

Численное решение задачи плоской конвекции Дарси на компьютере с распределенной памятью*

В.Н. ГОВОРУХИН, И.В. ШЕВЧЕНКО

Ростовский государственный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия

e-mail: vgov@math.rsu.ru, ishevtch@uic.rnd.runnet.ru

A parallel algorithm is considered for the numerical solution of the problem of plane filtration convection based on Galerkin and Runge—Kutta methods using a distributed-memory computer — nCube 2S. Several methods of data distribution are shown, the assessment of computational and spatial complexity is presented acceleration and efficiency coefficients are studied. The numerical experiments results are given under various parameter values. Periodic and chaotic modes in the problem of plane filtration convection have been discovered.

Введение

При аппроксимации уравнений в частных производных возникают системы обыкновенных дифференциальных или алгебраических уравнений высокого порядка. Решение таких систем требует больших вычислительных мощностей, предоставляемых параллельными компьютерами. В настоящей работе рассматривается распараллеливание алгоритма решения задачи плоской фильтрационной конвекции (задача Дарси) в прямоугольном контейнере с граничными условиями первого рода.

Интерес к этой задаче обусловлен, с одной стороны, ее непосредственной связью с реальными физическими процессами, изучение которых в настоящее время чрезвычайно актуально, и, с другой, рядом новых математических явлений. Так Д.В. Любимовым [1] было обнаружено, что в результате первого бифуркационного перехода при возникновении конвективных потоков в подогреваемой снизу пористой среде, заполняющей горизонтальный цилиндр с поперечным сечением произвольной формы, появляется однопараметрическое семейство устойчивых стационарных течений. Существование этого семейства доказано В.И. Юдовичем [2], где им установлена причина такого специфического перехода — наличие у соответствующего дифференциального уравнения нетривиальной косимметрии.

Для анализа поведения жидкости при росте надкритичности приходится прибегать к численному исследованию. В работах [3, 4] методом Галеркина изучены второй бифуркационный переход — возникновение неустойчивости на однопараметрическом семействе — и соответствующие конвективные режимы. В настоящее время актуальным является изучение последующих переходов — возникновение автоколебательных режимов, а также хаотических и третичных стационарных режимов при увеличении интенсивности подогрева.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант No. 99-01-01023.

*© В.Н. Говорухин, И.В. Шевченко, 2001

В [4] показано, что в рассматриваемой задаче могут существовать периодические режимы, появляющиеся при существенном увеличении интенсивности подогрева. При этом, возникает необходимость повышения порядка аппроксимации, что требует использования новых подходов, в том числе применения параллельных алгоритмов.

В настоящей работе для аппроксимации исходных дифференциальных уравнений в частных производных используется метод Галеркина, а для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) высокого порядка — параллельный вариант метода Рунге-Кутты (РК). Традиционным критерием точности вычислений при численном решении уравнений в частных производных является неизменность результата при росте порядка аппроксимации. Результаты всех выполненных вычислений представлены в статье для аппроксимаций различных порядков. Увеличение размерности аппроксимации (порядка галеркинской системы) прекращалось только в случае, если эта процедура приводила к изменению получаемых результатов менее чем на 5%.

Существует большое число публикаций о параллельной реализации метода РК. В [5] приводится теоретический анализ естественного параллелизма семейства методов РК и показано, что использование параллельных методов РК для одного уравнения практически не дает выигрыша в производительности, тогда как их применение для системы ОДУ высокого порядка позволяет существенно увеличить скорость расчета. В работе [6] рассматриваются несколько параллельных вариантов метода РК, проводится анализ эффективности и ускорения, дается теоретическая оценка временной сложности. В работе [7], которая имеет обзорный характер, представлены различные вычислительные схемы метода РК, использующие распараллеливание по времени (одновременное решение системы ОДУ на разных временных шагах), а также по системе (одновременное решение системы ОДУ на одном временном шаге).

В настоящей статье представлены уравнения, описывающие плоскую фильтрационную конвекцию и их аппроксимация с использованием методов Галеркина и РК, приводятся параллельная реализация алгоритма, способы распределения данных и результаты модельных тестов на nCube 2S, а также результаты вычислений при различных значениях фильтрационного числа Рэлея.

Авторы надеются, что эта информация будет полезна исследователям, реализующим метод Галеркина для нестационарных задач математической физики на параллельных компьютерах.

1. Исходные уравнения и их аппроксимация

Рассматривается плоский прямоугольный контейнер D с горизонтальной стороной a и вертикальной стороной b , заполненный пористой средой и насыщенный жидкостью. Уравнения гравитационной конвекции находящейся в контейнере и подогреваемой снизу жидкости, согласно [1, 2], имеют вид

$$\begin{cases} \Delta\psi = \theta_x, \\ \theta_t + \psi_y\theta_x - \psi_x\theta_y = \Delta\theta + \lambda\psi_x. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $\psi(x, y, t)$ — функция тока, $\theta(x, y, t)$ — отклонение температуры от равновесного по вертикали профиля, (x, y) — декартовы координаты на плоскости, t — время, λ — фильтрационное число Рэлея.

На границе прямоугольника заданы краевые условия, соответствующие непроницаемой границе с заданной температурой:

$$\begin{aligned}\psi(t, 0, y) = \psi(t, a, y) = \psi(t, x, 0) = \psi(t, x, b) = 0 \\ \theta(t, 0, y) = \theta(t, a, y) = \theta(t, x, 0) = \theta(t, x, b) = 0\end{aligned}\quad (2)$$

Начальное условие для системы (1),(2) имеет вид $\theta(x, y, t = 0) = \theta_0(x, y)$, где $\theta_0(x, y)$ – заданная функция. Для каждого фиксированного t из первого уравнения (1) ψ можно выразить через θ , решая краевую задачу Дирихле для уравнения Пуассона. В итоге получаем

$$\psi = G\theta_x, \quad (3)$$

(G – соответствующий оператор Грина).

Как было показано в [2], задача (1),(2) обладает косимметрией, которая определяется правой частью равенства (3). Известно, что рассматриваемая система уравнений глобально разрешима, диссипативна и имеет две дискретные симметрии. При малых значениях параметра λ состояние покоя глобально устойчиво. Затем, глобально устойчиво. При первом критическом значении λ_{11} имеет место бифуркация рождения однопараметрического семейства устойчивых стационарных режимов [2]. В работе [4] обнаружено, что существует значение $\lambda_u > \lambda_{11}$, при котором на этом семействе четыре режима теряют устойчивость.

Для аппроксимации задачи (1),(2) применяется метод Галеркина. Решение задачи разыскивается в виде

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \psi_{ij}(t) \phi_{ij}(x, y) \\ \theta &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \theta_{ij}(t) \phi_{ij}(x, y) \\ \phi_{ij} &= \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin \frac{i\pi x}{a} \sin \frac{j\pi y}{b}\end{aligned}\quad (4)$$

Легко видеть, что приближенное решение уравнений вида (4) удовлетворяет граничным условиям (2). Каждая функция $\phi_{ij}(x, y)$ является собственной функцией оператора Лапласа, то есть $\Delta \phi_{ij} = \sigma_{ij} \phi_{ij}(x, y)$, где σ_{ij} – соответствующее собственное значение.

После подстановки (4) в (1) и операций проектирования получим конечномерную систему $N = n^2$ обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) относительно функций θ_{ij}

$$\begin{aligned}\frac{d\theta_{ij}}{dt} &= - \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^n \psi_{kl} \theta_{pq} \left(\frac{\partial \phi_{kl}}{\partial y} \frac{\partial \phi_{pq}}{\partial x} - \frac{\partial \phi_{kl}}{\partial x} \frac{\partial \phi_{pq}}{\partial y}, \phi_{ij} \right) \\ &- \sigma_{ij} \theta_{ij} + \lambda \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \psi_{kl} \left(\frac{\partial \phi_{kl}}{\partial x}, \phi_{ij} \right), \quad i, j = 1, 2, \dots, n.\end{aligned}\quad (5)$$

Коэффициенты ψ_{ij} однозначно выражаются через неизвестные θ_{ij} из аппроксимации первого уравнения системы (1) следующим образом:

$$\psi_{ij} = - \frac{1}{\sigma_{ij}} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \theta_{kl} \left(\frac{\partial \phi_{kl}}{\partial x}, \phi_{ij} \right), \quad i, j = 1, 2, \dots, n. \quad (6)$$

В (5) и (6) скобками обозначено скалярное произведение в гильбертовом пространстве. Число n (определяет порядок аппроксимации) и здесь, вообще говоря, зависит от значений параметров. Для проверки достоверности результатов нами рассматривались аппроксимации различных порядков и проводился их сравнительный анализ (см. ниже). Размерность

системы $N = n^2$ считалась достаточной в том случае, если при увеличении n численные результаты изменялись незначительно.

Полученная система дифференциальных уравнений при всех значениях параметров сохраняет свойство косимметричности, а сама косимметрия определяется правой частью выражения (6). При переходе к конечномерной системе (5) свойство диссипативности исходной системы может нарушаться, что влечет появление решений, стремящихся к бесконечности при $t \rightarrow +\infty$ и больших значениях параметра λ . При росте числа Релея это делает необходимым использование аппроксимаций более высоких порядков.

Задача Коши для системы (5) решалась методом РК, вычислительную схему которого можно представить в виде [8]:

$$\bar{y}(x_0 + h) = \bar{y}_0 + \frac{\bar{q}_1 + 2\bar{q}_2 + \bar{q}_3 + \bar{q}_4}{3} + O(h^5), \quad (7)$$

где $\bar{q}_1 = \frac{h}{2}f_i(x_0, \bar{y}_0)$, $\bar{q}_2 = \frac{h}{2}f_i(x_0 + \frac{h}{2}, \bar{y}_0 + \bar{q}_1)$, $\bar{q}_3 = hf_i(x_0 + \frac{h}{2}, \bar{y}_0 + \bar{q}_2)$, $\bar{q}_4 = \frac{h}{2}f_i(x_0 + h, \bar{y}_0 + \bar{q}_3)$, $i = 1, 2, \dots, N$, h – шаг по времени, \bar{y}_0 – вектор начальных значений.

Прежде чем переходить к описанию параллельных аналогов используемых методов, рассмотрим несколько подходов к решению задачи. Первый состоит в записи системы (5) в явном виде при помощи пакетов аналитических вычислений (ПАВ). Такой способ был реализован в работе [3], где использовался ПАВ *Maple*. К сожалению, при росте порядка аппроксимации возможности пакетов символьной математики не позволяют реализовать такой подход в силу громоздкости уравнений (5). Другой подход, реализованный в настоящей работе, предполагает отказ от ПАВ и использование одного из языков программирования. В этом случае при каждом обращении к вычислению системы (5) приходится проводить анализ уравнений, исходя из свойства ортогональности функций ϕ_{ij} , что снижает производительность. Однако, при этом достигается возможность наращивания порядка аппроксимации, модернизации, оптимизации и распараллеливания алгоритма.

2. Параллельная схема алгоритма

Вычислительная система nCube 2S – компьютер гиперкубовой архитектуры с 64 процессорными модулями, пиковая производительность каждого из них составляет порядка 2MFlor. В каждом модуле помимо основного процессора присутствует коммуникационный процессор, позволяющий выполнять коммуникационные операции независимо от вычислительных.

Интерфейс передачи сообщения MPI [9] реализуется собой библиотекой программ. Основная идея MPI заключается во взаимодействии процессов по средствам послылки сообщений. В нашей работе мы опирались на две функции MPI: *MPI_Gather* и *MPI_Bcast*. Первая из них собирает вектор с подчиненных процессов на один выделенный процесс, а вторая проводит широковещательную рассылку указанного набора значений на все имеющиеся процессы.

Запишем только основной вычислительный алгоритм без учета процесса инициализации, поскольку его влияние на последующий ход вычислений незначительно. Пусть $h_2 = \frac{h}{2}$, Y_i^0 – вектор начальных данных, а разность $l_2 - l_1$ определяет количество уравнений на текущем процессоре. Тогда параллельный метод РК (7), где под *вызовом метода Галеркина* понимается вычисление правых частей системы (5), запишется в виде

```

DO 1 i = l1, l2
  Yi0 = Yi
вызов метода Галеркина
DO 1 i = l1, l2
  Qi0 = h2Fi, Yi-l1 = Yi0 + Qi0
MPI_Gatherv(Y), MPI_Bcast (Y)
вызов метода Галеркина
DO 1 i = l1, l2
  Qi1 = h2Fi, Yi-l1 = Yi0 + Qi1
MPI_Gatherv(Y), MPI_Bcast (Y)
вызов метода Галеркина
DO 1 i = l1, l2
  Qi2 = hFi, Yi-l1 = Yi0 + Qi2
MPI_Gatherv(Y), MPI_Bcast (Y)
вызов метода Галеркина
DO 1 i = l1, l2
  Qi3 = h2Fi, Yi-l1 = Yi0 +  $\frac{Q_{i0} + 2Q_{i1} + Q_{i2} + Q_{i3}}{3}$ 
MPI_Gatherv(Y), MPI_Bcast(Y)

```

Остановимся подробнее на *вызове метода Галеркина*. Пусть A — алгоритм, с помощью которого правые части системы ОДУ вида (5) непосредственно вычисляются при каждом обращении к ним метода РК. В этом случае анализ уравнений приводит к замедлению вычислений и выполнению большого объема “пустых” операций. Несмотря на возможность этого алгоритма равномерно распределять вычислительную нагрузку по процессорам, а также малый объем требуемой оперативной памяти, он работает медленно. Естественным усовершенствованием алгоритма A является выделение константных выражений и их вычисление на стадии инициализации, а также отсечения операций с нулевыми элементами, получающимися в процессе вычисления правых частей. Такой алгоритм обозначим через B . С уменьшением времени выполнения алгоритма увеличивается объем требуемой оперативной памяти и теряется равномерное распределение вычислительной нагрузки, что можно исправить при помощи алгоритма C , который позволяет более равномерно нагрузить процессоры и уменьшить время выполнения.

Оценки вычислительной (количество арифметических операций, требующихся для выполнения алгоритма) и пространственной (объем требуемой памяти) сложности предложенных алгоритмов даны ниже.

| | Значения вычислительной сложности для алгоритмов | Значения пространственной сложности для алгоритмов и метода РК. |
|---|--|--|
| A | $N^*(40N^2 + 26N + 30)$ | $5N + 8N^*$ |
| B | $4N + N^*(3\sqrt{N} - 2) + N_j^{**}(3\sqrt{N} + 1) + 6N_i^*$ | $6(p + N_i^*) + N(3\sqrt{N} + 22)$ |
| C | $4N + N^*(3\sqrt{N} - 2) + N_j^{**}(3\sqrt{N} + 1) + 6N_i^*$ | $6(p + N_i^*) + N(3\sqrt{N} + 22)$ |

$$\text{Здесь } N^* = \begin{cases} \left[\frac{N}{p} \right], & \frac{i}{p-r} < 1, \\ \left[\frac{N}{p} \right] + 1, & \frac{i}{p-r} \geq 1, \end{cases}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, p-1, \quad r = \text{mod}(N, p), \quad p - \text{число до-}$$

ступных процессоров, N_i^* – число ненулевых элементов, для i -го уравнения (вычисляется в процессе инициализации), а N_j^{**} – число уравнений на j -ом процессоре. Последняя величина определяется следующим образом. Поскольку для вычисления каждого уравнения системы методом Галеркина требуется неодинаковое число арифметических операций, то можно подобрать число уравнений на каждом процессоре так, чтобы суммарная нагрузка распределялась более равномерно.

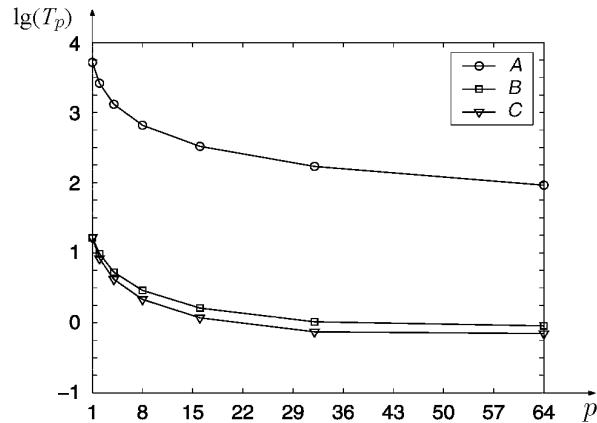


Рис. 1. Время выполнения одного шага метода РК для системы (5) с использованием алгоритмов А, В, С.

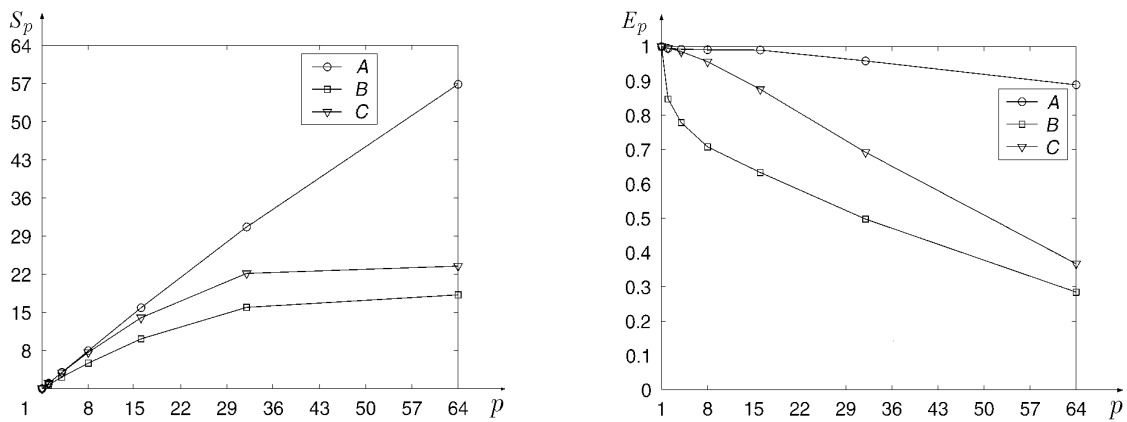


Рис. 2. Коэффициенты ускорения (слева) и эффективности (справа) для выполнения одного шага метода РК для системы (5) с использованием алгоритмов А, В, С.

Полное значение вычислительной сложности для каждого алгоритма и метода РК можно записать в виде

$$C_{comp}^{total} = C_{comp}^{RK} + kC_{comp}^G,$$

где величина C_{comp}^{RK} отвечает вычислительной сложности метода РК и равна $13N^*$. Значение k определяет порядок метода РК и в нашем случае равно 4. Вычислительная сложность метода Галеркина C_{comp}^G для алгоритмов А, В, С представлена выше.

Приведем экспериментальные оценки времени выполнения, эффективности и ускорения решения задачи Дарси с использованием алгоритмов А, В, С. Все тестовые экспери-

менты проводились для $N = 400$ и одного шага метода РК. Следуя [10] введем в рассмотрение коэффициент ускорения и эффективности:

$$S_p = \frac{T_1}{T_p}, \quad E_p = \frac{S_p}{p}, \quad (8)$$

где T_p – время выполнения параллельного алгоритма на компьютере с числом процессоров $p > 1$, T_1 – время работы последовательного алгоритма на одном процессоре того же компьютера.

Результаты расчетов даны на рисунках 1 и 2, где время выполнения алгоритмов приведено в секундах.

Видно, что время решения задачи при помощи алгоритма A по сравнению с алгоритмами B , C весьма велико. Уменьшение времени выполнения, коэффициента эффективности и ускорения алгоритма C по сравнению с алгоритмом B есть следствие более равномерного распределения вычислительной нагрузки.

3. Результаты численного эксперимента

Рассмотрим результаты численного анализа задачи (1,2) для нескольких значений фильтрационного числа Рэлея и фиксированного размера контейнера $a = 20$, $b = 50$. Расчеты проводились с использованием алгоритма C для систем (5) различных порядков при каждом значении параметра λ . Поиск устойчивых режимов осуществлялся методом установления. Целью исследований было вычисление с достаточной точностью периодических и более сложных режимов и изучение свойств галеркинских аппроксимаций при росте надкритичности. Результаты вычислений отображены на рис. 3, 4, где в качестве осей координат отложены потоки тепла:

$$Nu_v = \int_0^a \frac{\partial \theta}{\partial y} \Big|_{y=0} dx + \lambda, \quad Nu_h = \int_0^b \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{x=\frac{a}{2}} dy.$$

При малых надкритичностях, т.е. при значениях λ , близких к λ_{11} [4] для вычисления семейств стационарных режимов достаточно рассматривать системы малых размерностей ($N = 49$ и $N = 81$). При росте λ требования к порядку аппроксимации возрастают. Оказалось, что для удовлетворительного совпадения количественных характеристик (в пределах 5%) при $\lambda = \lambda_u = 0.24938$ необходимо рассматривать галеркинские аппроксимации с $N = 324$.

При росте λ возникают нестационарные решения. Результаты для $\lambda = 0.4$ и аппроксимаций с $N = 484$ и $N = 1024$ представлены на рис. 3. При этом значении параметра λ реализуется периодический режим. Получено не только качественное, но и хорошее количественное совпадение результатов, что говорит об удовлетворительной аппроксимации задачи 484-мерной галеркинской системой при $\lambda = 0.4$. Погрешность аппроксимации для $N = 324$ и $N = 1024$ в этом случае выше 5%.

В результате численных экспериментов при $\lambda = 1.5$ обнаружен хаотический режим (см. рис. 4). Одним из признаков хаотической динамики является форма спектра мощности выходного сигнала $Nu_v(t)$ на (рис. 5), где приняты следующие обозначения: $PS = |Nu_v(t)|^2$, f – частота, $\Delta f = 1/t_{max}$ (в нашем случае $t_{max} = 1000$). Видно удовлетворительное качественное совпадение спектра мощности для двух аппроксимаций.

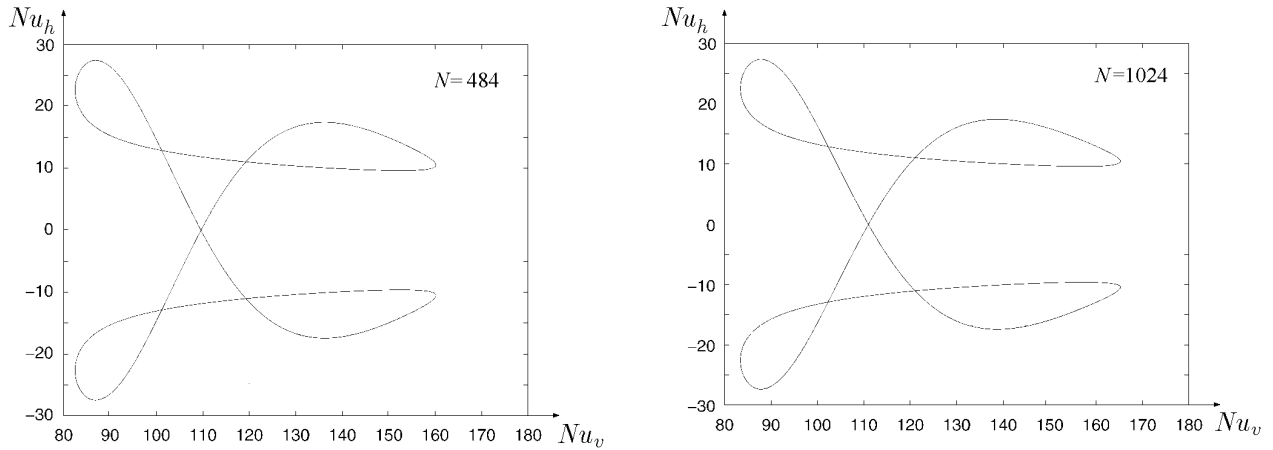


Рис. 3. Периодический режим при $\lambda = 0.4$, $N = 484$ (слева) и $N = 1024$ (справа).

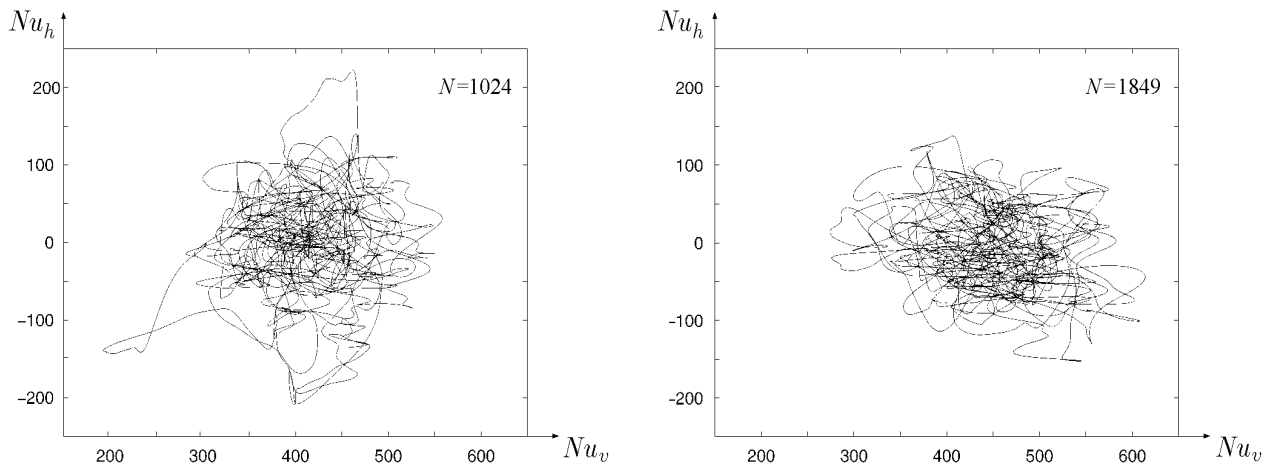


Рис. 4. Хаотический режим при $\lambda = 1.5$, $N = 1024$ (слева) и $N = 1849$ (справа).

Исследование проводилось и при других значениях λ и N . Оказалось, что увеличение параметра требует увеличения порядка аппроксимации для обеспечения необходимой точности расчетов. Так при $\lambda = 1.0$ и $N = 484$ наблюдалась сложная траектория, тогда как при том же значении параметра λ и $N = 1024$ решение представляло собой цикл. Аналогичная ситуация имела место при $\lambda = 0.6$, когда для $N = 81$ и $N = 484$ соответственно наблюдались хаотический и периодический режимы. Однако отметим, что последовательность переходов в системе бифуркаций от рождения однопараметрического семейства стационарных режимов до возникновения хаоса воспроизводится идентично, начиная с $N \geq 49$.

Заключение

Основываясь на полученных результатах, для реализации метода Галеркина на параллельных компьютерах можно рекомендовать следующие процедуры: провести анализ уравнений исходя из свойств базисных функций ϕ_{ij} ; выделить константные выражения и органи-

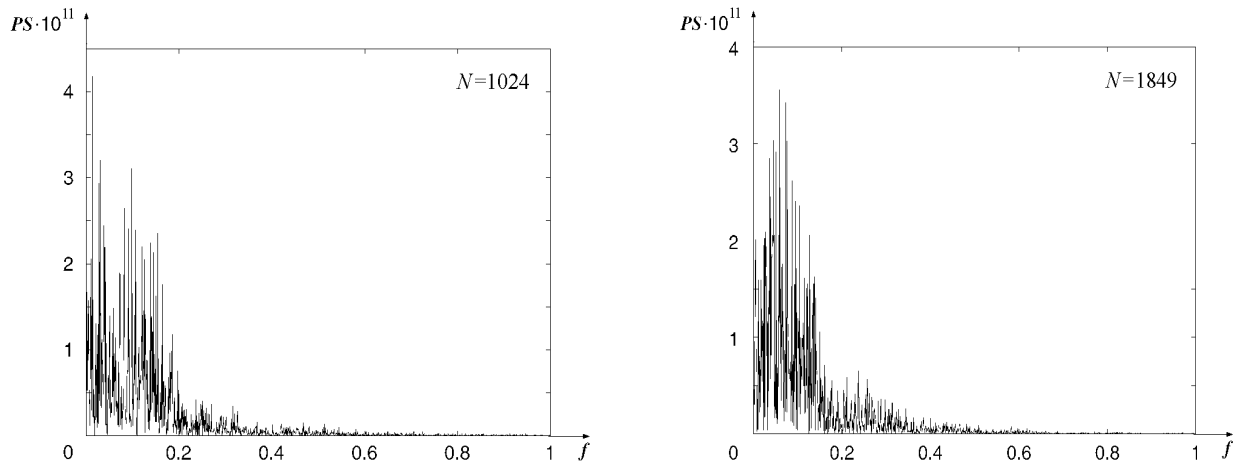


Рис. 5. Спектр мощности выходного сигнала $Nu_v(t)$ при $\lambda = 1.5$, $N = 1024$ (слева) и $N = 1849$ (справа).

зовать их вычисления на стадии инициализации; отсеять операции с нулевыми элементами, получающимися в процессе расчета правых частей; равномерно распределить нагрузку по процессорам.

Анализ аппроксимаций (5) различных размерностей при изменении параметра λ показал, что для получения достоверных результатов необходимо при росте λ повышать порядок аппроксимации.

Что касается решения плоской задачи фильтрационной конвекции, то можно утверждать, что при росте интенсивности подогрева в узком прямоугольном контейнере могут реализовываться периодические и хаотические режимы. Вопрос о механизме возникновения таких режимов требует детального численного бифуркационного анализа задачи (1-2) и будет предметом дальнейших исследований.

Список литературы

- [1] Любимов Д. В. О конвективных движениях в пористой среде, подогреваемой снизу // ПМТФ. 1975, №2, С. 131-137.
- [2] Юдович В. И. Косимметрия, вырождение решений операторных уравнений, возникновение фильтрационной конвекции // Мат. заметки. 1991, Т. 49, вып. 5, С. 142-148.
- [3] Говорухин В. Н. Численное исследование потери устойчивости вторичными стационарными режимами в задаче плоской конвекции Дарси // Докл. РАН, Т. 363, №6, 1998, С. 806-808.
- [4] Говорухин В. Н. Анализ семейств вторичных стационарных режимов в задаче плоской фильтрационной конвекции в прямоугольном контейнере. // Изв. РАН Механика жидкости и газа. 1999. №5. С. 53-62.
- [5] Jackson K. R. and Norsett S. P. The Potential for Parallelism in Runge-Kutta Methods. Part 1: RK Formulas in Standard Form, SIAM Journal on Numerical Analysis, V 32, N 1, 1995, pp. 49-82.

- [6] Rauber T. and Rünger G. Implementations of Iterated Runge-Kutta Methods and Applications. International Journal of Supercomputer Applications and High Performance Computing, V 10 (1), pp. 62-90, MIT Press, 1996.
- [7] Coleman J.P. An Introduction to Parallel Computation for ODE Initial - Value Problems, Department of Mathematical Science, University of Durham. February 1996.
- [8] Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987.
- [9] MPI: A Message-Passing Interface Standard, Message Passing Interface Forum, May 5, 1994.
- [10] Валях Е. Последовательно-параллельные вычисления. М.: Мир, 1985.

*Поступила в редакцию 9 августа 1999 г.,
в переработанном виде – 7 апреля 2000 г.*