

УДК 519.684;519.63

*Б. Т. ЖУМАГУЛОВ, У. С. АБДИБЕКОВ, Д. Б. ЖАКЕБАЕВ,
А. А. ИСАХОВ, А. К. ХИКМЕТОВ*

**РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ
ВЫЧИСЛЕНИЙ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНОГО
УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА**

In this paper absolutely new algorithm was developed and realized for solving of three-dimensional Poisson equation. This equation is being used in research of such difficult problems as turbulent mixing, computing of hydrodynamic stress, researching of atmospheric front, ocean flows and so on.

The very urgent at present and the most effective from point of view of increasing of productivity of complex calculations technology was used for parallel programming MPI in combination with OpenMP directives, allowing to realize problems with very large data volume.

Received results of calculations may be used when solving important applied and fundamental problems in mathematics and physics.

Уравнения в частных производных представляют собой широко применяемый при разработке моделей в самых разных областях науки и техники математический аппарат. К сожалению, явное решение этих уравнений в аналитическом виде оказывается возможным только в частных простых случаях и, как результат, возможность анализа математических моделей, построенных на основе дифференциальных уравнений, обеспечивается при помощи приближенных численных методов решения. Объем выполняемых при этом вычислений является громоздким.

Существуют задачи, решение которых не возможно на серийных персональных компьютерах за приемлемое время. Для решения таких задач используют многопроцессорные вычислительные системы с обширным множеством архитектур. Для параллельных вычислительных систем необходимо создавать специальные программы. В тексте такой программы определяются части, которые могут выполняться параллельно, и алгоритм их взаимодействия.

В этой статье для проведения тестовых расчетов выбиралась кубическая расчетная область размерностью 50x50x50. Сетка каждой из подобластей хранилась локально на некотором процессоре.

Расчет ускорения проводился на обычном компьютере (Intel(R) Pentium(R) 4 CPU 2.66 GHz, 512 MB RAM), двухъядерном компьютере (Intel(R) Core 2 Duo CPU 2.2 GHz, 1 GB RAM) и на кластере URSA, технические характеристики оборудования приведены в табл.

Характеристики используемого оборудования

Спецификация	URSA
Number of nodes	14 nodes
A node	Intel(R) Xeon(R) CPU E5335 2.00GHz
Memory	4 GB Memory
Network	Gigabit Broadcom NetXtreme II
MPI	MPICH2
System	Scientific Linux 4.6, Oscar 5.0

В качестве примера рассматривалось численное решение трехмерного уравнения Пуассона. Установлено, что возможности экспериментальных исследований, применяемых при решении уравнения Пуассона для расчета поля давления, весьма ограничены. В этих условиях особое значение приобретают методы математического моделирования. Однако специфика задачи накладывает ограничения и на численные методы. Прежде всего, это продиктовано неэкономичностью по числу действий и, главным образом, необходимостью в больших ресурсах машинной памяти. Существует множество методов решения уравнения Пуассона: метод верхней релаксации, метод декомпозиций и т.д., однако они не являются эффективными в силу присутствия весовых функций. Настоящая статья

предлагает использование метода Фурье [1–7] в сочетании с методом матричной прогонки, которая применяется для определения коэффициентов Фурье. Этот алгоритм является более точным в отличие от итерационных методов, а также упрощает процесс вычислений за счет применения преобразований Фурье, что хорошо согласуется с аналитическими решениями. Однако при моделировании можно использовать два метода. В одних случаях задачу можно упростить, используя граничные условия первого рода, а другой подход состоит в использовании средств параллельного программирования и современных многопроцессорных вычислительных систем [8].

В этой связи возникла задача распараллеливания разработанного метода Фурье для решения уравнения Пуассона для расчета поля давления на современных вычислительных кластерах. Поставленная задача была решена с распределением расчетной прямоугольной сетки на вычислительные подобласти для каждого процессора. Обмен необходимых расчетных величин между процессорами реализован с помощью библиотеки MPI [9]. Эффективность кода тестировалась на кластере URSA (Центр ДГП НИИ ММ КазНУ им. аль-Фараби). При используемом в тестовых расчетах количестве процессоров (до 10) получена квазилинейная зависимость ускорения от числа процессоров.

Распараллеливание метода Фурье для решения трехмерного уравнения Пуассона. Рассмотрим уравнение Пуассона, которое запишется в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} + 10p = -4 \cos(3x + y - 2z) + 12e^{x-z} + 10, \quad (1)$$

с граничными условиями:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -2 \sin(3x + y - 2z) - \exp(x - z) - \text{справа}, \quad (2)$$

$p = \cos(3x + y - 2z) + \exp(x - z) + 1$ – на остальных сторонах.

Здесь p – давление; x, y, z – пространственные координаты.

Уравнение для давления (1) аппроксимируется в точке i, j, k и принимает следующий вид:

$$\frac{p_{i+1,j,k} - pu_{i,j,k} + p_{i-1,j,k}}{\Delta x^2} + \frac{p_{i,j+1,k} - 2p_{i,j,k} + p_{i,j-1,k}}{\Delta y^2} + \frac{p_{i,j,k+1} - 2p_{i,j,k} + p_{i,j,k-1}}{\Delta z^2} + 10p_{i,j,k} = F_{i,j,k}, \quad (3)$$

$$\text{где } F_{i,j,k} = -4 \cos(3i\Delta x + j\Delta y - 2k\Delta z) + 12e^{i\Delta x - k\Delta z} + 10. \quad (4)$$

Граничные условия для уравнения Пуассона получаем из (2). К уравнению (3) применяем метод Фурье, согласно которому для любой сеточной функции $f(i)$ имеет место разложение

$$f(i) = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^N \rho_k \phi_k \cos \frac{\pi k i}{N}, i = 0, 1, \dots, N,$$

где

$$\phi_k = \sum_{i=0}^N \rho_i f(i) \cos \frac{\pi k i}{N}, k = 0, 1, \dots, N,$$

$$\rho_i = \begin{cases} 1, & 1 \leq i \leq N-1, \\ 0.5, & i = 0, N. \end{cases}$$

Согласно данным соотношениям имеем

$$p_{i,j,k} = \frac{2}{N_3} \sum_{l=0}^{N_3} \rho_l a_{i,j,l} \cos \frac{\pi k l}{N_3}, F_{i,j,k} = \frac{2}{N_3} \sum_{l=0}^{N_3} \rho_l b_{i,j,l} \cos \frac{\pi k l}{N_3}, \quad (5)$$

где

$$a_{i,j,l} = \sum_{k=0}^{N_3} \rho_k p_{i,j,k} \cos \frac{\pi k l}{N_3}, b_{i,j,l} = \sum_{k=0}^{N_3} \rho_k F_{i,j,k} \cos \frac{\pi k l}{N_3}. \quad (6)$$

Подставляя выражения (5) в уравнение (3) и используя формулу

$$\cos \frac{\pi(k+1)l}{N_3} + \cos \frac{\pi(k-1)l}{N_3} = 2 \cos \frac{\pi k l}{N_3} \cos \frac{\pi l}{N_3},$$

проводим упрощение, после чего полученное выражение запишем при фиксированном значении $k=1$ и разделим на величину $\frac{2}{N_3} \rho_l a_{i,j,l} \cos \frac{\pi k l}{N_3}$:

$$\frac{a_{i+1,j} - 2a_{i,j} + a_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{a_{i,j+1} - 2a_{i,j} + a_{i,j-1}}{\Delta y^2} + \frac{a_{i,j}}{\Delta z^2} \left(2 \cos \frac{\pi l}{N_3} - 2 \right) + 10a_{i,j} = b_{i,j}. \quad (7)$$

Это уравнение преобразуется к следующему виду:

$$-\frac{a_{i,j-1}}{\Delta y^2} + \left[\left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} - \frac{1}{\Delta z^2} \left(2 \cos \frac{\pi l}{N_3} - 2 \right) - 10 \right) a_{i,j} - \frac{a_{i+1,j} + a_{i-1,j}}{\Delta x^2} \right] - \frac{a_{i,j+1}}{\Delta y^2} = -b_{i,j}$$

Как известно, метод матричной прогонки относится к прямым методам решения разностных уравнений и применяется к уравнениям, которые можно записать в виде системы векторных уравнений [6, 7]

$$-A_j \vec{a}_{j-1} + B_j \vec{a}_j - C_j \vec{a}_{j+1} = \vec{F}_j, i = 1, 2, \dots, N_2 - 1, \quad (8)$$

где матрицы A_j, B_j, C_j и векторы \vec{F}_j, \vec{a}_j имеют следующий вид:

$$A_j = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Delta y^2} & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & & \frac{1}{\Delta y^2} \\ 0 & & & \end{pmatrix},$$

$$B_j = \begin{pmatrix} \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} - \frac{1}{\Delta z^2} \left(2 \cos \frac{\pi l}{N_3} - 2 \right) - 10 & -\frac{1}{\Delta x^2} & & 0 \\ & -\frac{1}{\Delta x^2} & \ddots & \\ & 0 & & -\frac{1}{\Delta x^2} \\ & & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} - \frac{1}{\Delta z^2} \left(2 \cos \frac{\pi l}{N_3} - 2 \right) - 10 \end{pmatrix},$$

$$C_j = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Delta y^2} & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & & \frac{1}{\Delta y^2} \\ 0 & & & \end{pmatrix},$$

$$\vec{a}_j = \begin{pmatrix} a_{0,j} \\ \vdots \\ a_{N_1,j} \end{pmatrix},$$

$$\vec{F}_j = \begin{pmatrix} b_{0,j} \\ \vdots \\ b_{N_1,j} \end{pmatrix}.$$

Алгоритм матричной прогонки для решения уравнения (8) можно записать следующим образом:

$$\alpha_{j+1} = (B_j - A_j \alpha_j)^{-1} C_j, j=1,2 \dots N_2 - 1, \alpha_1 = B_0^{-1} C_0, (9)$$

$$\overrightarrow{\beta}_{j+1} = (C_j - A_j \alpha_j)^{-1} (\overrightarrow{F}_j + A_j \overrightarrow{\beta}_j), j=1,2 \dots N_2 - 1, \overrightarrow{\beta}_1 = B_0^{-1} \overrightarrow{F}_0, (10)$$

$$-A_j \overrightarrow{a}_{j-1} + B_j \overrightarrow{a}_j - C_j \overrightarrow{a}_{j+1} = \overrightarrow{F}_j, j=1,2 \dots N_2 - 1, \overrightarrow{a}_{N_2} = \overrightarrow{\beta}_{N_2+1}. (11)$$

После нахождения коэффициентов $a_{i,j,k}$ значения поля давления определяются из формулы (5). Для вычисления суммы (5) и (6) применяется метод быстрого преобразования Фурье, который позволяет вычислить эти суммы за $O(N \ln N)$ действий, что существенно сокращает вычислительное время.

Повышение производительности показано в виде графиков на рис. 1 и 2. Разные линии на рис. 1 указывают на размерность подобластей N вычислительной области. На рис. 2 иллюстрируется эффективность производимых расчетов на различных вычислительных машинах. Так третий столбик диаграммы свидетельствует о том, что вычислительное время, затрачиваемое при решении задачи на кластере URSA, минимально.

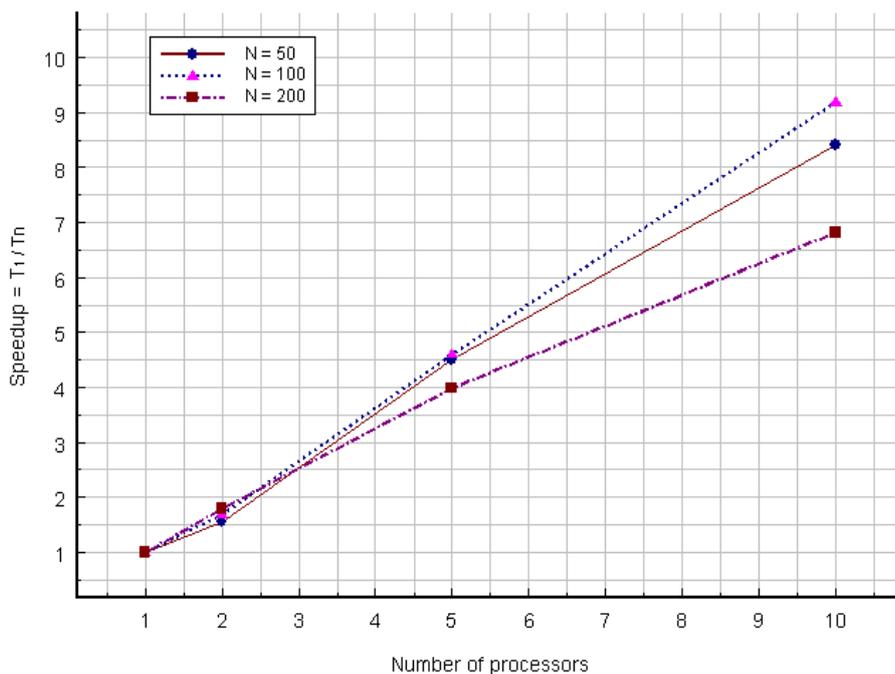


Рис. 1. Расчет ускорения

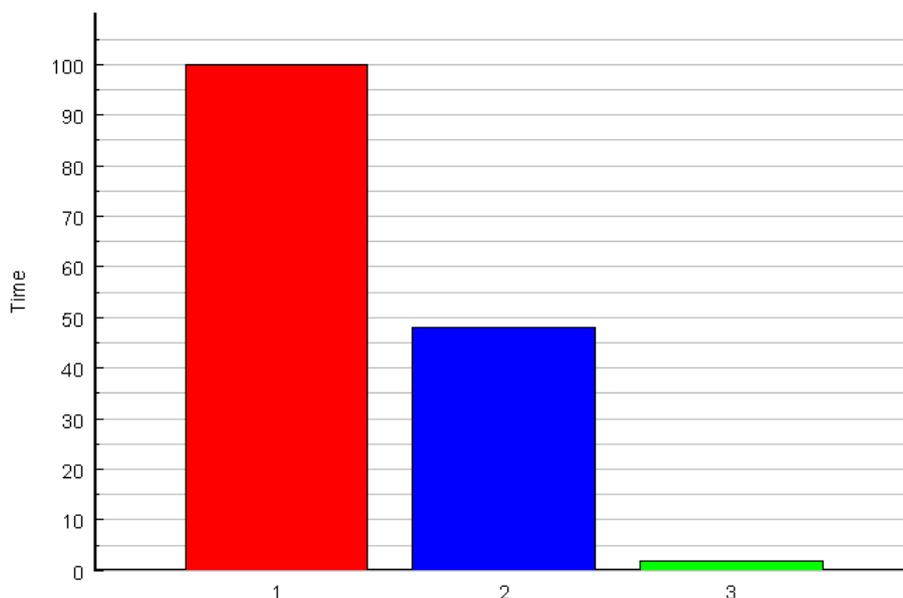


Рис. 2. Расчет ускорения. 1 – Intel(R) Pentium(R) 4 CPU 2.66 GHz; 2 – Intel(R) Core 2 Duo CPU 2.2 GHz, 1 GB RAM; 3 – URSA, технические характеристики оборудования приведены в табл.

Таким образом, построен новый алгоритм решения трехмерного уравнения Пуассона, который позволяет получить более точный результат, применены технологии параллельного программирования OpenMP, MPI, что существенно сокращает вычислительное время и повышает эффективность расчетов.

Поскольку настоящие исследования относятся к классу фундаментальных проблем, полученные результаты могут быть использованы при решении сложных задач вычислительной гидродинамики, где для определения давления применяется уравнение Пуассона.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ильин В.П. Численный анализ. Новосибирск: Изд. ИВМиМГ СО РАН, 2004. 71 с.
2. Ильин В.П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Физмалит, 1995. 288 с.

3. *Ильин В.П.* Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. Новосибирск: Изд. ИМ СО РАН, 2000. 345 с.
4. *Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.* Энциклопедия линейной алгебры. Электронная система ЛИНЕАЛ. СПб.: БХВ-Петербург, 2006. 544 с.
5. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. М.: Наука, 1989. 432 с.
6. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 553 с.
7. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. М.: Наука, 1978. 512 с.
8. *Антонов А.С.* Параллельное программирование с использованием технологий MPI. М.: МГУ, 2004. 71 с.
9. *Шпаковский Г.И., Серикова Н.В.* Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI. Минск: БГУ, 2002. 323 с.