ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ПРЕДОБУСЛАВЛИВАТЕЛЯ ПРИ РЕШЕНИИ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА РЕГУЛЯРНЫХ ДВУМЕРНЫХ РАЗНОСТНЫХ СЕТКАХ

Н.А. Ежова, О.Н. Иванова

ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет» (национальный исследовательский университет)

При моделировании теплообменных процессов требуется применение современной высокопроизводительной вычислительной техники, на которой эффективно применение параллельных алгоритмов. Поэтому актуальным является распараллеливание известных алгоритмов решения уравнения теплопроводности и исследование возможности их улучшения.

При решении нелинейного уравнения теплопроводности (УТП) локальным методом опорных операторов возникает система линейных уравнений, решаемая методом бисопряженных градиентов. При этом итерационные методы сходятся медленно, поэтому для ускорения сходимости используют предобуславливание.

В работе излагается методика параллельной реализации метода дробных шагов в качестве предобуславливателя для метода бисопряженных градиентов при решении нелинейного уравнения теплопроводности на регулярной двумерной разностной сетке.

Как правило, для численного решения начально-краевых задач теплопроводности используется метод конечных разностей (МКР) [3], либо метод конечных элементов (объемов) [2]. Так, в методике ТИГР [1], используемой в Российском Федеральном Ядерном Центре, применяется МКР.

Современные двумерные сетки содержат, в зависимости от задачи, порядка 10^4 – 10^6 неизвестных. Для уравнений теплопроводности размерность задачи на всем отрезке интегрирования по времени составляет порядка 10^3 – 10^5 временных шагов.

Традиционно для решения больших систем уравнений применяют итерационные методы, для которых весьма желательны разреженные матрицы (в них число ненулевых элементов много меньше общего числа элементов). Как правило, при разностной аппроксимации уравнения теплопроводности возникает число ненулевых элементов по порядку величины равное числу неизвестных, что приводит к необходимости перехода к разреженному представлению матрицы.

Одним из эффективных подходов для построения разностных схем является пространственная аппроксимация уравнения теплопроводности методом опорных операторов А.А. Самарского [3]. Локальная модификация данного метода даст необходимое разреженное представление матрицы [7]. Суть модификации состоит в том, что определяется разностный аналог оператора градиента (или дивергенции), а оператор дивергенции (или градиента) строится как сопряженный ему.

Метод опорных операторов можно использовать в любой системе координат, для сеток произвольной структуры и при любой дискретизации скалярных и векторных величин.

С помощью локального метода опорных операторов получаем двумерную ячеечноцентрированную (cell-centered) разностную схему для уравнения теплопроводности. Такая разностная схема имеет несколько преимуществ по сравнению с другими схемами. Среди основных достоинств можно назвать второй порядок точности даже на нерегулярных сетках, более точный учет неоднородностей материала и симметричная положительно определенная матрица коэффициентов.

Единственным недостатком метода является то, что он имеет скалярные неизвестные и в центрах ячеек, и в центрах граней ячеек [7]. Однако, в ортогональном случае температуры на гранях явно выражаются через температуры в ячейках.

В результате линеаризации и конечно-разностной аппроксимации решение задачи сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ):

$$A \cdot X = Y. \tag{1}$$

Существуют два класса методов для решения линейных систем – прямые и итерационные методы [4]. Прямые методы (на основе LU разложения) требуют больших вычислительных затрат, что делает неприемлемым их использование для задач актуальной размерности.

Наиболее употребительными на практике в настоящее время являются методы на основе подпространств Крылова. Среди методов этого типа для решения больших разреженных систем с симметричными положительно-определенными матрицами используется метод сопряженных градиентов, а для матриц общего вида чаще всего используют стабилизированный метод бисопряженных градиентов (BiCGStab) [6].

Известно [5], что итерационные методы, в частности, BiCGStab, для разностных схем уравнения теплопроводности сходятся медленно, поэтому для ускорения сходимости используют предобуславливание вида (2):

$$M \cdot A \cdot X = M \cdot Y, \qquad (2)$$

т.е. переход к СЛАУ с тем же решением, но матрицей, обладающей лучшими качествами, с помощью умножения системы на матрицу специального вида.

Предобуславливатель должен одновременно удовлетворять требованиям аппроксимации исходной матрицы и быстро вычисляться.

- Общая теория построения предобуславливателей в настоящий момент только разрабатывается [5].

Методы предобуславливания условно делят на две группы: общего вида, работающие лишь с исходной матрицей, и проблемно-ориентированные, которые строят предобуславливатель как решение более простой задачи, аппроксимирующей исходную.

В РФЯЦ-ВНИИТФ наиболее часто используются предобуславливатели первой группы, например, ILU разложение [8], которое является, фактически, модификацией метода Гаусса, и плохо распараллеливается. Поэтому, хотя сам метод стабилизированный метод бисопряженных градиентов распараллеливается хорошо, «узким» местом является именно предобуславливатель.

А данной работе, в качестве предобуславливателя второй группы предлагается использовать метод дробных шагов, сводящий двумерную задачу к последовательности независимых одномерных задач.

Предполагается, что реализация метода дробных шагов в качестве предобуславливателя позволит обойти описанное «узское» место и достичь хорошего ускорения работы параллельного алгоритма для решения нелинейного уравнения теплопроводности на регулярных двумерных разностных сетках.

Дифференциальный оператор и соответствующий ему разностный оператор представим в виде суммы операторов, каждый из которых включает производные лишь по одной пространственной переменной и разностные отношения лишь вдоль одного направления соответственно. Таким образом, получается система разностных уравнений, каждое из которых не аппроксимирует исходное дифференциальное, но может быть легко решено (методом прогонки по соответствующему направлению, если разностные операторы содержат лишь первые и вторые разности). Последовательно примененные друг за другом, они дают на следующем слое по времени решение с разумной точностью.

Существует множество программных продуктов, предназначенных для численного решения уравнений математической физики, в том числе, УТП. Например, GNU Octave, SciLab, MATLAB, FlowVision, библиотеки Intel MKL, LParSol, Krylov. Но специфика поставленной задачи не позволяет использовать ни один из них. Требуемой характеристикой программы, реализующей решение уравнения теплопроводности в РФЯЦ-ВНИИТФ, является возможность внедрения разработанных библиотек в программный комплекс ТИГР, использующуюся для производственных расчетов. Программный комплекс должен реализовывать параллельные вычисления на нескольких ядрах одного процессора, поскольку даже крупные промышленные предприятия, для кого разрабатываемая методика была бы полезной и востребованной, не имеют в своем распоряжении собственных суперкомпьютеров и проводят моделирование теплофизических процессов на обычных вычислительных системах с несколькими ядрами процессора.

В программном комплексе был реализован ряд алгоритмов:

- алгоритм локального метода опорных операторов для получения пространственной аппроксимации УТП;
- параллельный алгоритм ДМШ метода дробных шагов в качестве предобуславливателя;
- параллельный алгоритм ILU0 метода неполного LU разложения, также в качестве предобуславливателя, для сравнения с эффективностью работы алгоритма ДМШ;
- параллельный алгоритм PBiCGStab предобусловленного стабилизированного метода бисопряженных градиентов непосредственно для решения УТП;
- параллельный алгоритм BiCGStab стабилизированного метода бисопряженных градиентов без предобуславливателя, для сравнения с эффективностью работы алгоритма с предобуславливателем.

Динамика распространения тепла по телу квадратного сечения в моменты времени от 0,009 до 2,79 сек. от начала нагрева представлена на рис. 1. Расчет проводился предобусловленным методом PBiCGStab на сетке 200×200 ячеек. Такая сетка была обусловлена необходимостью проведения предварительного тестирования разработанного комплекса и дальнейшим использованием его в методических целях с перспективой изучения адекватности расчетов на больших сетках. На рисунке красным цветом обозначена самая горячая область, синим - самая холодная. Так как заданы одинаковые граничные условия на каждой грани тела, графическое представление обладает диэдральной симметрией, что говорит о его корректности. В нашем случае это важно, так как решение по каждому из направлений проходило независимо друг от друга.

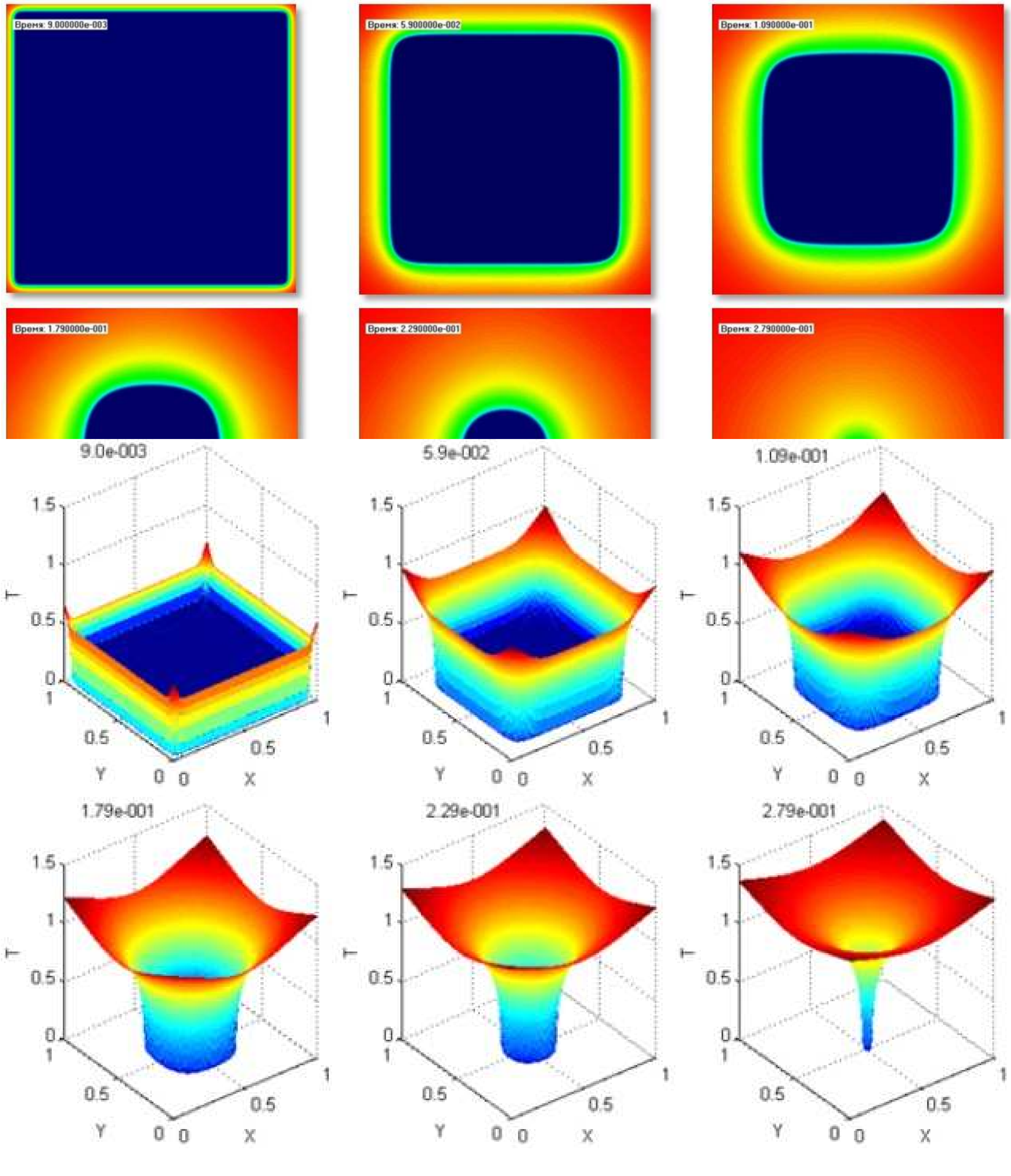


Рис. 2. Графическое представление результата работы программы в MATLAB

Для наглядности результаты этого расчета визуализированы в пакете MATLAB (рис. 2).

По количеству внутренних итераций решателя будем судить о скорости сходимости итерационного метода.

Для сравнения эффективности работы непредобусловленного алгоритма, реализующего метод бисопряженных градиентов, и алгоритма, реализующего его предобусловленную модификацию, обозначим среднее число внешних итераций QIout и количество внутренних итераций QIin.

Результаты и параметры расчетов серии экспериментов сведены в таблицу 1.

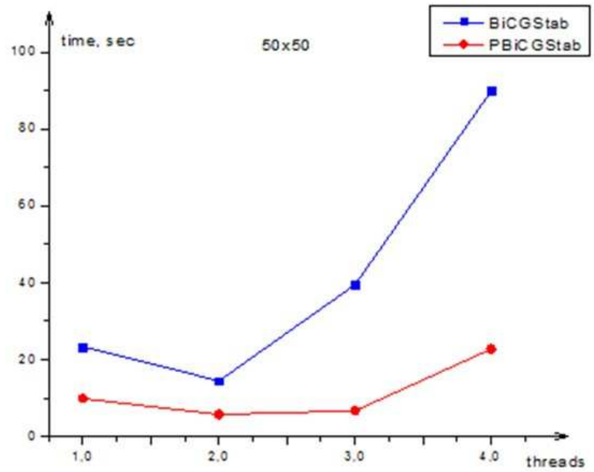
Табл. 1. Сравнение эффективности работы алгоритмов BiCGStab и PbiCGStab

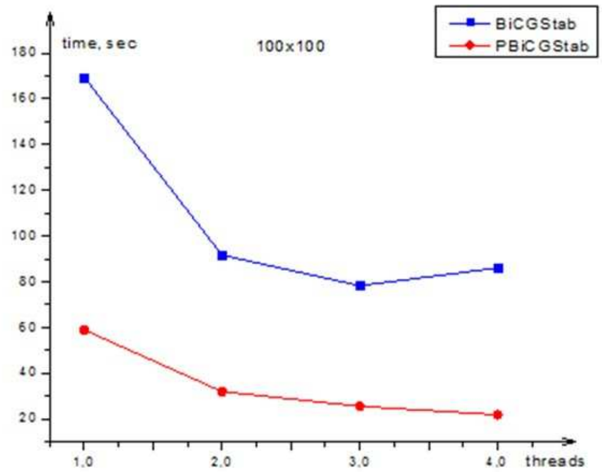
Сетка	Метод	Астрономическое время, с.	QI_{out}	QI_{in}
		Количество нитей		

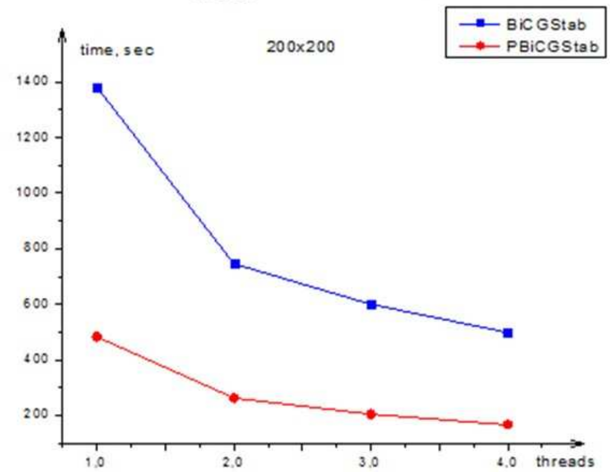
		1	2	3	4		
50x50	BiCGStab	23,40	14,46	39,50	89,88	3,46	89,9
	PBiCGStab	9,89	5,71	6,68	22,74	3,46	14,49
100x100	BiCGStab	169,50	91,65	78,27	86,07	3,6	173,4
	PBiCGStab	58,97	31,95	25,54	21,83	3,6	25,69
200x200	BiCGStab	1381,96	745,61	600,30	498,02	3,7	360,4
	PBiCGStab	482,66	262,37	204,33	166,30	3,7	51,1

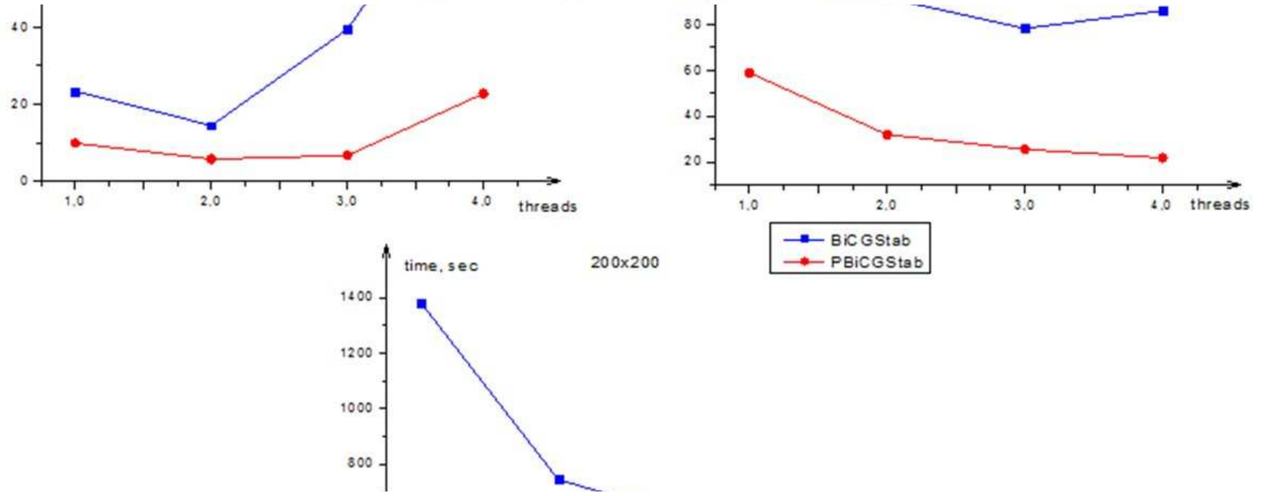
Как видно, среднее число внутренних итераций решателя при работе алгоритма PBiCGStab, реализующего предобусловленный метод бисопряженных градиентов, значительно меньше, что свидетельствует о наличии ускорения относительно реализации обычного метода при решении рассматриваемой задачи.

Графики, наглядно демонстрирующие эффективность предобуславливания методом дробных шагов, изображены на рис. 3.









Показателем эффективности параллельного алгоритма является коэффициент ускорения – отношение времени выполнения последовательного алгоритма ко времени выполнения параллельного алгоритма.

Коэффициенты ускорения для каждого параллельного расчета приведены в таблице 2.

Табл. 2. Сравнение методов предобуславливания BiCGStab и PBiCGStab

Сетка	Метод	Коэффициент ускорения		
		Количество нитей		
		2	3	4
50x50	BiCGStab	1,62	0,59	0,26
	PBiCGStab	1,73	1,48	0,43
100x100	BiCGStab	1,85	2,17	1,97
	PBiCGStab	1,85	2,31	2,70
200x200	BiCGStab	1,85	2,30	2,77
	PBiCGStab	1,84	2,36	2,90

Как видно из таблицы 2 ускорение достигает 2,90.

Отрицательное ускорение на сетке 50x50 объясняется тем, что временные затраты на накладные расходы больше, чем выигрыш от распараллеливания.

Также, были проведены эксперименты для сравнения методов предобуславливания: метода дробных шагов и метода неполного LU разложения (ILU0). Результаты и параметры расчетов сведены в таблицу 3.

Табл. 3. Сравнение методов предобуславливания ДМШ и ILU0

Сетка	Метод предобуславливания	Астрономическое время	QI_{out}	QI_{in}
200x200	ILU0	886,36	3,7	112
	МДШ	482,66	3,7	51,1

Как видно из таблицы 3, метод бисопряженных градиентов, предобусловленный методом дробных шагов, сошелся за меньшее количество итераций.

Следовательно, для решения конкретной задачи метод дробных шагов, использованный в качестве предобуславливателя метода бисопряженных градиентов, является более эффективным, чем предобуславливатель, реализующий метод неполного LU разложения.

Разработанный программный комплекс внедрен в опытную эксплуатацию в РФЯЦ-ВНИИТФ.

ЛИТЕРАТУРА:

1. А.Ю. Бисярин, В.М. Грибов, А.Д. Зубов, Н.В. Первиенко, Н.В. Неуважаев, В.Д. Фролов "Комплекс ТИГР для расчета двумерных задач математической физики". Т. 3. - М., 1984 г. - С. 34-41.
2. С.В. Патанкар "Численное решение задач теплопроводности и конвективного теплообмена при течении в каналах" = Computation of Conduction and Duct Flow Heat Transfer: Пер. с англ. - М.: Издательство МЭИ, 2003. - 312 с.
3. А.А. Самарский, А.В. Колдоба, Ю.А. Повещенко, В.Ф. Тишкин, А.П. Фаворский "Разностные схемы на нерегулярных сетках". - Минск: ЗАО "Критерий", 1996. - 276 с.
4. В.А. Кудинов, И.В. Кудинов "Методы решения параболических и гиперболических уравнений теплопроводности". - М.: Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2011. - 280 с.
5. H.A. Vorst "Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems". - Cambridge: Cambridge University, 2003.
6. Y. Saad "Iterative Methods for Sparse Linear Systems". - SIAM, 2000. - 528 p.
7. J.E. Morel, R.M. Roberts, M.J. R.M. Shashkov "A Local Support-Operators Diffusion Discretization Scheme for Quadrilateral r-z Meshes" // Journal of Computational Physics. - USA: Academic Press, 1998. Vol. 144. P. 17-51.
8. О.В. Дьяконов, В.Ю. Правельников "Предобуславливатели ILU типа с двумя настроечными параметрами" // Материалы Международной Конференции по численным методам. - Канада: Торонто, 2001.