

По мере развития и распространения ЭВМ задач стало больше: моделирование аэродинамики летательных аппаратов, создание климатических моделей и предсказание погоды, создание и развитие подходов численного моделирования прочностных свойств материалов и конструкций и т. д. Сейчас практически в любой наукоемкой отрасли достижение передовых результатов немыслимо без современных вычислительных ресурсов. Они необходимы для проведения высокоточного моделирования и статистической обработки экспериментальных данных.

Традиционная сфера применения вычислительных комплексов – моделирование гидродинамических течений. В зависимости от конфигурации рассматриваемой области задачи при решении могут быть использованы спектральные, конечно-разностные, конечно-объемные и конечно-элементные методы. Каждый имеет свои преимущества и недостатки, поэтому перед реше-

нием необходимо провести оценку эффективности подхода для рассматриваемой задачи.

Практически для любых конфигураций расчетных областей применяются конечно-объемные методы. В этом случае исходная расчетная область задачи разбивается на множество ячеек (элементарных объемов). Искомые переменные уравнений (для задач гидродинамики это уравнения законов сохранения массы и импульса), описывающие исследуемый физический процесс, рассматриваются в виде сеточной функции на введенной сетке. Для этих сеточных функций записываются разностные аналоги исходных дифференциальных уравнений. В большинстве случаев используемые методики реализуют неявные схемы аппроксимации различных членов уравнений. Это приводит к необходимости решения систем линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами. Решение практических задач требует использования большого числа ячеек и расчетных сеток больших размеров, что приводит к необходимости многократного решения систем уравнений с сильно разреженными матрицами и нерегулярной структурой заполненности элементов.

На помощь приходят технологии параллельных вычислений, позволяющие решать одновременно несколько вариантов подзадач, совокупность результатов которых является решением целевой задачи. В зависимости от постановки задачи или эффективности распараллеливания декомпозиция может представлять:

1. *Распараллеливание процедур;*
2. *Декомпозицию расчетной сетки на участки (домены).*

При втором подходе решается несколько однотипных уравнений для каждой области с различными входными данными, где граничными условиями каждого домена является результирующее поле сопряженного геометрически независимого домена. Такой подход в инженерных

Гидродинамика:

поиск оптимального распараллеливания

Текст Александр Мурашов
Иллюстрации Владимир Камеев

Первые проекты по моделированию физических процессов на электронных вычислительных машинах (ЭВМ) в 50-х годах прошлого века были связаны с военной тематикой и разработкой ядерного оружия



пакетах наиболее распространен. Для реализации описанных технологий распараллеливания необходимо описывать взаимодействия между вычислительными процессами. Это можно сделать посредством передачи сообщений и посредством обмена данными через общую память процессов. Для реализации первого подхода обычно применяют технологии

MPI. Для реализации второго используется расширение OpenMP или более низкоуровневые средства, например, через POSIX Shared Memory. В некоторых случаях находят применение и более высокоуровневые расширения языков программирования: NORMA, Fortran-DVM, mpC, UPC, Charm++, OpenTS и другие, с внедренными специфическими

процедурами управления распараллеливанием. Ограничения на технологии распараллеливания может накладывать и архитектура вычислительной машины. Эффективность распараллеливания зависит от множества факторов, определяющих взаимодействия программной и аппаратной частей МВС. Основными параметрами,

Домены, получаемые при декомпозиции

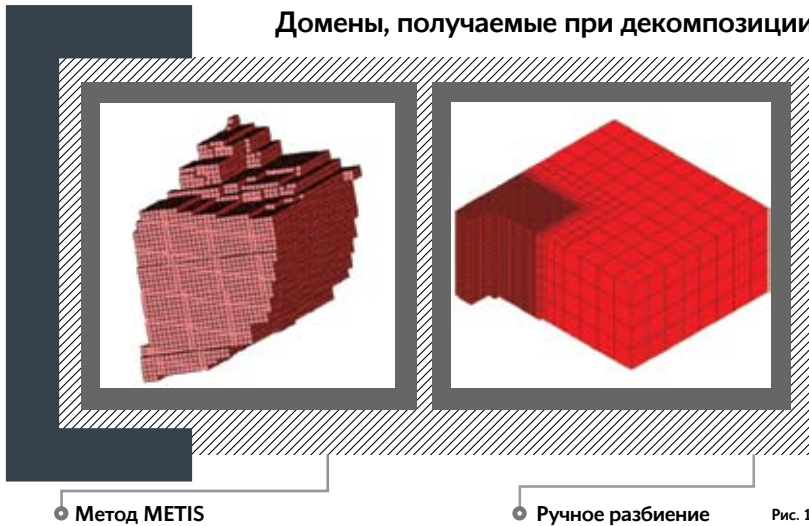


Рис. 1

определяющими производительность МВС, являются архитектура, используемые математические модели, разностные схемы и алгоритмы их реализации, размерность задачи, метод декомпозиции расчетной области, операции ввода-вывода и обмена данными и многое другое. Опыт решения различных прикладных задач показывает, что в задачах со сложной геометрией и с нетривиальными математическими моделями приведение аргументированного анализа влияния всех факторов зачастую невозможно. Однако для проведения детального анализа факторов необходимо абстрагироваться от конкретных задач и обращаться к упрощенной модели, допускающей независимое поочередное введение влияний.

Применение МВС позволяет распределить весь объем вычислительной работы между заданным множеством процессоров. Чем более равномерной оказывается загрузка, тем больше эффект. Поиск оптимального распараллеливания – важная задача. Анализ основных параметров скорости счета модели позволяет повышать размер решаемых задач и таким образом приблизить модель к реальности. Основные решения задач происходят на МВС с разделенной памятью. Для таких систем самым узким местом являются параметры и количество каналов передачи данных от процессора к процессору. Их низкая пропускная способность

существенно сдерживает быстродействие всей системы. Необходимо придерживаться принципа нахождения всех физических процессов в каждом домене.

Обычно так поступают, чтобы избежать распараллеливания по физическим процессам, при котором не избежать передачи больших массивов данных по каналам связи. Наилучшее распараллеливание удастся получить, если процессоры обмениваются только данными о состоянии полей на стыках между областями, так как при этом объем передаваемых данных минимален. Интегрирование уравнений механики жидкости и газа для таких моделей из-за разнородных физических процессов предполагает математические трудности, влияющие на скорость расчета, а также подразумевает возможность

Эффективность распараллеливания зависит от множества факторов, определяющих взаимодействие программной и аппаратной частей МВС

использования схем разностной аппроксимации. Маневрируя комбинацией явной и неявной схем, можно эффективно управлять вычислительным процессом, обеспечивая высокую точность решения при малых затратах машинного времени. Другой важный аспект, влияющий на скорость счета, – выбор эффективного решателя для систем уравнений. Среди методов решения

нелинейных систем уравнений выделяется группа методов, основанных на методе касательных (Ньютона).

Другую группу составляют методы, основанные на процедуре поиска минимума некоторой функции, определенной в гиперпространстве переменных, производная от которой представляет собой исходную систему уравнений, для которой ищется решение (метод скорейшего спуска).

Один из способов совершенствования метода наискорейшего спуска основан на поиске минимума функции по нескольким направлениям одновременно. При этом направления должны быть линейно независимыми, а векторы, определяющие различные направления, сопряжены – это метод сопряженных градиентов (Conjugate Gradient, CG). Он значительно быстрее, чем метод наискорейшего спуска. В то же время в расчетной практике при решении задач гидромеханики используют различные модификации метода сопряженных градиентов, ускоряющих его сходимость. Метод сопряженных градиентов в своем оригинальном виде применим только к симметричным системам. Для того чтобы применить метод к несимметричным системам уравнений, каковыми являются любые конвективно-диффузионные уравнения, описывающие задачи ме-

ханики жидкости и газа и процессы теплопереноса, необходимо преобразовать несимметричную задачу в симметричную.

Анализ этих проблем привел исследователей к стратегии многосеточных методов (MultiGrid, MG). Стратегия геометрического многосеточного метода заключается в последовательном интегрировании уравнения на нескольких сетках раз-

личной степени пространственного разрешения с взаимной интерполяцией получаемых решений. Такой подход, с одной стороны, существенно сокращает затраты на итерации, а с другой – сглаживает пространственное распределение итерационных ошибок.

Ускорение сходимости в MG-стратегии достигается благодаря уменьшению числа узлов как за счет применения более грубых сеток, так и за счет более гладкого поведения функции ошибки итерации.

Таким образом, сглаживающий (фильтрующий) эффект использования более грубых сеток обеспечивает двойной результат. Наряду с собственно фильтрацией возмущений сглаживание способствует ускорению сходимости. В то же время на мелкой сетке отслеживаются локальные особенности решения, которое обеспечивает вполне адекватные результаты. Вне зависимости от параметров счета и выбранного решателя минимизация количества пересылаемых данных между процессами и, как следствия, нивелирования использования интерконнекта и каналов памяти остается одной из важных задач. В основном решение проблемы связано с улучшением качества декомпозиции модели, т. е. непосредственно с кодами, реализующими автоматическое разбиение. В инженерных пакетах чаще распространена библиотека METIS – набор программ для разбиения графов и расчетных сеток. Алгоритмы, используемые в библиотеке, основываются на многоуровневом recursive-bisection, многоуровневой K-way и других схемах. Однако на практике использование автоматической декомпозиции не всегда приводит к эффективному использованию вычислительных ресурсов. Одна из проблем, например, состоит в том, что этот алгоритм разбиения модели не учитывает физику моделируемых процессов, протекающих в различных геометрически разнесенных областях расчетной области. Разбиение модели строится лишь

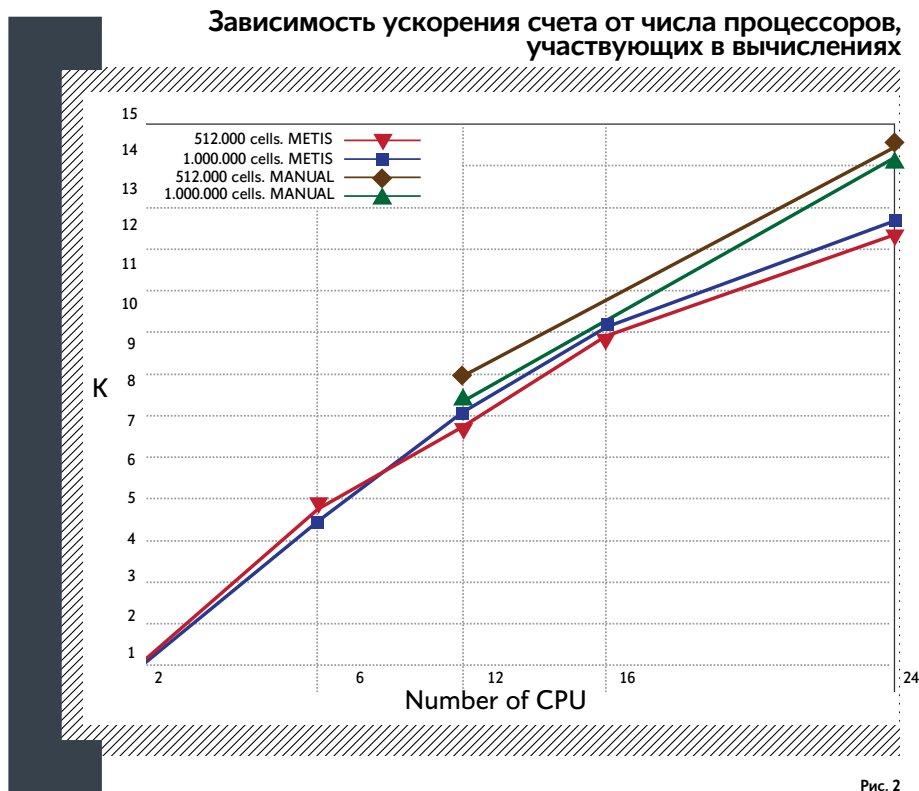


Рис. 2

исходя из соображений разбиения области на фрагменты с примерно равным количеством расчетных ячеек, а также минимизации количества граничных ячеек и взаимодействующих вычислительных процессов, что не всегда получается качественно в автоматическом режиме (рис. 1).

Эффективное разбиение модели для комплексных задач и различных уравнений требует многокритериальной оптимизации, когда вместо равного количества расчетных ячеек в каждом фрагменте должно быть использовано условие равного количества расчетных ячеек для каждого уравнения.

Рост коэффициента ускорения счета при ручной декомпозиции можно видеть на рис. 2.

Во многих случаях декомпозицию целесообразно проводить вручную с учетом большого количества параметров. Такой подход актуален, если на модели необходимо провести серию длительных расчетов. Однако в этом случае необходимо заранее определить количество областей для разбиения. Увеличение или уменьшение количества фрагментов

декомпозиции влечет за собой ручное переразбиение всей расчетной области.

Анализ приведенных зависимостей показывает, что при автоматическом способе декомпозиции в соответствии с алгоритмом METIS рост ускорения по мере увеличения числа процессоров замедляется. Это наблюдается как в случае использования разностной сетки размером 512 тыс. ячеек, так и для сетки размером 1 млн ячеек.

В то же время данные, полученные ручным способом декомпозиции для этих моделей, показывают явное увеличение эффективности распараллеливания.

Особенно важно, что наблюдается заметный рост ускорения счета в области больших значений числа используемых процессоров.

Таким образом, подтверждается естественное предположение о существенном влиянии на эффективность распараллеливания качества декомпозиции, которое, в сущности, и определяет число пересылок. Практика показывает, что при ручной декомпозиции ускорение счета может достигать 30%. 