УДК 518:517.944 519.6 http://doi.org/10.15407/pp2024.02-03.078

О.С. Дученко, А.Н. Нестеренко, О.В. Попов

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТЕПЛОПЕРЕНОСУ НА КОМП'ЮТЕРАХ ГІБРИДНОЇ АРХІТЕКТУРИ

Робота присвячена розробленню методів і алгоритмів комп'ютерного моделювання процесів теплопереносу, які відіграють суттєву роль в галузі механіки суцільних середовищ. Знаходження температурних полів у процесі зварювання для визначення кінетики температурних напружень і деформацій сприяє підвищенню технолого-експлуатаційних показників зварних конструкцій. У роботі запропоновано методику визначення температурних полів під час зварювання тонколистових елементів конструкцій. В результаті моделювання процесу теплопереносу, враховуючи нерівномірність нагрівання зварюваних елементів у процесі зварювання, отримано нестаціонарну теплову задачу. Для чисельного розв'язання цієї задачі методом скінченних елементів отримано дискретну задачу – систему звичайних диференціальних рівнянь першого порядку, тобто задачу Коші. В роботі запропоновано високопродуктивний комп'ютерний алгоритм методу Рунге-Кутта четвертого порядку для розв'язування задачі Коші. Алгоритм розроблено для сучасних суперкомп'ютерів, побудованих на нових багатоядерних процесорах. Запропонований алгоритм базується на багаторівневій моделі паралельних обчислень. На верхньому рівні паралелізму обчислення проводяться у вигляді паралельних процесів, між якими розподіляється пам'ять, забезпечується синхронізація обчислень та обмін інформацією. Розпаралелювання на цьому рівні доцільно здійснювати засобами MPI. На другому рівні паралелізму обчислення проводяться за допомогою директив OpenMP або програмних модулів бібліотеки Intel MKL з використанням спільної пам'яті. Третій рівень паралелізму передбачає обробку даних векторними арифметико-логічними пристроями, включення яких до програми відбувається автоматично за допомогою компілятора. Розроблений алгоритм апробовано на розв'язанні задачі визначення поля температур, яка виникає під час дослідження життєвого циклу зварних конструкцій. Такі розрахунки використовуються, зокрема, в задачі визначення кінетики температурних деформацій та напружень у процесі зварювання тонких пластин. Наведено деякі результати тестування запропонованого методу та розробленого алгоритму на суперкомп'ютері Інституту кібернетик імені В.М. Глушкова НАН України СКІТ.

Ключові слова: рівняння теплопровідності, температурне поле, задачі Коші для систем звичайних диференціальних рівнянь.

O.S. Duchenko, A.N. Nesterenko, O.V. Popov

MODELING OF HEAT TRANSFER PROCESSES ON HYBRID ARCHITECTURE COMPUTERS

The paper is devoted to the development of methods and algorithms for computer simulation of heat transfer processes, which play a significant role in the field of continuum mechanics. Finding the temperature fields during welding to determine the kinetics of temperature stresses and deformations helps to increase the technological and operational indicators of welded structures. This paper proposes a method of determining temperature fields during welding of thin-sheet elements of structures. This paper proposes a method of determining temperature fields during welding of thin-sheet elements of structures. A non-stationary thermal problem was obtained as a result of the simulation of the heat transfer process, taking into account the non-uniformity of the heating of the welded elements during the welding process. A discrete problem was obtained for the numerical solution of this problem by the finite element method – a first-order system of ordinary differential equations, that is, the Cauchy problem. This paper proposes a high-performance fourth-order Runge-Kutta computer algorithm for solving the Cauchy problem. The algorithm is developed for modern supercomputers built on new multi-core processors. The proposed algorithm is based on a multi-level model of parallel computing. At the upper level of parallelism, calculations performs in form of parallel processes, memory is distributed between them, also ensures synchronization of calculations and information exchanges. Parallelization at this level is expedient to be carried out by means of MPI. At the second level of parallelism, calculations performs using OpenMP directives or Intel MKL library software modules using shared memory. The third level of parallelism involves data processing with vector arithmetic and logic devices, which are included in the program automatically with the help of the compiler. The developed algorithm was tested on solving the problem of determining the temperature field, which arises during the

study of the life cycle of welded structures. Such calculations are used, in particular, in the problem of determining the kinetics of temperature deformations and stresses during welding of thin plates. Some results of testing the proposed method and the developed algorithm on the SKIT supercomputer of the V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the National Academy of Sciences of Ukraine are presented.
Key words: thermal conductivity equation, temperature field, Cauchy problems for systems of ordinary differential equations.

Вступ

Комп’ютерне моделювання процесів теплопереносу відіграє суттєву роль в галузі механіки суцільних середовищ. Так термодеформаційні процеси та перетворення в металах визначають технологічну міцність зварного шва та зони термічного впливу. Тому знаходження температурних полів під час зварювання для визначення кінетики температурних напружень і деформацій сприяє підвищенню технологоексплуатаційних показників зварних конструкцій. В результаті моделювання процесу теплопереносу, враховуючи нерівномірність нагрівання зварюваних елементів в процесі зварювання, отримано нестаціонарну теплову задачу.

Для чисельного розв’язання цієї нестаціонарної задачі методом скінченних елементів отримано дискретну задачу – задачу Коші для системи звичайних диференціальних рівнянь першого порядку. Як правило такі розрахункові задачі мають дуже велику кількість рівнянь – від десятків тисяч до мільйонів. Тому для комп’ютерного моделювання процесів теплопереносу доцільно використовувати високопродуктивні обчислювальні системи. В [1] запропоновано методи та паралельні алгоритми розв’язування задач Коші на комп’ютерах MIMD-архітектури. Сучасні суперкомп’ютери, побудовані на нових багатоядерних процесорах, дають можливість підвищення продуктивності за рахунок використання багаторівневої моделі паралельних обчислень.

Верхній рівень багаторівневої моделі паралельних обчислень – паралелізм рівня обчислювальних вузлів (process level parallelism – PLP), який дає можливість проводити обчислення у вигляді паралельних процесів, передбачає використання розподіленої між паралельними процесами пам’яті, забезпечує синхронізацію обчислень та обмін інформацією між процесами. Другий рівень – паралелізм рівня потоків (thread level parallelism – TLP) передбачає використання потоків, які працюють із загальною пам'яттю. Наступний рівень – паралелізм обробки даних векторними арифметико-логічними пристроями (data level parallelism – DLP) дає можливість автоматичного включення паралелізму до програми за допомогою компілятора.

Таким чином для отримання ефективних алгоритмів необхідно:

1. розділити задачу на підзадачі так, щоб оптимізувати комунікаційні витрати;
2. вибрати архітектуру паралельного комп’ютера;
3. врахувати структуру пам’яті процесорних пристроїв;
4. розподілити дані та обчислення між процесами, забезпечивши рівномірне завантаження обчислювальних вузлів комп’ютера.

Вихідна задача. Розглянемо задачу знаходження нестаціонарного поля температур для тонкої пластини.

У загальному вигляді температурне поле описується нестаціонарним нелінійним рівнянням теплопровідності. Для тонкої пластини можна знехтувати нерівномірністю поля температур по товщині пластини. Тоді тривимірне рівняння теплопровідності зводиться до двовимірного:

$$c\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial y}\right)+\mathrm{w}, \qquad (1)$$

де c – питома теплоємність (в $Дж/см^3$), λ – теплопровідність матеріалу (в $Дж/(см\cdot с)$), w – об'ємна потужність джерела тепла (в $Дж/(см^3\cdot с)$). Теплофізичні характеристики (c і λ) багатьох матеріалів у широкій області температур відомі з довідників.

Оскільки процес плавлення та затвердіння в багатьох випадках відбувається в інтервалі температур від T_S (температура твердої фази) до T_L (температура рідкої фази) і виділення прихованої теплоти плавлення здійснюється шляхом збільшення питомої теплоємності в області фазового перетворення, то питома теплоємність визначається наступним чином:

$$c = \begin{cases} c\,(T), & T \le T_S, \\ c\,(T_S) + \dfrac{q_{ск}}{T_L - T_S}, & T_S < T < T_L, \\ c\,(T_L), & T > T_L, \end{cases}$$

де $q_{ск}$ – прихована теплота плавлення (в Дж/(К·см3)).

В околі місцезнаходження джерела тепла утворюється рідка ванна розплаву, де процес переносу тепла відбувається як за рахунок теплопровідності, так і за рахунок перемішування. Для врахування впливу перемішування в цій ділянці використовують ефективний коефіцієнт теплопровідності:

$$\lambda = \begin{cases} \lambda(T), & T \le T_S, \\ n\lambda(T_S), & T > T_S \quad (n = 3 \div 5). \end{cases}$$

За граничні умови приймається закон конвективного теплообміну тіла з навколишнім середовищем:

$$-\lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial n} = \alpha \cdot (T - T_0), \qquad (2)$$

де α – коефіцієнт конвективного теплообміну, T_0 – температура навколишнього середовища, похідна температури береться по зовнішній нормалі до контуру пластини.

Як початкова умова приймається рівність температури тіла і навколишнього середовища в початковий момент часу t_0:

$$T(t_0) = T_0. \qquad (3)$$

Таким чином, з урахуванням конвективного потоку тепла з поверхні рівняння теплопровідності (1) має вигляд:

$$c\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial y}\right) - \frac{2\alpha(\mathrm{T} - \mathrm{T}_0)}{\delta} + \mathrm{w} \qquad (4)$$

де δ – товщина пластини.

Будемо вважати, що об'ємна потужність джерела за товщиною розподіляється рівномірно. Якщо початок координат розмістити у точці розташування цього джерела, то об'ємна потужність джерела обчислюється за формулою:

$$w = q_0 e^{-\left(K_x x^2 + K_y y^2\right)},$$

де K_x, K_y − коефіцієнти зосередженості теплового потоку, а $q_0 = Q\dfrac{\sqrt{K_x K_y}}{\pi\delta}$ (Q – ефективна потужність джерела).

Початково-крайова задача (2)-(4) може бути сформульована для функції $u \in U_0(\Omega) \times [t_0, t_f]$ у варіаційній формі:

$$\forall v \in U_0 \quad \begin{aligned} d(u', v) + a(u, v) &= l(w, v), \\ u(t_0) &= 0, \end{aligned} \qquad (5)$$

де $u = T - T_0$, u' – перша похідна функції u за часом t, $d(z,v) = \iint\limits_{\Omega} czv dx$, $a(u,v) = = \iint\limits_{\Omega}\left[\lambda\left(\dfrac{\partial v}{\partial x_1}\dfrac{\partial u}{\partial x_1} + \dfrac{\partial v}{\partial x_2}\dfrac{\partial u}{\partial x_2}\right) + \dfrac{2\alpha}{\delta}vu\right]dx + + \int\limits_{\Gamma}\alpha vu d\gamma$, $l(w,v) = \iint\limits_{\Omega} vw dx$ – лінійні по функції v функціонали.

Дискретна задача. Для розв'язання варіаційної задачі (5) можна використати метод скінчених елементів (МСЕ). Якщо $U_0^h \subset U_0$ – скінченновимірний підпростір МСЕ, і $v^h(x) \in U_0^h$, то дискретна варіаційна нестаціонарна задача має вигляд: $\forall v^h \in U_0^h$

$$\begin{aligned} d\left((u^h)', v^h\right) + a(u^h, v^h) &= l(w, v^h), \\ u^h(t_0) &= 0. \end{aligned} \qquad (6)$$

Запишемо $u^h(x,t) = \sum\limits_{i=1}^{n} U_i(t)\varphi_i(x)$ і, $v^h(x) = \sum\limits_{i=1}^{n} V_i\varphi_i(x)$, де $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ – множина базисних функцій підпростору U_0^h. Тоді $d((u^h)', v^h) = V^T M U'$, $a(u^h, v^h) = V^T K U$, $l(w, v^h) = V^T W$ і замість задачі (6) отримуємо задачу Коші для системи звичайних диференціальних рівнянь (СЗДР)

$$M\frac{dU}{dt}+KU-Y=0,\quad U(t_0)=0 \qquad (7)$$

або

$$\frac{dU}{dt}=-M^{-1}KU+M^{-1}W,\quad U(t_0)=0\,. \quad (8)$$

Тут матриця M – зазвичай діагональна, а матриця K – стрічкова.

Постановка задачі Коші для СЗДР. Задачу Коші для СЗДР на інтервалі $[t_0, T]$ розглядатимемо у вигляді:

$$\frac{dy}{dt}=f(t,y), \qquad (9)$$

$$y(t_0)=y_0\ , \qquad (10)$$

де $y=(y_1,y_2,\dots,y_n)^T$ – шуканий вектор розв’язку.

В багатьох практичних задачах (9) можна записати у матричній формі (8) з діагональною матрицею M і матрицею K розрідженої структури (причому часто стрічкової).

Для розв’язання зазначеної СЗДР використаємо метод Рунге-Кутта 4-го порядку, який є найбільш розповсюдженим методом чисельного розв’язування задач з початковими умовами для СЗДР та реалізується за формулами:

$$y^{(i+1)}=y^{(i)}+(k_1+2k_2+2k_3+k_4)/6, \qquad (11)$$

де

$$\begin{aligned} k_1&=h_i f(t_i,y^{(i)}),\\ k_2&=h_i f(t_i+h_i/2,y^{(i)}+0{,}5k_1),\\ k_3&=h_i f(t_i+h_i/2,y^{(i)}+0{,}5k_2),\\ k_4&=h_i f(t_i+h_i,y^{(i)}+k_3), \end{aligned} \qquad (12)$$

$i=0,1,2,\dots$ верхній індекс – номер точки, нижній індекс – номер компоненти вектора.

Отже, для знаходження розв’язку СЗДР (9)-(10) методом Рунге-Кутта 4-го порядку з автоматичним вибором кроку інтегрування для досягнення заданої точності розв’язку можна виділити наступні підзадачі [2]:

1) обчислення вектор-функції $f(t,y)$ для знаходження векторів k_1, k_2, k_3, k_4 за формулами (12);

2) обчислення вектора розв’язку $y=(y_1,y_2,\dots,y_n)^T$ у наступній точці інтегрування за формулою (11);

3) обчислення похибки отриманого розв’язку, перевірка умови досягнення заданої точності та корекція кроку інтегрування, якщо задана точність не досягнута;

4) обчислення константи Ліпшиця.

Паралельний алгоритм методу Рунге-Кутта 4-го порядку точності. Реалізація методу Рунге-Кутта 4-го порядку для розв’язування СЗДР з використанням багаторівневого паралелізму передбачає автоматичний розподіл вихідних даних та компонент векторів правих частин і розв’язків у локальній пам'яті ядер кожного процесора, а також автоматичний вибір довжини машинного слова та кроку інтегрування для отримання заданої точності розв’язку.

Для збалансованого завантаження обчисленнями процесорів використовується одновимірний блочний розподіл даних та обчислень. Водночас розмір блоків обчислюється за формулою:

$$s_q=\begin{cases}\lceil n/p\rceil+1, & q<n-p\lceil n/p\rceil\\ \lceil n/p\rceil, & q\ge n-p\lceil n/p\rceil\end{cases},$$

де n – порядок СЗДР, p – кількість процесів, $q = 0, 1, \dots, p-1$ – логічний номер процесу, значення $\lceil a\rceil$ дорівнює цілій частині числа a. За цією схемою розподіляються компоненти векторів y та $f(t,y)$. Така схема дозволяє виконувати автоматичний розподіл обчислень компонент вектор-функції СЗДР між p процесорами [3,4].

Ще однією перевагою такої схеми розподілу є те, що в багатьох випадках обміни даними здійснюються лише між процесорами, які містять сусідні блоки.

Запропонований паралельний алгоритм методу Рунге-Кутта 4-го порядку реалізується наступним чином.

1. На рівні паралелізму обчислювальних вузлів із розподіленою пам’яттю (I-й рівень), використовуючи p MPI-процесів, реалізуються підзадачі 1–3 на кожному кроці інтегрування алгоритму, а підзадача 4 – по завершенні процесу інтегрування. Для підзадач 1–3 виконуються обміни даними, використовуючи стандартні функції MPI.

2. Кожна з підзадач 1–3, як правило, зводиться до виконання однорідних операцій над великим обсягом даних (переважно це множення розрідженої матриці на вектор та додавання векторів). Тому тут доцільно використати спільну пам'ять, реалізувавши рівень паралелізму потоків (ІІ-й рівень) в середовищі OpenMP. Тут для виконання кожної з підзадач 1–3 виконується розпаралелення між деякою кількістю потоків (threads). Слід зауважити, що обчислення значень компонент вектор-функції $f(t, y)$ (підзадача 1), як правило, через достатньо високий порядок векторів потребує значно більшої кількості арифметичних операцій – лише у такому випадку застосування другого рівня паралелізму має сенс. З іншого боку, якщо для збереження даних і виконання обчислень достатньо одного вузла із спільною пам'яттю, то доцільно перший рівень не використовувати.

3. На рівні паралелізму обробки даних (ІІІ-й рівень) розпаралелення виконується за рахунок використання опцій компілятора.

Слід зазначити, що кількість арифметичних операцій, необхідних для обчислення компонент правої частини СЗДР (вектор-функції $f(t, y)$) істотно впливає на ефективність і прискорення обчислень. Тому поряд із розпаралеленням обчислення правої частини СЗДР для підвищення ефективності алгоритму і забезпечення необхідного рівня похибок доцільно для цих операцій використати змішану розрядність. Тобто залежно від властивостей оператора задачі здійснити обчислення або на одинарній розрядності (*float*), або на подвійній (*double*), або на ще вищій розрядності.

В таблиці 1 представлено час розв'язання теплової задачі на суперкомп'ютері СКІТ Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України. СЗДР порядку n = 28 471 (n_x=400; n_y=70; n=n_x×n_y) розв'язувалась на інтервалі [0,1]. У другій колонці таблиці наведено часи розв'язування задачі з використанням лише першого рівня паралелізму; у третій – першого та другого рівнів; у четвертій – усіх трьох рівнів паралелізму.

Результати, наведені у таблиці, свідчать, що розроблений паралельний алгоритм дозволяє значно зменшити час розв'язування задачі (у 7,67 раз у порівнянні з однопроцесорним варіантом). Крім того, зростання часу розв'язування задачі на дванадцяти процесах свідчить, що оптимальною архітектура комп'ютера для розв'язування СЗДР порядку n = 28 471 є вісім процесів.

Таблиця 1

Часи розв'язування теплової задачі

Кількість MPI-процесів	Час (сек) І рівень	І і ІІ рівні	Три рівні
1	1,84	1,5	0,77
2	0,96	0,78	0,42
4	0,48	0,43	0,29
8	0,32	0,32	0,22
12	0,29	0,31	0,24

Висновки

Використовуючи багаторівневу модель паралельних обчислень з урахуванням особливостей архітектури комп'ютера та структури даних задачі розроблено ефективний алгоритм розв'язування СЗДР, який програмно реалізовано на паралельних комп'ютерах гібридної архітектури. Водночас час розв'язання задач суттєво скорочується, що дає можливість розв'язувати задачі високих порядків у реальному часі, які висуває сучасне життя перед наукою.

Література

1. А.Н. Химич, И.Н. Молчанов, А.В. Попов, Т.В. Чистякова, М.Ф. Яковлев, Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики, Наукова думка, Киев, 2008.
2. М.Ф. Яковлев, В.М. Бруснікін, Т.О. Герасимова, Розв'язування задач з початковими умовами для систем звичайних диференціальних рівнянь на багатоядерному комп'ютері з графічними прискорювачами Інпарком, *Математичні машини і системи*, 2015. №2. С. 20–27.
3. М.Ф. Яковлев, Т.О. Герасимова, А.Н. Нестеренко, Особливості розв'язування систем

нелінійних та диференціальних рівнянь на паралельних комп'ютерах, *Питання оптимізації обчислень* (*ПОО – XXXV*). *Праці міжнародного симпозіуму*. – Київ: Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, 2009. № 2. С. 435–439.
4. А.Н. Химич, М.Ф. Яковлев, Т.А. Герасимова, Некоторые вопросы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений на MIMD-компьютерах, *Кибернетика и системный аналіз*, 2007. № 2. С. 175-182. https://doi.org/10.1007/s10559-007-0049-3

References

1. A.N. Khimich, I.N. Molchanov, A V. Popov, T.V. Chistyakova, and M.F. Yakovlev, Parallel Algorithms for the Solving of Computational Mathematics Problems. [in Russian], Naukova Dumka, Kyiv, 2008.
2. M. Yakovlev, V. Brusnikin, T. Gerasymova, The solving of initial-value problems for systems of ordinary differential equations on multi-core computer with graphic accelerators Inparcom, in: Mathematical machines and systems, 2015, pp. 20–27.
3. M. Yakovlev, T. Gerasymova, A. Nesterenko, Characteristic features of the solving both of non-linear systems and systems of ordinary differential equations on parallel computers, in: Proceedings of the international symposium "Optimization problems of computations" (OPC – XXXV). Kyiv: V.M. Glushkov Institute of cybernetics of NAS of Ukraine, 2009, Kyiv: Vol. 2. pp. 435-439.
4. A. Khimich, M. Yakovlev, T. Gerasymova, Some questions related to the solving of systems of ordinary differential equations on MIMD computers, in Cybernetics and system analysis. 2007, (2). pp. 175-182. https://doi.org/10.1007/s10559-007-0049-3

Одержано: 10.04.2024
Внутрішня рецензія отримана: 21.04.2024
Зовнішня рецензія отримана: 29.04.2024

Про авторів:

[1]*Дученко Олександр Сергійович*,
молодший науковий співробітник.
http://orcid.org/0009-0009-4157-1743.

[2]*Нестеренко Алла Никифорівна*,
молодший науковий співробітник.
http://orcid.org/0000-0001-6174-1812.

[3]*Попов Олександр Володимирович*,
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник,
провідний науковий співробітник,
http://orcid.org/0000-0002-1217-2534.
alex50popov@gmail.com
тел. (067)-234-12-08

Місце роботи авторів:

[1]Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова
НАН України
Тел. (+38) (044) 526-20-08
E-mail: incyb@incyb.kiev.ua,
https:\\www.incyb.kiev.ua

[2]Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова
НАН України,
Тел. (+38) (044) 526-20-08
E-mail: incyb@incyb.kiev.ua,
https:\\www.incyb.kiev.ua

[3]Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова
НАН України,
Тел. (+38) (044) 526-20-08
E-mail: incyb@incyb.kiev.ua,
https:\\www.incyb.kiev.ua