# ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ МАНТИЙНЫХ ТЕЧЕНИЙ[1]

Г.Г. Лазарева
ИВМиМГ СО РАН
lazareva@ssd.sscc.ru
В.Д. Корнеев
ИВМиМГ СО РАН
korneev@ssd.sscc.ru
А.В. Бабичев
ИГМ СО РАН
babichev@igm.nsc.ru

Аннотация

Разработана параллельная версия программы для моделирования течений в мантии Земли. Нестационарная модель мантийных течений описывает сжимаемую среду с сильно изменяющимися реологическими и транспортными свойствами и основана на решении системы уравнений Навье-Стокса. Численная модель содержит как явные, так и неявные конечно-разностные схемы, реализованные векторными прогонками. В работе проведен детальный анализ параллельного алгоритма, позволяющего получать близкое к линейному ускорение, не смотря на использование векторной прогонки. Приведены основные характеристики параллельного алгоритма. Получены общее время счета и счета внутреннего цикла, связанного с вычислениями скоростей мантийных течений вдоль координат вычислительного пространства, при разной заданной точности вычислений и разных размерах сеточного пространства. Показана зависимость ускорения и эффективности от размеров сеточного вычислительного пространства при слабой зависимости этих параметров от заданной точности вычислений. В результате расчетов на многопроцессорной вычислительной системе получено адекватное описание процесса плавления и диапиризма в нижней коре, определена структура течения всплывающей гранитной магмы.

Геодинамика - наука о природе глубинных сил и процессов, возникающих в результате планетарной эволюции Земли. Исследование эволюции гравитационно-неустойчивых систем в Земле  является одной из актуальных задач геодинамики. Решение этой задачи связано с чрезвычайно важной проблемой эндогенной геологии - анализом процессов тепломассопереноса в земной коре. Геодинамика использует данные геологии, геохимиии и геофизики, а также широко применяет математическое и физическое моделирование глубинных процессов. Математическое моделирование играет важнейшую роль в геодинамике, позволяя проверять самые смелые идеи и совершать фундаментальные открытия. Развитие математического моделирования обусловлено прогрессом возможностей вычислительной техники, который позволяет учитывать все больший и больший комплекс взаимосвязанных физических процессов в самом широком диапазоне масштабов. Тем не

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке интеграционного проекта СО РАН № 2

менее, мощная вычислительная техника - это лишь одна из потребностей численного моделирования. Другая, существенно более важная, состоит в доступности подходящих численных алгоритмов и кодов, способных к эффективной эксплуатации на доступных компьютерах для изучения интересующих физических задач с хорошей точностью и наиболее гибким подходом для введения новых физических процессов. Моделирование мантийных течений имеет ряд существенных особенностей, поэтому не все хорошо зарекомендовавшие себя методы применимы к этому типу задач. Современный уровень моделирования предполагает многомерность и высокое разрешение моделей, что приводит к необходимости использования многопроцессорной вычислительной техники. Расширение моделей приводит к появлению новых требований к используемым методам решения, что способствует их дальнейшему развитию. В отличие от традиционного подхода, основанного на приближении Буссинеска, рассматриваемая модель основана на решении системы полных классических уравнений Навье-Стокса, описывающих динамику слабосжимаемой жидкости с переменными плотностью и вязкостью. Нелинейный характер уравнений данной модели приводит к необходимости использования методов решения, основанных на использовании вычислительной техники. Для получения более точных решений создана параллельная версия алгоритма, реализованная на супервычислительном комплексе Информационно-вычислительного центра (ИВЦ) НГУ (www.nusc.ru). Вычислительная система с общей памятью выбрана с учетом специфики численной модели, характеризующейся большим числом векторных прогонок и не требующей более десятка процессоров при распараллеливании.

Рассмотрим систему уравнений [1], описывающую динамику слабосжимаемой жидкости, замкнутую уравнением состояния:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\left(\rho \mathbf{v}\right) = 0,$$

$$\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial t} + \left(\mathrm{v}\nabla\right)\mathrm{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_k}\eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\frac{\partial v_m}{\partial x_m}\right) - g e_y,$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \left(\mathbf{v}\nabla\right)T = k\Delta T,$$

Уравнение состояние является прямым следствием выражения для плотности $\rho = \rho_{y=0}\left(1 - \alpha T + \beta(p - p_{y=0})\right)$: $p = p_{y=0} + \frac{1}{\beta}\left(\frac{\rho}{\rho_{y=0}} + \alpha T - 1\right)$, где $\rho$ – плотность, $\mathbf{v} = \left\{v_x, v_y\right\}$ – скорость, $T$ – температура, $p$ – давление, $\eta$ – вязкость, $g$ – ускорение свободного падения, $k$ – температуропроводность. В уравнении состояния использованы параметры $\alpha = 3\cdot 10^{-5} 1/C^o$, $\beta = 10^{-11} 1/Па$. Характерные значения переменных задачи: характерная длина $L_0 = 3\cdot 10^4\, м$, $\rho_0 = 2.8\cdot 10^3 кг/м^3$, $T_0 = 550^o C$, $k_0 = 10^{-6} м^2/сек$, $t_0 = L_0^2/k_0$, $v_0 = k_0/L_0$, $p_0 = \eta_0 k_0/L_0^2$. Для определения вязкости в модели использовано уравнение Аррениуса: $\eta = A\cdot \exp\left(\frac{E}{RnT}\right)$, где $A = 1.2\cdot 10^{17}$, $E = 1.34\cdot 10^5$, $n = 2.6$ - экспериментальные данные, $R$ - универсальная газовая постоянная, $T$ – температура. В рассматриваемой постановке задачи значения коэффициента вязкости находятся в диапазоне $\eta_0 = 10^{18} \div 10^{20}$ Па×с, следовательно

$\Pr = \dfrac{\eta_0}{\rho_0 k_0} = 3.6 \cdot 10^{20} \div 3.6 \cdot 10^{22}$, $Ra = \dfrac{\alpha g \rho \theta L^3}{\eta_0 k_0} = 2.7 \cdot 10^2 \div 2.7 \cdot 10^4$, где $\theta$ - характерный перепад температуры. В модели рассматривается нормальная кора с экспоненциальным распределением радиоактивных источников тепла.

Выбор модели слабосжимаемой жидкости определяется как желанием использовать более полную модель процесса с учетом скачков плотности, вызванных фазовыми переходами при плавлении, так и возможностью создания численной технологии решения с привлечением хорошо апробированных конечно-разностных схем. Известен [2] критерий применимости классической модели Обербека-Буссинеска для описания тепловой гравитационной конвекции. Численное интегрирование полной системы уравнений Навье-Стокса является весьма сложной и трудоемкой вычислительной задачей, требующей для своего решения разработки специальных конечно-разностных схем и численных алгоритмов. Существенным отличием задач мантийной конвекции являются значение числа Прадтля порядка $10^{20}$, нелинейное уравнение состояния, разномасштабность различных процессов, сильно (на десятки порядков) изменяющиеся значения вязкости. Эти особенности создают дополнительные трудности при численной реализации модели с учетом сжимаемости среды. Тем не менее, в настоящее время возможности вычислительной техники позволяют проводить численное моделирование самых подробных моделей конвективных течений с учетом сильно изменяющихся реологических и транспортных свойств, таких как вязкость, плотность и теплопроводность.

Алгоритм рассматриваемой задачи распараллелен на вычислительной системе с общей памятью ИВЦ НГУ. Алгоритм реализован на языке Фортран с использованием программных средств распараллеливания алгоритмов над общим полем памяти - OpenMP. Расчетная область задана в виде прямоугольника в плоскости (X,Y). В расчетной области задана равномерная прямоугольная сетка размером (iDimX, iDimY). В узлах сетки определены значения каждого параметра задачи, хранящиеся в пятнадцати массивах размером (iDimX, iDimY). Расчет параметров: плотность, температура и давление ведется по явным схемам сквозного счета (без выделения особенностей) на 5-точечном шаблоне "крест". Скорости вдоль координат рассчитываются по неявным схемам на 5-точечном шаблоне "крест".

Распараллеливание алгоритма заключается в выделении частей (подобластей) расчетной области и распределении этих подобластей по потокам (threads) (в качестве задания работ) для вычислений каждым потоком в назначенной ей подобласти. Расчетная область условно "разрезается" на полосы вдоль координаты X или Y, которые (в данной программе) статически распределяются средствами OpenMP по потокам для вычислений. Заметим, что точки соседних полос, необходимые при вычислении по шаблону "крест" , доступны всем потокам, поскольку все данные находятся в общей памяти. Параметры (плотность, температура, давление), вычисляемые по явным схемам с расщеплением по пространственным направлениям, рассчитываются полосами вдоль одной из координат. Параметры скоростей рассчитываются во внутреннем цикле программы по неявной схеме методом прогонки и расчет осуществляется вдоль обеих координат. Массивы для хранения прогоночных коэффициентов задаются в локальной памяти каждого потока, что позволяет потокам осуществлять обратный проход (в алгоритме прогонки) для каждой строки или столбца вычисляемой ими полосы.

При разработке параллельного алгоритма важно знать потенциальные возможности ускорения вычислений и накладные расходы, связанные организацией параллельной работы потоков, их взаимодействием и синхронизацией. Кроме того, важно знать показатели эффективности работы параллельного алгоритма на вычислительной системе, позволяющий сравнивать его с другими параллельными алгоритмами. А так же оценить возможности параллельной реализации на вычислительных системах с общей памятью с большим количеством процессорных ядер.

Для численной реализации рассматриваемого алгоритма в качестве вычислительной системы с общим полем памяти используется вычислительный узел кластера ИВЦ НГУ. Вычислительные узлы кластера состоят из двух 4-х ядерных процессоров Intel Xeon 5355, работающих на частоте 2.66 ГГц, и с 16-ю ГБайт общей оперативной памяти.

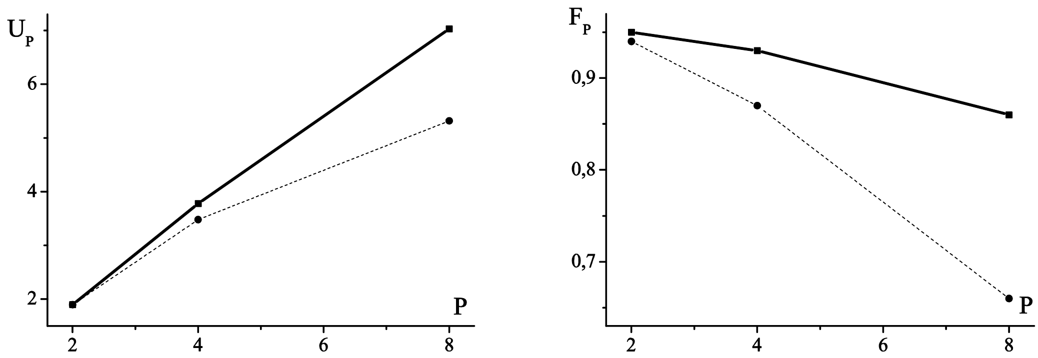


Рис. 1 Ускорение (а) и эффективность (б) счета.

Коэффициент ускорения $U_P$ на P потоках вычисляется как: $U_p = T_1 / T_p$, где $T_1$ - время счета задачи на одном потоке; $T_p$ - время счета задачи на P потоках. На рис. 1, а приведены графики ускорения счета для 2-х, 4-х и 8-и потоков для разных размеров сеточного пространства вычислений, задаваемых количеством точек сетки вдоль координат.

Коэффициент эффективности $F_P$ на P потоках вычисляется как $F_p = \dfrac{T_{pc}}{T_{pc} + T_{ps}}$, где $T_{pc}$ - время "чистого" счета задачи (без учета любых других затрат) на P потоках, $T_{ps}$ - общие затраты времени на взаимодействия и синхронизацию P потоков. Заметим, что вычисления на одном потоке производились, во-первых, как вычисления последовательной программы, и во-вторых, в скрипте запуска программы указывалось, что вычисления выполняются на узле только одним потоком. Во всех случаях программа запускалась на узле эксклюзивно. (Эксклюзивно - означает, что ресурсы узла отдаются программе в монопольное использование). Это связано с предотвращением помех со стороны других пользовательских задач или других, не вычисляющих в данный момент, ядер этого узла, что тем самым обеспечивает большую достоверность тестирования.

Сплошная линия показывает эффективность счета алгоритма при размерах сеточного пространства 5000 х 1000. Пунктир - на сеточном пространстве 10000 х 2000. Графики показывают, что размер сеточного пространства, аналогично ускорению, оказывает заметное влияние на ускорение и эффективность параллельного алгоритма в сторону его уменьшения с ростом количества узлов расчетной сетки. Таким образом, возможно получать для сеточных пространств среднего размера (5000x1000) близкое к линейному ускорение, не смотря на использование векторной прогонки.

ЛИТЕРАТУРА

[1]. Лазарева Г.Г., Полянский О.П., Федорук М.П., Бабичев А.В., Вшивков В.А., Ревердатто В.В. Нестационарная модель конвективных мантийных течений в приближении слабосжимаемой жидкости. Вычисл. технологии. 2011. Т. 16, N 5. С.

[2]. Андреев В. К., Гапоненко Ю. А., Гончарова О. Н., Пухначев В. В. Современные математические модели конвекции. М: Физматлит. 2008г. 368 с.