Использование гибридных кластерных вычислений в решении задачи о фазовом переходе

Дмитрий Глызин
glyzin@gmail.com

Ярославский госуниверситет им. П.Г. Демидова

Таруса, 2 октября 2014 г.

Задача

- Строительство в условиях многолетней мерзлоты
- Учет различных типов грунта с различной влажностью
- Краевые условия, учитывающие наличие построек, снега, силу ветра
- Необходим прогноз на несколько лет
- Типичные масштабы области: 100x100x10м
- Элементы размером 5x5x100 см

Задача

Рассмотрим задачу теплопроводности

$$\frac{\partial E(x,t)}{\partial t} = \mathrm{div}(\lambda(x,u)\nabla u(x,t)) + F(x) \qquad (1)$$

в прямоугольной области $x \in D \subset \mathrm{R}^3$ с условиями непроницаемости на границе, где $E(x,t)$ — энтальпия на единицу объема, $u(x,t)$ — температура, $\lambda(x,u)$ — известная зависимость коэффициента теплопроводности от температуры, $F(x,t)$ — известная плотность внутренних источников тепла.

Задача

Для моделирования процесса распространения тепла в грунте в условиях многолетней мерзлоты необходимо учитывать замерзание воды, для этого связь между E и u (в каждой точке области) будем задавать в виде:

$$E(u) = \int_0^u C(\xi) + Q_w \delta(\xi - u^*) d\xi, \tag{2}$$

где $C(u)$ — известная теплоемкость грунта, u^* — температура фазового перехода, Q_w — теплота плавления воды.

Метод

Для численного решения задачи (1)-(2) область $D = [0, s^{(x)}]x[0, s^{(y)}]x[0, s^{(z)}]$ разобьем прямоугольной сеткой

$$
\begin{aligned}
0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_{m_x} = s^{(x)}, \quad & h_i^{(x)} = x_{i+1} - x_i \\
0 = y_0 < y_1 < \cdots < y_{m_y} = s^{(y)}, \quad & h_j^{(y)} = y_{j+1} - y_j \\
0 = z_0 < z_1 < \cdots < z_{m_z} = s^{(z)}, \quad & h_k^{(z)} = z_{k+1} - z_k
\end{aligned}
$$

на элементарные объемы $v_{i,j,k}$, $i = 0..m_x - 1$, $j = 0..m_y - 1$, $k = 0..m_z - 1$

Метод

Каждый шаг метода требует:

- вычисления теплопотока через все грани элементарных объемов
- обновления энтальпии элементарных объемов с учетом теплопотоков
- вычисления температуры и доли жидкой воды по новой энтальпии

Теплопоток

Вычисление теплопотока через все грани элементарных объемов:

$$q^x_{i,j,k} = \frac{h^{(y)}_j h^{(z)}_k (u_{i-1,j,k} - u_{i,j,k})}{h^{(x)}_{i-1}\lambda^{-1}_{i-1,j,k}/2 + h^{(x)}_i \lambda^{-1}_{i,j,k}/2},$$

где $\lambda = w * \lambda_{Th} + (1-w) * \lambda_{Fr}$ — теплопроводность, w — доля жидкой воды, λ_{Th} и λ_{Fr} — экспериментально полученные теплопроводности талого и мерзлого грунта

Энтальпия

Новое значение энтальпии с учетом теплопотоков:

$$H_{i,j,k}^{l+1} = H_{i,j,k}^{l} + \\ + \frac{\Delta t}{\Delta v_{i,j,k}} \left(q_{i,j,k}^{x} - q_{i+1,j,k}^{x} + q_{i,j,k}^{y} - q_{i,j+1,k}^{y} + q_{i,j,k}^{z} - q_{i,j,k+1}^{z}\right) \quad (3)$$

Температура и доля жидкой воды

В зависимости от величины энтальпии температура вычисляется тремя способами:

- $H > H_{melt}$: $u = u^* + (H - H_{melt})/C_{Th}$
- $H_0 \leq H \leq H_{melt}$: $u = u^*$
- $H < H_0$: температура приближается по подготовленной таблице зависимости энтальпии от температуры.

Численное моделирование

Кластерные вычисления по стандартной схеме:

- разделение работы между узлами с помощью MPI
- в рамках одного узла использование параллелизма CPU и GPU с помощью OpenMP и CUDA

Производительность на одном узле

Задача: 100x100x100 элементов
Узел: 2xE5-2690 (8 ядер, 2.9ГГц), 3xGPU Tesla M2090

- Только 2 CPU: 409 млн. блоков в секунду
- 1 GPU: 607 млн. блоков в секунду
- 3 GPU+2 CPU: 1520 млн. блоков в секунду
- потери на синхронизацию 32%