УДК 681.3.012

Швачич Г.Г., Іващенко В.П., Іващенко О.В.

ЧИСЕЛЬНО-АНАЛІТИЧНА КОНЦЕПЦІЯ РОЗВ'ЯЗКІВ ПРИКЛАДНИХ ЗАДАЧ НА ОСНОВІ СХЕМ ПІДВИЩЕНОГО ПОРЯДКУ ТОЧНОСТІ

Національна металургійна академія України, м. Дніпро

Статтю присвячено розподіленому моделюванню візуалізації векторів розв'язків прикладних задач на основі схем підвищеного порядку точності. Більш високе прискорення обчислень порівняно з кінцево-різницевим підходом ілюструється використанням аналітичних розв'язків, які дозволяють проводити обчислення одночасно та паралельно за всіма часовими шарами. Показано, що найбільш перспективним підходом до математичного моделювання прикладних задач слід вважати той, що ґрунтується на числово-аналітичних розв'язках. Виявлено, що ефективним засобом під час опрацювання прикладних задач в металургійному виробництві вважають застосування технологій паралельних обчислень на розподілених системах кластерного типу, що мають порівняно невелику вартість і досить легко масштабуються як за кількістю процесорів, так і за обсягом оперативної пам'яті. Розглянутий у даній роботі підхід до числово-аналітичної концепції візуалізації векторів у розв'язках прикладних задач дозволяє отримати будь-які необхідні дані для побудови гладких графіків або ізоліній на відповідних сітках. Максимальні ж паралельні форми алгоритму становлять предмет особливого інтересу, оскільки визначають мінімально можливий час реалізації алгоритму візуалізації. Для проведення обчислювальних експериментів на базі застосування багатопроцесорної обчислювальної системи розроблено пакет прикладних програм, що реалізує розв'язок коефіцієнтних обернених задач теплопровідності методом математичного моделювання. Пакет прикладних програм розроблено з урахуванням вимог об'єктно-орієнтованого програмування.

Ключові слова: багатопроцесорна обчислювальна система, прискорення, візуалізація, розподілене моделювання, чисельно-аналітичний розв'язок.

Постановка проблеми

Значне прискорення обчислень прикладних задач за рахунок кінцево-різницевих схем досягається за рахунок ефекту розпаралелювання. Проте на окрему увагу заслуговують чисельно-аналітичні алгоритми розв'язування прикладних задач. Більш високе прискорення обчислень порівняно з кінцево-різницевим підходом можна досягти використанням аналітичних розв'язків, які дозволяють виконувати обчислення одночасно та паралельно за всіма часовими шарами та не використовують при цьому комбіновану пам'ять.

Отже, найбільш перспективним підходом до математичного моделювання прикладних задач слід вважати той, що ґрунтується на чисельно-аналітичних розв'язках.

Ефективним засобом під час опрацювання прикладних задач в металургійному виробництві вважають застосування технологій паралельних обчислень на розподілених системах кластерного типу, що мають порівняно невелику вартість і досить легко масштабуються як за кількістю процесорів, так і за обсягом оперативної пам'яті [1,2].

Отже, розподілене моделювання візуалізації векторів розв'язків прикладних задач на основі схем підвищеного порядку точності є задачею важливою та актуальною.

Аналіз останніх досліджень і публікацій

Процеси, які відбуваються в агрегатах металургійного виробництва слід розглядати як великі системи [3–5]. Відзначимо, що на сьогодні розв'язування складних, великих за обсягом задач вимагає потужних комп'ютерів і характеризується словом паралельний, тобто існують паралельні комп'ютери, обчислювальні системи, паралельні обчислювальні методи тощо [6−8]. У широкий вжиток цей термін увійшов майже відразу після появи перших комп'ютерів, а точніше, після усвідомлення того факту, що створені комп'ютери не в змозі розв'язати протягом оптимального терміну багато актуальних для практики задач. Появу в обчислювальних системах нових і високовартісних засобів комунікації, більш досконалої елементної бази стимулював розвиток високопродуктивних обчислень на базі багатопроцесорних обчислювальних систем [9,10].

Крім того, відзначимо, що клас задач, який розглядається в даній роботі, як правило, розв'язується на основі застосування апарата різницевих рівнянь, суть якого полягає в тому, що здійснюється заміна похідних різницевими співвідношеннями. При цьому з точки зору чисельного алгоритму розв'язок різницевих рівнянь розподіляється на явні та неявні схеми [11]. У явній схемі значення шуканої функції визначаються послідовно, шар за шаром. Проте, незважаючи на очевидну простоту та зручність обчислень, така схема має один істотний недолік. Якщо розміри сітки $l > h$, то похибки округлення можуть стати настільки великими, що отриманий розв'язок втрачає сенс. Відомо, що для застосування явної схеми повинна виконуватися умова: $l / h^2 \le 0{,}5$. Але справедливим виявляється таке емпіричне правило: якщо зменшувати величини l і h, то похибка апроксимації частинних похідних кінцево-різницевими похідними теж зменшуватиметься. Проте, чим дрібнішою буде сітка, тим ще більше обчислень необхідно зробити, а це означає, що тим більшими будуть похибки округлення. Неявні схеми дозволяють вести обчислення з великим кроком без істотного погіршення точності, але такий підхід вимагає більшого обсягу обчислень.

Розглянутий аналіз показує, що методи розв'язку даного класу задач мають бути не тільки різноманітними, але й поєднувати кількісні оцінювання з можливостями якісного аналізу. На сьогодні намітилися певні тенденції в розробці чисельно-аналітичних методів із складною логічною структурою, але вони мають порівняно з кусково-різницевими методами вищий порядок точності й можливість побудови алгоритмів з адаптацією за порядками апроксимації [12,13]. З погляду обчислення цей підхід відрізняється деякою громіздкістю, але він показує своєрідний еталон для порівняння з іншими практичними методами. Разом з тим, зважаючи на те, що обчислювальний експеримент здійснюється на багатопроцесорній системі, можна стверджувати, що обставина, яка стримувала розвиток чисельно-аналітичного підходу, тепер втрачає свою актуальність. У зв'язку з цим у даній роботі набула подальшого розвитку ідея розробки схем підвищеного порядку точності на основі чисельно-аналітичного підходу до обчислень широкого класу досліджуваних задач.

Мета дослідження

Мета дослідження полягає в розробці числового розв'язку задачі металургійної теплофізики на основі застосування багатопроцесорних систем. Окрему увагу необхідно приділити чисельно-аналітичним алгоритмам розв'язування поставлених задач. Більш високе прискорення обчислень порівняно з кінцево-різницевим підходом виконати за рахунок застосування аналітичних розв'язків, які дозволяють проводити обчислення одночасно та паралельно за всіма часовими шарами без використовування комбінованої пам'яті. Для виконання обчислювальних експериментів на основі застосування багатопроцесорної обчислювальної системи запропонувати пакет прикладних програм (ППП), що реалізує розв'язок коефіцієнтних обернених задач теплопровідності методом математичного моделювання. ППП розробити з урахуванням вимог об'єктно-орієнтованого програмування. При цьому розв'язок коефіцієнтних задач зводити до задач оптимального керування, алгоритми обчислювання яких закласти в пакеті. Також ППП повинен включати блок візуалізації даних.

Основні результати дослідження

Розглядається розв'язок крайової задачі для рівняння теплопровідності. Нехай потрібно знайти функцію, яка описується рівнянням вигляду:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad (1)$$

при цьому

$$u(0, x) = 0,\ u(t, 0) = 1,\ u(t, 2) = 1. \qquad (2)$$

Побудуємо рівномірну сітку, крок якої відповідно:

$$Dx1 = 0{,}01;\ Dt1 = 0{,}001. \qquad (3)$$

Нехай послідовний алгоритм реалізується за неявною схемою методом прогонки. Тоді після дискретизації рівняння (1) отримують СЛАР вигляду:

$$U_{p,1} - U0_{p,1} = \left(\frac{Dt1}{Dx1^2}\right)\left[U_{p+1,1} + U_{p-1,1} - 2U_{p,1}\right], \quad (4)$$

при цьому номери внутрішніх сіткових вузлів відповідають виразу: $p=\overline{1,2m-1}$; шукані сіткові функції $U_{0,1}=1$, $U_{2m,1}=1$, $U_{p,1}$; значення величин $U0_{p,1}$ беруться з попереднього часового шару.

Система лінійних алгебраїчних рівнянь виду (4) має тридіагональну структуру, а саме:

$$\mathrm{C_p} U_{p+1,1} - U_{p,1} + D_p U_{p-1,1} = f_p\,, \quad (5)$$

при цьому

$$\left.\begin{aligned} &\mathrm{C_p} = \mathrm{B_p} = \frac{\mathrm{Dt1/Dx1^2}}{\left(1+\mathrm{Dt1/Dx1^2}\right)}, \\ &f_p = \frac{-U0_{p,1}}{\left(1+\mathrm{Dt1/Dx1^2}\right)}, \quad \text{якщо } p=\overline{1,2m-1} \end{aligned}\right\}. \quad (6)$$

Досить простий та зручний послідовний спосіб розв’язку різницевої крайової задачі (4)–(6) являє собою один із варіантів методу виключення невідомих за схемою Гауса й має назву методу прогонки. Мале число арифметичних операцій, а також досить слабка чутливість до обчислювальних похибок роблять прогонку дуже зручним засобом для реалізації послідовних обчислювальних алгоритмів.

Наведемо деякі аспекти обчислювального характеру при комп’ютерному моделюванні. При розв’язуванні нестаціонарних задач за допомогою неявних (або явних) методів розрахунки завжди ведуться за часовими шарами послідовно. Якщо вся інформація про сусідній шар поміщається в оперативну пам’ять, то особливих ускладнень не виникає. Але, якщо задача є настільки великою, що не відповідає викладеній раніше умові, то доводиться користуватися комбінованою пам’яттю. Час перенесення інформації з повільної пам’яті в оперативну є пропорційним числу точок у шарі. Час знаходження розв’язку задачі на черговому шарі також є пропорційний числу точок у шарі. Але період виконання однієї операції значно менший від середнього значення часу пересилання одиниці інформації з повільної пам’яті в оперативну. Тому при подібному обчисленні велика частина часу буде відводитися на організацію пересилань, тобто витрачатись непродуктивно. Отже, виникає таке питання: чи можна якимось чином підвищити ефективність використання комп’ютерної пам’яті при розв’язуванні зазначеного класу задач? А якщо є можливість, то як? Відповіді на запитання можна отримати при більш детальному вивченні графа алгоритму розв’язку поставленої задачі. По-перше, очевидно, що таку проблему можна вирішити за рахунок паралельного процесора. А по-друге, особливості розпаралелювання задачі повинні бути такими, щоб час відповідних обчислень і обробка даних в оперативній пам’яті були б більшими за час, який відводиться на пересилання даних. Нарешті, для того, щоб позбутися від використання комбінованої пам’яті при розв’язуванні задачі (1), необхідно застосувати до такого рівняння або чисельно-аналітичний підхід, або один із методів математичної фізики, наприклад, інтегральне перетворення Лапласа за часом.

Згідно з чисельно-аналітичним підходом у кожному вузлі ($x=x_p$) сіткової області розв’язок заданого рівняння шукається в класі аналітичних функцій, які допускають його подання у вигляді ряду Тейлора, тобто:

$$u_{p+\varepsilon_{x,1}}(t,x) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_x^n u_{p,n+1}(t)\,, \quad (7)$$

при цьому нормована змінна:

$$\varepsilon_x = \frac{x - \mathrm{x_p}}{\mathrm{x_{p+1}} - \mathrm{x_p}} \in [-1,1]\,, \quad (8)$$

невідомі тейлорівські компоненти шуканої функції u визначаються таким чином:

$$u_{p,n+1}(t) = \frac{(x_{p+1} - x_p)^n}{n!} \left.\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right|_{x=x_p}. \quad (9)$$

Після підстановки ряду (9) у співвідношення (7), використовуючи метод невизначених коефіцієнтів, одержимо систему диференціальних наслідків у формі системи звичайних диференціальних рівнянь (СЗДР). Розглядаючи отримане співвідношення як рекурентне за величиною n, можемо записати відповідні наслідки. Тоді загальний розв’язок рівняння (1) набуває вигляду:

$$u_{p+\varepsilon_{x,1}}(x,t)=\begin{Bmatrix} u_{p,1}(t)+ \\ +\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\varepsilon_x^{2n}}{(2n)!}(\frac{Dx1^2}{a})^n\frac{\partial^n u_{p,1}(t)}{\partial t^n}\end{Bmatrix}-$$
$$-\frac{\varepsilon_x}{\lambda}\cdot\begin{Bmatrix} u_{p,2}(t)+ \\ +\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\varepsilon_x^{2n}}{(2n+1)!}(\frac{Dx1^2}{a})^n\frac{\partial^n u_{p,2}}{\partial t^n}\end{Bmatrix}. \quad (10)$$

Необхідно відзначити, що обчислювальна система може використовуватися і для збільшення обсягу доступної оперативної пам'яті. Так, із збільшенням в N разів числа процесорів, у стільки ж збільшується й обсяг доступної оперативної пам'яті. Ця обставина стає вельми суттєвою під час розв'язку багатовимірних задач, коли виникають проблеми з пам'яттю обчислювального середовища (свопінг та ін.). Тому для більш повного аналізу ефективності розробленої багатопроцесорної системи було здійснені обчислювальні експерименти при моделюванні багатовимірних задач.

Розглянемо особливість конструювання схем розщеплення для розподіленого моделювання прикладних задач. Для того, щоб з'явилася можливість переходу до суттєво більш складних алгоритмів, необхідно розроблену методологію поставити на фундаментальну теоретичну основу. Для цього можна використати різницеві схеми розщеплення як один із найбільш важливих засобів моделювання багатовимірних нестаціонарних задач математичної фізики. Різницеві схеми розщеплення – це один з важливих засобів розрахунку багатовимірних нестаціонарних задач математичної фізики. Річ у тім, що різницеві схеми, в яких число арифметичних дій, потрібних для переходу між часовими шарами, пропорційне числу невідомих значень шуканих функцій, прийнято називати економічними. Відомо, що обчислення за явними схемами дуже прості. Якість арифметичних дій у них не підлягає удосконаленню. Проте, будучи економічною, явна схема є стійкою тільки при жорсткому її обмеженні на крок сітки у часі. Різницеві схеми розщеплення на основі сукупності пропозицій, не зовсім еквівалентних одна одній, але таких, що мають стереотипну мету звести задачу тривимірного поширення області залежності до послідовності схем, включають невідомі величини, які діють поперемінно за координатними напрямками і зводять розв'язок таких задач до скалярних прогонок. Тому різницева схема розщеплення вважається економічною і, безумовно, стійкою, тобто ніби поєднує в собі переваги явної і неявної схем.

Застосування числово-аналітичних розв'язків дозволяє для кожного часового шару проводити обчислення одночасно в будь-який момент, а, отже, не вимагає організації пересилання інформації з повільної пам'яті в оперативну, тобто виключається міжпроцесорний обмін даними. Цим і пояснюється суттєве прискорення розв'язування тих задач, які моделювалися за допомогою чисельно-аналітичних методів.

Нині набули значного поширення різні програмні продукти, які часто називають пакетами або комплексами програм. У даній роботі йдеться про пакет прикладних програм, призначений для обробки теплофізичних експериментів оберненими методами. Основна мета створення ППП – це надання практичної допомоги дослідникові на всіх етапах обробки теплофізичного експерименту оберненими методами за допомогою персонального обчислювального кластера. ППП використовується при плануванні й обробці результатів теплофізичного експерименту оберненими методами. Розроблені алгоритми, використані в ППП, досить просто перебудовуються на розв'язок інших коефіцієнтних і граничних ОЗТ.

Висновки

Розглянутий у даній роботі підхід до чисельно-аналітичної концепції візуалізації векторів у розв'язках дозволяє отримати будь-які необхідні дані для побудови гладких графіків або ізоліній на відповідних сітках. Максимальні ж паралельні форми алгоритму становлять предмет особливого інтересу, оскільки визначають мінімально можливий час реалізації алгоритму візуалізації.

Для здійснення обчислювальних експериментів на базі застосування багатопроцесорної обчислювальної системи розроблено пакет прикладних програм, що реалізує розв'язок коефіцієнтних обернених задач теплопровідності методом математичного моделювання. ППП розроблено з урахуванням вимог об'єктно-орієнтованого програмування. При цьому обчислення коефіцієнтних ОЗТ зводиться до задач оптимального керування, алгоритми розв'язку яких реалізовано в цьому ППП. Зауважимо, що ППП також включає блок візуалізації даних.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Башков Є.О., Іващенко В.П., Швачич Г.Г.* Високопродуктивна багатопроцесорна система на базі персонального обчислювального кластера // Проблеми моделювання та автоматизації проектування. – Донецьк: ДонНТУ. – 2011. – Вип. 9 (179). – С.312-324.

2. *Швачич Г.Г., Ткач М.А., Щербина П.А.* Суперкомпьютеры и высокопроизводительные вычисления // Бъдещето проблемите на световната наука: материали за 4-а межд. практична конф. – София. – 2008. – Т. 21. Съвремении технологии на информации. – С.22-27.

3. Коздоба Л.А. Вычислительная теплофизика. – Киев: Наук. Думка, 1992. – 224 с.

4. *Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А.* Численное моделирование процессов тепло- и массобмена. – М.: Наука, 1984. – 288 с.

5. *Роуч П.* Вычислительная гидромеханика: пер. с англ. – М.: Мир, 1980. – 616 с.

6. *Букатов А.А., Дацюк В.Н., Жегуло А.И.* Программирование многопроцессорных вычислительных систем. – Ростов-на-Дону: Изд-во ООО «ЦВВР», 2003. – 208 с.

7. *Воеводин В.В.* Математические модели и методы в параллельных процессах. – М.: Наука, 1986. – 296 с.

8. *Иващенко В.П., Швачич Г.Г., Шмукин А.А.* Параллельные вычисления и прикладные задачи металлургической теплофизики // Системні технології: регіональний зб. наук. праць. – Дніпропетровськ, 2008. – Вип. 3(56). – Т.1. – С.123-138.

9. *Башков Е.А., Иващенко В.П., Швачич Г.Г.* Перспективы применения современных коммуникационных технологий и исследование их влияния на эффективность многопроцессорных вычислительных систем // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка». – Донецьк: ДонНТУ, 2011. – Вип. 14 (188). –С.100-112.

10. *Информационные* системы и технологи: монография / В.П. Иващенко, Е.А. Башков, Г.Г. Швачич и др. – Красноярск: Научно-инновационный центр, 2011. – 302 с.

11. *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1966. – 724 с.

12. *Швачич Г.Г.* К вопросу конструирования параллельных вычислений при моделировании задач идентификации параметров окружающей среды // Математичне моделювання. – 2006. – № 2 (14). – С.23-34.

13. *Швачич Г.Г., Шмукин А.А.* Определение теплофизических свойств материалов на основе решений коэффициентных ОЗТ в экстремальной постановке // Теория и практика металлургии. – № 1, 2. – 2005. – С.104-108.

Надійшла до редакції 15.10.2016

ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ РЕШЕНИЙ ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ НА ОСНОВЕ СХЕМ ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ

Швачич Г.Г., Иващенко В.П., Иващенко Е.В.

Статья посвящена распределенному моделированию визуализации векторов решений прикладных задач на основе схем повышенного порядка точности. Высокое ускорение вычислений по сравнению с конечно-разностным подходом иллюстрируется использованием аналитических решений, которые позволяют проводить вычисление одновременно и параллельно по всем часовым слоям. Показано, что наиболее перспективным подходом к математическому моделированию прикладных задач следует считать тот, который основывается на численно-аналитических решениях. Выявлено, что эффективным средством решения прикладных задач в металлургическом производстве считают применение технологий параллельных вычислений на распределенных системах кластерного типа, которые имеют сравнительно небольшую стоимость и достаточно легко масштабируются как по количеству процессоров, так и по объему оперативной памяти. Рассмотренный в данной работе подход к численно-аналитической концепции визуализации векторов в решениях прикладных задач позволяет получить любые необходимые данные для построения гладких графиков или изолиний на соответствующих сетках. Максимальные же параллельные формы алгоритма представляют предмет особенного интереса, поскольку определяют минимально возможное время реализации алгоритма визуализации. Для проведения вычислительных экспериментов на базе применения многопроцессорной вычислительной системы разработан пакет прикладных программ, который реализует решение коэффициентных обратных задач теплопроводности методами математического моделирования. Пакет прикладных программ разработан с учетом требований объектно-ориентированного программирования.

Ключевые слова: многопроцессорная вычислительная система, ускорение, визуализация, распределенное моделирование, численно-аналитическое решение.

NUMERICAL-ANALYTICAL CONCEPTION OF DECISIONS OF THE APPLIED TASKS BASED ON CHARTS OF AN INCREASE ORDER OF EXACTNESS

Shvachych G.G., Ivaschenko V.P., Ivaschenko O.V.

The article is sanctified to the distributed modeling of visualization of decisions vectors of the applied tasks based on charts of an increase order of exactness. Higher acceleration of computation compared with the finite difference approach is illustrated by the use of analytical decisions that allow computation simultaneously and in parallel in all time layers. It is shown that the most promising approach to the mathematical modeling of applied tasks is one that is based on numerical-analytic decisions. It has been found that the application of parallel computing technologies in distributed cluster-type systems, having relatively low cost and easily scaled both by the number of processors and by the amount of RAM, is considered as an effective tool in the processing of applied tasks in metallurgical production. The approach considered in this work is the numerical-analytical concept of vectors visualization in the decisions of applied tasks that allows obtaining any necessary data for the construction of smooth charts or isolines on the corresponding grids. The maximum parallel forms of the algorithm are a subject of special interest, as they determine the minimum possible implementation time of the visualization algorithm. For computing experiments based on application of multiprocessor computing system the package of applied programs was developed to implement the decision of coefficient reverse tasks of heat-conduction by mathematical modeling method. The application package was developed taking into account the requirements of object-oriented programming.

Keywords: multiprocessor computer system, acceleration, visualization, distributed modeling, numerical and analytical decision.