ОСОБЕННОСТИ КОНСТРУИРОВАНИЯ МАКСИМАЛЬНО ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ФОРМ ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ

Швачич Г.Г.,
доктор технических наук,
заведующий кафедрой прикладной математики и вычислительной техники,
Национальная металлургическая академия Украины (г. Днепропетровск)
sgg1@ukr.net

Аннотация. *Предложен подход к разработке современных вычислительных математических технологий нахождения решения многомерных нестационарных задач. Процесс моделирования реализован на основе применения многопроцессорных вычислительных систем кластерного типа. Рассматриваются вопросы построения максимальных параллельных форм алгоритмов разностных схем, имеющих трехдиагональную структуру. Выявлены особенности распараллеливания при помощи кусочно-аналитического метода прямых.*

Ключевые слова: *вычислительные технологии, многопроцессорные системы, параллельные формы, метод прямых.*

FEATURES OF CONSTRUCTING OF MAXIMAL PARALLEL FORMS OF THE APPLIED TASKS

Shvachych G.,
National metallurgical academy of Ukraine (Dnipropetrovs'k)

Abstract. *Approach is offered to development of modern calculable mathematical technologies of finding of decision of multidimensional unstationary tasks. The process of design is realized on basis application of the multiprocessor computer systems of cluster type. The questions of constructing of calculable cluster are lighted. The questions of construction of maximal parallel forms of algorithms of difference schemes are examined, having a three-diagonal structure. The features of code parallelization are explored through the piece-analytical method of lines.*

Key words: *calculable technologies, the multiprocessor systems, parallel forms, method of lines.*

Введение

Технологические операции, протекающие в печах и агрегатах металлургического производства, являются высокотемпературными теплофизическими процессами [1, 2]. В первую очередь это технологии выплавки и разливки железоуглеродистых сплавов, нагрева, прокатки и термической обработки металлопродукции. Практика показывает, что ни интенсификация процессов металлургического производства, ни конструктивное совершенствование разнообразного металлургического оборудования не возможны без изучения и анализа явлений тепло- и массообмена. При этом система уравнений, описывающих подобные процессы, включает систему дифференциальных уравнений в частных производных, выражающих законы сохранения массы, импульса и энергии, уравнений диффузии для каждой компоненты в течениях многокомпонентного газа и уравнения состояния. В наиболее полной постановке такой системой уравнений являются уравнения Навье – Стокса, в различных частных случаях используются и различные упрощенные модели: уравнения Эйлера, пограничного слоя, вязкого ударного слоя и т.д. Эти уравнения содержат ряд коэффициентов, зависящих как от выбора системы координат, так и характеризующих физические свойства среды: коэффициенты вязкости, теплопроводности и диффузии.

К настоящему времени наметились определенные тенденции по развитию вычислительных методов со сложной логической структурой, имеющих по сравнению с традиционными конечно-разностными методами более высокий порядок точности. Серьезным прогрессом в области решения многомерных пространственных задач можно считать ряд предложений, не совсем эквивалентных друг другу, но преследующих одну стереотипную цель – свести задачу трехмерного распределения области изменения переменных к последовательности схем, включающих неизвестные величины лишь в одном направлении – попеременно продольном, поперечном и вертикальном [3, 4]. Заметим, что использование неявных схем при этом приводит к системам линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), имеющих трехдиагональную структуру. Таким образом, принятие в качестве методологической основы разностных схем расщепления, во-первых, обеспечивает экономичную и устойчивую реализацию численных моделей методом скалярных прогонок. И, во- вторых, известно, что наибольший эффект от параллельного процессора достигается в тех случаях, когда он применяется для выполнения матричных вычислений линейной алгебры.

Статья посвящена разработке современных вычислительных математических технологий кластерного типа для приближенного решения начально-краевых задач металлургической теплофизики. Под *вычислительными математическими технологиями кластерного типа* здесь понимается совокупность вычислительных методов со сложной логической структурой, имеющих по сравнению с традиционными конечно-разностными методами более высокий уровень порядка аппроксимации. При этом вычислительные эксперименты реализуются при помощи параллельного процессора кластерного типа, что обеспечивает процедуру моделирования многомерных задач в реальном масштабе времени и существенно сокращает время проведения машинных экспериментов.

Актуальность темы исследований

В настоящее время в мире наблюдается стремительный рост числа многопроцессорных вычислительных систем кластерного типа и их суммарной производительности. Одновременно растет потребность в имитационных моделях сложных систем, требующих большого количества вычислительных ресурсов. Однако широкому внедрению машинного моделирования для многопроцессорных вычислительных систем препятствует отсутствие или недоступность систем распределенного моделирования. В этой связи, проблемы конструирования вычислительных кластеров, а также разработки вычислительных алгоритмов для параллельного процессора являются актуальными и первостепенными.

В связи с отмеченным, можно указать основные черты рассматриваемых в статье компьютерных технологий – параллельность и эффективность, базирующихся на современных численных методах. Параллельность вызвана необходимостью решать задачи настолько большой размерностью, что это возможно лишь на параллельных компьютерах с распределенной память [5, 6]. Распределенная память подразумевает разбиение данных на блоки, каждый из которых обрабатывается отдельным процессором, поэтому блочность алгоритмов характерна для большинства параллельных методов и технологий.

Цель исследования заключается в конструировании и исследовании новых параллельных численно-аналитических методов адаптивного комплексного решения начально-краевых задач с учетом априорной информации об искомых функциях и применение этих методов к решению актуальных прикладных задач металлургического производства. Область применения предлагаемых методов и алгоритмов включает прямые и обратные прикладные задачи металлургической теплофизики, а также параллельную дискретную обработку данных в виде графиков и картины изолиний. При этом для данных интерполяционного типа обеспечивается необходимая гладкость представления соответствующих изолиний при минимальных объемах выборки.

Математическая постановка задачи

Рассмотрим решение краевой задачи Дирихле для уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial Y}{\partial t}=\alpha\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2},\ x\in\left[x_0,x_L\right],\ t\in\left[t_0,T\right] \quad (1)$$

с начальным

$$Y_{|\,t=t_0}=\phi(x) \quad (2)$$

и граничными условиями

$$Y_{|\,x=x_0}=YW(t),\ Y_{|\,x=x_L}=YL(t). \quad (3)$$

Области определения искомой функции *Y(t,x)* в задаче (1) – (3) сопоставим сеточную область

$$\left.\begin{aligned} &t_j=J\times Dt1,\quad j=\overline{1,M},\ Dt1=T/M,\ M\in Z\\ &x_p=p\times Dx1,\ p=\overline{0,2m},\ Dx1=(x_L-x_0)/2m, m\in Z\end{aligned}\right\}, \quad (4)$$

где введение целочисленного параметра m в топологию построения сеточных узлов по пространственной переменной x позволяет выбрать требуемый шаг интегрирования. Рассмотрим способ дискретизации задачи (1) – (3) по схеме метода прямых.

Конечно-разностная схема. Простейшая неявная схема по времени и центральные разности по координате x приводят к СЛАУ

$$C_pY_{p+1,1}-Y_{p,1}+D_pY_{p-1,1}=f_{p,1},\ \ p=\overline{1,2m-1}, \quad (5)$$

где

$$\left.\begin{aligned} &C_p=D_p=\frac{A}{(1+2A)},\ A=\frac{\alpha}{Dx1^2}Dt1\\ &f_{p,1}=-\frac{YOp,1}{(1+2A)}\end{aligned}\right\}. \quad (6)$$

Здесь сеточные функции $Y_{0,1}=fW(t_j)$ – несут информацию о граничных условиях (3), а правые части $f_{p,1}$ – о начальных, так как сеточные функции $YO_{p,1}$ берутся с предыдущего (*j-1)* – го временного слоя. Следовательно, численный алгоритм (5), (6) является эволюционным и состоит из актов перехода от одного момента времени t_{j-1} к другому $t_j=t_{j-1}+Dt1$. Распараллеливание СЛАУ (5), (6) при помощи перестановок (алгоритм «нечетно-четной» редукции) освещен в [7].

Схема метода прямых. После дискретизации уравнения (1) по временной переменной получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$Y''_{p+\varepsilon_{x,1}}(\varepsilon_x)-\frac{1}{A}Y_{p+\varepsilon_{x,1}}(\varepsilon_x)=-\frac{1}{A}YO_{p+\varepsilon_{x,1}}(x), \quad (7)$$

где $YO_{p+\varepsilon_{x,1}}(x)$ – известная начальная функция,

$\varepsilon_x=\dfrac{(x-x_p)}{(x_{p+1}-x_p)}\in\left[-1,+1\right]$ – нормированння пространственная переменная.

Общее решение уравнения (7) представляется в конечном виде:

$$\begin{aligned} Y_{p+\varepsilon_{X,1}}(\varepsilon_x)&=Y^*_{p+\varepsilon_x,1}(\varepsilon_x)+\\ &+C_pC\eta\beta(\varepsilon_x)+D_pS\eta\beta(\varepsilon_x),\end{aligned} \quad (8)$$

где C_p, D_p – константы интегрирования;

$Y^*_{p+\varepsilon_x,1}(x)$ – некоторое частное решение неоднородного уравнения (7);

$\beta=\sqrt{\dfrac{1}{A}}$ – собственные числа характеристического уравнения.

Определив константы интегрирования C_p, D_p из условий при $\varepsilon_x=\pm1$:

$$Y_{p+\varepsilon_{X,1}}(\varepsilon_x)_{|\varepsilon_X\pm1}=Y_{p\pm1,1}, \quad (9)$$

получим решение уравнения (7) в следующем виде:

$$\begin{aligned} Y_{p+\varepsilon_{X,1}}(\varepsilon_x)=\Big\{&Y^*_{p+\varepsilon_{X,1}}(\varepsilon_x)+\\ &+\frac{S\eta\ \beta(1+\varepsilon_x)}{S\eta\ \beta(2)}\left[Y_{p+1,1}-Y^*_{p+1,1}\right]+\\ &+\frac{S\eta\ \beta(1-\varepsilon_x)}{S\eta\beta(2)}\left[Y_{p-1,1}-Y^*_{p+1,1}\right]\Big\}.\end{aligned} \quad (10)$$

Положив в (10) $\varepsilon_x=0$, перейдем от распределенной формы решения к его дискретному аналогу в форме СЛАУ (5), но с другим функциональным наполнением:

$$\left. \begin{array}{l} C_p = D_p = \dfrac{S\eta\beta(1)}{S\eta\beta(2)} = \dfrac{1}{2C\eta\beta} \\ f_{p,1} = C_p \mathrm{Y}*_{p+1,1} - Y^*_{p,1} + D_p \mathrm{Y}*_{p-1,1} \end{array} \right\}, p = \overline{1, 2m-1}, \tag{11}$$

отличающегося от рассмотренного конечно-разностного метода, имеющего форму (6). Таким образом, предложенный алгоритм абсолютно устойчив для любых входных данных, имеет максимальную параллельную форму и, следовательно, минимально возможное время его реализации на параллельных вычислительных устройствах.

Вычислительные эксперименты

Решение прикладных задач осуществлялось на основе применения многопроцессорного вычислительного комплекса [5, 6] с использованием предложенного аппарата численно-аналитических методов решения с применением методов расщепления [3, 4]. Численно-аналитический подход обеспечивает применение экономичных и устойчивых алгоритмов решения. А метод расщепления позволяет редуцировать сложный оператор к более простым. Такой подход позволяет свести интегрирование заданного уравнения к последовательности интегрирования одномерных уравнений более простой структуры. Эффективность такого подхода иллюстрируется решением задач нестационарной теплопроводности, некоторыми особенностями моделирования обратных задач исследования теплофизических свойств материалов [8 – 10]. Постановка их формулируется с точки зрения соотношений причина – следствие. К причинным характеристикам теплообменного процесса в соответствии с принятой математической моделью отнесены граничные условия и их параметры, начальные условия, теплофизические свойства и т.д.

Заметим, что решение задач теплопроводности дает возможность по заданным, известным из теплового или численного эксперимента температурным полям, определять различные причинные характеристики теплообменных процессов в системе твердое тело – окружающая среда. Под причинными характеристиками обычно подразумеваются коэффициенты уравнений, начальные поля, граничные условия, характеристики области интегрирования и т.д. Обратные задачи теплопроводности (ОЗТ) являются некорректно поставленными, поэтому методы их решения сложнее, чем соответствующих прямых задач. Разработан алгоритм и выявлены особенности решения коэффициентных ОЗТ. Предложенный подход реализован в виде ППП [11].

Выводы

Основным научным результатом представленной статьи является разработка новых эффективных математических технологий кластерного типа для решения многомерных нестационарных задач металлургического производства. При этом:

- предложен, проанализирован и реализован новый подход для решения многомерных нестационарных задач металлургического производства на основе параллельных компьютерных технологий кластерного типа;
- реализованы и расширены основные компоненты технологии параллельного конструирования алгоритмов на основе метода прямых;
- разработан и протестирован высокоэффективный комплекс программ для решения широкого класса задач металлургического производства.

Список литературы

1. Роуч П. Вычислительная гидродинамика / П. Роуч; [пер. с англ]. – М.: Мир, 1980. – 616 с.
2. Коздоба Л. А. Вычислительная теплофизика / Л.А. Коздоба. – К.: Наук. думка, 1992. – 224 с.
3. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики / Н.Н. Яненко. – Новосибирск: Наука, 1967. – 196 с.
4. Ковеня В. М. Метод расщепления в задачах газовой динамики / В. М. Ковеня, Н. Н. Яненко. – Новосибирск: Наука, 1981. – 304 с.
5. Башков Є.О. Високопродуктивна багатопроцесорна система на базі персонального обчислювального кластера / Є.О. Башков, В.П. Іващенко, Г.Г. Швачич // Наук. пр. Донецького національного технічного університету. Серія “Проблеми моделювання та автоматизації проектування”. – Вип. 9 (179). – Донецьк: ДонНТУ, 2011. – С. 312 – 324.
6. Швачич Г.Г. Особливості конструювання і моделювання високопродуктивного інтегрованого середовища на базі персонального обчислювального кластера / Г.Г. Швачич // Сучасні проблеми металургії: наук. пр. – Т. 10. – Д.: Системні технології, 2007. – С. 151 – 170.
7. Швачич Г.Г. Об алгебраическом подходе в концепции распределенного моделирования многомерных систем / Г.Г. Швачич // Теория и практика металлургии. – 2007. – №6 (61). – С. 73 – 78.
8. Иващенко В.П. Некоторые аспекты проблемы математического моделирования задач металлургической теплофизики на основе применения параллельных вычислительных систем кластерного типа / В.П. Иващенко, Г.Г. Швачич, А.А. Шмукин // Сучасні проблеми металургії: наук. пр. – Т. 7. – Д.: Системні технології, 2005. – С. 23 – 30.
9. Иващенко В.П. Параллельные вычисления и прикладные задачи металлургической теплофизики / В.П. Иващенко, Г.Г. Швачич, А.А. Шмукин // Системні технології: регіон. зб. наук. пр. – Вип. 3(56). – Т. 1. – Д., 2008. – С. 123 – 138.
10. Швачич Г.Г. Математическое моделирование одного класса задач металлургической теплофизики на основе многопроцессорных параллельных вычислительных систем / Г.Г. Швачич // Математичне моделювання. – 2008. – №1 (18). – С. 60 – 65.
11. Швачич Г.Г. ППП исследования решений некоторого класса задач нестационарной теплопроводности / Г.Г. Швачич, А.А. Шмукин, Д.В. Протопопов // Металлургическая теплотехника: Сб. науч. трудов НМетАУ в 2-х кн. – Кн. 2. – Д.: Пороги, 2005. – С. 448 – 453.