Federal Research Center
of Problems of Chemical Physics
and Medicinal Chemistry
Russian Academy of Sciences

Суперкомпьютерные дни в России

международная научная конференция
26-27 сентября 2022 г.

Универсальная Многосеточная Технология для параллельного численного решения начально-краевых задач

С.И. Мартыненко, П.Д. Токталиев, В.А. Бахтин, Е.В. Румянцев,
Г.А. Тарасов, Н.Н. Середкин, К.А. Боярских

Докладчик: д.ф.-м.н., профессор Сергей Иванович Мартыненко

Исследовательские работы проведены при финансовой поддержке государства в лице РНФ по соглашению № 21-72-20023 по теме: «Суперкомпьютерное моделирование высокоскоростных ударов по искусственным космическим объектам и Земле».

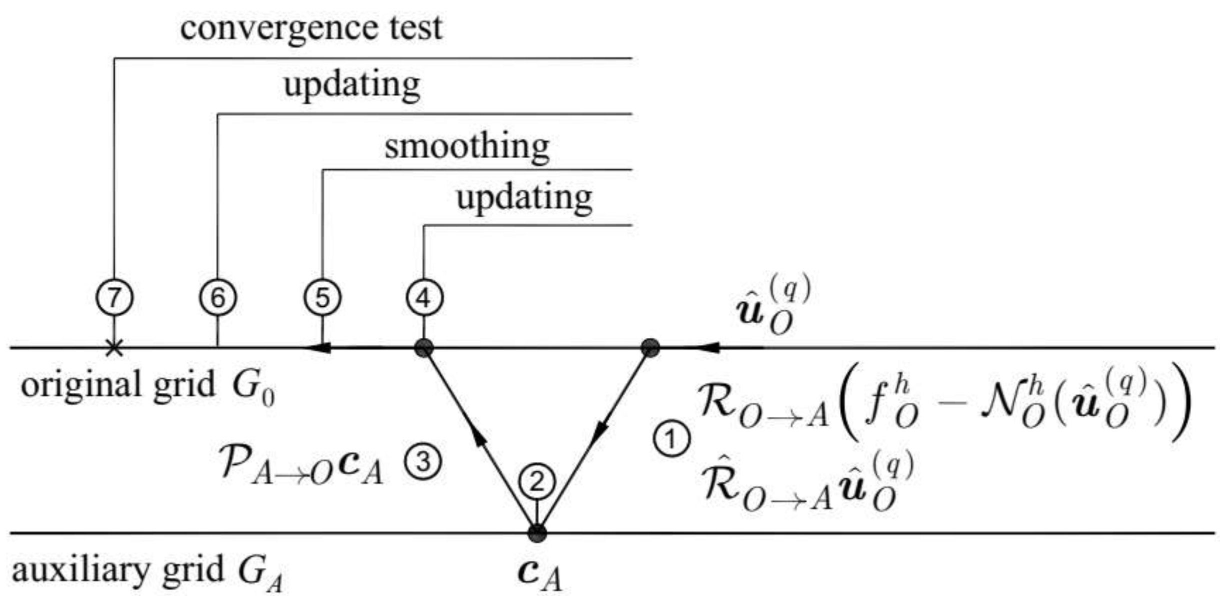
Цель работы: разработка вычислительной технологии для программного обеспечения, устроенной по принципу «чёрного ящика»

CFX/ANSYS, FLUENT, PHOENICS, STAR-CD, Логос и др.

Требования к вычислительной технологии:
а) универсальность – наименьшее количество проблемно-независимых компонентов;
б) эффективность – близкая к оптимальной алгоритмическая трудоёмкость;
в) параллелизм – меньшее время счёта, чем у самого быстрого последовательного алгоритма.

Решаемые задачи: от уравнения Пуассона до систем нелинейных сильно связанных ДУЧП (*multiphysics simulation*)

Нелинейный двухсеточный алгоритм



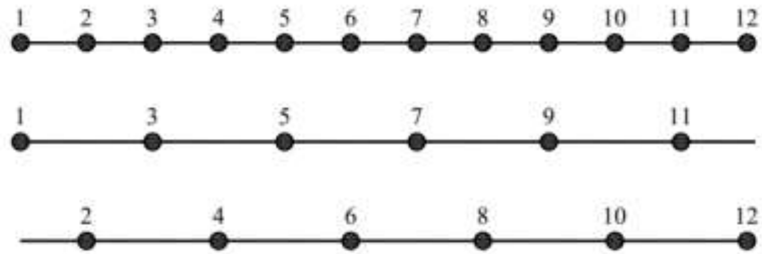
Исходная сетка – неструктурированная, (блочно-)структурированная
Вспомогательная сетка – структурированная

Линейный случай: количество межсеточных итераций не зависит от размера задачи!

J. Xu The auxiliary space method and optimal multigrid preconditioning techniques for unstructured grids. Computing. 1996. 56. 215–235.

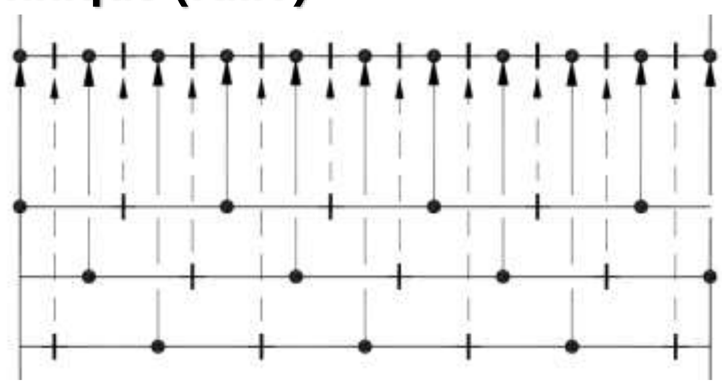
Нестандартные многосеточные методы

Parallel Superconvergent Multigrid Method (PSMG)



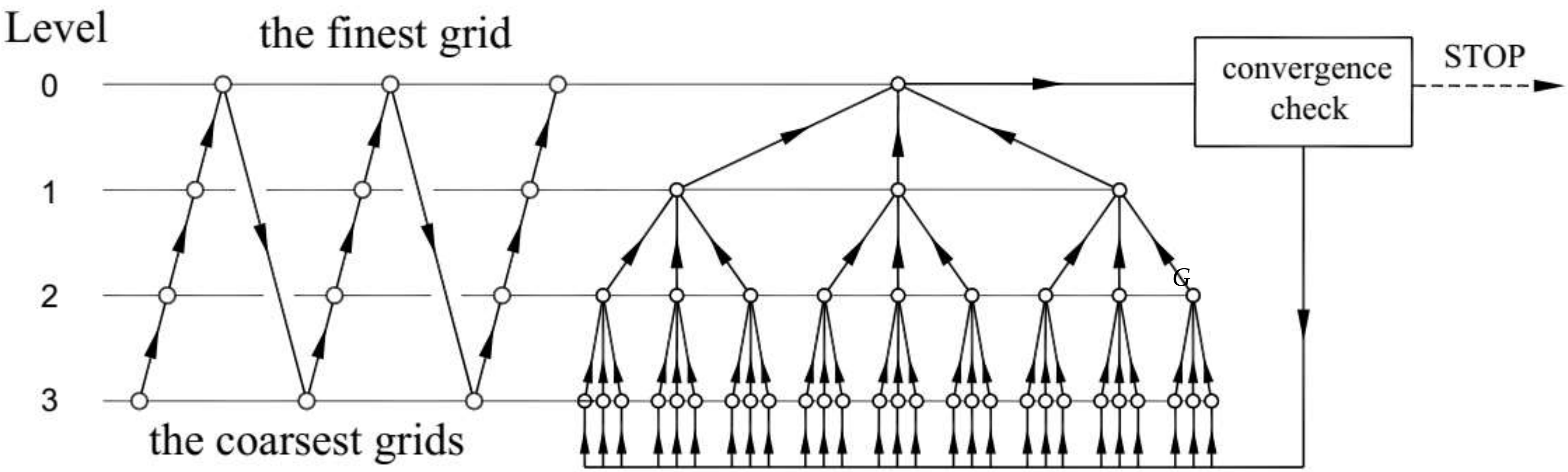
P. O. Frederickson, O. A. McBryan Parallel superconvergent multigrid. Multigrid Methods: Theory, Applications and Supercomputing (ed. S. McCormick). 195–210. Marcel Dekker, New York, 1988.

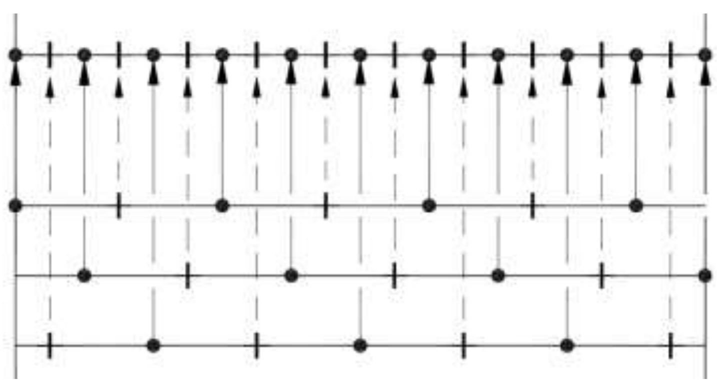
Robust Multigrid Technique (RMT)



Мартыненко С.И. Последовательное программное обеспечение для универсальной многосеточной технологии. Триумф. Москва, 2020.

Последовательный многосеточный цикл





Многосеточная структура: $G_n^l, n = 1, 2, \ldots, 3^{dl}, l = 0, 1, \ldots, L_3^+, d = 2, 3$

Алгебраический и геометрический параллелизмы

Каждый сеточный уровень состоит из 3^{dl} сеток, $d = 2,3$
количество независимых вычислителей $p = 3^m$
$m = 0$ (последовательное исполнение), 1,2,3,…

Алгебраический параллелизм (l: $dl < m$)
зависит от итерационного метода, но не зависит от сетки

Геометрический параллелизм (l: $dl >= m$)
зависит от сетки, но не зависит от итерационного метода

Геометрический параллелизм

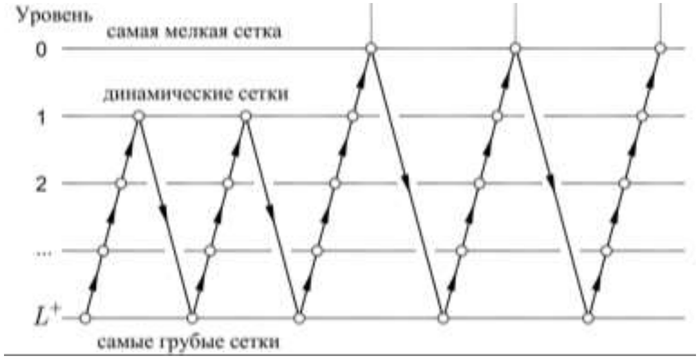
Краевая задача

$$u''_{xx} + u''_{yy} + u''_{zz} = 3\exp(x+y+z)$$

в области (0,1)^3,
сетка $101 \times 101 \times 101$
Погрешность

$$\|e\|_\infty = \max_{ijk} |u_a(x_i, y_j, z_k) - \hat{u}^h_{ijk}|$$

Теоретическая оценка:
сравним по времени счёта
с V-циклом при *p* = 9



Нестационарные задачи

1) Сугубо нестационарные задачи
2) Счёт на установление

ПРОБЛЕМЫ (неявные схемы):
1) Разработка унифицированного параллельного алгоритма
2) Влияние обусловленности на параллельный алгоритм

Сетка $(n+1)\times(n+1)\times(n+1) \qquad h = 1/n$

$$\Theta = n^m, \quad 0 < m < 2d$$

$$\frac{\mathcal{W}_{\mathrm{S}}}{\mathcal{W}_{\mathrm{RMT}}} = \frac{1}{q\nu}\frac{3^{\frac{L_3^+ + 1}{L_3^+ - L_*^+ + 1}}}{L_*^+ + 1} > 1$$

Нестационарные задачи

$$\Theta = n^m, \quad 1 \leqslant m < 2d$$

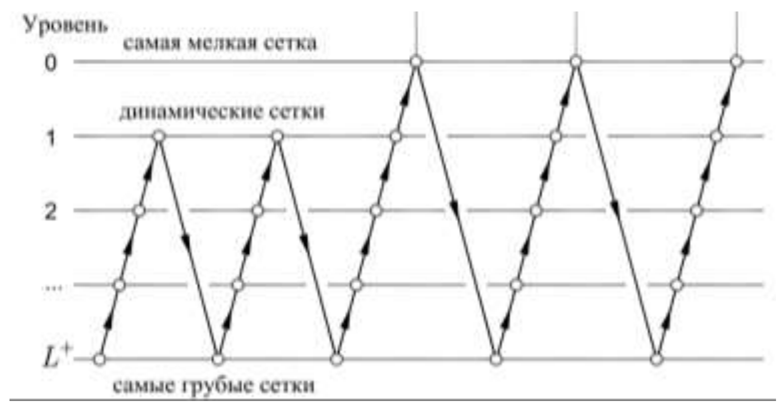
$$\Theta = n \Rightarrow k = 1 \Rightarrow L_3^+ = L_*^+ \Rightarrow \frac{\mathcal{W}_{\mathrm{S}}}{\mathcal{W}_{\mathrm{RMT}}} = \frac{1}{q\nu}\frac{3^{L_3^+ + 1}}{L_3^+ + 1} > 1$$

$$\Theta = \sqrt{n} \Rightarrow k = \frac{1}{2} \Rightarrow L_*^+ = L_3^+ - 1$$

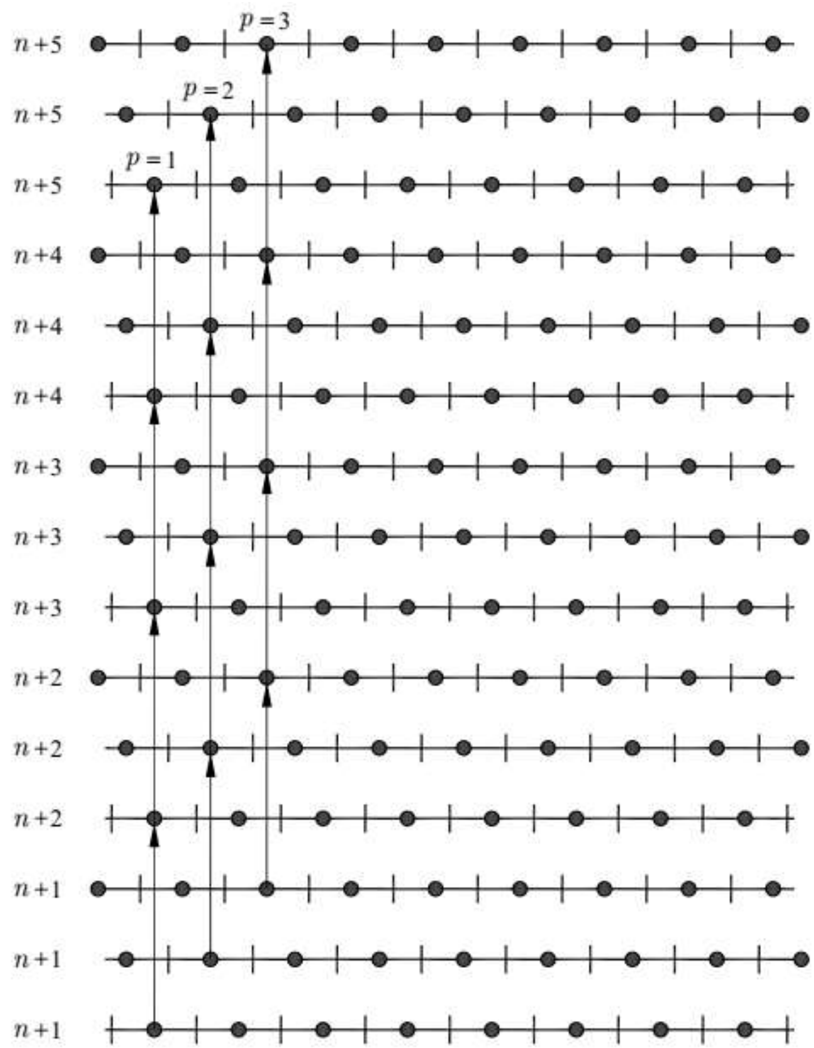
$$\frac{\mathcal{W}_{\mathrm{S}}}{\mathcal{W}_{\mathrm{RMT}}} = \frac{1}{q\nu}\frac{3^{\frac{L_3^+ + 1}{2}}}{L_3^+} > 1$$

$$\Theta = \sqrt[L_3^+]{n} \Rightarrow k = \frac{1}{L_3^+} \Rightarrow L_*^+ = 1$$

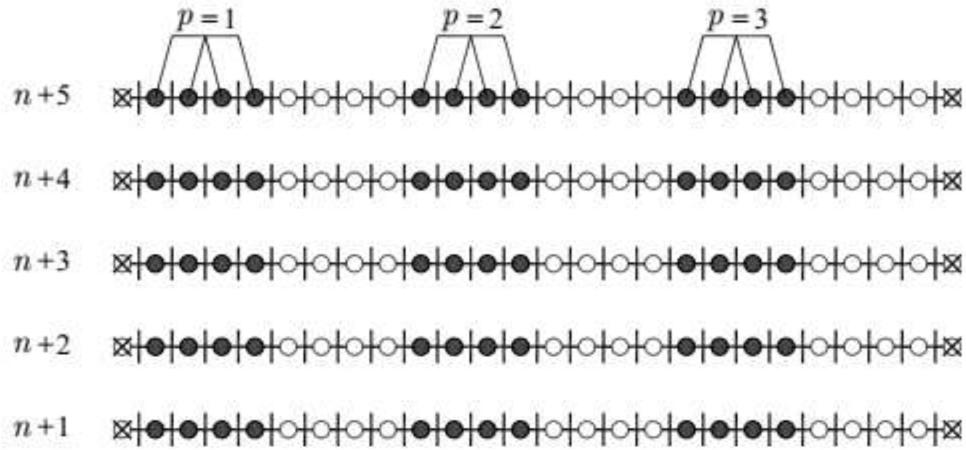
$$\frac{\mathcal{W}_{\mathrm{S}}}{\mathcal{W}_{\mathrm{RMT}}} = \frac{1}{q\nu}\frac{3^{\frac{L_3^+ + 1}{L_3^+}}}{2}$$

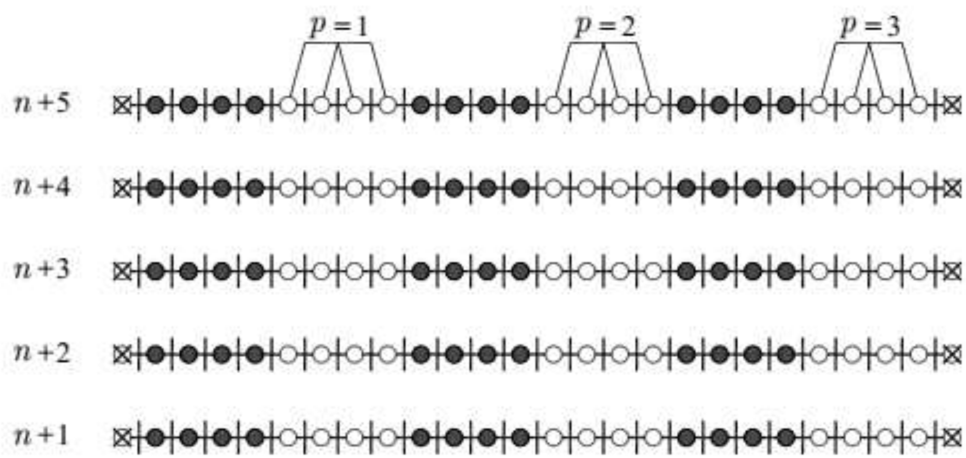


Геометрический параллелизм



Алгебраический параллелизм
The Waveform Relaxation method





Вычислительный эксперимент

$$u'_t = a^2 \Delta u + f$$

$$u(t, x, y, z) = \sin(2\pi t) + Q(x)Q(y)Q(z)$$

$$Q(\theta) = \exp(\alpha\theta) + \big(1 - \exp(\alpha)\big)\theta - 1, \quad \theta = (x\ y\ z)^T$$

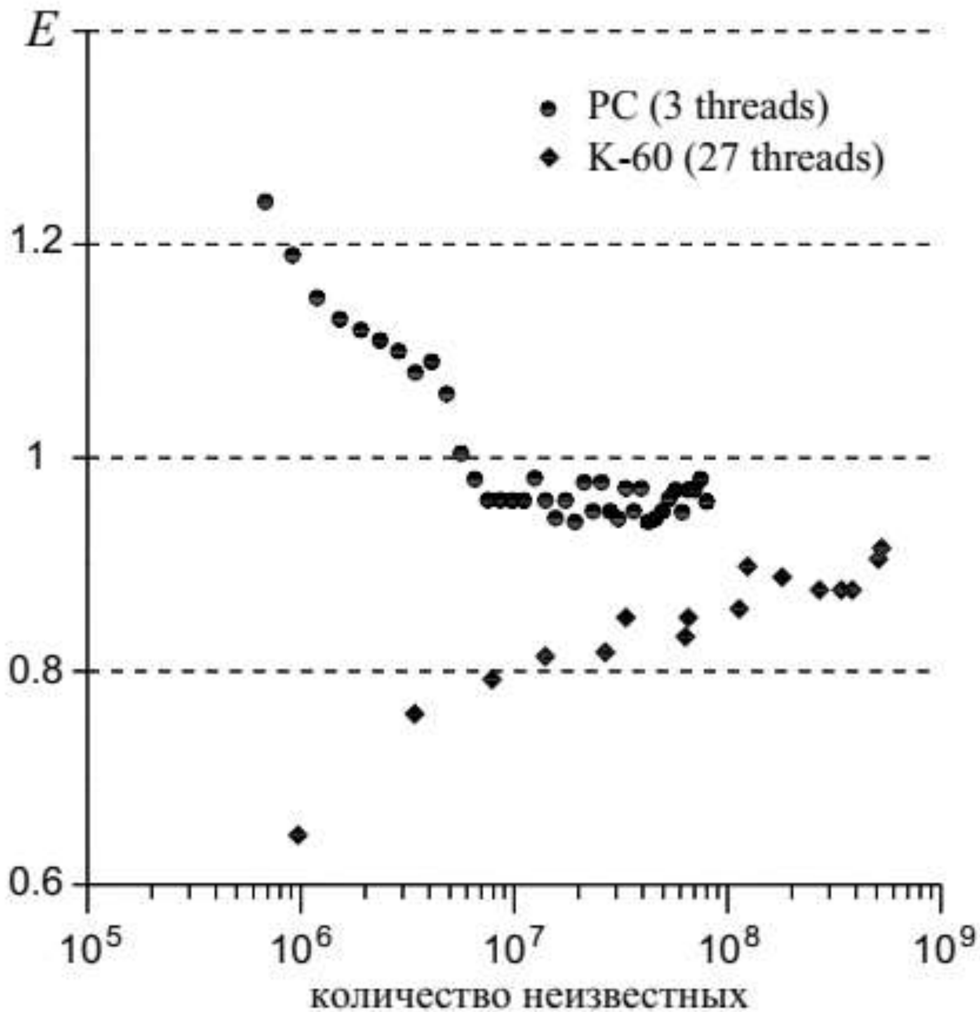
Схема Кранка-Николсона

$$\frac{u_{ijk}^{(n+1)} - u_{ijk}^{(n)}}{h_t} = \frac{a^2}{2}\Big(\Delta^h u_{ijk}^{(n)} + \Delta^h u_{ijk}^{(n+1)}\Big) +$$

$$+\frac{1}{2}\Big(f(t^{(n)}, x_i, y_j, z_k) + f(t^{(n+1)}, x_i, y_j, z_k)\Big)$$

Персональный компьютер (Intel(R) Core(TM) i7-4790 CPU@3.60 GHz) и кластер К-60 (Институт Прикладной Математики имени М.В. Келдыша РАН) использованы для вычислительных экспериментов. Параллельный код разработан с привлечением технологии распараллеливания OpenMP.

Вычислительный эксперимент



Заключение

Разработанный алгоритм на основе RMT позволяет параллельно решать широкий класс краевых и начально-краевых задач унифицированным образом. При этом достигается высокая эффективность параллелизма: ожидается, что при использовании девяти нитей время выполнения разработанного параллельного алгоритма будет сопоставимо со временем исполнения оптимизированного последовательного односеточного метода. Однако многосеточный алгоритм следует адаптировать к дискретным начально-краевым задачам посредством определения уровня с самыми грубыми сетками. Кроме того, снижение объёма вычислений по сравнению с односеточным сглаживателем зависит от обусловленности матрицы коэффициентов результирующей СЛАУ в линейном случае.

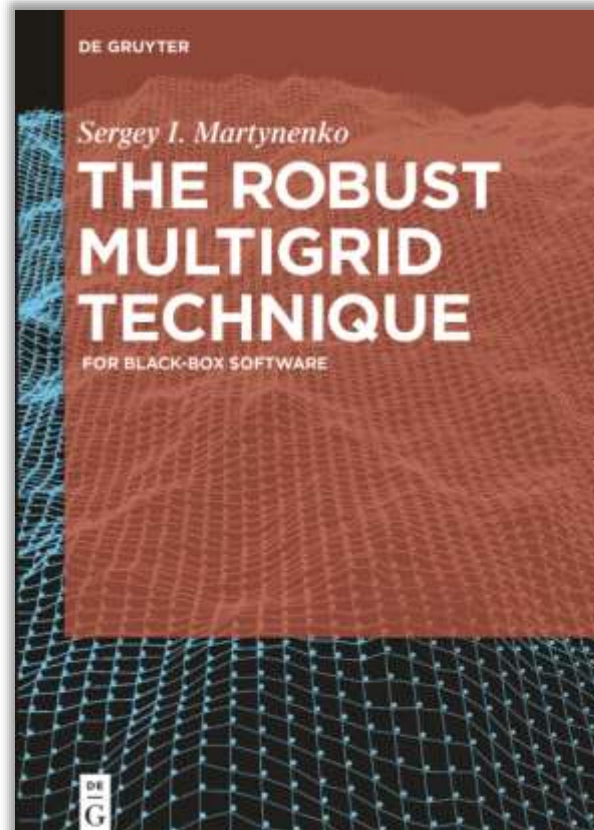
2013

Robust Multigrid Technique

2015

Robust Multigrid Technique: Theory and Applications

2017



https://github.com/simartynenko/Robust_Multigrid_Technique_2020

**Sequential Software
for the Robust Multigrid Technique**

**Parallel Software
for the Robust Multigrid Technique**

https://github.com/simartynenko/Robust_Multigrid_Technique_2021_OpenMP