

УДК 519.6

КОМБИНИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА НА НЕОРТОГОНАЛЬНЫХ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СЕТКАХ

Р. М. Шагалиев, И. М. Беляков, В. А. Шумилин, А. В. Алексеев, О. В. Бутнева, А. Ю. Костенко, А. А. Нуждин, Н. П. Плетенева, В. Ю. Резчиков, С. В. Суббот (РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Рассматриваются вопросы создания комбинированного алгоритма распараллеливания численного решения двумерного уравнения переноса фотонов с учетом взаимодействия излучения со средой. Уравнения записаны в цилиндрической системе координат, для пространственной аппроксимации используются структурированные неортогональные сетки. Комбинированный алгоритм предполагает распараллеливание численного решения уравнения переноса по пространственным переменным и по энергетической переменной. Представлены описание параллельного метода и результаты численных исследований эффективности на модельных задачах.

Введение

Численное решение нестационарного кинетического уравнения в многогрупповой постановке в двумерном пространственном приближении связано с большими затратами оперативной памяти ЭВМ и календарного времени счета. Одним из путей наиболее эффективного решения подобных задач является использование алгоритмов распараллеливания.

Следует отметить особую сложность решения проблемы в общем случае, когда краевая задача для уравнения переноса ставится в областях сложной формы и уравнение аппроксимируется на неортогональных пространственных сетках. Для численного решения таких задач, как правило, используются неявные схемы по переменной времени, а система сеточных уравнений на шагах по времени решается методом бегущего счета. Это означает, что сеточные уравнения переноса в ячейках сетки на данном временном шаге разрешаются в строго определенной последовательности, причем эта последовательность разная для разных направлений полета частиц и изменяется на временных шагах. Иначе говоря, при решении уравнения переноса в кинетическом приближении на мультипроцессорных системах отсутствует возможность для предварительного определения топологии связей (порядка обменов информацией) между процессорными

элементами, что принципиально усложняет проблему разработки эффективных алгоритмов распараллеливания задач переноса.

В настоящее время в комплексе САТУРН-3 [1] для решения двумерного нестационарного уравнения переноса фотонов в групповой кинетической постановке (ДКУ) успешно применяется мелкоблочный алгоритм распараллеливания [2]. Особенностью этого алгоритма распараллеливания является то, что данные распределяются по процессорам согласно принципу пространственной декомпозиции. Решение трехмерного уравнения переноса в параллельном режиме также основано на пространственной декомпозиции с использованием конвейерной схемы [3].

Современные требования повышения точности решения спектральных задач переноса обуславливают необходимость использования при численном моделировании большого количества интервалов по энергетической переменной (групп). В результате появляется необходимость и возможность использования дополнительного ресурса распараллеливания по энергетическим группам, поскольку при решении многогруппового уравнения переноса расчет по интервалам энергетической переменной можно проводить независимо.

Для ускорения численного решения двумерного уравнения переноса в спектральной поста-

новке предлагается использовать комбинированный алгоритм распараллеливания. Особенностью этого алгоритма является сочетание декомпозиции системы на пространственные подобласти с распараллеливанием по энергетической переменной. Такой подход позволяет существенно увеличить количество используемых процессоров при сохранении высокой эффективности. Характерными чертами рассматриваемого комбинированного метода распараллеливания являются:

1. Возможность распараллеливания на большое число процессоров за счет декомпозиции системы по пространственным и энергетическим переменным.
2. Использование принципа пространственной декомпозиции исходной системы на подобласти. При этом на каждом процессоре хранятся данные для конкретной подобласти, а не всей задачи.
3. Отсутствие дополнительного итерационного процесса по интервалам переменных, участвующих в распараллеливании.
4. Возможность естественного обобщения методики на трехмерный случай.
5. Ориентация на многопроцессорные ЭВМ с распределенной памятью. Для передачи сообщений используются процедуры стандарта MPI.

В работе излагается методика решения уравнения переноса с использованием комбинированного алгоритма распараллеливания. Приводятся результаты численных исследований, которые показывают высокую эффективность применения указанной методики при решении задач переноса излучения.

Постановка задачи решения двумерного уравнения переноса излучения

Рассматривается многогрупповое нестационарное двумерное уравнение переноса излучения с учетом взаимодействия излучения со средой в следующем виде [1]:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + L \varepsilon_i + \chi_{ti} \varepsilon_i = \frac{\chi_{ai}}{2\pi} \varepsilon_{ip} + \frac{\chi_{si}}{2\pi} \varepsilon_i^{(0)} + \frac{Q_i}{2\pi}; \quad (1)$$

$$L \varepsilon_i = \mu \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \sqrt{1-\mu^2} \cos \varphi \varepsilon_i \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sqrt{1-\mu^2} \sin \varphi \varepsilon_i \right); \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \sum_{i=1}^{i1} \chi_{ai} \varepsilon_i^{(0)} \Delta \omega_i - \sum_{i=1}^{i1} \chi_{ai} \varepsilon_{ip} \Delta \omega_i; \quad (3)$$

$$\varepsilon_i^{(0)} = \int_{-1}^1 \int_0^\pi \varepsilon_i d\mu d\varphi. \quad (4)$$

В записи уравнений приняты следующие обозначения: $i = 1, \dots, i1$ — номер интервала по энергетической переменной (группы); r, z — цилиндрические координаты положения частицы (рис. 1); $\vec{\Omega}(\mu, \varphi)$ — единичный вектор в направлении полета частиц; $\mu = \cos(\theta)$, $-1 \leq \mu \leq 1$, θ — угол между вектором $\vec{\Omega}$ и осью симметрии Z (см. рис. 1); φ — угол между проекцией вектора $\vec{\Omega}$ на плоскость, проходящую через точку (r, z) перпендикулярно оси Z , и вектором, соединяющим точки $(0, z)$ и (r, z) , $0 \leq \varphi \leq \pi$; $\varepsilon_i = \varepsilon_i(r, z, \mu, \varphi, \omega_i, t)$ — функция интенсивности излучения (искомая функция); $Q_i = Q_i(r, z, \omega_i)$ — независимый источник; $\chi_{ai} = \chi_{ai}(\rho, T, \omega_i)$ — сечение поглощения; $\chi_{si} = \chi_{si}(\rho, T, \omega_i)$ — сечение рассеяния; $\chi_{ti} = \chi_{ai} + \chi_{si}$ — полное сечение; $\varepsilon_{ip} = \varepsilon_{ip}(T, \omega_i)$ — функция Планка.

Система (1)–(4) дополняется соответствующими начальными и граничными условиями.

Аппроксимация уравнения переноса проводится по схемам типа DS_n -метода [4, 5]. По пространственным переменным уравнение переноса аппроксимируется с использованием так называемого расширенного шаблона [6]. В ходе счета вся система может быть разбита на несколько математических областей со своими структури-

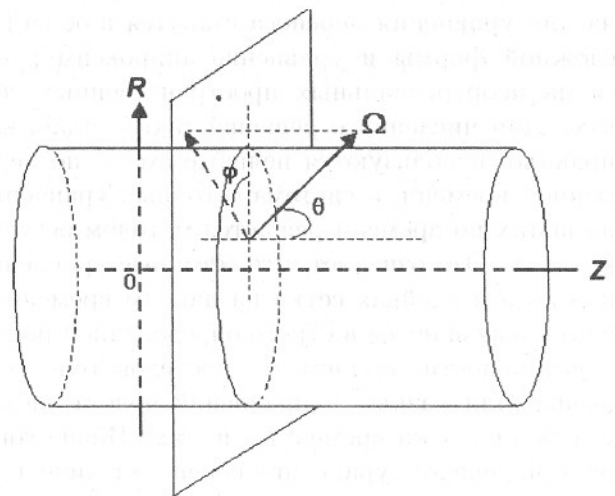


Рис. 1. Геометрическая постановка задачи двумерного переноса

рованными неортогональными пространственными сетками, состоящими из четырехугольников произвольной формы (пример на рис. 2) [1].

Система разностных уравнений, полученных при аппроксимации, разрешается по следующему алгоритму [1]:

1. На каждом временном шаге система групповых кинетических уравнений решается методом итераций по правой части. При необходимости простые итерации совмещаются с итерациями по внутренним граничным условиям между математическими областями.
2. При заданной правой части и заданных граничных условиях система групповых кинетических уравнений решается в цикле по энергетическим группам.
3. Уравнение переноса с заданной правой частью аппроксимируется системой разностных уравнений. Эта система решается отдельно для каждого интервала угловой переменной μ .
4. При фиксированном μ система разностных уравнений разрешается последовательно для всех значений угловой переменной φ .
5. Для выбранных значений (μ, φ) система разностных уравнений решается методом бегущего счета, основанным на приведении системы уравнений к блочно-треугольному виду [7] путем анализа освещенности сторон пространственных ячеек.

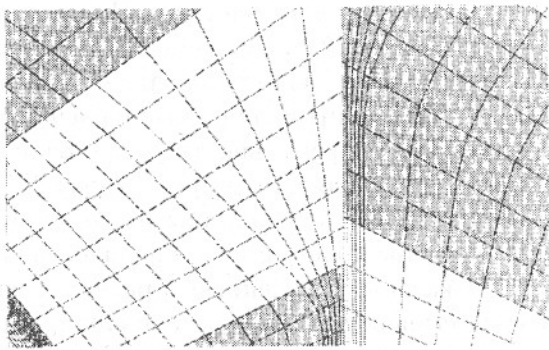


Рис. 2. Пример пространственной сетки для решения двумерного уравнения переноса

Основные положения метода комбинированного распараллеливания

Алгоритм комбинированного распараллеливания представляет собой сочетание мелкоблочного

го распараллеливания по пространственным переменным [2], а также распараллеливания по энергетическим группам. Вследствие этого рассмотрим особенности каждого из алгоритмов.

Мелкоблочный метод распараллеливания имеет следующие характерные черты:

1. Использование принципа пространственной декомпозиции исходной системы на подобласти (параобласти). Разбиение на подобласти производится регулярным образом по строкам и столбцам так, чтобы количество данных в них было примерно одинаковым. При этом на каждом процессоре хранятся лишь данные для конкретной подобласти, а не всей задачи.
2. Каждая параобласть для текущего направления полета частиц разрешается с внутренними граничными условиями, вычисленными на текущей итерации, что позволяет сохранить точность решения и не дает увеличения общего числа итераций.
3. Процессоры, содержащие параобласти, на границах которых внутренние граничные условия для текущего направления пока не определены, не простаивают, а занимаются некоторой полезной вычислительной работой, которая при получении граничных условий позволяет быстро разрешить данную подобласть.
4. Для повышения эффективности используется сочетание распараллеливания по параобластям с конвейерной схемой распараллеливания по угловой переменной μ .
5. При использовании мелкоблочного распараллеливания межпроцессорные обмены происходят достаточно часто (внутри цикла по направлениям) и локально (между геометрически соседствующими параобластями). Размер передаваемых сообщений относительно мал, поскольку значения выходящего потока на границе параобласти передаются несколькими порциями.

Что касается распараллеливания по группам, то этот алгоритм характеризуется следующим образом:

1. На каждом процессоре двумерное уравнение переноса решается только для части энергетических групп — *группобласти*, т. е. части счетной области (параобласти), содержащей массивы для интервалов по энергетическим группам, соответствующим данному процессору.

2. Уравнение энергии при учете взаимодействия излучения со средой на каждом процессоре решается для всех групп.
3. При распараллеливании по группам межпроцессорные обмены происходят сравнительно редко (один раз на итерации). Однако обмены носят глобальный характер по схеме *каждый с каждым*. Передаются достаточно большие по размеру массивы интенсивности излучения (ϵ_0). Для передачи сообщений применяются асинхронные процедуры MPI.

Основной сложностью при организации комбинированного распараллеливания является то, что оба метода распараллеливания (по группам и по пространству) существенно различаются как по алгоритму межпроцессорных обменов, так и по топологии связей между используемыми процессорами. Вследствие этого оказалось необходимым ввести для каждого параллельного метода свою систему нумерации процессоров. Отметим, что в библиотеке передачи сообщений стандарта MPI имеется возможность наложить на одни и те же процессоры различные системы нумерации. Это выполняется с помощью так называемых *коммуникаторов*, каждый из которых определяет некоторую совокупность параллельных процессов со своей внутренней нумерацией — контекст. Один и тот же процессор в рамках различных контекстов может иметь различный номер (rank).

Таким образом была организована иерархическая (трехуровневая) система коммуникаторов. Один из коммуникаторов включает в свой контекст все процессоры, участвующие в работе программ комплекса САТУРН-3. Второй коммуникатор (точнее, набор коммуникаторов) объединяет геометрические параобласти для каждой группобласти. И наконец, третий набор коммуникаторов объединяет все группобласти для каждой параобласти.

Таким образом, каждый процессор получил свои идентификационные параметры (номер — rank и количество процессоров — size) для каждого из алгоритмов распараллеливания: по группам или по геометрии. Осуществляя операции межпроцессорных обменов в рамках того или иного коммуникатора, каждый процессор может работать стандартным образом, ничего "не зная" о другом алгоритме распараллеливания.

Результаты численных исследований эффективности

Для оценки эффективности комбинированного метода распараллеливания была проведена серия расчетов модельных задач переноса излучения. Для определения коэффициентов ускорения и эффективности распараллеливания использовался метод дробления задачи [8].

Коэффициент ускорения рассчитывался следующим образом:

$$Sp_n = \frac{t_1}{t_n},$$

эффективность распараллеливания для n процессоров рассчитывалась как

$$E_n = \frac{t_1}{nt_n} \cdot 100\%,$$

где t_n — среднее время счета задачи на одном процессоре в режиме запуска на n процессорах; t_1 — время счета задачи в последовательном режиме.

Решение системы разностных уравнений на временном шаге проводилось с помощью итераций, во всех расчетах навязывалось 10 итераций по правой части.

1-я серия тестовых расчетов. В данной серии в качестве тестовой была выбрана следующая модельная задача. Задана одна счетная область, представляющая собой полусферу. Число строк — 80, число столбцов — 200. Порядок угловой квадратуры — 12, (96 направлений полета частиц). Число энергетических групп — 28. Физические параметры задачи соответствуют известной задаче Флека [9].

На рис. 3 показаны полученные в расчетах 1-й серии значения эффективности распараллеливания для разного количества процессоров N . Расчеты проводились с различными сочетаниями количества параобластей и группобластей. Маркерами показаны полученные в расчетах значения эффективности распараллеливания на соответствующее количество процессоров.

Сравнение трех кривых показывает, что при достаточно большом количестве процессоров (175–200) в данной задаче наилучшая эффективность достигается при использовании распараллеливания на 7 группобластей.

2-я серия тестовых расчетов. Модельная двухобластная задача для данной серии расчетов была получена из предыдущей однообластной задачи путем разбиения по строкам на две

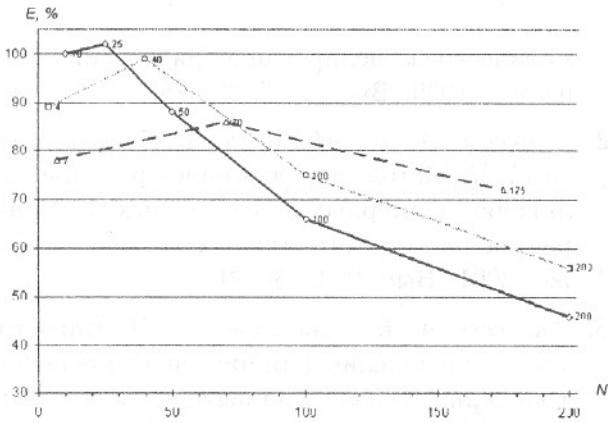


Рис. 3. Эффективность распараллеливания в 1-й серии расчетов: —◇— — 1 группобласть; —□— — 4 группобласти; —△— — 7 группобластей

математические области. В каждой из областей получается 40 строк и 200 столбцов. Число энергетических групп и прочие параметры задачи такие же, как в предыдущей задаче.

На рис. 4 показаны полученные во 2-й серии расчетов значения эффективности распараллеливания в зависимости от количества процессоров. Расчеты проводились с различными сочетаниями количества параобластей и группобластей.

В данном случае наилучшая эффективность достигается при распараллеливании на 4 группобласти. Эффективность при использовании распараллеливания на 7 группобластей оказывается несколько ниже. Еще более низкий результат демонстрирует «чистое» распараллеливание по пространственным переменным.

3-я серия тестовых расчетов. Модельная трехобластная задача данной серии расчетов была получена из предыдущей двухобластной задачи путем одинакового разбиения по столбцам первой счетной области.

В первой и второй областях число строк получается равным 40, число столбцов — 100. В третьей области число строк — 40, число столбцов — 200. Остальные параметры совпадают с указанными в предыдущих задачах.

На рис. 5 показаны полученные в расчетах 3-й серии значения эффективности распараллеливания в зависимости от количества процессоров. Расчеты проводились с различным сочетанием количества параобластей и группобластей.

В 3-й серии расчетов, как и во 2-й, оптимальным выглядит использование при распараллеливании на 4 группобласти. Кривые, соответствующие 1-й и 7-й группобластям, при достаточно

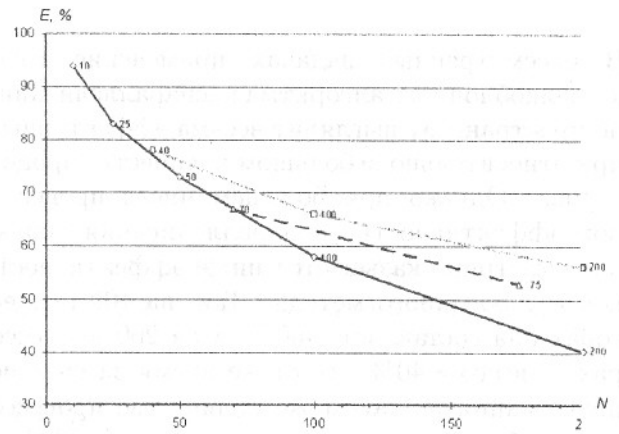


Рис. 4. Эффективность распараллеливания во 2-й серии расчетов: —◇— — 1 группобласть; —□— — 4 группобласти; —△— — 7 группобластей

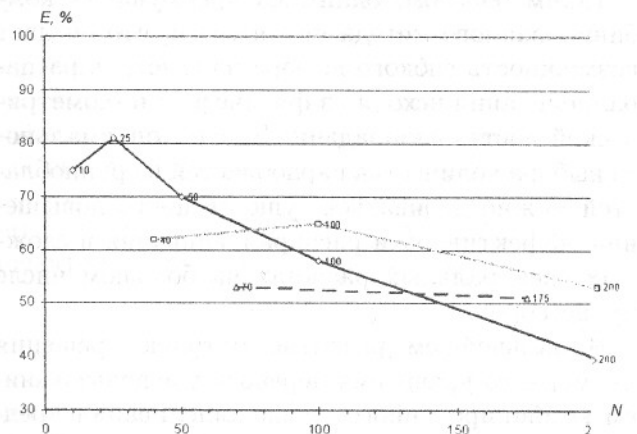


Рис. 5. Эффективность распараллеливания в 3-й серии расчетов: —◇— — 1 группобласть; —□— — 4 группобласти; —△— — 7 группобластей

большом количестве процессоров лежат ниже.

Следует отметить, что общая эффективность в данной и предыдущей сериях расчетов оказывается несколько ниже, поскольку в них задачи рассчитывались в многообластной постановке. В этом случае возникают дополнительные межпроцессорные обмены граничными условиями между математическими областями.

Заключение

Комбинированный алгоритм распараллеливания численного решения двумерного многогруппового уравнения переноса продемонстрировал достаточно высокую эффективность. Полученные в ходе тестовых расчетов результаты показывают, что новый метод позволяет, благодаря дополнительному распараллеливанию по энергетическим группам, использовать большое количество процессоров при сохранении приемлемой эффективности распараллеливания.

В рассмотренных задачах применение только мелкоблочного алгоритма распараллеливания по пространству выглядит весьма эффективным при относительно небольшом количестве процессоров. Однако при большем числе процессоров эффективность распараллеливания только по геометрии оказывается ниже эффективности комбинированного метода. Так, на 100 процессорах она составляет ~60 %, а на 200 процессорах — всего ~40 %. В то же время за счет использования на таком же количестве процессоров комбинированного алгоритма распараллеливания оказалось возможным увеличить эффективность на 15–25 %.

Таким образом, одним из преимуществ комбинированного метода является то, что он дает возможность гибкого выбора параметров распараллеливания исходя из физической и геометрической постановки задачи. За счет оптимального выбора количества параобластей и группобластей можно добиваться существенного повышения эффективности распараллеливания в сложных спектральных расчетах на большом числе процессоров.

В дальнейшем развитие методики решения двумерного уравнения переноса с использованием комбинированного распараллеливания предполагается проводить по следующим направлениям:

- усовершенствование алгоритма распараллеливания по группам с целью повышения эффективности на большом числе процессоров;
- адаптация к комбинированному алгоритму распараллеливания программ ускорения сходимости итерационного процесса;
- обобщение комбинированного алгоритма распараллеливания на пространственно-трехмерный случай в сочетании с конвейерной схемой [3].

Список литературы

1. Шагалиев Р. М., Шумилин В. А., Алексеев А. В., Беляков И. М., Евдокимов В. В., Звенигородская О. А., Москвин А. Н., Плетенева Н. П., Федотова Л. П. Математические модели и методики решения многомерных задач переноса частиц и энергии, реализованные в комплексе САТУРН-3 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 4. С. 20–26.
2. Алексеев А. В., Нуждин А. А., Шагалиев Р. М. Метод мелкоблочного распараллеливания двумерных и трехмерных задач переноса на неортогональных сетках // Там же. 2001. Вып. 2. С. 3–10.
3. Алексеев А. В., Шагалиев Р. М. Алгоритмы распараллеливания численного решения трехмерного уравнения переноса в комплексе САТУРН // Там же. 1993. Вып. 4. С. 3–7.
4. Carlson B. G. The numerical theory of neutron transport // Methods in Computational Physics. 1963. Vol. 1. P. 9.
5. Басс А. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А. Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучений. М.: ИПМ АН СССР им. М. В. Келдыша, 1986.
6. Плетенева Н. П., Шагалиев Р. М. Аппроксимация двумерного уравнения переноса на четырехугольных и многоугольных пространственных сетках по разностной схеме с расширенным шаблоном // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1989. Вып. 3. С. 34–40.
7. Троцкий В. Е. О классах сеток, допускающих консервативные аппроксимации двумерного оператора переноса треугольным разностным оператором // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1976. Т. 16, № 3. С. 793–797.
8. Алексеев А. В., Софронов И. Д., Федотова Л. П., Шагалиев Р. М. Численные исследования алгоритмов распараллеливания трехмерных задач диффузии и переноса нейтронов в комплексе САТУРН на многопроцессорных ЭВМ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1996. Вып. 4. С. 16–23.
9. Fleck J. A., Cummings J. D. An implicit Monte Carlo scheme for calculating time and frequency dependent nonlinear radiation transport // J. Comp. Phys. 1971. Vol. 8. P. 313–342.