

УДК 681.3

Р.І. Черниш, Ю.М. Тирчак, П.А. Іваненко

ПОБУДОВА ПАРАЛЕЛЬНОГО АЛГОРИТМУ ЧИСЕЛЬНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ БАГАТОВИМІРНОЇ ЗАДАЧІ МОДЕЛЮВАННЯ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА

Розглядається розпаралелювання чисельного моделювання з використанням модифікованого адитивно-усередненого розщеплення з покоординатною декомпозицією області. Це дозволяє уникнути визначення крайових умов усередині розрахункової області. Наведені кількісні показники розпаралеленого алгоритму, проведено чисельний експеримент.

Вступ

Реалізація обчислень на ЕОМ є відповідальною ланкою під час розв'язання прикладних задач. Від неї у значній мірі залежить ефективність та доцільність отримання остаточного результату. Як відомо [1, 2], сучасні інформаційні технології та прикладне програмне забезпечення так чи інакше ґрунтуються на концепціях паралельних та розподілених обчислень. Саме їх використання є принципово важливим для досягнення високих показників продуктивності мультипроцесорної обробки та паралельного програмування.

Для наближеного чисельного розв'язання багатовимірних задач математичної фізики цілком прийнятними є обидві парадигми паралелізму [3, 4]: розпаралелювання на рівні чисельної процедури та на рівні даних. Звісно, одночасне застосування цих парадигм є бажаним, проте не завжди можливе. Причиною цього є та обставина, що не всі чисельні алгоритми можуть бути зведені до паралельної форми. Проте будь-яку задачу математичної фізики можливо звести до сукупності підзадач шляхом поділу даних, тобто декомпозиції розрахункової області [5, 6]. Такий підхід не лише зведе алгоритм до паралельної форми, а й спростить геометрію підобластей. Але для коректної постановки підзадач виникає потреба задання крайових умов усередині розрахункової області.

Крайові умови для підзадач у разі геометричного розщеплення враховуються постановкою обмінних граничних умов, накладанням підобластей, постановкою

умов із явного шару, застосуванням ітерацій тощо [5, 6]. У даній роботі на прикладі модифікованої адитивно-усередненої схеми розщеплення [7] та покоординатної декомпозиції області буде показано, що можливе поєднання геометричного та операторного розщеплення, яке не потребує постановки крайових умов усередині розрахункової області.

Модифіковане адитивно-усереднене розщеплення

Розглянемо нестационарну крайову задачу із крайовими умовами першого роду

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \Lambda u = f, \quad x \in \Omega/\Gamma \quad t \in (0; T], \quad (1)$$

$$u(0, x) = u_0(x), \quad x \in \Omega, \quad (2)$$

$$u(t, x) = u_\Gamma(t), \quad x \in \Gamma = \partial\Omega \quad t \in [0; T], \quad (3)$$

де $\Lambda = \sum_{k=1}^L \Lambda_k$ – просторовий оператор, що подається через суму простіших операторів, $f = \sum_{k=1}^L f_k$.

Згідно [7] модифікація полягає у введенні незалежного параметру m таким чином: часовий проміжок $[0; T]$ розбивається на відрізки довжини $m\tau$. Тоді задача (1) – (3) зводиться до розв'язання низки підзадач (4) та усереднення їх результатів (5) через кожні m кроків

$$\frac{1}{L} \frac{\partial u_\ell}{\partial t} + \Lambda_\ell u_\ell = f_\ell,$$

$$t \in [qm\tau; (q+1)m\tau], \quad \ell = \overline{1, L}, \quad (4)$$

$$u_\ell(qm\tau, x) = y(qm\tau, x), \quad y(0, x) = u_0(x),$$

$$y((q+1)m\tau, x) = \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L u_\ell((q+1)m\tau, x), \quad (5)$$

де $q = 0, \dots, \lfloor T/m\tau \rfloor$.

Слід зауважити, що можлива паралельна реалізація етапу (4) для всіх L підзадач оскільки обмін інформацією між ними здійснюється на етапі (5).

Покоординатна декомпозиція області

Розглянемо спеціальну декомпозицію для області $\Omega = [0; 1]^p$. Ця декомпозиція p -мірного гіперкубу полягає у поділі

на частини $\Omega^{(k)} = \left\{ \Omega_i^{(k)} : \bigcup_{i=1}^{s_k} \Omega_i^{(k)} = \Omega \right\}$ таким

чином, щоб принаймні за k -м координатним напрямком область Ω залишалася цілою. Тобто, покоординатна декомпозиція $\Omega^{(k)}$ має задовольняти наступні вимоги:

- 1) $\text{diam } \ell_k = 1$ для довільного відрізка ℓ_k із $\Omega_i^{(k)} \in \Omega^{(k)}$, $i = 1, \dots, s_k$, що паралельний вісі Ox_k ;
- 2) можливе також існування інших

координатних напрямків, що мають властивість (п. 1).

Надалі декомпозицію $\Omega^{(k)}$ будемо пов'язувати із розбиттям області Ω , тобто вважатимемо, що суміжні підобласті $\Omega_i^{(k)}, \Omega_j^{(k)} \in \Omega^{(k)}$, $i \neq j$ матимуть спільні гіперграні розмірності не більше за $p-1$. Також поставимо у відповідність області Ω одну із можливих множин покоординатних декомпозицій $\{\Omega^{(k)} : k = 1, \dots, p\}$, яка покриває всі просторові координатні напрямки відповідно до (п. 1). Внаслідок (п. 2) можлива ситуація, коли деяка декомпозиція $\Omega^{(k)}$ відповідає кільком координатним напрямкам. Зокрема, випадок виродженої декомпозиції $\Omega^{(k)} = \Omega$ відповідає відразу всім напрямкам.

Приклади двох множин покоординатних декомпозицій для випадку $\Omega = [0; 1]^3$, що покривають всі напрямки, показано на рис. 1 та 2.

Декомпозиції із $\{\Omega^{(3)} : k = 1, 2, 3\}$, які показані на рис. 1, визначаються лише (п. 1). Тому кожна покоординатна декомпозиція $\Omega^{(k)}$ відповідає лише одному просторовому напрямку. На рис. 2 кожна із двох декомпозицій визначається (п. 1 та 2). Потім кожній декомпозиції відповідає два напрямки; напрямку Ox_2 відповідають обидві декомпозиції.

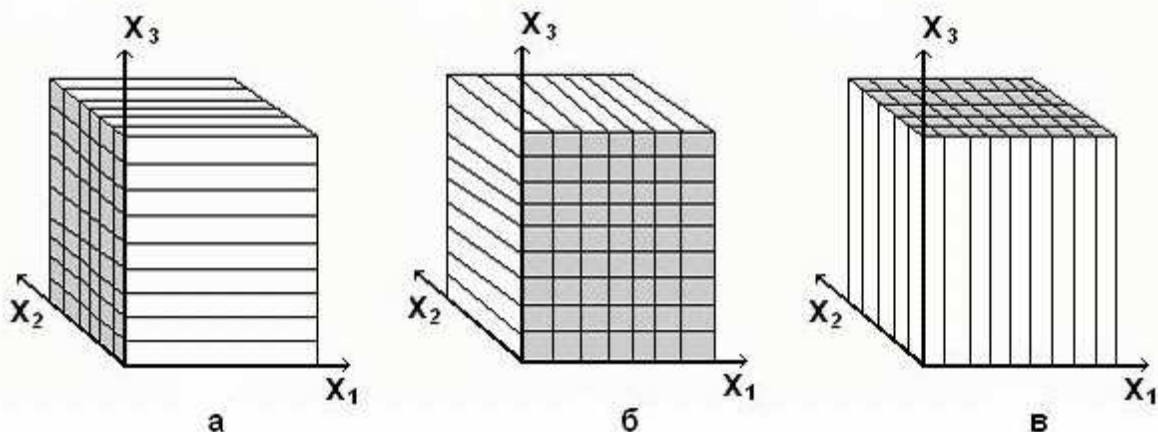


Рис. 1. Множина індивідуальних покоординатних декомпозицій:
а) для напрямку x_1 ; б) для напрямку x_2 ; в) для напрямку x_3

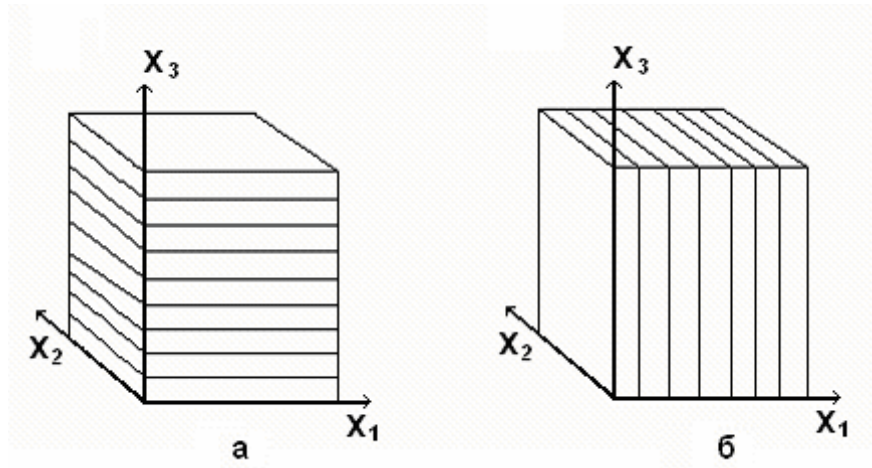


Рис. 2. Множина парних покоординатних декомпозицій:
 а) для напрямків x_1 та x_2 ; б) для напрямків x_2 та x_3

Паралельна реалізація задачі

Розглянемо деяку еволюційну модель, що складається із r рівнянь, містить крайові умови першого роду та визначена в області $\Omega = [0;1]^p$.

$$\frac{\partial u^{(i)}}{\partial t} + \Lambda^{(i)}u = f^{(i)}, \quad x \in \Omega/\Gamma \quad t \in (0;T], \quad (6)$$

$$u^{(i)}(0, x) = u_0^{(i)}(x), \quad x \in \Omega, \quad (7)$$

$$u^{(i)}(t, x) = u_\Gamma^{(i)}(t), \quad x \in \Gamma = \partial\Omega \quad t \in [0;T], \quad (8)$$

де $\Lambda^{(i)} = \sum_{k=1}^L \Lambda_k^{(i)}$ – просторові оператори, що подаються через суму простіших операторів $f^{(i)} = \sum_{k=1}^L f_k^{(i)}$, $i = \overline{1, r}$.

Обмежимося розглядом коректно поставлених задач, коли для деякого класу початкових (7) та крайових (8) даних розв’язок існує у заданому класі функцій, єдиним чином визначений та неперервно залежить від цих даних, які є взаємно узгодженими.

Для спрощення подальших міркувань зробимо кілька припущень. Нехай має місце рівність $L = p$ та кожна операторна компонента $\Lambda_k^{(i)}$, $i = \overline{1, r}$ пов’язана лише з k -м просторовим напрямком (уздовж вісі Ox_k). Прикладом цього може бути випа-

док, коли оператори $\Lambda_k^{(i)}$, $i = \overline{1, r}$ містять всі похідні за змінною x_k та не містять похідних за іншими змінними.

Надалі орієнтуватимемося на MIMD архітектуру паралельної обчислювальної системи (ПОС) згідно класифікації Флінна. Одна із парадигм паралельного програмування для ПОС передбачає поділ алгоритму на окремі частини, що дозволяють їх паралельне виконання. У цьому випадку формула Вірта набуває вигляду [2, 3]:

паралельна програма = паралельні алгоритми + структури даних.

Розглянемо застосування цієї парадигми до поставленої модельної задачі (6) – (8), що розв’язується алгоритмом (4) – (5). Існує дві можливості застосування алгоритмічного розпаралелювання.

У загальному випадку система рівнянь (6) – (8) є нелінійною. Проте навіть за таких умов можливий вибір методів наближеного розв’язання відповідних одновимірних задач, які дозволяють здійснити розпаралелення обчислень за рівняннями завдяки інформаційній взаємній незалежності обчислень при переході на наступний часовий шар чи на наступний ітераційний крок. Обмін інформацією у відповідній системі дискретних рівнянь здійснюється через початкові дані.

Іншою можливістю є паралельна реалізація етапу (4) модифікованого ади-

тивно-усередненого розщеплення. За прийнятих припущень це фактично є розщеплення за напрямками. Проте слід зауважити, що етап (5) не підлягає алгоритмічному розпаралелюванню.

Парадигма геометричного паралелізму передбачає декомпозицію структур даних та записується так:

паралельна програма = алгоритми + розподілені структури даних.

Ця парадигма досить широко застосовується для реалізації розв'язання різноманітних задач скінченно-різницевиими методами. Її суть полягає у поділі просторової області визначення задачі на підмножини та розв'язанні сукупності підзадач, що визначені на цих підмножинах. Такий підхід є досить універсальним та ефективним засобом розпаралелювання обчислень та поширюється на широкий клас алгоритмів. Проте застосування цієї парадигми для розв'язання еволюційних задач зумовлює появу принципової проблеми – проблема постановки крайових умов для підобластей. Як варіант її вирішення вдаються до постановки обмінних граничних умов на границях підобластей (підобласті перекриваються), умов узгодження (підобласті не перекриваються) чи постановки цих умов із явного шару з подальшим інтегруванням [5, 6]. Звісно, в цьому разі або з'являється певна залежність обчислень у підобластях від наявних на поточний момент даних, або використовується ітераційний підхід до розв'язання чи здійснюються додаткові обчислення граничних умов (неітераційні). Ці фактори призводять до зниження ефективності розпаралелення. Тому зведення до мінімуму вагової частки додаткових витрат є пріоритетним напрямком оптимізації чисельного розв'язання задачі.

Поєднаємо алгоритмічне розпаралелення задачі із геометричним таким чином, щоб запобігти врахуванню крайових умов усередині розрахункової області. Для цього задамо множину покоординатних декомпозицій $\{\Omega^{(k)} : k = \overline{1, p}\}$, яка покриває усі просторові напрямки. Зокрема, можливо, що деякі декомпозиції $\Omega^{(k)}$ відповідають відразу кільком напрямкам. Нехай ко-

жне розбиття $\Omega^{(k)}$ складається із s рівновеликих підобластей. Поставимо у відповідність кожній задачі із (4)

$$\frac{1}{p} \frac{\partial u_{\ell}^{(i)}}{\partial t} + \Lambda_{\ell}^{(i)} u_{\ell}^{(i)} = f_{\ell}^{(i)},$$

$$t \in [qm\tau; (q+1)m\tau], \quad (9)$$

де $i = \overline{1, r}$, $\ell = \overline{1, p}$,

декомпозицію розрахункової області $\Omega^{(\ell)}$. Це забезпечить розщеплення задачі (9) на підзадачі, що визначені у підобластях із $\Omega^{(\ell)}$:

$$\frac{1}{p} \frac{\partial u_{j\ell}^{(i)}}{\partial t} + \Lambda_{j\ell}^{(i)} u_{j\ell}^{(i)} = f_{j\ell}^{(i)},$$

$$t \in [qm\tau; (q+1)m\tau] \quad x \in \Omega_j^{(\ell)}, \quad (10)$$

де $\Lambda_{j\ell}^{(i)}$, $f_{j\ell}^{(i)}$ – звуження відповідного оператора та функції на область $\Omega_j^{(\ell)} \subseteq \Omega$, $\ell = \overline{1, p}$, $j = \overline{1, s}$, $i = \overline{1, r}$.

Зрозуміло, що задачі (10) є повноцінними, оскільки початковими умовами для них є відповідна частина результату усереднення (5), або власний результат попереднього обчислення. Внаслідок підбору покоординатної декомпозиції $\Omega^{(\ell)}$ до операторів $\Lambda_{\ell}^{(i)}$, $i = \overline{1, r}$, а також її особливості, підобласть залишилася цілою вздовж дії оператора. Отже, необхідні лише крайові умови для граней $x_{\ell} \in \{0, 1\}$, які є межами розрахункової області Ω .

Геометричне розпаралелювання також застосовне і до усереднення (5). Оберемо для цього, наприклад, декомпозицію $\Omega^{(1)}$, тоді

$$y_j^{(i)}((q+1)m\tau, x) = \frac{1}{p} \sum_{\ell=1}^p u_{\ell}^{(i)}((q+1)m\tau, x),$$

$$x \in \Omega_j^{(1)}, \quad i = \overline{1, r}, \quad (11)$$

де u_{ℓ} – скомпонований із відповідних векторів $u_{j\ell}$ згідно (10), $j = \overline{1, s}$.

Остаточний результат формується компонуванням $y^{(i)}((q+1)m\tau, x)$ із векторів, що отримані за формулою (11).

Кількісні показники паралельної реалізації

Для кількісної оцінки ефективності реалізації системи (6) – (8) із використанням одночасного розпаралелювання за рівняннями, напрямками (9) та підобластями (10) – (11) використаємо модель паралельної машини PRAM. Для теоретичного аналізу алгоритму вона є цілком прийнятною та широко використовується [1, 4].

Припустимо, що кожна декомпозиція складається з однакової кількості рівновеликих елементів: $\Omega^{(k)} = \{\Omega_i^{(k)} : i = \overline{1, s}\}$, $k = \overline{1, p}$. Введемо такі позначення:

a – середній час, що витрачається одним процесором на здійснення одного кроку за часом τ для всієї просторової області Ω за формулою (4);

b – середній час, що витрачається одним процесором на здійснення усереднення для всієї просторової області Ω за формулою (5).

Часова складність для паралельної реалізації на rps процесорах одного обчислення для задачі за формулами (10) – (11) становить

$$T_{rps} = \frac{ma + b}{s},$$

а у разі послідовного виконання цих дій на одному процесорі, маємо

$$T_1 = r(pma + b).$$

Загальний час розв'язання задачі для обох випадків становитиме відповідно

$$\theta_{rps} = \frac{N}{m} T_{rps} = \frac{N}{s} \left(a + \frac{b}{m} \right),$$

$$\theta_1 = \frac{N}{m} T_1^{(m)} = Nr \left(pa + \frac{b}{m} \right).$$

Знаходимо коефіцієнт мультипроцесорного прискорення

$$S_{rps} = \frac{\theta_1}{\theta_{rps}} = \frac{sr(pcm + 1)}{cm + 1} \leq srp,$$

де $c = \frac{a}{b} \gg 1$.

Ефективність використання процесорів дорівнює

$$E_{rps} = \frac{S_{rps}}{rps} = \frac{pcm + 1}{pcm + p} \leq 1.$$

Часова ціна алгоритму складає

$$C_{rps} = rps\theta_{rps} = \frac{N}{m} rp(ma + b).$$

Очевидно, що має місце нерівність

$$p\theta_1 = \frac{N}{m} rp(pma + b) \geq \frac{N}{m} rp(ma + b) = C_{rps}.$$

Тому виконується оцінка $C_{rps} = O(\theta_1^{(m)})$, яка доводить оптимальність алгоритму.

Чисельний експеримент

Зауважимо, що нас цікавить чисельна складність задачі, а не її фізична чи математична цінність. Тому розглядалася проста тестова тривимірна початково-крайова задача конвективної дифузії, що визначена в області $\Omega = [0; 1]^3$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 v^{(k)} \frac{\partial u}{\partial x_k} = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu^{(k)} \frac{\partial u}{\partial x_k} \right) + f, \quad x \in \Omega, \quad t \in [0; 1],$$

$$u(0, x) = A \exp \left(- \sum_{k=1}^3 x_k^2 \right), \quad x \in \Omega,$$

$$u(t, x) = u_A(t, x), \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in [0; 1],$$

де $A = const > 0, v^{(k)} = const > 0, \mu^{(k)} = const > 0$,

$$f(t, x) = u(t, x) \sum_{k=1}^3 \mu^{(k)} \left(1 - 4(x_k - v^{(k)}t)^2 \right).$$

Відомий аналітичний розв'язок цієї задачі

$$u_A(t, x) = A \exp \left(- \sum_{k=1}^3 \left(t\mu^{(k)} + (x_k - v^{(k)}t)^2 \right) \right),$$

який було використано для визначення точності чисельного розв'язку.

Тестова задача реалізована за допомогою модифікованого адитивно-усередненого розщеплення та геометричного розпаралелення згідно формул (10) – (11). Для порівняння та оцінки результатів паралельної реалізації також здійснено послідовне розв'язання задачі. В обох випадках до уваги бралися лише витрати часу, що пов'язані безпосередньо з обчисленнями.

Всі експерименти здійснено за таких значень параметрів:

$$\Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x_3 = 0.033,$$

$$A = 1, \nu^{(k)} = 0.5, \mu^{(k)} = 0.03.$$

Величина кроку за часом варіювалася для досягнення заданої точності розв'язку. Декомпозиційні множини, що покривають всі просторові напрямки, задавалися згідно

На рис. 3, б, в, г чітко простежується тенденція до зменшення часових витрат на розв'язання задачі (за фіксованої точності) зі збільшенням кількості підобластей у декомпозиціях. Одночасно відбувається певне їх зростання з ростом значення параметра m .

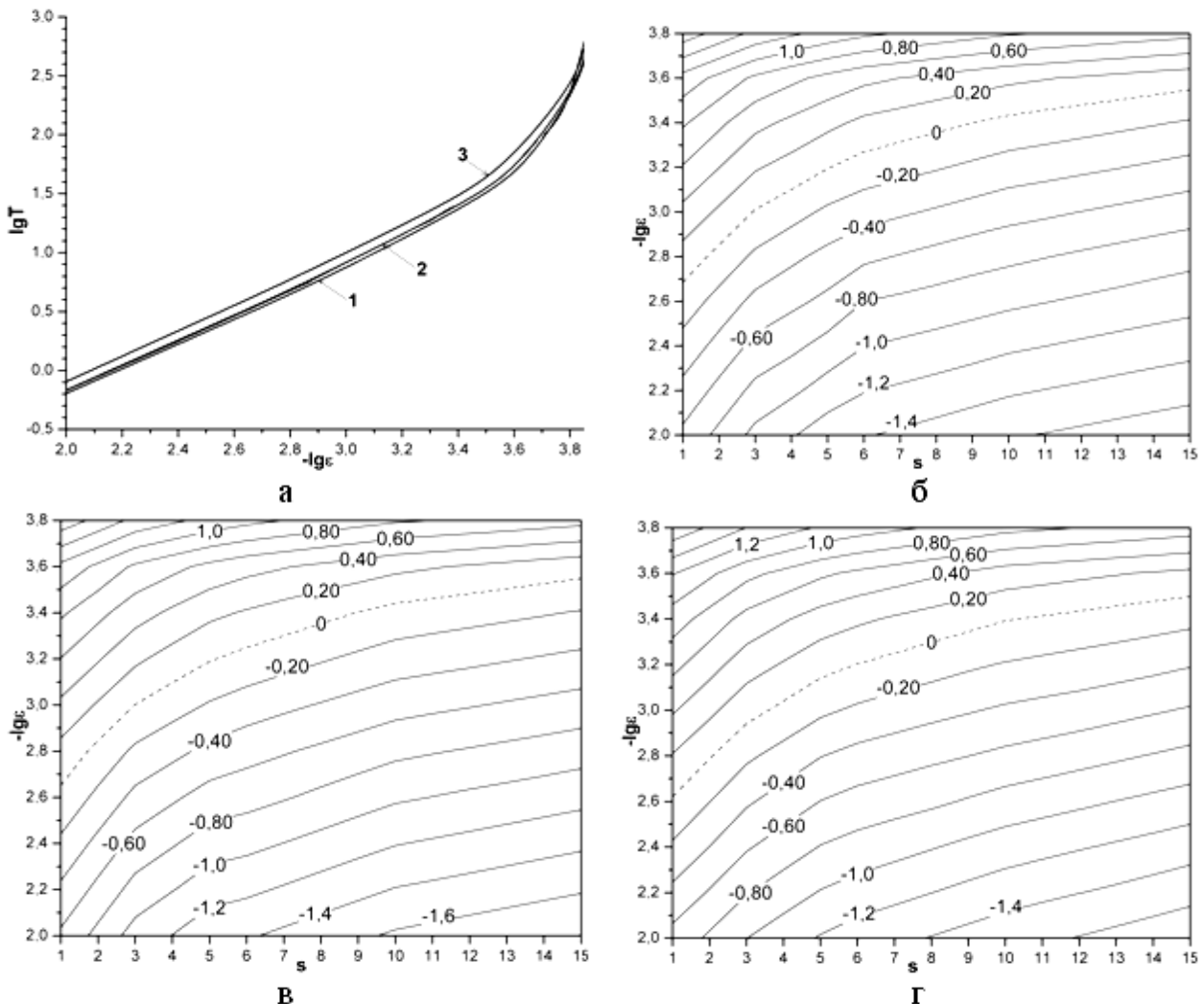


Рис. 3. Залежність витрат часу $\lg T$ від точності розв'язку $-\lg \varepsilon$:

послідовна реалізація: а) 1 $m = 1$, 2 $m = 2$, 3 $m = 4$,

паралельна реалізація (s – кількість підобластей); б) $m = 1$; в) $m = 2$; г) $m = 4$

рис. 2 та мали однакову кількість рівновеликих підобластей.

Експеримент здійснено на гомогенній ЕОМ, що містить 24 процесори Dual-Core Intel Itanium 2 Series 9000 із частотою 1.6 ГГц та архітектурою IA64. Система доступу до пам'яті NUMALink 4; топологія доступу fat-tree; загальний обсяг оперативної пам'яті становить 96 ГБ. Паралельна реалізація задачі здійснювалася засобами бібліотеки MPI. Результати експерименту подані у графічній формі на рис. 3.

Зміна лінійного тренду різким градієнтом графіків на рис. 3, а та згущення ізолій у верхній частині рис. 3, б, в, г пояснюється наближенням чисельного розв'язку до межі точності, яка визначається похибкою просторової дискретизації.

З метою перевірки формули для мультипроцесорного прискорення виберемо, наприклад, часові витрати на розв'язання задачі в точці $s=10, -\lg \varepsilon=3.0$ на графіках рис. 3, б, в, г та порівняємо їх із відповідними значеннями на рис. 3, а.

Маємо, що для рис. 3, б $\lg T = -0.55$, для рис. 3, в $\lg T = -0.5$, для рис. 3, г $\lg T = -0.45$. Відповідні значення $\lg T$ на рис. 3, а становлять: 0.85, 0.9 та 1.0. Звідси знаходимо коефіцієнт прискорення: для $m=1$ та $m=2$, $S = 25.1$, для $m=4$, $S = 28.2$. Як і очікувалося, значення коефіцієнтів обмежені числом $10 \cdot 1.3 = 30$.

Висновки

Запропонований альтернативний підхід до декомпозиції області розв'язання задачі. Поєднання покоординатної декомпозиції із алгоритмічним розщепленням задачі за просторовими напрямками дозволяє отримати сукупність підзадач, які не потребують жодних узгоджень розв'язків через обміни даними чи через умови спряження на спільних границях підобластей. Підзадачі виявляються абсолютно незалежними в межах кількох кроків за часом завдяки застосуванню модифікованого адитивно-усередненого методу розщеплення. Ця властивість дозволяє підвищити ефективність обчислень оскільки зменшуються витрати часу на додаткові дії.

Наведено кількісні оцінки розпаралелювання чисельного алгоритму для випадку реалізації системи еволюційних рівнянь за допомогою PRAM-моделі. Вони свідчать про оптимальність паралельного алгоритму та його широкі можливості для ефективного розв'язання задачі. Всі теоретичні результати цілком узгоджуються з проведеним чисельним експериментом.

1. *Миллер Р., Боксер Л.* Последовательные и параллельные алгоритмы. Общий подход / Пер. с англ. А.В. Козвонина – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2006. – 406 с.
2. *Прусов В.А., Дорошенко А.Ю.* Моделирование природных і техногенних процесів в атмосфері. – К.: Наук. думка, 2006. – 542 с.
3. *Дорошенко А.Ю.* Лекції з паралельних обчислювальних систем // Методичний посібник. – К.: Видавничий дім „КМ Академія”, 2003. – 44 с.

4. *Воеводин В.В.* Математические модели и методы в параллельных процессах. – М.: Наука, 1986. – 269 с.
5. *Самарский А.А., Вабищевич П.Н.* Аддитивные схемы для задач математической физики. – М.: Наука, 2001. – 320 с.
6. *Самарский А.А., Вабищевич П.Н., Матус П.П.* Разностные схемы с операторными множителями. – Минск: ЦОТЖ, 1998. – 442 с.
7. *Прусов В.А., Дорошенко А.Е., Черныш Р.И.* Метод численного решения многомерной задачи конвективной диффузии // Кибернетика и системный анализ. – 2009. – № 1. – С. 100 – 107.

Отримано 04.12.2008

Про авторів:

Черниш Руслан Іванович,
старший науковий співробітник
Українського гідрометеорологічного
інституту,

Тирчак Юрій Мар'янович,
науковий співробітник Інституту
програмних систем НАН України,

Іваненко Павло Андрійович,
студент 6-го курсу
Київського національного
університету імені Тараса Шевченка.

Місце роботи авторів:

Український гідрометеорологічний
інститут
03028, Київ, проспект Науки, 37,
E-mail: chernysh@uhmi.org.ua

Інститут програмних систем НАН України.
03187, Київ, проспект Академіка Глушкова,
40, корп. 5,
E-mail: chacke@gmail.com

Київський національний університет
імені Тараса Шевченка,
01033, Київ, вул. Володимирська 60.
E-mail: paiv@ukr.net