О ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЯХ НА ОСНОВЕ МУЛЬТИОПЕРАТОРНОГО МЕТОДА, ПОЗВОЛЯЮЩИХ ИСПОЛЬЗОВАТЬ АППРОКСИМАЦИИ И СХЕМЫ СКОЛЬ УГОДНО ВЫСОКИХ ПОРЯДКОВ.

А.И. Толстых

Существуют задачи, важные для практики, которые требуют

(а) длительного интегрирования по времен,

(б) достаточно высокой точности описания мелких масштабов решений на разумных сетках.

Примерами могут служить следующие проблемы:

1. моделирование атмосферных процессов;
2. моделирование генерации акустических полей, возбуждаемых реактивными двигателями, в интересах снижения уровня шума;
3. моделирования вихревых следов при посадки крупных летательных аппаратов;
4. применение прямого численного моделирования (DNS) и методики больших вихрей (LES) для описания турбулентности и других мелкомасштабных явлений.

Стандартные аппроксимации невысокого порядка могут удовлетворить (а) и (б) только при неприемлемо малых шагах сетки вследствие больших фазовых и амплитудных ошибок для средневолновых и коротковолновых гармоник, поддерживаемых сетками. При этом самое эффективное использование массивно параллельных вычислительных систем в настоящее время может лишь частично ослабить ограничения на потребное время счета (заметим, что в трехмерном случае при использовании хорошо распараллеливаемых явных схем для 3D уравнений типа газовой динамики в случае одного процессора увеличение числа узлов в k раз каждом направлении увеличивает время счета в k^4 раз, а для некоторых задач требуется такое увеличения на несколько порядков).

Стандартные методы повышения порядков, связанные с увеличением числа узлов в шаблонах или увеличением числа других носителей информации, обычно сопровождаются рядом неприятных численных эффектов. Это объясняет, почему при решении задач из перечисленных выше классов обычно порядки схем не превышают шести.

В докладе приводится принципиально другой подход к построению аппроксимационных формул численного анализа и разностных схем произвольно высокого порядка. При использовании параллельных вычислительных систем с незначительными затратами на операции обмена (в частности, с использованием многоядерных процессоров) он позволяет увеличивать порядки точности до желаемых без изменения заданий для процессоров (или ядер процессоров) путем простого увеличения их числа. Эта идея в первоначальном виде была предложена автором в 1997 на Манчестерской конференции по параллельным вычислениям и в настоящее время активно развивается и используется только в ВЦ им. А.А. Дородницына РАН.

Суть ее состоит в построении линейных комбинаций базисных операторов, полученных путем фиксации набора M различных значений параметра в однопараметрических семействах операторов, аппроксимирующих рассматриваемый сеточный функционал (например, производные в узлах сетки). При некоторых условиях существует единственный набор коэффициентов в этих линейных комбинациях (названных мультиоператорами), для которого порядки аппроксимации оказываются пропорциональными M.

Пусть имеется вычислительная система с M процессорами (например, M- ядерный компьютер). Тогда фиксируются M значений параметра и для каждого из них возникает базисный оператор, т.е. базисные операторы отличаются лишь значениями параметра. По этим значениям в результате решения некоторой линейной системы находятся коэффициенты мультиоператора, "заточенного" под такого типа вычислительную систему.

Вычисление действий мультиоператоров на известную сеточную функцию выглядит следующим образом. Эта функция раздается каждому процессору (или ядру), после чего процессоры (или ядра) одновременно производят вычисления действий базисного оператора со "своими" значениями параметра.Затем результаты собираются и суммируются с уже известными коэффициентами. Таким образом, чем больше M, тем выше порядок без изменения времени счета, если пренебречь временами обмена. Такой способ использование "внутреннего параллелизма" может хорошо сочетаться с традиционными методами распараллеливания для при решении задач на массивно параллельных системах с многоядерными процессорами.

Существенным моментом при построении мультиоператоров является разрешимость системы для коэффициентов. Это может иметь место в случае однопараметрических семейств компактных аппроксимаций сеточных функционалов. В докладе приводятся результаты исследования и применения мультиоператорных схем 7-го и 9-го порядков для уравнений Навье-Стокса (M=3,5). Расчеты проводились как на однопроцессорных компьютерах с повторением вычислений M раз, так и на кластерах с использованием технологии MPI с затратами на обмен данными. В последнее время были разработаны новые варианты схем до 12-го порядков, оптимизированных для задач неустойчивости и аэроакустики. Они особенно эффективны в случае многоядерных процессоров с применением технологии OpenMP. Некоторые результаты приводятся в сопутствующем докладе.