ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ПИРАМИД ДЛЯ СИНТЕЗА ПАРАЛЛЕЛЬНОГО АЛГОРИТМА РАЗНОСТНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

О.В. Калюжная

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева (национальный исследовательский университет), Самара, Россия

Работа посвящена, программной реализации и анализу параллельного алгоритма разностного решения уравнения теплопроводности, построенного с помощью метода пирамид. В ходе вычислительных экспериментов продемонстрированы преимущества подхода, определены границы его применимости.

Ключевые слова: метод пирамид, разностная схема, ускорение.

Введение

Математическое моделирование физических процессов находит всё большее применение в вычислительной практике, обуславливая развитие численных методов, алгоритмов их реализации и приёмов программирования. Так, идеи инженеров Писмена и Рекфорда [1] нашли применение при синтезе разностной схемы повышенного порядка аппроксимации для уравнения теплопроводности. С развитием архитектурной базы вычислительной техники наблюдается обратный процесс: особенности производства вычислений на процессорах разных типов побуждают авторов к разработке новых алгоритмов и численных методов решения уравнений математической физики. Например, в фундаментальной работе Яна Фостера [2] излагается подход к синтезу параллельных алгоритмов разностного решения уравнения теплопроводности с учётом топологии межпроцессорных коммуникаций.

Важным этапом составления параллельного алгоритма по методике Фостера является установка упомянутых коммуникаций. При этом рекомендуется [2] минимизировать их количество (стратегия "разделяй и властвуй") и объём передаваемых данных с целью снижения общей длительности вычислений. Известен приём, позволяющий полностью отказаться от коммуникаций при производстве вычислений по явным разностным схемам, который связывают с именами Лампорта [3] и Вальковского [4], сформулировавших основы метода пирамид. Суть метода в замене коммуникаций на дублирование части вычислений всеми процессорами.

К сожалению, полный отказ от коммуникаций и и упомянутое дублирование при достаточно большом количестве слоёв по времени в сеточной области приводят к падению ускорения вычислений, что существенно ограничивает область применения метода. Автор настоящей работы предлагает приём, позволяющий сократить коммуникации, без их полного исключения, регулируя длительность расчётов высотой пирамиды. Таким образом, управляя указанным параметром, можно добиваться значительных величин ускорения.

1. Разностная схема для уравнения теплопроводности

В качестве примера, следуя Фостеру [2], рассмотрим двумерное однородное нестационарное линейное уравнение теплопроводности [5]:

$$\frac{\partial u(x,y,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,y,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x,y,t)}{\partial y^2}, \qquad (1)$$

где x, y, t – пространственные и временные координаты, u – температура, коэффициент температуропроводности для простоты принят равным единице.

За $D = \{(x,y,t): 0 \le x \le l_x; 0 \le y \le l_y; 0 \le t \le T\}$ примем вычислительную область. На её границах поставим граничные условия первого рода $u|_\Gamma = 0$, где Γ задаётся отрезками $0 \le x \le l_x$ при $y = 0$ и $y = l_y$; $0 \le y \le l_y$ при $x = 0$ и $x = l_x$ (для простоты положим $l_x = l_y = 1$).

В качестве начального условия примем следующее распределение температур в момент $t = 0$: $\varphi(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$.

Приступая к записи разностной схемы из [6], наложим на D сеточную область

$$D_h = \{(x_i, y_j, t_k): x_i = ih, i = \overline{0,\mathrm{N}}, h = \frac{1}{N}; y_j = jh,$$
$$j = \overline{0,\mathrm{N}}; t_k = k\tau, k = \overline{0,K}, \tau = \frac{T}{K}\},$$

в узлах которой определим функцию $u_{i,j}^k$. Тогда простейшая разностная схема для (1) выглядит как:

$$\begin{cases} \dfrac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\tau} = \dfrac{u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k}{h^2} + \dfrac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{h^2}, \\ \qquad i = \overline{1,N-1},\ j = \overline{1,N-1}, k = \overline{0,K-1}; \\ u_{i,j}^0 = \varphi_{i,j}, i = \overline{0,N}, j = \overline{0,N}; \\ u_{0,j}^k = u_{N,j}^k = 0, j = \overline{0,N}, k = \overline{1,K}; \\ u_{i,0}^k = u_{i,N}^k = 0, i = \overline{1,N-1}, k = \overline{1,K}. \end{cases} \qquad (2)$$

2. Метод пирамид для уравнения теплопроводности

Следуя классическому методу пирамид [3,4] уместно представить программную реализацию схемы (2) в виде циклической конструкции на языке MatLab:

```
for k=1:T

U(1:N-1,1:N-1)= c(U(2:N,1:N-1))+

+U(0:N-2,1:N- 1))+U(1:N-1,2:N))+
```

+U(1:N-1,0:N-2))+(1-4c)U(1:N-1,1:N-1)

end,

где $c = \frac{\tau}{h^2}$.

Выделим на пространстве итераций вектора, от которых не зависит ни один вектор данного пространства, учитывая, что отношение зависимости антирефлексивно. Такие вектора назовём результирующими. Введём в пространстве итераций отношение следования. Каждому результирующему вектору поставим в соответствие (биективное) одну задачу синтезируемого параллельного алгоритма. Этой задаче поставим в соответствие (не инъективное) все вектора из пространства итераций, от которых зависит взятый результирующий вектор. В задаче расположим операторы в соответствии с отношением следования, определённом на пространстве итераций.

Представленный метод нельзя назвать эффективным в случае, когда затраты времени на полное дублирование вычислений превышают коммуникационные издержки обычного параллельного алгоритма (например, из [2]). Далее предлагается авторская модификация метода, позволяющая повысить ускорение алгоритма за счёт допущения некоторого количества коммуникаций.

Отныне коммуникации производятся не на каждом временном слое (как у Фостера), а на некоторых выбранных. Расстояние между двумя такими ближайшими слоями назовём высотой пирамиды, обозначив его за Q.

Число передаваемых значений соседним задачам будет меняться в зависимости от высоты пирамиды. Чем больше высота пирамиды, тем больше значений мы должны передавать. Каждая задача производит вычисление значений сеточной функции в пирамиде, после чего передаёт все значения, необходимые соседям для дальнейших вычислений.

Для начала рассмотрим метод пирамид для высоты $Q = 2$ (схема изображена на рис. 1).

По сравнению с обычной параллельной программой из [2] (то есть при $Q = 1$), общее число коммуникаций снижено в два раза за счёт дублирования вычислений сеточных функций на границе раздела области между задачами, изображённой на рис. 1 (черной линией выделяются узлы области, отнесённые к ведению первой задачи).

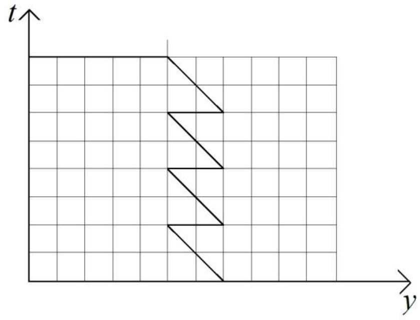

Рис. 1. Схема декомпозиции вычислительной области при использовании метода пирамид для высоты два (ось x – перпендикулярна к плоскости рисунка, по ней декомпозиция не производится)

Далее приведём алгоритм (в нотации Джина Голуба [7]) для случая произвольной высоты пирамиды, предписывающий производство вычислений по первой задаче.

```
for k= 1:T/Q            % перебор пирамид
send(U(1:N-1,N/2-Q+1:N/2), 2)
for iQ=Q-1:-1:0         % проход по слоям пирамиды
U(1:N-1,1:N/2+iQ)=c*(U(0:N-2,1:N/2+iQ)+
+U(2:N,1:N/2+iQ)+U(1:N-1,0:N/2+iQ-1)+ +U(1:N-1,2:N/2+iQ+1)+
+(1-4c)U(1:N-1,1:N/2+iQ)
end
recv(U(1:N-1,N/2+1:N/2+Q), 2)
end
```

3. Результаты вычислительных экспериментов

Вычислительные эксперименты проводились на одном узле кластера «Сергей Королёв» с задействованием двух ядер процессора 2x Intel Xeon X5560, 2.80GHz, работающих под управлением операционной системы Red Hat Enterprise Linux 5.11. Программная реализация параллельного алгоритма производилась на языке fortran (компилятор Intel© Fortran Compiler) с использованием библиотеки impi/4. Выбор языка обусловлен близостью его синтаксических конструкций к используемой нотации Голуба.

Параметры дискретизации сеточной области принимались: $N = 20$ (при этом обычный последовательный алгоритм характеризуется низким ускорением), $T = 100000$ (для увеличения длительности вычислений и нивелирования влияния на результаты экспериментов случайных системных событий).

Табл. 1 Время выполнения параллельной программы ($Tpar$) при различных высотах Q и ускорение (S)

Q	$Tpar$ **, с**	S
1	0,4297	1,1545
2	0,3984	1,2451
3	0,3828	1,2959
	0,3985	1,2451
5	0,4062	1,2212
6	0,4141	1,1981
7	0,4297	1,1545

Из табл. 1 видно, что переход к авторскому алгоритму позволил повысить ускорение вычислений с 1,15 до 1,3 (на 13%).

U-образный вид зависимости длительности вычислений от высоты пирамиды объясняется первоначальным снижением времени исполнения программы при увеличении Q (когда выигрыш при сокращении коммуникаций превышает проигрыш от дублирования вычислений) и последующим ростом длительности (за счёт противоположной тенденции).

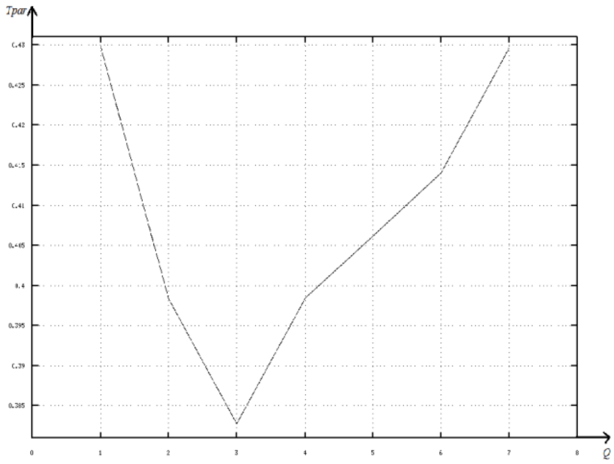

Рис. 2 – График времени выполнения параллельной программы в зависимости от разных высот пирамиды

Заключение

С помощью метода пирамид синтезирован новый параллельный алгоритм разностного решения уравнения теплопроводности, позволивший добиться увеличения ускорения вычислений до 13%. В основу метода положен приём снижения длительности коммуникаций за счёт дублирования арифметических операций.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 14-07-00291-а.

Литература

1. Peaceman, D., Rachford, M. The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations / J. SIAM 3. – 1955. – P. 28-41.
2. Foster I. Designing and building parallel programs: Concepts and tools for software engineering. Reading / MA: Addison-Wesley. – 1995. P. 430.
3. Lamport, L. The coordinate method for the parallel execution of DO-loops / Sagamore computer conference on parallel processing. – 1973. – P. 83-93.
4. Вальковский В.А., Котов В.Е., Марчук А.Г., Миренков Н.Н. Элементы параллельного программирования / М.: Радио и связь. – 1983. – 239 с.
5. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики / М.: Изд-во МГУ. – 2004. – 798 с.
6. Самарский А.А., Теория разностных схем / М.: Наука. – 1989. – 617 с.
7. Голуб, Д., Ван Лоун, Ч. Матричные вычисления / М.: Мир. – 1999. – 548 с.