

# ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА С ПОМОЩЬЮ НЕЯВНОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ ПОКОМПОНЕНТНОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ

А.В. Старченко, В.И. Лаева, Е.А. Мурзина

*Предлагается метод распараллеливания неявной разностной схемы покомпонентного расщепления для численного решения нестационарного конвективно-диффузионного уравнения на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью. На основе проведенных расчетов для тестовой задачи о мгновенном точечном источнике показано, что эффективность параллельного алгоритма составляет около 80%.*

В связи широким распространением математического моделирования при изучении процессов, протекающих в технических устройствах и в окружающей среде, в настоящее время большое внимание уделяется разработке эффективных численных методов решения нестационарных трехмерных уравнений конвективно-диффузионного переноса физической субстанции (например, концентрации, температуры, компонент импульса или энергии турбулентности) [1,2]. Причем зачастую расчеты по математическим моделям, основу которых составляют такие уравнения, необходимо проводить на подробных разностных сетках за приемлемое время работы используемого вычислительного устройства. Для решения подобных проблем актуальным является применение высокопроизводительных вычислительных систем.

В качестве одного из примеров применения параллельных вычислений часто рассматривается численное исследование и прогноз метеорологических условий и качества воздуха над ограниченной территорией. Расчеты целесообразно проводить на структурированных сетках, объединяющих несколько миллионов узлов, и прогноз по результатам вычислений следует давать за один-два часа расчетного времени. Применение явных или явно-неявных разностных схем [3] накладывает ограничение на величину шага интегрирования дифференциального уравнения конвекции-диффузии, значение которого линейно зависит от размера шага сетки. Поэтому, несмотря на высокую эффективность явных разностных схем при использовании в последовательных и параллельных вычислениях, при построении и применении математических моделей исследования атмосферных процессов с высоким пространственным разрешением такие разностные схемы будут терять свои преимущества. Неявные разностные схемы являются абсолютно устойчивыми, но в силу нелинейности используемых математических моделей чрезвычайно требовательны к выбору численного метода решения системы нестационарных конвективно-диффузионных уравнений. Одними из хорошо зарекомендовавших себя неявных разностных схем, использующихся при численном прогнозе погоды и качества атмосферного воздуха, являются схемы расщепления по физическим процессам или покомпонентного расщепления [1,2,4].

Целью данной работы является построение эффективного параллельного алгоритма численного решения нестационарного трехмерного уравнения конвекции-диффузии на основе неявной разностной схемы покомпонентного расщепления на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью.

## Физическая постановка задачи

Рассматривается область  $\bar{\Omega} = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ , в которой в течение времени исследования ( $0 < t \leq T$ ) происходит выброс газообразной примеси от различных источников, расположение и мощность которых известны. Распределение по области исследования поступающей примеси зависит от метеорологических условий (поля ветра, интенсивности турбулентного обмена). Предполагается, что эти необходимые для замыкания модели параметры известны. Кроме того, будем считать, что газообразная примесь инертна, т.е. не вступает в химические реакции с другими веществами и скорость ее переноса и температура примеси совпадает с соответствующими параметрами окружающего воздуха.

Необходимо определить значение концентрации примеси в различных точках рассматриваемой области через некоторый промежуток времени  $T$ .

## Математическая постановка задачи

С учетом принятой физической постановки задачи с математической точки зрения процесс переноса примеси определяется как решение краевой задачи трехмерного нестационарного конвективно-диффузионного уравнения следующего вида [1,4]:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + V_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} + V_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} + V_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + Q(t, x, y, z), \quad (1)$$

где  $(t, x, y, z) \in G$ ,  $G = \{(t, x, y, z) | (x, y, z) \in \bar{\Omega}, t > 0\}$ ,  $\bar{G} = G \cup \partial G$ ;

Начальные условия для уравнения (1) имеют вид:

$$\Phi|_{t=0} = \phi(x, y, z); \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z. \quad (2)$$

Граничные условия для уравнения (1) представляют условия равенства нулю производных концентрации по нормали при  $((x, y, z) \in \partial G, t > 0)$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial x}|_{x=0} = 0; \quad \frac{\partial \Phi}{\partial x}|_{x=L_x} = 0; \\ \frac{\partial \Phi}{\partial y}|_{y=0} = 0; \quad \frac{\partial \Phi}{\partial y}|_{y=L_y} = 0; \\ \frac{\partial \Phi}{\partial z}|_{z=0} = 0; \quad \frac{\partial \Phi}{\partial z}|_{z=L_z} = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $\Phi = \Phi(t, x, y, z)$  – функция, описывающая концентрацию примеси;  $V_x, V_y, V_z$  – компоненты скорости потока ветра, удовлетворяющие условию неразрывности;  $t$  – время;  $L_x, L_y, L_z$  – размеры исследуемой области;  $\Gamma > 0, K_z > 0$  – коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии;  $Q(t, x, y, z)$  – функция, которая описывает распределение и интенсивность источников примеси.

### Метод численного решения

Для построения численного метода необходимо написать разностную схему, приближенно описывающую рассматриваемую дифференциальную задачу (1) – (3). Для этого область непрерывного изменения аргументов  $(t, x, y, z)$  заменяем областью конечного набора узлов точек области: множеством равномерно распределенных узлов, в которых будут вычисляться значения неизвестной концентрации  $\Phi$ . Расчетную область  $\bar{\Omega}$  представим в виде конечного числа не пересекающихся конечных объемов:

$$\bar{\omega}_{\tau, h_x, h_y, h_z} = \begin{cases} (t^n, xc_i, yc_j, zc_k): xc_i = (i-1)h_x; h_x = L_x/N_x; i = 0 \dots N_x + 2; \\ yc_j = (j-1)h_y; h_y = L_y/N_y; j = 0 \dots N_y + 2; \\ zc_k = (k-1)h_z; h_z = L_z/N_z; k = 0 \dots N_z + 2; \\ t^n = \tau n; \tau = T/N_T; n = 0, 1, 2, \dots; \end{cases} \quad (4)$$

где  $\{xc_i, yc_j, zc_k\}$  – положения граней конечных объемов, которые используются для вычисления положения узловых точек  $\{x_i, y_j, z_k\}$ :

$$\begin{aligned} x_i &= \frac{(xc_{i+1} + xc_i)}{2}; \quad i = 0 \dots N_x + 1; \quad y_j = \frac{(yc_{j+1} + yc_j)}{2}; \quad j = 0 \dots N_y + 1; \\ z_k &= \frac{(zc_{k+1} + zc_k)}{2}; \quad k = 0 \dots N_z + 1; \quad t^n \text{ – рассматриваемые моменты времени;} \end{aligned}$$

Отметим, что значения скалярных характеристик и компонент скорости ветра определяются в центре конечного объема, что чрезвычайно удобно в случае использования криволинейных конечных объемов.

Введем неизвестную сеточную функцию

$$U_{ijk}^n \approx \Phi(t^n, x_i, y_j, z_k), \quad (5)$$

$$i = 0, \dots, N_x + 1, \quad j = 0, \dots, N_y + 1, \quad k = 0, \dots, N_z + 1, \quad t^n = \tau n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Распространенным методом решения нестационарных задач переноса примеси при исследовании проблемы окружающей среды [1] является метод покомпонентного расщепления [2]. В основе данного метода лежит идея расщепления вычислительного процесса перехода от нижнего слоя  $t^n$  к верхнему  $t^{n+1}$  на ряд промежуточных этапов с сохранением суммарного порядка аппроксимации [1,2]. Таким образом, решение разностной многомерной задачи сводится к решению последовательности одномерных разностных задач, решать которые значительно проще, тем не менее, вычислительная эффективность (количество арифметических операций с плавающей точкой или флопов) такого метода должна быть приблизительно на порядок выше, чем явного или явно- неявного метода решения, т.е. точность расчетов с шагом  $(10-20)\tau$  должна

быть не хуже, чем расчет по явной схеме с шагом  $\tau$ , и одновременно разностная схема должна иметь перспективы хорошего распараллеливания не хуже чем явная схема.

Перепишем дифференциальное уравнение (1) в операторном виде

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + (L_x + L_y + L_z) \Phi = f, \quad (6)$$

где

$$L_x \Phi = V_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right); \quad L_y \Phi = V_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right);$$

$$L_z \Phi = V_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right); \quad f = Q(t, x, y, z).$$

Для записанной дифференциальной задачи (6) схема расщепления имеет вид [1]:

$$\begin{aligned} 1 \text{ этап:} & \quad \frac{U_h^{n+\frac{1}{6}} - U_h^n}{\tau} + \frac{1}{4} \left( A_x U_h^{n+\frac{1}{6}} + A_x U_h^n \right) = 0; \\ 2 \text{ этап:} & \quad \frac{U_h^{n+\frac{2}{6}} - U_h^{n+\frac{1}{6}}}{\tau} + \frac{1}{4} \left( A_y U_h^{n+\frac{2}{6}} + A_y U_h^{n+\frac{1}{6}} \right) = 0; \\ 3 \text{ этап:} & \quad \frac{U_h^{n+\frac{3}{6}} - U_h^{n+\frac{2}{6}}}{\tau} + \frac{1}{4} \left( A_z U_h^{n+\frac{3}{6}} + A_z U_h^{n+\frac{2}{6}} \right) = \frac{1}{2} Q_h^{n+\frac{3}{6}}; \\ 4 \text{ этап:} & \quad \frac{U_h^{n+\frac{4}{6}} - U_h^{n+\frac{3}{6}}}{\tau} + \frac{1}{4} \left( A_x U_h^{n+\frac{4}{6}} + A_x U_h^{n+\frac{3}{6}} \right) = \frac{1}{2} Q_h^{n+\frac{3}{6}}; \\ 5 \text{ этап:} & \quad \frac{U_h^{n+\frac{5}{6}} - U_h^{n+\frac{4}{6}}}{\tau} + \frac{1}{4} \left( A_y U_h^{n+\frac{5}{6}} + A_y U_h^{n+\frac{4}{6}} \right) = 0; \\ 6 \text{ этап:} & \quad \frac{U_h^{n+1} - U_h^{n+\frac{5}{6}}}{\tau} + \frac{1}{4} \left( A_x U_h^{n+1} + A_x U_h^{n+\frac{5}{6}} \right) = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь  $A_x, A_y$  и  $A_z$  – конечно-разностные операторы, аппроксимирующие дифференциальные операторы  $L_x, L_y$  и  $L_z$  соответственно. Следует отметить, что представленная выше схема расщепления имеет порядок аппроксимации по времени  $O(\tau^2)$  [1].

В качестве аппроксимации конвективно-диффузионных операторов выберем монотонную разностную схему Самарского [5]. Например, для конечно-разностного оператора  $A_x$  имеем

$$\left( A_x U_h^{n+1} \right)_{ijk} = -A_i U_{i-1jk}^{n+1} + B_i U_{ijk}^{n+1} - C_i U_{i+1jk}^{n+1}, \quad (8)$$

где  $A_i = \frac{b_i^+ \Gamma_{i-1/2jk}}{h_x} + \frac{\chi_i \Gamma_{i-1/2jk}}{h_x^2} > 0$ ,  $C_i = \frac{b_i^- \Gamma_{i+1/2jk}}{h_x} + \frac{\chi_i \Gamma_{i+1/2jk}}{h_x^2} > 0$ ,  $B_i = A_i + C_i > 0$ ;

$$b_i^+ = \max \left( \frac{(V_x)_{ijk}}{\Gamma_{ijk}}, 0 \right) \geq 0, \quad b_i^- = \max \left( -\frac{(V_x)_{ijk}}{\Gamma_{ijk}}, 0 \right) \geq 0, \quad \chi_i = \frac{1}{1+R_i}, \quad R_i = \frac{h_x |(V_x)_{ijk}|}{2\Gamma_{ijk}},$$

$$(V_x)_{ijk} = V_x(x_i, y_j, z_k), \quad \Gamma_{ijk} = \Gamma(x_i, y_j, z_k), \quad \Gamma_{i\pm 1/2jk} = 0.5(\Gamma_{i\pm 1jk} + \Gamma_{ijk}).$$

Данная схема обладает вторым порядком аппроксимации по пространству –  $O(h_x^2)$ .

Для тестирования численной схемы, рассмотренной в данной работе, выберем трехмерную нестационарную задачу о мгновенном точечном источнике. Пусть в определенный момент времени  $t_0$  при известном местоположении точечного источника  $(x_0, y_0, z_0) \in \bar{\Omega}$ ,  $\bar{\Omega} = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$  произошел выброс в атмосферу примеси с мощностью  $Q_0$ . Необходимо определить значение концентрации примеси в различных точках рассматриваемой области через некоторый промежуток времени  $T$ .

Пусть в рассматриваемой краевой задаче (1)-(3)  $\phi(x, y, z) = 0$ ,  $V_x, V_y, V_z$  – постоянные величины,  $Q(t, x, y, z) = Q_0 \delta(t - t_0) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0)$ ,  $Q_0$  – мощность источника,  $t_0$  –

время срабатывания источника с координатами  $(x_0, y_0, z_0)$ . В этих предположениях аналитическое решение задачи (1) – (3) имеет вид [1]:

$$\Phi(t, x, y, z) = \frac{Q_0}{(4\pi\Gamma(t-t_0))^{1,5}} \exp(-e1 - e2 - e3);$$

$$\text{где } e1 = \frac{(x-x_0 - V_x(t-t_0))^2}{4\Gamma(t-t_0)}; \quad e2 = \frac{(y-y_0 - V_y(t-t_0))^2}{4\Gamma(t-t_0)}; \quad e3 = \frac{(z-z_0 - V_z(t-t_0))^2}{4\Gamma(t-t_0)};$$

Численное решение задачи с мгновенным точечным источником было получено при следующих условиях: расчетная область с размерами  $L_x=L_y=L_z=180\text{м}$  покрывается вычислительной сеткой  $102 \times 102 \times 100$  узлов, период прогностического моделирования  $t=50\text{с}$ ,  $V_x=V_y=0,707\text{ м/с}$ ;  $V_z=0$ ;  $\Gamma=K_z=1\text{ м}^2/\text{с}$ ;  $Q_0=1000$ ,  $\tau=0.01\text{ с}$ ,  $t_0=15\text{ с}$ ,  $x_0=0.25L_x$ ,  $y_0=0.25L_y$  и  $z_0=0.1 * L_z$ .

На рис.1 представлены результаты согласования расчетов и значений аналитического решения.

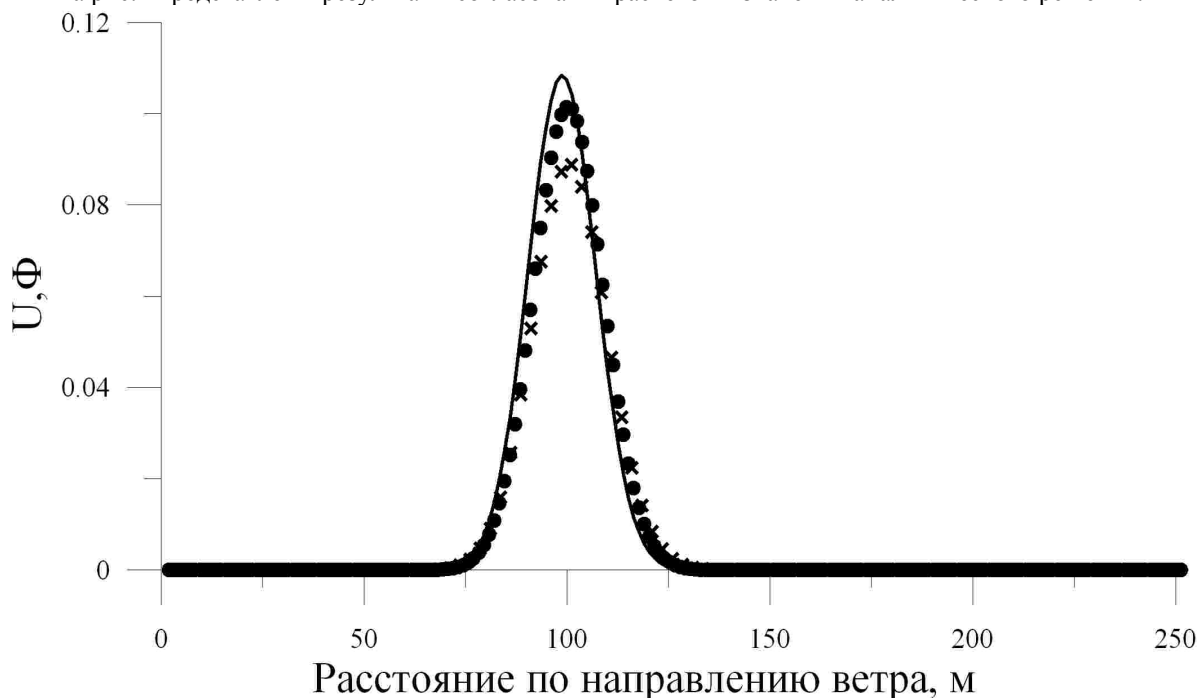


Рис. 1. Сравнение расчетов, выполненных на различных сетках ( $35 \times 202 \times 202 \times 200$ ;  $\times 102 \times 102 \times 100$ ), с аналитическим решением

### Построение параллельного алгоритма и результаты

В данной работе для получения параллельного алгоритма покомпонентной схемы расщепления (7) предлагается использовать одномерную декомпозицию сеточной области  $\bar{\omega}_h$ , в которой вся расчетная область разделяется на  $p$  областей вдоль оси  $Oy$ , где  $p$  – число процессорных элементов (Рис.2).

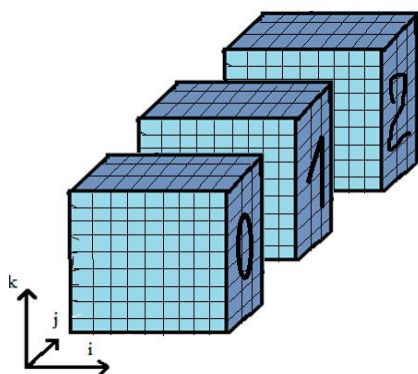


Рис. 2. Распределение сеточной области при одномерной декомпозиции,  $p=3$

Выбор в пользу такого способа декомпозиции сеточной области связан с требованием минимизации количества передаваемых данных между процессорными элементами во время численной реализации построенной разностной схемы покомпонентного расщепления на МВС с распределенной памятью. Дело в том, что использование многомерной декомпозиции приведет к необходимости распараллеливания метода прогонки или метода циклической редукции, параллельные алгоритмы которых в случае применения к решению систем линейных уравнений с различными коэффициентами не отличаются высокой эффективностью при рассматриваемых размерах разностных задач [6]. Анализируя схему покомпонентного расщепления (7), можно заметить, что при выбранном способе декомпозиции сеточной области выполнение вычислений на этапах 1, 3, 4 и 6 расщепления осуществляется одновременно и независимо на каждом процессорном элементе (например, применяется метод прогонки вдоль сеточных линий  $i$  (этапы 1 и 6) или  $k$  (этапы 3,4)), т.е. вычисления проводятся с идеальной степенью параллелизма. На этапах 2 и 5

покомпонентного расщепления (7) для решения систем трехточечных уравнений вдоль сеточных линий  $j$  потребуются пересылки данных при использовании метода параметрической прогонки или какого-то ее варианта, что несомненно скажется на общей эффективности параллельного алгоритма.

В данной работе для решения этой проблемы предлагается подход, опирающийся на использование операции транспонирования для элементов сеточной функции  $U_h$  ( $U_{ijk}^{n+1} = U_{jik}^{n+1}$ ,  $i=0, \dots, N_x+1; j=0, \dots, N_y+1; k=0, \dots, N_z+1$ ) предварительно на этапе 2 и после этапа 5 схемы расщепления, на которых решаются системы с трехдиагональными матрицами. Заметим, что после проведения операции транспонирования решение систем разностных уравнений на этапах 2 и 5 можно проводить одновременно и независимо обычным методом прогонки без применения коммуникационных процедур в связи с отсутствием необходимости межпроцессорного обмена данными.

Для осуществления операции транспонирования сеточной функции  $U_h$ , значения которой распределены с учетом принятой схемы декомпозиции по всем используемым процессорным элементам, в рамках стандарта Message Passing Interface были рассмотрены следующие три способа, отличающиеся различным уровнем сложности выполнения коммуникационных операций и эффективностью.

Первый способ предполагает совместное использование функций MPI\_Gather и MPI\_Scatter. Идея данного способа заключается в том, что для выполнения операции транспонирования сначала производится сборка значений сеточной функции, посылаемых всеми процессами коммутатора на процессорный элемент с номером 0 при помощи функции MPI\_Gather. После получения данных процесс с номером 0 производит непосредственное транспонирование элементов сеточной функции, а затем выполняет распределение данных от себя всем процессам с помощью функции MPI\_Scatter. Заметим, что рассматриваемые функции определены как коллективные операции, и их вызов должен быть обеспечен в каждом процессе.

Во втором способе с помощью функции MPI\_Type\_vector на каждом процессоре независимо друг от друга создается тип данных для одного сечения трехмерного массива, а затем организуется передача и прием данных с использованием функции MPI\_Sendrecv.

Таблица. Временные затраты (с) на реализацию схемы расщепления для различных способов транспонирования сеточной функции

Способ	MPI_Gather&MPI_Scatter						MPI_SendRecv						MPI_AlltoAll					
	1	2	4	5	10	20	1	2	4	5	10	20	1	2	4	5	10	20
ПЭ	1	2	4	5	10	20	1	2	4	5	10	20	1	2	4	5	10	20
Время	5 7	41	30	378	492	584	57	39	29	27	23	23	57	36	23	17	8	4
Счет	5 7	29	14	11	14	15	57	29	15	12	7	3	57	30	17	13	6	3
Обмены	0	12	16	361	478	579	0	10	14	15	16	20	0	6	6	4	2	1

Что касается третьего способа организации многопроцессорного транспонирования сеточной функции, то здесь используется непосредственное транспонирование значений на каждом процессорном элементе и вызов функции MPI\_Alltoall. Данная функция позволяет каждому процессорному элементу распределять по остальным свои данные и одновременно получать данные из памяти других процессоров.

В Таблице представлены результаты реализации различных способов частичного транспонирования сеточной функции, равномерно распределенной по процессорным элементам. Расчеты проводились на кластере ТГУ СКИФ Cyberia (<http://supercomputers.ru>) на сетке 102x102x100 для значений входных параметров, указанных выше в предыдущем разделе. Перемещение облака примеси, образовавшегося при срабатывании мгновенного точечного источника, моделировалось в течение 100 секунд физического времени с момента его образования. Во время движения облако примеси увеличивалось в размерах с одновременным уменьшением максимальной концентрации примеси за счет диффузии, а перенос облака осуществлялся по направлению ветра, что хорошо согласуется с аналитическим решением (Рис.3).

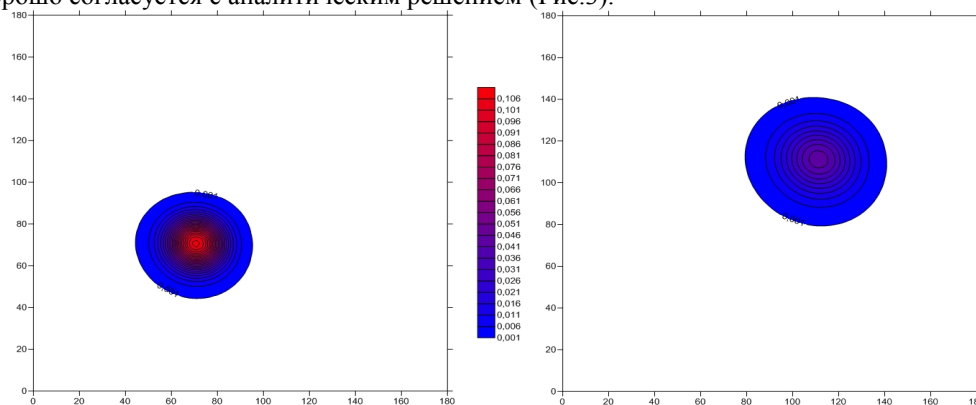


Рис. 3. Положение облака через 35 секунд (слева) и через 65 секунд (справа)

Из Таблицы видно, что способы, использующие коллективные операции MPI\_Gather и MPI\_Scatter и парные операции межпроцессорной передачи данных не дают заметного ускорения вычислений при использовании до 20 процессорных элементов. В то же время, применении коллективной операции MPI\_Alltoall обеспечивает получения эффективности параллельного алгоритма для рассматриваемой схемы покомпонентного расщепления около 80%.

### **Заключение**

Для исследования возможности эффективного распараллеливания неявной разностной схемы покомпонентного расщепления для конвективно-диффузионного уравнения предложена одномерная декомпозиция сеточной области с проведением операции транспонирования для сеточной функции на определенных шагах алгоритма. Выполнено тестирование трех различных способов осуществления такой операции с использованием функций стандарта Message Passing Interface. Расчеты, проведенные на кластере ТГУ СКИФ Cyberia показали высокую эффективность функции MPI\_Alltoall при реализации предложенного способа построения параллельного алгоритма.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-01-00433-а) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (соглашение № 14.В37.21.0667).

### **ЛИТЕРАТУРА:**

1. Г.И. Марчук. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.:Наука, 1982.
2. Н.Н. Яненко. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск:Наука, 1967.
3. Д.А. Беликов, А.В. Старченко. Распараллеливание пространственной модели переноса примеси на системах с распределенной памятью с помощью одно- и двумерной декомпозиции области //Вестник ЮУрГУ, 2009, №17, вып.3. С.12-23.
4. В.В. Пененко, А.Е. Алоян. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск:Наука, 1985.
5. А.А. Самарский. Теория разностных схем. М.:Наука, 1977.
6. А.В. Старченко, В.Н. Берцун. Методы параллельных вычислений. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2013.