УДК 532.7:004.75(045)

Глазок О.М., к.т.н..

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ РОЗВ'ЯЗАННЯ ГІДРОДИНАМІЧНОЇ ЗАДАЧІ У РОЗПОДІЛЕНОМУ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Національний авіаційний університет

Розглядаються складові елементи математичної моделі задачі призначення обчислювальних робіт при математичному моделюванні течії рідини на вузли розподіленої обчислювальної системи. Використання цієї моделі дозволяє оптимізувати використання обчислювальних ресурсів.

Ключові слова: математична модель, система різницевих рівнянь,розріджені структури даних.

Ряд наукових і технічних задач, зокрема задачі математичного моделювання розподілених фізичних систем, зводяться до великих розріджених систем алебраїчних або диференціальних рівнянь. Алгоритми обробки та розв'язання таких систем рівнянь суттєво використовують властивість розрідженості вхідної системи.

Постановка проблеми

Потреби предметної області, до задач якої застосовують методи обчислювальної динаміки рідин, включають розв'язання задач великої розмірності для площинних та просторових областей складних геометричних форм. Велика розмірність задач приводить до необхідності мати значні обчислювальні потужності для їх розв'язання. Сучасними напрямками розв'язання цієї проблеми є виконання розподілених обчислень на апаратній основі багатоядерних комп'ютерних систем, використання графічних процесорів, або набору комп'ютерів, об'єднаних у розподілену обчислювальну систему. Актуальною науковою задачею є організація ефективного використання цих обчислювальних ресурсів. У даній статті розглядається ця задача в контексті прикладної задачі обчислювальної гідродинаміки.

Аналіз досліджень і публікацій

В якості модельної використано гідродинамічну задачу, розглянуту у статті [1]. Залежно від специфіки досліджуваного технічного об'єкту, розмірність задачі може бути такою, що зробить неможливим її розв'язання за прийнятний час на однопроцесорній системі. Система різницевих рівнянь, до якої зводиться згадана задача, безперечно може бути віднесена до розріджених, оскільки, незалежно від загальної розмірності задачі, кожне з рівнянь цієї системи має фіксовану кількість доданків – від 1 до 12.

Для обробки та розв'язання таких систем рівнянь розробляються спеціальні алгоритми та структури даних, які суттєво використовують властивість розрідженості вхідної системи. Наприклад, для зберігання даних про розріджені матриці першого порядку – координатний формат, формат «стиснення розрідженого рядка» (CSR), формати, що використовують патерни розрідженості, та інші [2].

Чисельні методи розв'язання розріджених систем рівнянь загалом поділяють на прямі та ітераційні. Прямі методи, як наприклад метод Гауса розв'язання систем лінійних рівнянь, LU-факторизація та інші, отримують точний розв'язок системи рівнянь на основі обмеженої кількості операцій, яку можна визначити наперед. Ітераційні методи дозволяють за рахунок повторного виконання однотипних обчислень отримати послідовні наближення до точного розв'язку системи. У нескладних практичних застосуваннях часто надають перевагу прямим методам через їх стійкість та передбачуваність їх поведінки. Однак при збільшенні розміру систем, які необхідно розв'язувати, прямі методи стають неефективними через явище, яке для випадку лінійних систем отримало назву «заповнення розрідженої матриці» [3, 4]. При лінійному комбінуванні рядків матриці в ході прямого ходу метода Гауса, виконанні факторизації, тощо, перетворення матриці системи призводить до того, що матриця поступово стає все менш розрідженою. Але структури даних, в яких зберігалися коефіцієнти системи, початково були пристосовані до особливостей вхідної розрідженої системи, і тому нових даних, отриманих після її перетворення, зберігати не можуть; отже, в ході виконання алгоритму перетворення ці структури даних доводиться піддавати змінам, і обсяг їх при цьому суттєво зростає.

Тому для розв'язання розріджених систем рівнянь великої розмірності активно використовуються ітераційні методи, зокрема, градієнтні методи, методи, основані на підпросторах Крилова у поєднанні з методами неповної факторизації [5], а також багатосіткові методи, перевагою яких є добра масштабованість [6, 7].

Недоліком ітераційних методів пошуку розв'язку є те, що для довільних систем рівнянь збіжність послідовності отримуваних наближень до точного розв'язку системи не гарантована. Однак, якщо збіжності процесу вдається досягти, то для великих систем потреби у ресурсах для застосування ітераційних методів виявляються меншими, ніж для застосування прямих методів. Крім того, ітераційні методи позбавлені недоліків типу заповнення розріджених інформаційних структур, оскільки ітераційні методи, на відміну від прямих, не змінюють структуру та коефіцієнти системи; вони використовують ці дані тільки в режимі «для читання», в контексті обчислення нев'язок, наприклад, знаходження векторно-матричного добутку.

Ціль статті

Ціль статті полягає у розгляді складових частин математичної моделі задачі про призначення на вузли мережі обчислювальних робіт з чисельного розв'язання системи алгебраїчних та диференціальних рівнянь, породжених математичною моделлю руху рідини. Метою вказаної математичної моделі є оптимізація використання ресурсів розподіленої обчислювальної системи.

Основна частина

Розглянемо процес чисельного розв'язання двовимірної гідродинамічної задачі [1], використовуючи опис руху рідини рівняннями Нав'є-Стокса у наступній формі:

$$\frac{\partial U_x}{dt} + \frac{\partial}{\partial x}(U_x U_x) + \frac{\partial}{\partial y}(U_y U_x) = = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x} + \nu\left(\frac{\partial^2 U_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial y^2}\right); \qquad (1)$$

$$\frac{\partial U_y}{dt} + \frac{\partial}{\partial x}(U_x U_y) + \frac{\partial}{\partial y}(U_y U_y) = = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial y} + \nu\left(\frac{\partial^2 U_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_y}{\partial y^2}\right); \qquad (2)$$

$$\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} = 0, \qquad (3)$$

де $U_x = U_x(x, y)$ та $U_y = U_y(x, y)$ – компоненти вектора швидкості за координатами x та y відповідно; $P = P(x,y)$ – тиск; ν – в'язкість рідини; ρ – щільність рідини.

Для компактності запису введемо позначення

$$U_x(x, y) = f(x, y);\ U_y(x.y) = g(x, y)\ . \qquad (4)$$

З урахуванням позначень (4) запишемо різницеву схему для системи (1)–(3) на прямокутній розрахунковій сітці:

$$2f_{i,j}\frac{f_{i+1,j}-f_{i,j}}{\Delta_x}+g_{i,j}\frac{f_{i,j+1}-f_{i,j}}{\Delta_y}+ f_{i,j}\frac{g_{i,j+1}-g_{i,j}}{\Delta_y}+\frac{1}{\rho}\frac{P_{i+1,j}-P_{i,j}}{\Delta_x}- \nu\frac{f_{i+1,j}-2f_{i,j}+f_{i-1,j}}{\Delta_x^{2}}- \nu\frac{f_{i,j+1}-2f_{i,j}+f_{i,j-1}}{\Delta_y^{2}}=0\ ; \qquad (5)$$

$$g_{i,j}\frac{f_{i+1,j}-f_{i,j}}{\Delta_x}+f_{i,j}\frac{g_{i+1,j}-g_{i,j}}{\Delta_x}+ 2g_{i,j}\frac{g_{i,j+1}-g_{i,j}}{\Delta_y}+\frac{1}{\rho}\frac{P_{i,j+1}-P_{i,j}}{\Delta_y}- \nu\frac{g_{i+1,j}-2g_{i,j}+g_{i-1,j}}{\Delta_x^{2}}- \nu\frac{g_{i,j+1}-2g_{i,j}+g_{i,j-1}}{\Delta_y^{2}}=0\ ; \qquad (6)$$

$$\frac{f_{i+1,j}-f_{i,j}}{\Delta_x}+\frac{g_{i,j+1}-g_{i,j}}{\Delta_y}=0\ ,, \qquad (7)$$

де $f_{i,j}$, $g_{i,j}$, $P_{i,j}$ – значення функцій $f(x,y)$, $g(x,y)$, $P(x,y)$ в точці розрахункової сітки з номером (i,j) ; $\Delta_x>0$ та $\Delta_y>0$ – кроки розрахункової сітки за координатами x та y відповідно. У рівняннях системи (5)–(7) використано порядок індексів, що відповідає алфавітному розташуванню змінних (перший індекс відповідає координаті x, другий – координаті y).

В результаті простих математичних перетворень з рівнянь (5)–(7) отримаємо:

$$2\Delta_x\Delta_y^{2}f_{i,j}f_{i+1,j}-2\Delta_x\Delta_y^{2}f_{i,j}f_{i,j}+ \Delta_x^{2}\Delta_y f_{i,j+1}g_{i,j}+ \Delta_x^{2}\Delta_y f_{i,j}g_{i,j+1}-2\Delta_x^{2}\Delta_y f_{i,j}g_{i,j}+ \Delta_x\Delta_y^{2}\frac{1}{\rho}P_{i+1,j}-\Delta_x\Delta_y^{2}\frac{1}{\rho}P_{i,j}- \nu\Delta_y^{2}f_{i+1,j}+2\nu\left(\Delta_x^{2}+\Delta_y^{2}\right)f_{i,j}-\nu\Delta_y^{2}f_{i-1,j}- \nu\Delta_x^{2}f_{i,j+1}-\nu\Delta_x^{2}f_{i,j-1}=0\ ; \qquad (8)$$

$$\Delta_x\Delta_y^{2}f_{i+1,j}g_{i,j}+ \Delta_x\Delta_y^{2}f_{i,j}g_{i+1,j}-2\Delta_x\Delta_y^{2}f_{i,j}g_{i,j}+ 2\Delta_x^{2}\Delta_y g_{i,j}g_{i,j+1}-2\Delta_x^{2}\Delta_y g_{i,j}g_{i,j}+ \frac{1}{\rho}\Delta_x^{2}\Delta_y P_{i,j+1}-\frac{1}{\rho}\Delta_x^{2}\Delta_y P_{i,j}- \nu\Delta_y^{2}g_{i+1,j}+2\nu\left(\Delta_x^{2}+\Delta_y^{2}\right)g_{i,j}-\nu\Delta_y^{2}g_{i-1,j}- \nu\Delta_x^{2}g_{i,j+1}-\nu\Delta_x^{2}g_{i,j-1}=0\ ; \qquad (9)$$

$$\Delta_y f_{i+1,j}-\Delta_y f_{i,j}+\Delta_x g_{i,j+1}-\Delta_x g_{i,j}=0\,. \qquad (10)$$

Для виконання базових оцінок розглянемо найпростішу задачу про потік рідини у каналі прямокутного перерізу без перешкод. Нехай бокові стінки каналу паралельні осі координат *Ox*, вхідний та вихідний перерізи паралельні осі координат *Oy*. Введемо обчислювальну сітку, що має N_x вузлів вздовж осі *Ox* та N_y вузлів вздовж осі *Oy*. (Рис. 1.)

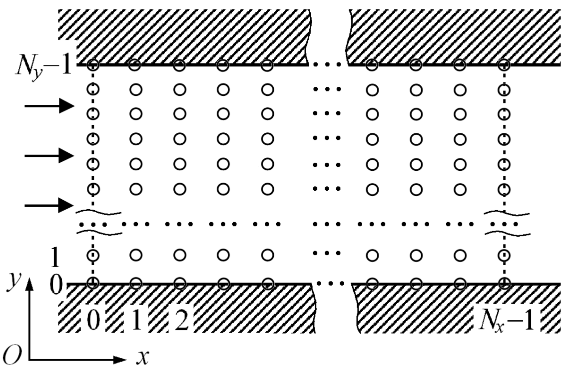

Рис. 1. Нумерація вузлів сітки у прямокутній області.

Граничні умови задачі мають такий вигляд:

1) для вхідного перерізу:

$$P_{i,j}=P_1=const,\ i=0,\ j=\overline{0..\left(N_y-1\right)}; \qquad (11)$$

2) для вихідного перерізу:

$$P_{i,j}=P_2=const,\ i=0,\ j=\overline{0..\left(N_y-1\right)}; \qquad (12)$$

3) для верхньої (за зображенням рис. 1) бокової стінки:

$$f_{i,j}=0,\ i=\overline{0..\left(N_x-1\right)},\ j=N_y-1 \qquad (13)$$

(умова прилипання);

$$g_{i,j}=0,\ i=\overline{0..(N_x-1)},\ j=N_y-1 \qquad (14)$$

(умова нерозривності рідини біля стінки);

4) для нижньої (за зображенням рис. 1) бокової стінки:

$$f_{i,j}=0,\ i=\overline{0..(N_x-1)},\ j=0 \qquad (15)$$

(умова прилипання);

$$g_{i,j}=0,\ i=\overline{0..(N_x-1)},\ j=0 \qquad (16)$$

(умова нерозривності рідини біля стінки).

З міркувань можливості реалізації наведених скінченно-різницевих співвідношень для решітки, зображеної на рис. 1, можна отримати такі висновки:

1. Співвідношення (8) та (9), що містять другі різниці величин за координатними напрямками *Ox* та *Oy*, можуть бути записані тільки у внутрішніх вузлах решітки, і тому кожне з них породжує $(N_x-2)(N_y-2)$ рівнянь щодо невідомих величин системи.

2. Співвідношення (10) містить перші різниці величин за координатними напрямками *Ox* та *Oy*, і воно може бути записане у всіх вузлах решітки, окрім вузлів верхньої бокової границі та правого перерізу. Тому співвідношення (10) породжує $(N_x-1)(N_y-1)$ рівнянь щодо невідомих величин системи;

3. Кожне з співвідношень (11) та (12) породжує по N_y рівнянь щодо невідомих величин системи;

4. Кожне з співвідношень (13) – (16) породжує по N_x рівнянь щодо невідомих величин системи;

5. Загальна кількість рівнянь, породжених співвідношеннями (8) – (16), дорівнює

$$\begin{aligned}&2(N_x-2)(N_y-2)+(N_x-1)(N_y-1)+2N_y+4N_x=\\&=2N_xN_y-4N_x-4N_y+8+N_xN_y-N_x-N_y+1+\\&+4N_x+2N_y=3N_xN_y-N_x-3N_y+9. \qquad (17)\end{aligned}$$

Величниа (17) менша за кількість невідомих величин системи $(3N_xN_y)$. Це може свідчити про можливість існування сімейств розв'язків, що задовольняють заданим умовам. Для виділення одного з цих розв'язків можна доповнити систему додатковими співвідношеннями; наприклад, задати в ряді точок умови

$$g_{i,j}=0,\ (i,j)\in\{(i,j)_k\}\ . \qquad (18)$$

Розглянемо задачу розподілу обчислювальних задач між хостами при уточненні розв'язку системи рівнянь (8) – (16), (18). Можна виділити наступні причини, що мотивують до організації розподілених обчислень:

- велика розмірність задачі, що може бути умовою для отримання розв'язків з достатньою (з погляду замовника) точністю наближення до реального процесу, або навіть необхідною умовою адекватності моделі;
- необхідність підтримувати зберігання чисел із великою кількістю значущих цифр (велика розрядність значень змінних), що може бути умовою збіжності ітераційного процесу з огляду на можливі ефекти втрати значень при роботі з слабко визначеними системами рівнянь;
- можливість розпаралелювання операцій обчислення окремих арифметичних виразів у складі системи рівнянь при поточних значеннях змінних;
- можливість розпаралелювання окремих операцій чисельного методу, що застосовується.

Обсяг обчислювальних операцій при розв'язанні задачі може бути оцінений на основі даних, наведених у табл. 1.

Таблиця 1

Кількість арифметичних операцій, необхідних для розрахунку лівих частин рівнянь (8) – (16), (18)

Рівняння	Кількість операцій	
	з пам'яттю	арифметичних
(8)	30	28
(9)	30	28
(10)	9	7
(11)–(17)	1	0

Припустимо, що уточнення розв'язку ведеться чисельним методом найшвидшого спуску. Застосування цього чисельного методу включає в себе почергове повторення двох етапів.

На *першому етапі ітераційного процесу* визначаємо вектор градієнта функції нев'язки системи рівнянь (8) – (16), (18), на основі якого можна визначити оптимальний напрямок руху для застосування на другому етапі.

Компонентами вектора градієнта нев'язки є частинні похідні нев'язки за компонентами вектора невідомих величин системи. Кількість цих змінних дорівнює $3N_xN_y$, тому цю нев'язку необхідно б було розрахувати $3N_xN_y$ разів. (Вважаємо, що значення нев'язки у базовій точці даної ітерації уже відоме, оскільки воно було знайдене на другому етапі попередньої ітерації. Скорочення кількості змінних на підставі граничних умов поки не будемо брати до уваги, вважаючи, що кількість граничних точок задачі значно менша за кількість внутрішніх точок розрахункової області, а також беручи до уваги, що в інших задачах граничні умови можуть мати і більш складну форму.) Однак цей обсяг розрахунків можна суттєво зменшити, врахувавши, що при зміні значення однієї з невідомих змінних змінюється нев'язка лише кількох рівнянь системи, до яких ця змінна входить.

Якщо розподіл навантаження між обчислювальними вузлами виконано шляхом поділу рівнянь на групи та розподілу груп рівнянь між вузлами, то доцільним підходом буде наступний: або одноразово передати алгоритм визначення кроків за змінними на кожен обчислювальний вузол, або ж на початку першого етапу кожної ітерації передати на кожен вузол дані про поточний базовий вектор та вектор кроків; кожен вузол самостійно обчислює нев'язки, що відповідають виконанню кроку за кожною із змінних, і передає отримані вектори нев'язок на керуючий вузол.

Більш доцільним з погляду організації операцій першого етапу виглядає розподіл рівнянь між обчислювальними вузлами на основі визначених груп змінних. Тобто, на кожному обчислювальному вузлі будуть зберігатися і оброблятися відомості про всі рівняння, що містять змінні, які входять до «сфери відповідальності» даного вузла. Недоліком цього підходу є деяка надмірність, що виявляється у двох аспектах.

Введемо наступні позначення:

V – множина змінних системи (8) – (16), (18);

V_i – підмножина змінних системи (8) – (16), (18), що є сферою відповідальності (за змінними) *i*-го обчислювального вузла, $i = 1..K$;

$$\bigcup_{i=1..K} V_i = V \,; \quad \forall i, j : V_i \bigcap V_j = \varnothing .$$

E_i – множина рівнянь системи (8) – (16), (18), які містять змінні, що входять до множини V_i;

W_i – множина змінних, що входять до рівнянь множини E_i.

Перший аспект надмірності полягає в тому, що $\exists\, i, j : E_i \bigcap E_j \neq \varnothing$, тобто сумарна кількість рівнянь, що будуть зберігатися і оброблятися на обчислювальних вузлах, більша, ніж кількість рівнянь системи (8) – (16), (18), оскільки деякі рівняння будуть повторно зберігатися на різних обчислювальних вузлах.

Другий аспект надмірності полягає в тому, що для виконання першого етапу ітераційного процесу кожен (*i*-й) обчислювальний вузол повинен отримати інформацію про значення змінних з множини W_i. З системи (8) – (16), (18) видно, що $W_i \supset V_i$; внаслідок цього інформацію про поточні значення змінних та кроки пошуку необхідно буде розсилати з командного центру на обчислювальні вузли з частковим її дублюванням.

Метою *другого етапу* є знаходження оптимальної величини переміщення у попередньо визначеному оптимальному напрямку. Цей етап, в свою чергу, також має форму пошукового ітераційного процесу: за певним алгоритмом обирається крок переміщення, проводиться розрахунок координат нової точки і визначення відповідної нев'язки, після чого крок коригується. Процес повторюється, доки не буде знайдено локальний оптимум функції нев'язки. Очевидно, немає сенсу змінювати розподіл рівнянь між вузлами при переході від першого до другого етапу, тому все сказане вище про надмірність на першому етапі залишається вірним і для другого. При цьому обчислювальне навантаження з пошуку оптимального кроку можна розпаралелити ціною деякої надмірності операцій, випробовуючи одночасно два або більше різних кроки з однієї базової точки.

Таким чином, елементами математичної моделі призначення обчислювальних робіт для задачі, що розглядається, будуть відомості про операції на вузлах, про операції обміну даними між вузлами, часові характеристики виконання окремих операцій, включаючи імовірнісні характеристики, пов'язані з контекстом роботи обчислювальних вузлів та каналів зв'язку, а також згадані вище параметри обчислювальної задачі – розмірність, розрядність, необхідну точність розв'язків.

Висновки

В статті розглянуто складові елементи математичної моделі задачі призначення обчислювальних завдань з математичного моделювання течії рідини на вузли розподіленої обчислювальної системи. Використання цієї моделі дозволяє оптимізувати використання обчислювальних ресурсів.

Можливим та необхідним напрямком подальших досліджень є деталізація запропонованої математичної моделі з урахуванням трьох можливих варіантів організації обміну даними між вузлами, а також властивостей каналів обміну даними «клієнт-клієнт», «клієнт-сервер», «сервер-сервер» та обчислювальних потужностей кожного з них:

1. Однорангова мережа клієнтів, всі обмінюються інформацією з усіма. (Необхідно розробити оптимальний алгоритм колективного прийняття рішень клієнтами в умовах неповноти інформації на кожному з вузлів.)

2. Один командний сервер, який збирає дані з усіх клієнтів, приймає рішення про подальші дії та видає клієнтам відповідні команди;

3. Група командних серверів, які розв'язують цю задачу колективно. (Необхідно знайти оптимальну структуру поєднання командних серверів між собою та з клієнтами, та розробити оптимальний алгоритм колективного прийняття рішень командними серверами.)

Список літератури

1. Глазок О.М. Математичний метод розв'язання задач обчислювальної гідродинаміки /О. М. Глазок // Наукоємні технології. – 2014. – №2. – С. 168-171.

2. Старовойтов С.В. Формат Sky-line для хранения и обработки разреженных матриц нерегулярной структуры для численного решения СЛАУ/ С.В. Старовойтов //Вестник Балтийского фед. ун-та им. И. Канта. – 2008. – № 10. – С. 84-94.

3. Марчевский И.К. Анализ эффективности итерационных методов решения систем линейных алгебраических уравнений, реализованных в пакете OpenFOAM /И.К.Марчевский, В.В.Пузикова. //Труды Ин-та системного программирования РАН.

4. Davis T. Direct Methods for Sparse Linear Systems (Fundamentals of Algorithms) / Timothy A. Davis. – Philadelphia: SIAM, 2006. – 217 p.

5. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems, 2-nd ed. /Yousef Saad. – Philadelphia: SIAM, 2003. – 528 p.

6. Краснопольский Б.И. Алгоритмические особенности создания многосеточного решателя СЛАУ на вычислительных системах с графическими ускорителями /Б.И. Краснопольский, А.В. Медведев. //Вестник Нижегородского ун-та им. Н.И. Лобачевского. – 2014. – № 2 (1). – С. 210–217.

7. Trottenberg U. Multigrid /U. Trottenberg, C.W. Oosterlee, A. Schuller. – N.Y.: Academic Press, 2001. – 631 p.