

**PARALLELER BERECHNUNGSALGORITHMUS
DER DREIDIMENSIONALEN NICHTSTATIONÄREN
WÄRMELEITUNGSGLEICHUNG AUF GRUND DER EXPLIZITEN
DIFFERENZENVERFAHREN**

A.B. Borisenko, S.V. Karpushkin, A.O. Glebov

*Lehrstuhl «Die rechnergestützte Projektierung
der technologischen Anlagen», TSTU;
andrey@mail.gaps.tstu.ru*

Vorgelegt vom Mitglied des Redaktionskollegiums Professor W.I. Konowalow

Schlüsselwörter und Phrasen: die Analyse der Beschleunigung und der Effizienz; die dreidimensionale nichtstationäre Wärmeleitungsgleichung; das explizite Differenzenverfahren; die Parallele Berechnungen;

Zusammenfassung: Es ist die Analyse der Beschleunigung und der Effizienz des parallelen Programms der Lösung der dreidimensionalen nichtstationären Wärmeleitungsgleichung mit den Randbedingungen der ersten Art auf der Grundlage der expliziten Finite-Differenzen-Approximation vorgestellt.

Als Hauptcharakteristik der modernen Computer verwenden meistens solche Kennwerte wie die Rechenkapazität – die Größe, die zeigt die Anzahl der arithmetischen Operationen pro Zeiteinheit. Die Operationsgeschwindigkeit der Rechentechnik wuchs durch die Steigerung der Geschwindigkeit der Bauelementebasis und der maximal breit Parallelisierung der Datenverarbeitung. Dabei kann der Parallelismus oder durch eine unmittelbare Parallele Verarbeitung, oder durch die Pipeline-Datenverarbeitung erreicht werden. Es ist notwendig zu bemerken, dass mit dem heutigen Tag die weitere Erhöhung der Taktfrequenz der Prozessoren wegen der prinzipiellen fundamentalen physikalischen Beschränkungen schwierig ist. Deshalb wird der Parallelismus für die Erhöhung der Rechenkapazität, nicht nur in den spezialisierten Rechenclustern, sondern auch in den Personalcomputern aktiv verwendet: Multithreading, Hyper-Threading, Multiprozessoren und Multikerne. Die Prozessoren – z. B. Intel Core Duo oder AMD Athlon 64 X2 – enthalten zwei (Dual Core) oder vier (Quad Core) Kerne[1].

Nach der bekannten Klassifikation der Rechnerarchitekturen, die von Flynn vorgeschlagen wurden [2] (sog. Taxonomie nach Flynn) und die sich auf der Instruktionssequenzen und auf der Sequenzen der Datenverarbeitung gründen, kann man alle Computersysteme auf vier Typen teilen:

- 1) SISD (Single instruction, single data stream): einfacher Befehls- und einfacher Datenstrom);
- 2) MISD (Multiple instruction, single data stream): multipler Befehls- und einfacher Datenstrom;
- 3) SIMD (Single instruction, multiple data streams): einfacher Befehls- und multipler Datenstrom);
- 4) MIMD (Multiple instruction, multiple data streams): multipler Befehls- und multipler Datenstrom).

Zu der MIMD-Gruppe gehören die symmetrischen parallelen Rechnersysteme, die Workstations mit mehreren Prozessoren, sowie die Cluster. Zu dieser Klasse der Rechnersysteme verhält sich auch der Cluster der Staatlichen Technischen Universität Tambow [3]. Der Cluster umfasst acht Rechnern (Knoten) auf dem Intel Pentium 4 3,0 GHz und 2 GB RAM, einen von denen (HeadNode) ist Server, der auf Intel Pentium 4 3,2 GHz und 4 GB RAM basiert. Alle Computer des Clusters sind in ein lokales Netz Fast-Ethernet verbunden.

Die Analyse der Beschleunigung und der Effizienz des parallelen Programms auf dem Cluster von Staatlichen Technischen Universität Tambow wurde auf dem Beispiel der Lösung der dreidimensionalen nichtstationären Wärmeleitungsgleichung durchgeführt. Dabei wurde die Aufgabe auf folgende Weise formuliert.

Der feste Körper in Form eines Quaders, der gleichmäßig bis zur Temperatur 100 °C erhitzt wurde, wurde dann in die mehr kältere Umgebungen platziert. Dabei die Temperatur auf einer Fläche 1 °C und auf anderen Flächen 10 °C aufrechterhalten wird. Man muss das Temperaturfeld innerhalb des Körpers nach Ablauf von einiger Zeit nach dem Anfang des Experiments bestimmen.

Die Evolution des Temperaturfeldes im Körper wird durch der Lösung der folgenden Gleichung bestimmt

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right),$$

wo $T(t, x, y, z)$ – die Temperaturverteilung, α – die Temperaturleitfähigkeit. Die Lösung dieser Angleichung wird auf dem Bereich verwirklicht, der vom Quader $H = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ begrenzt ist. Die Anfangsverteilung wird wie $T(0, x, y, z) = 100$ °C bestimmt.

Die Grenzbedingungen:

$$T(t, x, y, 0) = 1 \text{ °C};$$

$$T(t, 0, y, z) = T(t, L_x, y, z) = T(t, x, 0, z) = T(t, x, L_y, z) = T(t, x, y, L_z) = 10 \text{ °C}.$$

Für die numerische Berechnung der Aufgabe muss man auf dem untersuchten Gebiet das gleichmäßige Netz mit der identischen Zahl der Knotenpunkte $(n + 2)$ in jeder Koordinatenrichtung bestimmen

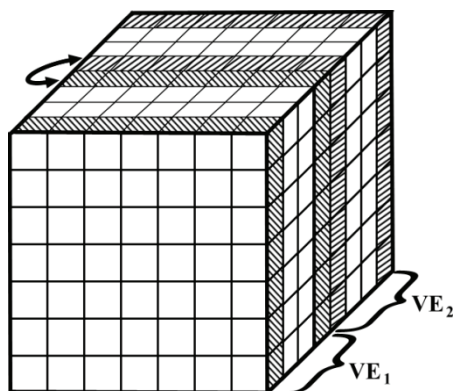
$$\bar{\omega} = \left\{ (x_i, y_k, z_j) \left| x_i = i \frac{L_x}{n+1}, y_k = k \frac{L_y}{n+1}, z_j = j \frac{L_z}{n+1}, i, j, k = \overline{0, n+1} \right. \right\}.$$

Das Finite-Differenzen Analogon der Wärmeleitungsgleichung mit der Nutzung der expliziten Differenzenverfahren:

$$\frac{T_{i,k,j}^{l+1} - T_{i,k,j}^l}{\tau} = \alpha \left(\frac{T_{i+1,k,j}^l - 2T_{i,k,j}^l + T_{i-1,k,j}^l}{h_x^2} + \frac{T_{i,k+1,j}^l - 2T_{i,k,j}^l + T_{i,k-1,j}^l}{h_y^2} + \frac{T_{i,k,j-1}^l - 2T_{i,k,j}^l + T_{i,k,j+1}^l}{h_z^2} \right), i = \overline{1, n}, j = \overline{1, n}, k = \overline{1, n}; l = 0, 1, \dots;$$

$$\tau = \frac{0,5}{\left(2\alpha \left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2} \right) \right)}.$$

Die Entwicklung des parallelen Algorithmus verwirklichte sich laut dem methodologischen Herangehen von Foster [5] mit der Nutzung des Prinzips der Datenzerlegung. Verschiedene Fragmente des Datenfeldes werden auf verschiedenen Verarbeitungselementen (VE) des parallelen Rechners bearbeitet. Es wird die eindimensionale Datenzerlegung der Aufgabe verwendet, die auf der Zeichnung 1 vorgestellt ist. Auf jedem VE (auf Bild gibt es zwei – VE₁ und VE₂) werden mehrere Schichten des Netzes für den laufenden Moment der Zeit verarbeitet, dann geschieht der Austausch von den Randschichten dazwischen VE und es verwirklicht sich der Schritt nach der Zeit. Die Lösung der dreidimensionalen nichtstationären Wärmeleitungsgleichung stellt die Gesamtheit der Temperaturwerte in allen inneren Schichten des Netzes jeder VE dar.



Zeichnung 1. Die eindimensionale Datenzerlegung der Aufgabe

Die Lösung der dreidimensionalen nichtstationären Wärmeleitungsgleichung stellt die Gesamtheit der Temperaturwerte in allen inneren Schichten des Netzes jeder VE dar.

Für die Entwicklung der parallelen Programme verwendet man wie die spezialisierten Programmiersprachen (z.B., C*, MPP Fortran, High Performance Fortran (HPF)), als auch die spezialisierten Programmbibliothek für die traditionellen Programmiersprachen (z.B., Parallel Virtual Machines (PVM)). Weit verbreitet ist die Programmbibliothek Message Passing Interface (MPI) [6]. Diese Technologie der Programmerzeugung der parallelen Programme gründet sich auf der Übertragung von Nachrichten zwischen Prozessen (die Prozesse können wie auf der einen, als auch auf den verschiedenen Rechenknoten durchgeführt werden). Zu der Mittel der Programmierung kann man auch die hochproduktiven optimierenden Compiler für den Sprachen C/C++/Fortran (Intel Compiler) [7] zurechnen, die Branchensoftware – die Softwarepaket für die wissenschaftlichen und technische Berechnungen Fluent und ANSYS, die Systeme für die Forschungen des Wetters und des Klimas MM5 und WRF, die Systeme für die Lösung der Aufgaben des Umweltschutzes CAMx и CMAQ, die Programmbibliotheken für die Durchführung der parallelen Berechnungen Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation (PETSc) [8], Intel Math Kernel Library [9].

Die Autoren haben das parallele Programm mit der Nutzung der spezialisierten Programmbibliothek MPI auf der Programmiersprache C++ entwickelt.

Die Beschleunigung S_p bestimmt wie die Verhältnis der Prozessorzeit T_1 , die für die Ausführung des sequentiell Programms auf einem Prozessor gefordert wird, zur Zeit T_p der Ausführung der Berechnungen vom parallelen Programm auf dem p Prozessoren. Für den Idealfall soll die Lösung der Aufgabe auf der p Prozessoren in p Mal schneller durchgeführt werden. Jedoch wird in der Praxis solche Beschleunigung tatsächlich niemals erreicht (die Ursache dafür wird vom Amdahls Gesetz [10] gut illustriert).

Die Effizienz der Nutzung der Prozessoren E_p bestimmt wie die Verhältnis der bekommenen Beschleunigung S_p zur Anzahl von Prozessoren p .

In der Tabelle 1 werden die Werte der Beschleunigung und der Effizienz der Nutzung der Prozessoren angeführt, die bei der Lösung der oben genannten Probleme auf dem Rechencluster TSTU bekommen wurde.

Es ist ersichtlich, dass der Wert der Ausnutzungskoeffizient mit der Vergrößerung der Anzahl der VE reduziert wird, obwohl die absolute Zeit der Lösung des Problems verringert wird. Das kann dadurch geschehen, dass sich der Gewinn von der Nutzung der mehrerer Anzahlen der Prozessoren infolge der Vergrößerung der Anzahl der Datenkommunikation dazwischen verliert. Auch, es ist offenbar, die negative Rolle spielt die Nutzung als Kommunikationsmedium des Fast-Ethernetnetzes, deren Bandbreite um eine Größenordnung kleiner als in der modernen Supercomputern

Табелла 1

Дие Вере де р Бешлеунигунг унд де р Еффизienz де р Нутзунг де р Процессорен

Anzahl von Prozessoren	Zeit, s	Beschleunigung	Effizienz
1	250,843	1	1
2	135,850	1,846	0,923
3	92,952	2,698	0,899
4	70,508	3,557	0,889
6	48,574	5,164	0,860

Zusammenschaltung, solcher, z.B., wie InfiniBand, ist. Auch die Anwendung der zweidimensionalen und dreidimensionalen Datenzerlegung wird zur wesentlichen Vergrößerung der Datenkommunikation dazwischen VE bringen. Nichtsdestoweniger, die Anwendung des Rechenclusters lässt beim richtigen Herangehen an die Entwicklung des parallelen Algorithmus die wesentliche Reduzierung der Lösungszeit zu bekommen.

Die Veröffentlichung ist in den Rahmen des Projektes, die Zulassungsnummer 2.2.2.3/9065, nach dem analytischen amtlichen Zielprogramm «Die Entwicklung des wissenschaftlichen Potentials der Hochschule (2009–2010 Jahre)» im Jahr 2010 erfüllt.

Literatur

1. HPCWire: Core Economics. – URL : <http://www.hpcwire.com/features/17908534.html>.
2. Flynn, M.J. Parallel architectures / M.J. Flynn, K.W. Rudd // ACM Computing Surveys. – 1996. – Vol. 28, No. 1. – P. 67–70.
3. Веб-сайт вычислительного кластера Тамбовского государственного технического университета. – URL : <http://cluster.tstu.ru>.
4. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М. : Наука, 1989. – 614 с.
5. Ian Foster. Designing and Building Parallel Programs (Online). – URL : <http://www-unix.mcs.anl.gov/dbpp/>.
6. Message Passing Interface Forum. Official MPI (Message Passing Interface) standards documents, errata. – URL : <http://www.mpi-forum.org/>.
7. Intel Compilers. – URL : <http://software.intel.com/en-us/intel-compilers/>.
8. Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation – URL : <http://www.mcs.anl.gov/petsc/petsc-2/>.
9. Intel Math Kernel Library – <http://software.intel.com/en-us/intel-mkl/>.
10. Amdahl, G. Validity of the single-processor approach to achieving large-scale computing capabilities / G. Amdahl // Proc. 1967 AFIPS Conf., AFIPS Press. – 1967. – Vol. 30. – P. 483.

Параллельный алгоритм решения трехмерного нестационарного уравнения теплопроводности с использованием явной разностной схемы

А.Б. Борисенко, С.В. Карпушкин, А.О. Глебов

*Кафедра «Автоматизированное проектирование технологического оборудования», ГОУ ВПО «ТГТУ»;
andrey@mail.gaps.tstu.ru*

Ключевые слова и фразы: анализ ускорения и эффективности; параллельные вычисления; трехмерное нестационарное уравнение теплопроводности; явная разностная схема.

Аннотация: Приводится анализ ускорения и эффективности параллельной программы решения трехмерного нестационарного уравнения теплопроводности с граничными условиями первого рода на основе явной конечно-разностной аппроксимации.

Parallel Algorithm of Solving Three Dimensional Non-Stationary Equation of Heat Conductivity Using Explicit Difference Scheme

A.B. Borisenko, S.V. Karpushkin, A.O. Glebov

*Department "Automated Designing of Technological Equipment", TSTU;
andrey@mail.gaps.tstu.ru*

Key words and phrases: analysis of acceleration and efficiency; explicit difference scheme; parallel computations; three-dimensional non-stationary equation of heat conductivity.

Abstract: The paper presents the analysis of acceleration and efficiency of the parallel program of solution to the three-dimensional non-stationary equation of heat conductivity with the boundary conditions of the first type on the basis of explicit difference approximation.

Algorithme parallèle de la solution de l'équation à trois dimensions non stationnaire de la conductibilité thermique avec l'emploi d'un schéma différentiel évident

Résumé: Est citée l'analyse de l'accélération et de l'efficacité du programme parallèle de la solution de l'équation à trois dimensions non stationnaire de la conductibilité thermique avec les conditions marginales du premier ordre à la base de l'approximation finale différentielle évidente.

Авторы: *Борисенко Андрей Борисович* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Автоматизированное проектирование технологического оборудования»; *Карпушкин Сергей Викторович* – доктор технических наук, профессор кафедры «Автоматизированное проектирование технологического оборудования»; *Глебов Алексей Олегович* – магистрант группы МТ-53 кафедры «Автоматизированное проектирование технологического оборудования», ГОУ ВПО «ТГТУ».

Рецензент: *Гатапова Наталия Цибиковна* – доктор технических наук, профессор, заведующая кафедрой «Химическая инженерия», ГОУ ВПО «ТГТУ».
