УДК 519.6:532.5

БИБЛИОТЕКА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ИТЕРАЦИОННЫХ МЕТОДОВ РЕШАТЕЛЕЙ СЛАУ ДЛЯ ЗАДАЧИ КОНВЕКЦИИ-ДИФФУЗИИ НА ОСНОВЕ ДЕКОМПОЗИЦИИ ПО ОДНОМУ ПРОСТРАНСТВЕННОМУ НАПРАВЛЕНИЮ

Чистяков А.Е.[1], Хачунц Д.С.[1], Никитина А.В.[1], Проценко Е.А.[2], Кузнецова И.Ю.[2]

[1]ГОУ ВО «Научно-исследовательский институт многопроцессорных вычислительных систем им. А.В. Каляева Южного федерального университета», Таганрог, Россия (347928, г. Таганрог, ГСП 284, ул. Чехова, 2), e-mail: cheese_05@mail.ru, diana-hachunts@mail.ru, nikitina.vm@gmail.com
[2]ГОУ ВО «Инженерно-технологическая академия Южного федерального университета», Таганрог, Россия (347928, г. Таганрог, ГСП_17А, пер. Некрасовский, 44), e-mail: eapros@rambler.ru, kuznet.i.u@gmail.com

В данной статье проведена работа по параллельной реализации библиотеки итерационных методов решателей систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) задачи конвекции-диффузии на основе декомпозиции по одному пространственному направлению. Построена библиотека двухслойных итерационных методов, предназначенных для решения девятидиагональных сеточных уравнений. Получены табличные значения количества итераций решения сеточных уравнений итерационными методами от шага по временной переменной. Разработаны параллельные алгоритмы исследования данной библиотеки, реализованные в виде комплекса программ. При параллельной реализации использованы методы декомпозиции сеточных областей по одному направлению для вычислительно трудоемких задач диффузии-конвекции, учитывающие архитектуру и параметры многопроцессорной вычислительной системы. Получены временные затраты выполнения одной итерации методом Якоби и модифицированный попеременно-треугольный метод (МПТМ) соответственно на различных сетках, а также значения ускорения и эффективности параллельного алгоритма, зависящие от времени выполнения арифметической операции, времени передачи данных и латентности. Показана эффективность МПТМ для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором в широком диапазоне задаваемых параметров.

Ключевые слова: задача конвекции-диффузии, библиотека итерационных методов, параллельные алгоритмы.

LIBRARY PARALLEL ITERATIVE METHODS FOR LINEAR ALGEBRAIC EQUATION SOLVER FOR CONVECTION - DIFFUSION ON THE BASIS OF DECOMPOSITION ONE SPATIAL DIRECTIONS

Chistyakov A.E.[1], Khachunts D.S.[1], Nikitina A.V.[1], Protsenko E.A.[2], Kuznetsova I.Y.[2]

[1]GOU VO Public Educational Institution «Scientific Research Institute of Multiprocessor Computer Systems named after Acad. A.V. Kalyaev of Southern Federal University», Taganrog, Russia (347928, Taganrog, GSP 284, st. of Chekhov, 2), e-mail: cheese_05@mail.ru, diana-hachunts@mail.ru, nikitina.vm@gmail.com
[2]GOU VO «Engineering and Technological Academy of the Southern Federal University», Taganrog, Russia (347928, Taganrog, GSP_17A, Nekrasovksky Lane, 44), e-mail: eapros@rambler.ru, kuznet.i.u@gmail.com

In this paper carried out the work on a parallel library implementation of iterative methods solvers of linear In this paper carried out the work on a parallel library implementation of iterative methods solvers of linear algebraic equations (SLAE) convection-diffusion problems based on decomposition one spatial direction. Built library of two-layer iterative methods for the resolution of devyatidiagonalnyh difference equations. Tabulated values obtained the number of iterations for solving grid equations by iterative methods on the time step variable. Developed parallel algorithms for the study of the library, implemented as a set of programs. When parallel implementation used decomposition methods grid areas in one direction for the computational complexity convection-diffusion problems, taking into account the architecture and parameters of multiprocessor computer systems. Obtained by the execution of one iteration of the Jacobi method and MPTM respectively on different grids, as well as the values of acceleration and efficiency of the parallel algorithm, time-dependent arithmetic operation, data transfer time and latency. The efficiency MPTM for solving grid equations with nonselfadjoint operators in a wide range of set parameters.

Keywords: problems convection-diffusion, library of iterative methods, parallel algorithms .

Для решения двумерной задачи диффузии-конвекции,, была построена библиотека двухслойных итерационных методов, предназначенных для решения девятидиагональных сеточных уравнений. Данная библиотека решателей систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) состоит из:

– метода Якоби [4];

– метода минимальных поправок;

– метода скорейшего спуска;

– метода Зейделя;

– метода верхней релаксации;

– адаптивного МПТМ вариационного типа [1; 2; 6].

Разработанная библиотека итерационных методов была протестирована на модельной задаче диффузии-конвекции-реакции [9; 11]. Задача решена на сетке размером 100×100, шаги по пространственным переменным равны 1 м, коэффициент турбулентного обмена μ=10 м^2/с, скорость конвективного переноса равна нулю. Функция, описывающая распределение и интенсивность источников веществ, представлена точечным источником. Для решения модельной задачи использованы схемы с весами, при этом вес схемы задавался равным 0,5. Шаг по временной переменной менялся от 0,001 до 1000 с. Завершение работы решателей СЛАУ происходило при выполнении следующего условия: равномерная норма вектора невязки меньше заданного значения [3].

В таблице 1 приведены зависимости количества итераций, необходимых для решения модельной задачи, от шага по временной переменной.

Из приведенных в таблице значений количества итераций, необходимых для решения модельных задач диффузии-конвекции-реакции, видно, что чем больше шаг по временной переменной, тем больше итераций требуется для решения данной задачи. Это связано с тем, что при увеличении шага по временной переменной уменьшается диагональное преобладание, вследствие чего растет число обусловленности матрицы коэффициентов. Как показано выше, скорость сходимости напрямую зависит от числа обусловленности матрицы коэффициентов. С этим и связан рост числа итераций, необходимых для решения сеточных уравнений итерационными методами.

Таблица 1

Зависимости количества итераций решения сеточных уравнений итерационными методами от шага по временной переменной

Шаг по временной переменной	Количество итераций					
	Метод Якоби	Метод минимальных поправок	Метод скорейшего спуска	Метод Зейделя	Метод верхней релаксации	МПТМ
0.001	6	6	6	5	43	5
0.005	8	8	8	8	43	6
0.01	10	10	10	8	45	6
0.05	23	23	23	15	56	10
0.1	37	36	37	22	61	12
0.5	138	134	138	70	60	27
1	256	247	256	126	60	28
5	1138	1077	1138	558	131	50
10	2233	2110	2233	1073	246	72
50	10160	9523	10160	4774	1074	158
100	19966	18625	19966	9320	2096	218
500	99651	92789	99651	46383	10399	1281
1000	199295	185529	199295	92739	20781	4382

Не трудно заметить, что МПТМ является наиболее эффективным из предложенных методов. При больших шагах по временной переменной МПТМ требуется наименьшее количество итераций, по сравнению с остальными методами. Достаточно эффективен и метод верхней релаксации, но при малых шагах по временной переменной его использовать не целесообразно. При решении сеточных уравнений методы Якоби, Зейделя и вариационного типа показали свою эффективность в узком диапазоне задаваемых параметров, однако использовать данные методы при решении плохо обусловленных задач не целесообразно.

Алгоритм параллельной реализации попеременно-треугольного метода

Схему итерационного двухслойного модифицированного попеременно-треугольного метода запишем в виде:

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x}^{n} - \tau_{n+1}\boldsymbol{w}^{n}, \quad \left(D+\omega R_1\right)D^{-1}\left(D+\omega R_2\right)\boldsymbol{w}^{n} = \boldsymbol{r}^{n}, \quad \boldsymbol{r}^{n} = A\boldsymbol{x}^{n} - f,$$

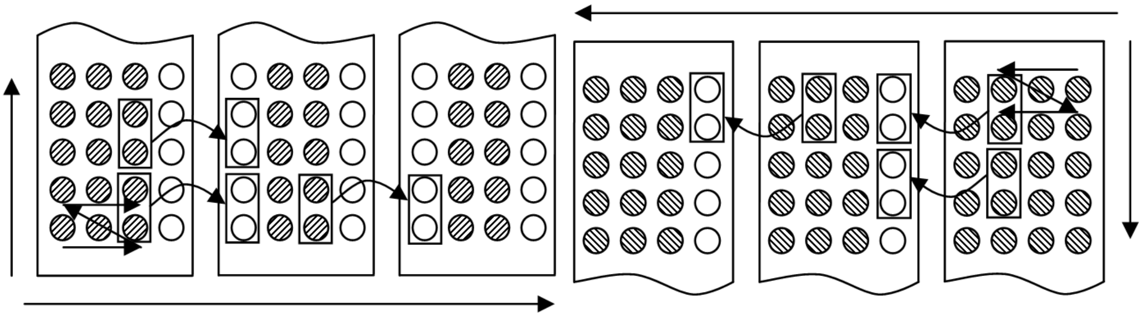
где x^n – вектор решения; $\boldsymbol{w}^n$ – вектор поправки; A – оператор сеточного уравнения; D – диагональная часть оператора A; ω – итерационный параметр; R_1, R_2 – верхняя и нижняя треугольные части оператора A; $\boldsymbol{r}^n$ – вектор невязки; f – правая часть сеточного уравнения.

Для параллельной реализации адаптивного МПТМ использованы методы декомпозиции области по одному направлению. Наиболее трудоемким расчетом с точки зрения построения параллельной программной реализации является расчет вектора поправки, который выполняется в два шага:

1) $\left(D+\omega R_1\right)\boldsymbol{y}^{\boldsymbol{n}}=\boldsymbol{r}^{\boldsymbol{n}}$,

2) $\left(D+\omega R_2\right)\boldsymbol{w}^{\boldsymbol{n}}=D\boldsymbol{y}^{\boldsymbol{n}}$.

На первом шаге рассчитываются элементы вспомогательного вектора $\boldsymbol{y}^{\boldsymbol{n}}$ снизу вверх, а затем, зная его, на втором шаге находятся элементы вектора поправки $\boldsymbol{w}^{\boldsymbol{n}}$ сверху вниз. Схемы расчета вспомогательного вектора и вектора поправки представлены на рис. 1 (стрелками показаны направления счета и передачи).



а) *б)*

Рис. 1. Схемы расчета вспомогательного вектора y^n (а) и вектора поправки w^n (б).

В схеме для расчета вектора $\boldsymbol{y}^n$ только первый процессор не требует дополнительной информации и может независимо от других процессоров посчитать свою часть области, остальные процессоры ждут от предыдущего передачи элементов, стоящих в начале строки. Передача по одному элементу не оптимальна, так как появляются временные затраты, связанные с их организацией. Суммарное время на накладные расходы можно уменьшить путем увеличения объема передач. Данные рассуждения используются для расчета вектора поправки.

Результаты численных экспериментов

Для решения задачи транспорта МВС использован адаптивный модифицированный попеременно-треугольный метод (МПТМ) минимальных поправок. При параллельной реализации использованы методы декомпозиции сеточных областей для вычислительно трудоемких задач диффузии-конвекции, учитывающие архитектуру и параметры многопроцессорной вычислительной системы. Максимальная производительность МВС составляет 18,8 терафлопс. В качестве вычислительных узлов используются 128 однотипных 16-ядерных Blade-серверов HP ProLiant BL685c, каждый из которых оснащен четырьмя четырехъядерными процессорами AMD Opteron 8356 2.3GHz и оперативной памятью в объеме 32 ГБ. В таблицах 2 и 3 приведены временные затраты выполнения одной итерации методом Якоби и МПТМ соответственно на различных сетках, а также значения ускорения и эффективности для различного числа вычислительных ядер.

Таблица 2

Ускорение и эффективность работы параллельного варианта метода Якоби

		100x100	200x200	500x500	1000x1000	2000x2000	5000x5000
1	Время	0.000271	0.00429	0.00846	0.03608	0.138	1.633
	Ускорение	1	1	1	1	1	1
	Эффективность	1	1	1	1	1	1
2	Время	0.000074	0.00060	0.00866	0.02193	0.08041	0.825
	Ускорение	3.662	7.15	0.977	1.645	1.716	1.979
	Эффективность	1.831	3.575	0.488	0.823	0.858	0.99
4	Время	0.000052	0.00017	0.00341	0.00978	0.04376	0.533
	Ускорение	5.212	25.235	2.481	3.689	3.156	3.064
	Эффективность	1.303	**6.309**	0.62	0.922	0.788	0.766
8	Время	0.000029	0.000089	0.00207	0.00745	0.02924	0.188
	Ускорение	9.345	48.202	4.087	4.843	4.72	8.686
	Эффективность	1.168	6.025	0.511	0.605	0.59	1.086
16	Время	0.000025	0.000063	0.00054	0.00628	0.01921	0.142
	Ускорение	**10.84**	**68.095**	15.667	5.745	7.184	11.5
	Эффективность	0.677	4.256	0.979	0.359	0.449	0.719
32	Время	0.000060	0.000089	0.00018	0.00247	0.01051	0.078
	Ускорение	4.517	48.202	47	14.607	13.13	20.936
	Эффективность	0.141	1.506	1.469	0.456	0.41	0.654
64	Время	0.000125	0.000142	0.00016	0.00110	0.00584	0.044
	Ускорение	2.168	30.211	**52.875**	32.8	23.63	37.114
	Эффективность	0.034	0.472	0.826	0.513	0.369	0.58
128	Время	-	0.000364	0.00040	0.00048	0.00485	0.017
	Ускорение	-	11.786	21.15	**75.167**	28.454	96.059
	Эффективность	-	0.092	0.165	0.587	0.222	0.75
256	Время	-	-	0.000801	0.000653	0.003215	0.00987
	Ускорение	-	-	10.562	55.253	42.924	165.434
	Эффективность	-	-	0.041	0.216	0.168	0.646
512	Время	-	-	-	0.001294	0.002051	0.00715
	Ускорение	-	-	-	27.883	**67.284**	**228.36**
	Эффективность	-	-	-	0.054	0.131	0.446

Из таблиц 2 и 3 видно, что максимальное значение эффективности достигалось на четырех вычислительных узлах и сетках 200x200. При этом возникает «суперлинейное ускорение». Эта аномалия вызвана следующей причиной. С увеличением количества вычислителей растёт суммарный объём их оперативной и кэш-памяти. Поэтому большая часть данных задачи вмещается в оперативной памяти и не требует подкачки с диска и вмещается в кэше.

Таблица 3

Ускорение и эффективность работы параллельного варианта МПТМ

		100x100	200x200	500x500	1000x1000	2000x2000	5000x5000
1	Время	0.001183	0.010633	0.026031	0.10584	0.381988	3.700073
	Ускорение	1	1	1	1	1	1
	Эффективность	1	1	1	1	1	1

2	Время	0.000446	0.003435	0.01932	0.05579	0.264114	1.880677
	Ускорение	2.652	3.095	1.347	1.897	1.446	1.967
	Эффективность	1.326	1.548	0.674	0.949	0.723	0.984
4	Время	0.000232	0.00106	0.005755	0.026683	0.132585	1.2655
	Ускорение	5.099	10.031	4.523	3.967	2.881	2.924
	Эффективность	1.275	**2.508**	1.131	0.992	0.72	0.731
8	Время	0.000179	0.000878	0.004379	0.023322	0.092771	0.489768
	Ускорение	**6.609**	12.11	5.945	4.538	4.118	7.555
	Эффективность	0.826	1.514	0.743	0.567	0.515	0.944
16	Время	0.000231	0.000407	0.001869	0.013105	0.085056	0.472151
	Ускорение	5.121	**26.125**	13.928	8.076	4.491	7.837
	Эффективность	0.32	1.633	0.87	0.505	0.281	0.49
32	Время	0.000365	0.0005	0.001404	0.008871	0.045913	0.318709
	Ускорение	3.241	21.266	**18.541**	11.931	8.32	11.61
	Эффективность	0.101	0.665	0.579	0.373	0.26	0.363
64	Время	0.000642	0.000748	0.001557	0.004189	0.026844	0.182296
	Ускорение	1.843	14.215	16.719	25.266	14.23	20.297
	Эффективность	0.029	0.222	0.261	0.395	0.222	0.317
128	Время	-	0.001612	0.002064	0.003442	0.016437	0.076545
	Ускорение	-	6.596	12.612	**30.75**	23.24	48.338
	Эффективность	-	0.052	0.099	0.24	0.182	0.378
256	Время	-	-	0.005434	0.005446	0.012521	0.06318
	Ускорение	-	-	4.79	19.434	30.349	58.563
	Эффективность	-	-	0.019	0.076	0.119	0.229
512	Время	-	-	-	0.009793	0.012362	0.058805
	Ускорение	-	-	-	10.808	**30.9**	**62.921**
	Эффективность	-	-	-	0.021	0.06	0.123

Из приведенных таблиц также видно, что для каждой из расчетных сеток ускорение принимает наибольшее значение при определенном значении вычислителей, и при дальнейшем увеличении числа вычислительных ядер ускорение только уменьшается. Это связано с временными затратами на обмен данными между вычислителями. Из приведенных результатов расчетов видно, что методы с диагональными предобуславливателями (пример метод Якоби) лучше распараллеливаются, чем методы с треугольными предобуславливателями (пример МПТМ). Несмотря на это, параллельный вариант МПТМ является предпочтительнее метода Якоби для плохообусловленных задач, так как требует значительно меньшего числа итераций. Следует отметить, что адаптивный МПТМ нашел свое применение при решении задач аэродинамики [5; 10; 12] и транспорта донных материалов [7; 8].

Заключение

Работа посвящена параллельной реализации библиотеки итерационных решателей СЛАУ для задачи конвекции-диффузии на основе декомпозиции по одному пространственному направлению. Для решения двумерной задачи диффузии-конвекции была построена библиотека двухслойных итерационных методов, предназначенных для решения девятидиагональных сеточных уравнений. Получены табличные значения количества итераций решения сеточных уравнений итерационными методами от шага по временной переменной.

При параллельной реализации использованы методы декомпозиции сеточных областей по одному направлению для вычислительно трудоемких задач диффузии-конвекции, учитывающие архитектуру и параметры многопроцессорной вычислительной системы. Получены времена выполнения одной итерации методом Якоби и МПТМ соответственно на различных сетках, а также значения ускорения и эффективности параллельного алгоритма, зависящие от времени выполнения арифметической операции, времени передачи данных и латентности. Результаты использования многопроцессорных технологий показали, что максимальное значение эффективности достигалось на четырех вычислительных узлах и сетках 200x200 и равнялось 6,309 (метод Якоби) и 2,508 (метод МПТМ), а максимальное ускорение достигалось на 512 узлах и сетках 5000x5000 и равнялось 228,36 (метод Якоби) и 62,921 (метод МПТМ). Данные результаты расчетов говорят о том, что метод Якоби лучше распараллеливается по сравнению с методом МПТМ, однако, несмотря на это, для решения плохообусловленных задач параллельный МПТМ при больших шагах по временной переменной требует наименьшего числа итераций, что говорит о его предпочтении.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Задания № 2014/174 в рамках базовой части государственного задания Минобрнауки России, а также при частичной финансовой поддержке РФФИ по проектам № 15-01-08619, № 15-07-08626 и № 15-07-08408.

Список литературы

1. Коновалов А.Н. К теории попеременно-треугольного итерационного метода // Сибирский математический журнал. - 2002. - Т. 43. - № 3. - С. 552.
2. Коновалов А.Н. Метод скорейшего спуска с адаптивным попеременно-треугольным переобусловливателем // Дифференциальные уравнения. - 2004. - Т. 40. - № 7. - С. 953.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. - М. : Наука, 1989.
4. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. – М. : Наука, 1978. – 588 с.
5. Сухинов А.И., Хачунц Д.С. Задача движения многокомпонентной воздушной среды с учетом парообразования и конденсации // Известия Южного федерального университета. Технические науки. - 2013. - № 4 (141). - С. 81-86.
6. Сухинов А.И., Чистяков А.Е. Адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24. - № 1. – С. 3–21.

7. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежной зоне мелководных водоемов // Математическое моделирование. - 2013. - Т. 25. - № 12. - С. 65-82.
8. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежных водных системах на многопроцессорной вычислительной системе // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. - 2014. - Т. 15. - № 4. - С. 610-620.
9. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Фоменко Н.А. Методика построения разностных схем для задачи диффузии-конвекции-реакции, учитывающих степень заполненности контрольных ячеек // Известия Южного федерального университета. Технические науки. - 2013. - № 4. - С. 87-98.
10. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Хачунц Д.С. Математическое моделирование движения многокомпонентной воздушной среды и транспорта загрязняющих веществ // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. - № 8 (121). – С. 73-79.
11. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Шишеня А.В. Оценка погрешности решения уравнения диффузии на основе схем с весами // Математическое моделирование. - 2013. - Т. 25. - № 11. - С. 53-64.
12. Чистяков А.Е., Хачунц Д.С. Программная реализация двумерной задачи движения воздушной среды // Известия Южного федерального университета. Технические науки. - 2013. - № 4 (141). - С. 15-21.

Рецензенты:

Сухинов А.И., д.ф.-м.н., профессор, декан факультета физики, математики и информатики, ТГПИ им. А.П. Чехова (филиал) РИНХ, Таганрог;
Илюхин А.А., д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры математики, ТГПИ им. А.П. Чехова (филиал) РИНХ, Таганрог.