких задач часто применяют методы фиктивных областей или, как частный случай, методы фиктивных компонент, изложенные, например, в [7, 8]. Пусть система линейных уравнений

$$Au = f \tag{2}$$

является разностным аналогом задачи (1), где A — положительно полуопределенная матрица, u и f — векторы, компоненты которых соответствуют узлам (внутренним и граничным) области Ω. Метод фиктивных областей заключается в следующем. Наряду с матрицей A рассмотрим матрицу $\widetilde{A} = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, нулевые строки которой соответствуют узлам сетки, лежащих в области $\Pi \setminus \Omega$. Вместо решения задачи (2) будем решать задачу

$$\widetilde{A}\widetilde{u} = \widetilde{f}, \tag{3}$$

где

$$\widetilde{u} = \begin{bmatrix} u \\ u^0 \end{bmatrix}, \quad \widetilde{f} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Очевидно, что любое решение задачи (3) является решением исходной задачи. Пусть B — разностный аналог уравнения Пуассона в расширенной области Π с условиями Неймана, т.е. между узлами сетки и строками матриц $\widetilde{A}$ и B имеется взаимно-однозначное соответствие. Для решения задачи (3) применим обобщенный метод сопряженных градиентов [5] вида

$$\widetilde{u}^{k+1} = \widetilde{u}^k - \frac{1}{q_k}\Big[B^{-1}\xi^k - e_k\big(\widetilde{u}^k - \widetilde{u}^{k-1}\big)\Big], \quad e_{-1} = 0, \quad q_k = \frac{\left\|B^{-1}\xi^k\right\|_A^2}{\left\|\xi^k\right\|_{B^{-1}}^2} - e_{k-1}, \quad e_k = q_k \frac{\left\|\xi^{k+1}\right\|_{B^{-1}}^2}{\left\|\xi^k\right\|_{B^{-1}}^2}, \tag{4}$$

где ξ^k — невязка на k-й итерации и q_k, e_k — итерационные параметры.

Известно, что в данной постановке метод (4) сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем, не зависящим от шага сетки. Основным вычислительным блоком при реализации метода (4) является блок вычисления вектора $w = B^{-1}\xi^k$, т.е. численное решение уравнения Пуассона $\Delta w = \xi^k$ в прямоугольнике П с прямоугольной сеткой (в двумерном случае).

1.2. Свойства предобусловливателя B. Рассмотрим линейную систему с матрицей B, которая является разностным аналогом задачи (1), но в области П . Матрица B допускает представление $B = A_x \otimes B_y + B_x \otimes A_y$ в двумерном случае и $B = A_x \otimes B_y \otimes B_z + B_x \otimes A_y \otimes B_z + B_x \otimes B_y \otimes A_z$ в трехмерном случае, где A_x, A_y, A_z — разностные аналоги второй производной по осям x, y, z соответственно, B_x, B_y, B_z — аналоги осреднения по соответствующим осям, а операция $\otimes$ обозначает прямое произведение. Трехдиагональные полуопределенные матрицы A_x, A_y, A_z в случае равномерной сетки с шагами h_x, h_y, h_z имеют вид

$$A_x = \frac{1}{h_x}\begin{bmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_y = \frac{1}{h_y}\begin{bmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_z = \frac{1}{h_z}\begin{bmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Матрицы B_x, B_y, B_z тоже трехдиагональные и полуопределенные:

$$B_x = \frac{h_x}{4}\begin{bmatrix} 1 & 1 & & & \\ 1 & 2 & 1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & 1 & 2 & 1 \\ & & & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad B_y = \frac{h_y}{4}\begin{bmatrix} 1 & 1 & & & \\ 1 & 2 & 1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & 1 & 2 & 1 \\ & & & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad B_z = \frac{h_z}{4}\begin{bmatrix} 1 & 1 & & & \\ 1 & 2 & 1 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & 1 & 2 & 1 \\ & & & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Отметим, что в случае шаблона “прямой крест” матрицы B_x, B_y, B_z являются диагональными и положительно определенными.

Спектральные свойства оператора B в случае шаблона “косой крест” существенно отличаются от аналогичного оператора в случае шаблона “прямой крест”. Рассмотрим следующую задачу на собственные значения:

$$B\sigma = \nu\sigma. \tag{5}$$

Поскольку в исходной задаче допустимо разделение переменных, то задача (5) непосредственно зависит от одномерных задач вида

$$A_x\varphi = \alpha_x B_x\varphi, \tag{6}$$
$$A_y\psi = \alpha_y B_y\psi, \tag{7}$$
$$A_z\vartheta = \alpha_z B_z\vartheta. \tag{8}$$

Однако в таком виде решение задач (6)–(8) не существует, поскольку матрицы B_x, B_y, B_z положительно полуопределены. В связи с этим будем искать решение видоизмененных задач

$$\lambda_i^x A_x\varphi_i = \mu_i^x B_x\varphi_i, \quad i = 0,\dots,n_x, \tag{9}$$
$$\lambda_j^y A_y\psi_j = \mu_j^y B_y\psi_j, \quad j = 0,\dots,n_y, \tag{10}$$
$$\lambda_k^z A_z\vartheta_k = \mu_k^z B_z\vartheta_k, \quad k = 0,\dots,n_z. \tag{11}$$

Легко видеть, что векторы

$$\varphi_0 = (1,1,\dots,1), \quad \psi_0 = (1,1,\dots,1), \quad \vartheta_0 = (1,1,\dots,1), \tag{12}$$
$$\varphi_{n_x} = \bigl(1,-1,\dots,-1^{n_x}\bigr), \quad \psi_{n_y} = \bigl(1,-1,\dots,-1^{n_y}\bigr), \quad \vartheta_{n_z} = \bigl(1,-1,\dots,-1^{n_z}\bigr) \tag{13}$$

удовлетворяют (9)–(11). Для векторов (12) справедливы равенства $\lambda_0^x = 0$, $\lambda_0^y = 0$, $\lambda_0^z = 0$, а для векторов (13) справедливы равенства $\mu_{n_x}^x = 0$, $\mu_{n_y}^y = 0$, $\mu_{n_z}^z = 0$. Поскольку $\nu_{ijk} = \lambda_i^x\mu_j^y\mu_k^z + \mu_i^x\lambda_j^y\mu_k^z + \mu_i^x\mu_j^y\lambda_k^z$, $i = 0,\dots,n_x$, $j = 0,\dots,n_y$, $k = 0,\dots,n_z$, то ядро матрицы B состоит из $O\bigl(N^{2/3}\bigr)$ векторов, где N — число узлов в П. Заметим, что в случае шаблона “прямой крест” ядро матрицы B состоит из одного собственного вектора (константы).

1.3. Быстрый прямой метод. Для решения системы уравнений с переобусловливателем примени́м быстрый прямой метод FDM [7] (FDM: Fast Direct Method). Для простоты рассмотрим двумерный случай. Алгоритм данного метода основан на решении частичных задач, которые определим следующим образом.

Пусть правая часть отлична от нуля на некоторых линиях сетки, а решение требуется найти на некоторых сеточных линиях, возможно, на тех же самых. Такие задачи будем называть частичными. Решение нашей задачи, вообще говоря, отлично от нуля во всех узлах. Очевидно, что алгоритм, использующий быстрое преобразование Фурье (БПФ) [5] с оценкой числа действий, можно применить для решения частичных задач. Однако его можно преобразовать так, чтобы, во-первых, сократить число арифметических действий, а во-вторых, расширить область его применения на случай неравномерной сетки по обоим направлениям.

Предлагаемый метод можно также применять для решения уравнения Пуассона на произвольной прямоугольной сетке. Этот метод дает такую же асимптотику числа арифметических действий, что и метод с использованием БПФ. Алгоритм метода основан на принципе дихотомии. Пусть прямоугольник Π разбит вертикальными линиями сетки на p непересекающихся подобластей Π_k. Пусть для простоты $p = 2$. Нахождение полного решения задачи $Bu = g$ сводится к следующим процедурам.

1. Решение двух задач в подобластях Π_1 и Π_2 с однородными условиями Дирихле на общей границе (на линии разреза). Требуется найти не все решение u, а только его значения на сеточных линиях с номерами $s-1$ и $s+1$. Это необходимо для определения невязки r_s на линии s.

2. Решение частичной задачи $Bw_s = r_s$.

3. Решение двух задач в подобластях Π_1 и Π_2 с неоднородными условиями Дирихле на общей границе ($u = w_s$ на линии s).

Примечание. При решении частичных задач мы делаем преобразование Фурье по оси x, а прогонки — по оси y.

Если ширина подобластей Π_1 и Π_2 еще достаточно велика, то эту процедуру можно рекурсивно применить для задач 1 и 3 в подобластях Π_1 и Π_2, завершив, таким образом, логическое построение метода решения всей задачи.

Описанный алгоритм легко распространяется на трехмерные области. В этом случае параллелепипед разрезается на несколько подобластей плоскостями, а при решении трехмерных частичных задач используется двумерный аналог данного метода.

2. Параллельная реализация. Алгоритм FDM был модифицирован авторами и реализован для многопроцессорных вычислительных систем с распределенной памятью с использованием технологии MPI. В программном комплексе распределение памяти между процессами проводилось по геометрическому принципу, т.е. сначала разбивался параллелепипед на равные (по числу узлов) подобласти плоскостями, параллельными осям. Все трехмерные массивы распределялись по процессам в соответствии с этим разбиением. В программе применяется коммуникатор с декартовой топологией. В процессе работы программы объем передаваемой информации между процессорами оценивается как $O\big(p_x, p_y, N^{1/2}\ln(N)\big)$ в двумерном случае и $O\big(p_x, p_y, p_z, N^{2/3}\ln(N)\big)$ в трехмерном случае, где p_x, p_y, p_z — число процессоров по осям x, y, z.

3. Численный эксперимент. В качестве инструмента для реализации эталонного солвера была выбрана библиотека подпрограмм для научных вычислений PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific computation) [4] и входящие в ее состав процедуры для работы с векторами и матрицами, распределенными по процессорам, а также набор итерационных методов и предобусловливателей для решения систем линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами.

Среди многообразия предоставляемых библиотекой PETSc предобусловливателей и солверов был выбран за эталон аддитивный метод Шварца и метод сопряженных невязок, показавшие наилучшие результаты на исследуемой задаче. Вместе с блочным предобусловливателем Шварца использовался предобусловливатель ILU (Incomplete LU factorization) на подобластях. Подробное описание используемых методов можно найти в монографиях [5, 6]. Сравнительные расчеты проводились на сетках размерностей $64 \times 64 \times 64$, $128 \times 128 \times 128$ и $256 \times 256 \times 256$ узлов. Рассматривались как равномерные сетки, так и “сгущающиеся” к середине области и ее границам. В качестве критерия останова итерационного процесса было выбрано условие

$$\frac{\|Au_n - f\|_2}{\|f\|_2} < 10^{-9}.$$

Вычисления проводились на суперкомпьютере “Ломоносов”, установленном в Научно-исследовательском вычислительном центре МГУ им. М. В. Ломоносова.

Результаты представлены в табл. 1–3. На пересечении столбцов с количеством задействованных ядер и типом сетки и строк с указанием использованного метода приводится время в секундах, затраченное на одно обращение матрицы.

Приводятся данные о времени, затраченном на вычисления 64, 128, 256 и 512 процессорными ядрами, что позволяет сделать выводы о масштабируемости реализованных программ.

Из таблиц видно, что оба алгоритма испытывают провал в эффективности при использовании большого количества ядер для решения задач малой размерности, что является стандартной проблемой. На задаче размером в 256 расчетных узлов по каждому из трех направлений алгоритм, построенный на базе стандартных методов библиотеки PETSc, показывает хорошую масштабируемость, уменьшая время, затрачиваемое на одно обращение матрицы, примерно в 1.8 раза при удвоении количества задействованных ядер. Алгоритм FDM не выдерживает конкуренции с кодом PETSc по показателю масштабируемости, однако его худший результат в 3.67 секунды при решении задачи $256 \times 256 \times 256$ узлов 64-я ядрами почти вдвое лучше результата PETSc в 6.15 секунды на той же задаче, но с привлечением 512 ядер. В среднем алгоритм FDM на один порядок превосходит алгоритм PETSc по показателю затрачиваемого времени. Следует также отметить, что реализованный алгоритм FDM, в отличие от PETSc, не хранит целиком матрицу задачи, позволяя экономить ресурсы памяти. Это обусловило возможность успешного решения систем с использованием алгоритма FDM для задач размерности 512 и 1024 узлов по каждому направлению, в то время как в случае PETSc потребовались критические объемы памяти для хранения матриц столь больших размерностей.

Таблица 1

$64 \times 64 \times 64$

	64 ядра		128 ядер		256 ядер		512 ядер	
	равн.	неравн.	равн.	неравн.	равн.	неравн.	равн.	неравн.
PETSc	0.56	0.60	0.33	0.37	0.97	1.08	1.23	1.37
FDM	0.07	0.08	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05

Таблица 2

$128 \times 128 \times 128$

	64 ядра		128 ядер		256 ядер		512 ядер	
	равн.	неравн.	равн.	неравн.	равн.	неравн.	равн.	неравн.
PETSc	4.82	4.91	3.04	3.23	1.81	1.82	1.71	1.78
FDM	0.42	0.45	0.27	0.26	0.21	0.22	0.18	0.19

Таблица 3

$256 \times 256 \times 256$

	64 ядра		128 ядер		256 ядер		512 ядер	
	равн.	неравн.	равн.	неравн.	равн.	неравн.	равн.	неравн.
PETSc	36.16	36.59	19.83	20.16	10.86	11.09	5.86	6.15
FDM	3.17	3.67	2.01	2.15	1.29	1.36	0.89	0.91

Если сравнивать работу программ на различных типах сетки, то видно, что, независимо от размерности задачи и количества используемых ядер, на обращение матрицы для сетки с неравномерным шагом требуется всегда больше времени, нежели в случае с равномерной сеткой, что является ожидаемым результатом.

Заключение. С помощью библиотеки PETSc был реализован и протестирован итерационный программный решатель уравнения Пуассона для трехмерных областей на прямоугольных сетках для вычислительных систем с массивно-параллельной архитектурой. Кроме того, для такой архитектуры ЭВМ был разработан программный комплекс, основанный на использовании метода фиктивных областей с алгоритмом FDM. При дискретизации оператора Лапласа использовался шаблон “косой крест” (27-точечный), характерный для схемы КАБАРЕ. Сравнения проводились с методом фиктивных областей и набором методов из библиотеки PETSc. Полученный программный комплекс прошел отладку и тестирование на суперкомпьютере МГУ “Ломоносов”. В ходе тестирования была продемонстрирована высокая степень масштабируемости запрограммированных алгоритмов и проведен сравнительный анализ вычислительных затрат на интегрирование уравнения Пуассона для разных алгоритмов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Головизнин В.М., Самарский А.А.* Некоторые свойства разностной схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1988. **10**, № 1. 101–116.
2. *Головизнин В.М., Карабасов С.А., Кобринский И.М.* Балансно-характеристические схемы с разделенными консервативными и потоковыми переменными // Математическое моделирование. 2003. **15**, № 9. 29–48.
3. *Головизнин В.М., Карабасов С.А.* Нелинейная коррекция схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1998. **10**, № 12. 107–123.
4. PETSc: Portable, Extensible Toolkit for Scientific computation (http://www.mcs.anl.gov/petsc/petsc-as/).
5. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
6. *Saad Y.* Iterative methods for sparse linear systems. Philadelphia: SIAM, 2003.
7. *Кузнецов Ю.А.* Численные методы в подпространствах // Вычислительные процессы и системы. Т. 2. М.: Наука, 1985. 265–350.
8. *Finogenov S.A., Kuznetsov Yu.A.* Two-stage fictitious components method for solving the Dirichlet boundary value problem // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1988. **3**, N 4. 301–323.

Поступила в редакцию
29.03.2013