

Высокопроизводительный алгоритм для задачи радиационно-кондуктивного переноса тепла в слое*

А.Е. Ковтанюк

Дальневосточный федеральный университет

Рассматривается задача радиационно-кондуктивного теплообмена в рассеивающем слое с отражающими границами. Для ее решения предлагается итерационный рекурсивный алгоритм, основанный на методе Монте-Карло. Проведен анализ и сравнение различных подходов параллелизации алгоритма.

1. Введение

Изучение радиационно-кондуктивного теплообмена [1, 2] является важным во многих инженерных приложениях. Так в [3-6] изучаются термосвойства некоторых полупрозрачных и изоляционных материалов в рамках радиационно-кондуктивной модели переноса тепла. Математические подходы решения этой нелинейной системы были рассмотрены в работах [7-9]. В [10] доказаны теоремы существования и единственности решения рассматриваемой задачи в случае изотропного рассеяния и неотражающих границ. Решение нестационарной задачи радиационно-кондуктивного теплообмена на основе параллельной реализации метода Монте-Карло проведено в [11].

В данной работе предлагается итерационный рекурсивный алгоритм для решения стационарной задачи радиационно-кондуктивного теплообмена в рассеивающем слое с отражающими границами. Для решения уравнения переноса теплового излучения на каждом шаге итерационной процедуры используется рекурсивный алгоритм, реализующий метод Монте-Карло. Этот алгоритм удобен для применения технологии параллельных вычислений и способен обеспечить требуемую точность за приемлемое вычислительное время. Численные эксперименты проведены для случая изотропного рассеяния и отражающих границ слоя. Проанализированы два различных подхода в параллелизации алгоритма: в первом, параллелизация осуществляется по точкам слоя, во втором - по траекториям метода Монте-Карло. Показано, что разработанные параллельные алгоритмы обеспечивают хорошее, близкое к линейному, ускорение времени выполнения программы. Вычисления осуществлены с использованием технологии параллельных вычислений MPI.

2. Теоретическая часть

Рассмотрим задачу радиационно-кондуктивного переноса тепла в слое [7, 8]. Уравнение радиационного переноса тепла в безразмерной форме имеет вид:

$$\nu f_z(z, \nu) + f(z, \nu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^1 p(\nu, \nu') f(z, \nu') d\nu' + (1 - c)u^4(z), \quad (1)$$

где $f(z, \nu)$ безразмерная плотность радиационного потока в точке $z \in [\bar{z}_1, \bar{z}_2]$ и в направлении, косинус угла которого с положительным направлением оси z составляет $\nu \in [-1, 1]$; $c < 1$ есть альбеда однократного рассеяния, описывающее уровень рассеяния в среде; $p(\nu, \nu')$ - фазовая функция; $u(z)$ - безразмерная температура. Введем следующие множества для

*Работа выполнена при финансовой поддержке Федеральной целевой программы 1.4 "Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы"(гос. контракт 07.514.11.4013); Федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы"(гос. контракты 14.740.11.0289, 14.740.11.1000, 16.740.11.0456)

задания граничных условий:

$$\Gamma^- = (\{\bar{z}_1\} \times (0, 1]) \cup (\{\bar{z}_2\} \times [-1, 0]), \quad \Gamma^+ = (\{\bar{z}_1\} \times [-1, 0]) \cup (\{\bar{z}_2\} \times (0, 1]).$$

Присоединим к уравнению (1) следующие граничные условия:

$$f(\bar{z}_i, \nu) = h(\bar{z}_i) + (Bf)(\bar{z}_i, \nu), \quad i = 1, 2, \quad (\bar{z}_i, \nu) \in \Gamma^-, \quad (2)$$

где

$$h(\bar{z}_i) := \varepsilon_i U_i^4, \quad (Bf)(\bar{z}_i, \nu) := \rho_i^s f(\bar{z}_i, -\nu) + 2\rho_i^d \int_0^1 f(\bar{z}_i, -\operatorname{sgn}(\nu)\nu') \nu' d\nu'.$$

Здесь, U_1 и U_2 безразмерные температуры на границах слоя; ρ_i^s и ρ_i^d - коэффициенты зеркального и диффузного отражения; $\varepsilon_i = 1 - \rho_i^s - \rho_i^d$ - коэффициенты излучения для обеих границ.

Уравнение кондуктивного переноса тепла запишем в следующем виде

$$u''(z) = \frac{1}{2N_c} \left(\int_{-1}^1 f(z, \nu) \nu d\nu \right)', \quad (3)$$

где N_c есть кондуктивно-радиационный параметр [7]. К уравнению (3) присоединим следующие граничные условия:

$$u(\bar{z}_1) = U_1, \quad u(\bar{z}_2) = U_2. \quad (4)$$

Для нахождения решения системы (1)-(4) применим метод простой итерации с параметром. В соответствии с которым, начальное приближение для температуры $u(z)$ (например, линейное приближение, которое соответствует нулевому значению правой части уравнения (3)) обозначим через $u^{(0)}(z)$. Затем, подставляя $u^{(0)}(z)$ в (1) вместо функции $u(z)$, находим решение задачи (1)-(2), и обозначим его через $f^{(1)}(z, \nu)$. Далее, находим решение задачи (3)-(4), соответствующее заданной функции $f^{(1)}(z, \nu)$, и обозначим его как $\tilde{u}^{(1)}(z)$. Выберем малый положительный параметр α и положим $u^{(1)}(z) = \alpha \tilde{u}^{(1)}(z) + (1 - \alpha)u^{(0)}(z)$ в качестве следующего приближения функции $u(z)$. Затем, подставляя $u^{(1)}(z)$ вместо функции $u(z)$ в уравнение (1), находим следующее приближение $f^{(2)}(z, \nu)$, и т.д. Таким образом, на j -ом шаге мы используем функции $u^{(j-1)}(z)$ и $\tilde{u}^{(j)}(z)$ для нахождения следующего приближения функции $u(z)$ по формуле:

$$u^{(j)}(z) = \alpha \tilde{u}^{(j)}(z) + (1 - \alpha)u^{(j-1)}(z). \quad (5)$$

Основная сложность в численной реализации итерационного метода заключается в решении краевой задачи для уравнения переноса теплового излучения. Для нахождения решения задачи (1),(2) будем использовать рекурсивный алгоритм, основанный на методе Монте-Карло.

Предварительно сформулируем некоторые ограничения. Положим, что функция $u(z)$ является неотрицательной и $u(z) \in C_b(\bar{z}_1, \bar{z}_2)$, где $C_b(X)$ есть Банахово пространство функций непрерывных и ограниченных на X с нормой $\|\varphi\|_{C_b(X)} = \sup_{x \in X} |\varphi(x)|$. Также, пусть $p(\nu, \nu') \in C_b(\Omega \times \Omega)$, где $\Omega = [-1, 0] \cup (0, 1]$, и

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 p(\nu, \nu') d\nu' = 1.$$

Заметим, что оператор $B : C_b(\Gamma^+) \rightarrow C_b(\Gamma^-)$ является линейным, ограниченным и неотрицательным, $\|B\| < 1$.

Для дальнейших рассуждений обозначим

$$X = (\bar{z}_1, \bar{z}_2) \times ([-1, 0] \cup (0, 1]),$$

$$\xi(\nu) = \begin{cases} \bar{z}_1, & \nu \in (0, 1], \\ \bar{z}_2, & \nu \in [-1, 0). \end{cases}$$

Введем также следующие интегральные выражения

$$\begin{aligned} (A\varphi)(z, \nu) &= \frac{1}{\nu} \int_{\xi(\nu)}^z \exp\left(-\frac{z-z'}{\nu}\right) \varphi(z', \nu) dz', \\ (S\varphi)(z, \nu) &= \frac{c}{2} \int_{-1}^1 p(\nu, \nu') \varphi(z, \nu') d\nu', \\ (Tf)(z, \nu) &= (Bf)(\xi(\nu), \nu) \exp\left(-\frac{z-\xi(\nu)}{\nu}\right) + (ASf)(z, \nu). \end{aligned} \quad (6)$$

Отметим, что согласно [12] при выполнении неравенств: $\|B\| < 1$ и $c < 1$, существует единственное решение задачи (1)-(2), которое может быть представлено в виде следующего ряда Неймана, сходящегося в норме $C_b(X)$:

$$\begin{aligned} f(z, \nu) &= \sum_{k=0}^{\infty} (T^k f_0)(z, \nu), \\ f_0(z, \nu) &= \exp\left(-\frac{z-\xi(\nu)}{\nu}\right) h(\xi(\nu)) + (1-c)(Au^4)(z, \nu). \end{aligned} \quad (7)$$

3. Реализационная часть

Рассмотрим итерационный алгоритм (5). Для вычисления решения задачи (1)-(2), соответствующего заданной функции $u(z)$, предложим рекурсивный алгоритм, основанный на методе Монте-Карло. В соответствии с [12] существует единственное решение задачи (1)-(2), которое представляется в виде ряда Неймана (7). Применим алгоритм метода Монте-Карло для вычисления конечной суммы

$$f_N(z, \nu) = \sum_{n=0}^N (T^n f_0)(z, \nu). \quad (8)$$

Для реализации метода перепишем (8) в виде следующего рекурсивного отношения

$$f_n(z, \nu) = (T f_{n-1})(z, \nu) + f_0(z, \nu), \quad n = 1, 2, \dots, N.$$

Рассмотрим структуру оператора T (см. равенство (6)). Он состоит из двух слагаемых: первое описывает эффекты отражения, второе - эффекты рассеяния. Рассмотрим второе слагаемое более подробно. Используя простые преобразования, мы запишем его в следующей форме

$$\begin{aligned} I(z, \nu) &= \frac{c}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{z-\xi}{\nu}\right) \right) \times \\ &\times \int_{\xi}^z \int_{-1}^1 \frac{\exp(-(z-z')/\nu)}{\nu(1 - \exp(-(z-\xi)/\nu))} p(\nu, \nu') f(z', \nu') d\nu' dz', \end{aligned} \quad (9)$$

где $\xi = \xi(\nu)$. В соответствии с методом Монте-Карло мы аппроксимируем интеграл в этом выражении как математическое ожидание от случайных последовательностей, определенных через случайные величины z' и ν' , распределенные на интервалах (ξ, z) и $(-1, 1)$ с плотностями

$$\frac{\exp(-(z-z')/\nu)}{\nu(1 - \exp(-(z-\xi)/\nu))}, \quad \text{и} \quad \frac{1}{2} p(\nu, \nu'), \quad (10)$$

Следовательно интеграл (9) аппроксимируется следующей суммой

$$\bar{I}(z, \nu) = \frac{c}{M} \left(1 - \exp\left(-\frac{z - \xi(\nu)}{\nu}\right) \right) \sum_{k=1}^M f(z_k, \nu_k).$$

Здесь, $\nu_k, z_k, k = 1, 2, \dots, M$ есть независимые реализации случайных величин z' и ν' , распределенных на интервалах (ξ, z) и $(-1, 1)$ с плотностями (10). Следовательно, мы можем следующим образом аппроксимировать функции $f_n(z, \nu), n = 1, 2, \dots, N$:

$$f_n(z, \nu) \approx \bar{f}_n(z, \nu) = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M s_{n,k}(z, \nu), \quad \bar{f}_0(z, \nu) = f_0(z, \nu), \quad (11)$$

$$s_{n,k}(z, \nu) = (B\bar{f}_{n-1})(\xi(\nu), \nu) \exp\left(-\frac{z - \xi(\nu)}{\nu}\right) + c \left(1 - \exp\left(-\frac{z - \xi(\nu)}{\nu}\right) \right) \bar{f}_{n-1}(z_k, \nu_k) + f_0(z, \nu). \quad (12)$$

Таким образом, конечная сумма (8) может быть вычислена на основе рекуррентных соотношений (11), (12).

Для конструирования устойчивого варианта итерационной процедуры запишем аналитическое представление решение задачи (3)-(4) при заданной функции f . После интегрирования равенства (3) получим

$$u(z) = \frac{1}{2N_c} \int_0^z \int_{-1}^1 f(\zeta, \nu) \nu d\nu d\zeta + C_1 z + C_2, \quad (13)$$

Постоянные C_1 и C_2 определяются из граничных условий (4).

Предположим, что приближение температуры $\bar{u}^{(j-1)}(z)$ уже найдено на $(j-1)$ -ом шаге итерационной процедуры (5). На основе (5) и (13) мы получаем следующую аппроксимацию для температуры на j -ом шаге:

$$\bar{u}^{(j)}(z) = (1 - \alpha) \bar{u}^{(j-1)}(z) + \alpha \left(\frac{z}{MN_c} \sum_{k=1}^M \nu_k \bar{f}_N^{(j)}(z_k, \nu_k) + C_1 z + C_2 \right), \quad (14)$$

где случайные величины z_k и ν_k являются равномерно распределенными на соответствующих интервалах $(0, z)$ и $(-1, 1)$. Вычисление $\bar{f}_N^{(j)}(z, \nu)$ осуществляем на основе формул (11) и (12), полагая, что температура равна $\bar{u}^{(j-1)}(z)$. Постоянная C_1 также вычисляется с помощью метода Монте-Карло. Таким образом, приближение $\bar{u}^{(j)}(z)$ функции $u^{(j)}(z)$ вычисляется с помощью формул (11), (12) и (14).

Для вычисления второго слагаемого в правой части равенства (12) генерируются точки $(z_k, \nu_k), k = 1, \dots, M$, на соответствующих интервалах $(\xi(\nu), z)$ и $(-1, 1)$ с плотностями (10). Генерация точек z_k осуществляется по следующей формуле:

$$z_k = z + \nu \ln(1 - \alpha_k(1 - \exp(-(z - \xi)/\nu))),$$

здесь α_k является независимой реализацией равномерно распределенной на $(0, 1)$ случайной величины. Генерация угловой переменной ν_k определяется конкретным видом фазовой функции $p(\nu, \nu')$.

При вычислении первого слагаемого в правой части равенства (12) используется угловая переменная, соответствующая зеркальному отражению: $-\nu$, и также, генерируется угловая переменная, соответствующая диффузному отражению: $-\text{sgn}(\nu)\sqrt{\alpha_k}$.

Заметим, что рекуррентный алгоритм, основанный на методе Монте-Карло, удобен для использования параллельных компьютерных вычислений. Имеется два основных пути параллелизации вычислительного процесса. В первом, вычисление функции f в каждой точке слоя выполняется в отдельном процессе. Другой подход основывается на генерации каждой рекурсивной траектории метода Монте-Карло в отдельном процессе.

4. Экспериментальная часть

Параллелизация рекурсивного вычислительного алгоритма была реализована в C++ коде с использованием технологии MPI. Анализировались перспективы использования двух основных способов параллелизации алгоритма: в первом, параллелизация осуществлялась по точкам слоя, во втором - по траекториям метода Монте-Карло. Вычисление нормализованной температуры проводилось в 32 точках слоя, при этом для нахождения температуры в одной точке генерировалось 8192 (или 2^{13}) траекторий. При проведении вычислительных экспериментов были взяты следующие значения параметров задачи: $N = 8$, $N_c = 0.00001$, $c = 0.9$, $\bar{z}_2 - \bar{z}_1 = 3$, $U_1 = 1$, $\rho_1^s = 0.1$, $\rho_1^d = 0.2$, $\varepsilon_1 = 0.7$, $U_2 = 0.5$, $\rho_2^s = 0.3$, $\rho_2^d = 0.1$ и $\varepsilon_2 = 0.6$.

В таблице 1 приведено время выполнения 10 итераций алгоритма и получаемое ускорение в зависимости от количества используемых вычислительных ядер. Время выполнения программы находилось с помощью метода clock. Ускорение, соответствующее k ядрам, рассчитывалось как отношение времени выполнения программы на 1 ядре ко времени выполнения параллельного кода на k ядрах. Данные, представленные в таблице 2, соответствуют алгоритму, в котором распараллеливание осуществлялось по траекториям метода Монте-Карло. Из анализа полученных результатов следует, что оба параллельных алгоритма обладают высокой эффективностью и обеспечивают хорошее ускорение времени выполнения программы, близкое к линейному. Так, отклонение от "идеального" линейного ускорения при распараллеливании по траекториям на 64 ядрах не превосходит 6%. При этом большую эффективность демонстрирует алгоритм, в котором параллелизация осуществляется по точкам слоя. С другой стороны, алгоритм, осуществляющий параллелизацию по траекториям, достаточно перспективен для реализации на многоядерных суперкомпьютерных комплексах, поскольку содержит большое количество независимых процессов ($2^{11} \sim 2^{13}$), равное количеству генерируемых траекторий. При разработке комбинированного алгоритма, осуществляющего одновременную параллелизацию и по точкам слоя, и по траекториям, количество независимых процессов может достигать 2^{18} .

Таблица 1. Ускорение времени выполнения 10 шагов итерационного алгоритма при распараллеливании по точкам слоя.

Количество узлов	Время выполнения (мс)	Ускорение
1	11914080	
2	5954700	2,00
4	3003840	3,97
8	1513550	7,87
16	760690	15,66
32	381900	31,20

Целью следующей серии вычислительных экспериментов являлся анализ вычислительной устойчивости предложенного алгоритма. Параметры задачи были взяты как и в предыдущей серии экспериментов, за исключением количества членов ряда Неймана (N), которое в данном случае равнялось 14. Следует отметить, что используемое в экспериментах значение параметра N_c соответствует случаю высоких температур и требует использование

Таблица 2. Ускорение времени выполнения 10 шагов итерационного алгоритма при распараллеливании по траекториям метода Монте-Карло

Количество узлов	Время выполнения (мс)	Ускорение
1	11914080	
2	6009780	1,98
4	3072630	3,88
8	1536630	7,75
16	761570	15,64
32	394970	30,16
64	196370	60,67

достаточно малого значения параметра α итерационной процедуры (5). При проведении расчетов было взято значение $\alpha = 0.0001$, что в свою очередь замедлило сходимость итерационной процедуры.

На рисунках 1,2 представлены аппроксимации температуры, соответствующие 2000 траекториям метода Монте-Карло, для различного количества шагов итерационной процедуры. Рисунок 1 соответствует 600 шагам итерационного алгоритма; рисунок 2 - 1500 шагам. На рисунках продемонстрирована неустойчивость вычислительной процедуры в случае недостаточного числа траекторий метода Монте-Карло.

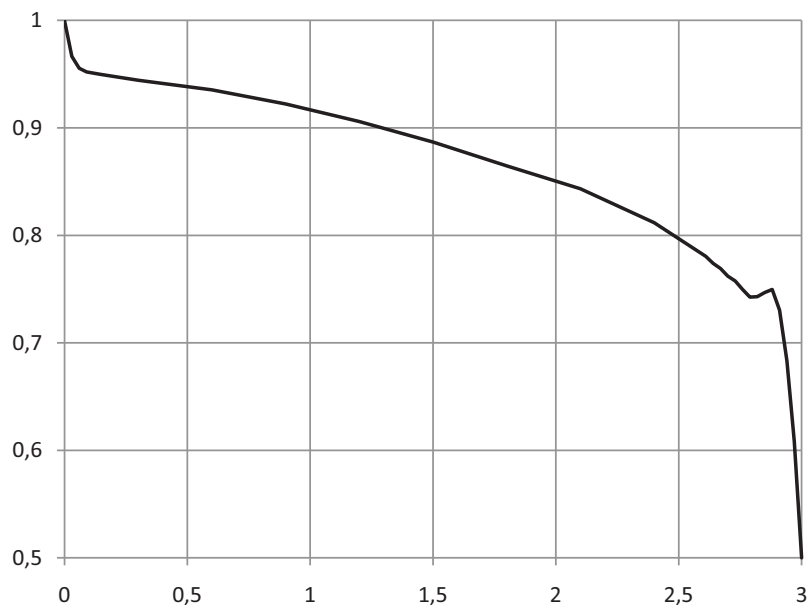


Рисунок 1. Численный эксперимент, демонстрирующий неустойчивость итерационной процедуры, основанной на методе Монте-Карло. Неустойчивость имеет место в случае недостаточного числа траекторий ($M = 2000$). График соответствует 600 шагам итерационной процедуры.

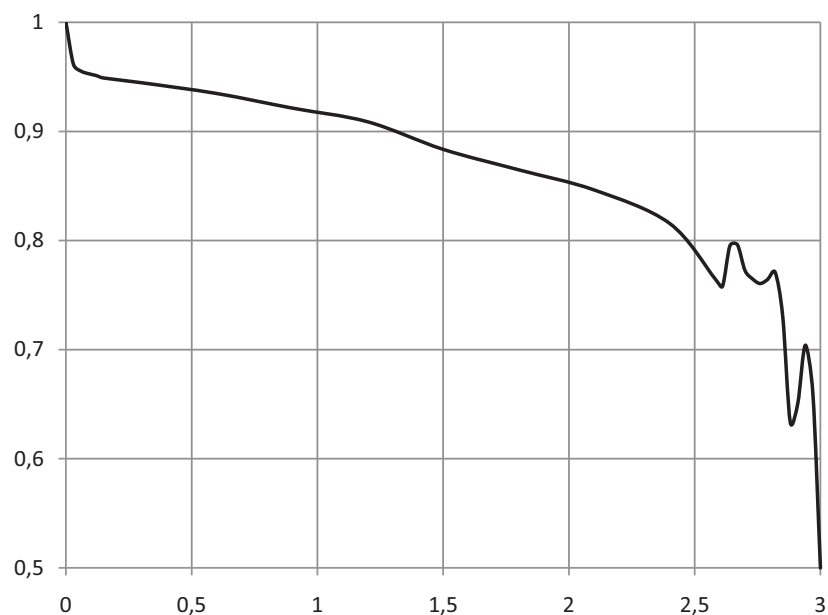


Рисунок 2. Численный эксперимент, демонстрирующий неустойчивость итерационной процедуры, основанной на методе Монте-Карло. Неустойчивость имеет место в случае недостаточного числа траекторий ($M = 2000$). График соответствует 1500 шагам итерационной процедуры.

На рисунке 3 представлены результаты вычислительного эксперимента, соответствующего 10000 траекториям метода Монте-Карло и 1200 шагам итерационной процедуры. Таким образом, увеличение числа траекторий способствует устойчивости вычислительного процесса.

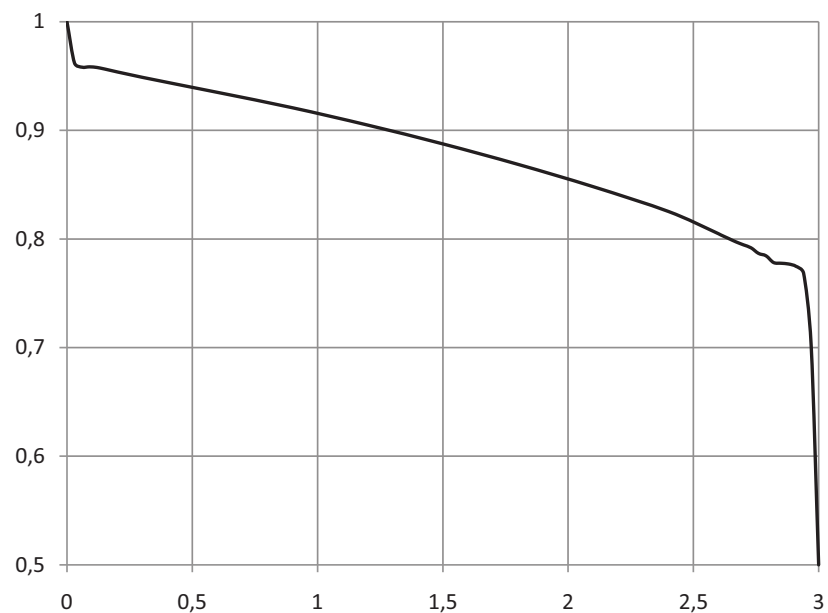


Рисунок 3. Температурный профиль, соответствующий 10000 траекториям метода Монте-Карло и 1200 шагам итерационной процедуры.

5. Заключение

Предложен итерационный рекурсивный алгоритм, основанный на методе Монте-Карло, для нахождения температурного профиля в задаче радиационно-кондуктивного теплообмена в рассеивающем слое с отражающими границами. Данный подход удобен для использования параллельных вычислений. Проанализированы перспективы распараллеливания алгоритма по точкам слоя, и по траекториям метода Монте-Карло. В обоих случаях параллельный алгоритм демонстрирует хорошее ускорение времени выполнения программы, близкое к линейному. Распараллеливание по траекториям является перспективным для выполнения на многоядерных вычислительных комплексах, поскольку позволяет выделить до 10^4 независимых процессов. Представляет интерес разработка комбинированного параллельного алгоритма, осуществляющего параллелизацию по точкам слоя и по траекториям. Число независимых процессов в его реализации может составить $3 \cdot 10^5$, что является основой для эффективной параллелизации алгоритма. Таким образом, реализация алгоритма с использованием суперкомпьютерных вычислений позволит обеспечить хорошую точность расчета за приемлемое время.

Литература

1. Ozisik M.N. Radiative Transfer and Interaction with Conduction and Convection. John Wiley, New York, 1973.
2. Modest M.F. Radiative Heat Transfer, McGraw-Hill, New York, 1993.
3. Andre S., Degiovanni A. A theoretical study of the transient coupled conduction and radiation heat transfer in glass: phonic diffusivity measurements by the Nash technique// Int. J. Heat Mass Transfer. 1995. Vol. 38, N 18. P. 3401–3412.
4. Andre S., Degiovanni A. A new way of solving transient radiative-conductive heat transfer problems// J. Heat Transfer. 1998. Vol. 120, N. 4. P. 943–955.
5. Banoczi J.M., Kelley C.T. A fast multilevel algorithm for the solution of nonlinear systems of conductive-radiative heat transfer equations// SIAM J. Sci. Comp. 1998. Vol. 19, N. 1. P. 266–279.
6. Klar A., Siedow N. Boundary layers and domain decomposition for radiative heat transfer and diffusion equations: applications to glass manufacturing process// Eur. J. Appl. Math. 1998. Vol. 9, N. 4. P. 351–372.
7. Siewert C.E., Thomas J.R. A computational method for solving a class of coupled conductive-radiative heat-transfer problems// J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1991. Vol. 45, N. 5. P. 273–281.
8. Siewert C.E. An improved iterative method for solving a class of coupled conductive-radiative heat-transfer problems// J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1995. Vol. 54, N. 4. P. 599–605.
9. Barichello L.B., Rodrigues P., Siewert C.E. An analytical discrete-ordinates solution for dual-mode heat transfer in a cylinder// J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2002. Vol. 73. P. 583–602.
10. Kelley C.T. Existence and uniqueness of solutions of nonlinear systems of conductive-radiative heat transfer equations// Transport Theory Statist. Phys. 1996. Vol. 25, N. 2. P. 249–260.

11. Шаенко А.Ю. Распределенный параллельный расчет радиационно-кондуктивного теплообмена методом Монте-Карло на базе графических ускорителей// Доклады пятой международной конференции "Параллельные вычисления и задачи управления Москва. 2010. С. 281–293.
12. Prokhorov I.V., Yarovenko I.P., Krasnikova T.V. An extremum problem for the radiation transfer equation// J. Inverse Ill-Posed Problems. 2005. Vol. 13. P. 365–382.