

УДК 532.526.10[045]

Є.О. Шквар, д.т.н., доц.

ОЦІНЮВАННЯ МАСШТАБУВАННЯ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОЇ ПРОДУКТИВНОСТІ ПАРАЛЕЛЬНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ МЕТОДУ ВЕЛИКИХ ВИХОРІВ

Національний авіаційний університет

E-mail: eush@hotmail.ru

Подано результати аналізу масштабування продуктивності паралельних обчислень при моделюванні турбулентних течій за методом великих вихорів. Виконано структурування типового розрахункового алгоритму на складові за їх функціональним призначенням. Досліджено можливості багатопотокового розгалуження обчислень цих елементів. Визначено пріоритетні напрями докладання зусиль з покращення масштабування швидкодії розрахунків за розглянутим обчислювальним методом шляхом його розпаралелювання.

Ключові слова: математичне моделювання, метод великих вихорів (LES), паралельні багатопоточні обчислення, турбулентні течії.

Постановка проблеми

Протягом останнього двадцятиліття спостерігається неухильне зміщення методології теоретичних досліджень властивостей турбулентного обтікання з добре відпрацьованих напівемпіричних підходів, що ґрунтуються на запропонованому Рейнольдсом осередненні вихідних рівнянь Нав'є–Стокса за часовою змінною (Reynolds Average Navier-Stokes Equations – RANS) у бік розвитку набагато більш ресурсовитратних технологій прямого числового моделювання (Direct Numerical Simulation – DNS) та моделювання методом великих вихорів (Large Eddy Simulation – LES) рівнянь Нав'є–Стокса.

Стимулом розвитку та набуття популярності останніх є значний прогрес, бурхливе зростання ефективності, зокрема, швидкодії обчислювальної техніки та сприятливі умови щодо збільшення доступності останньої.

Метод LES – вдалий компроміс між моделюванням на основі рівнянь RANS та DNS, оскільки не потребує використання притаманних RANS гіпотез та узагальнень емпіричної інформації для опису взаємодії між збуреною (пульсаційною) та осередненою складовими руху і водночас є значно менш вимогливим до обчислювальних ресурсів порівняно з DNS.

Оцінити вимогливість цих різних технологій моделювання до комп'ютерних ресурсів можна за пропорційністю витрат до числа Рейнольдса, яке характеризує співвідношення сил інерції до сил в'язкості в течії і є кількісною мірою, що визначає режим обтікання:

$$Re = \frac{U_0 L}{\nu},$$

де U_0 , L – характерні швидкість потоку та розмір обтічного тіла,

ν – кінематичний коефіцієнт в'язкості рідини чи газу.

Якщо кількість вузлів різницевої сітки для реалізації методу DNS збільшується пропорційно $Re^{2,25}$, LES технологія потребує [1; 2]:

- при моделюванні вільної турбулентності пропорційності $Re^{1,125}$;
- при моделюванні зсувної турбулентної течії поблизу обтічних поверхонь у приміжовому шарі в цілому пропорційності $Re^{1,2}$;
- для досягнення достатньої роздільної здатності розрахунку в'язкого підшару – пропорційності $Re^{1,8}$.

Наведені оцінки демонструють значно менші вимоги метода LES порівняно з DNS, але вони наочно ілюструють важливість вибору обґрунтованого компромісу між розмірністю сітки та рівнем локальності застосованих напівемпіричних підсіткових моделей турбулентності.

Водночас, навіть за цієї умови реалізація технології LES залишається вкрай ресурсо-витратною, враховуючи типові розміри та швидкості сучасних транспортних засобів, оскільки число Рейнольдса на крейсерських режимах для літака Boeing-747 дорівнює $Re = 7 \cdot 10^7$, а для океанського лайнера завдовжки 325 м, який пересувається зі швидкістю 15 м/с, становить $Re = 4,87 \cdot 10^9$.

Саме тому методи LES, як і DNS, можуть стати знаряддям практичного використання лише за умови застосування при їх реалізації технологій ефективного розпаралелювання обчислень.

Остання вимога накладає суттєві обмеження на вибір скінченно-різницевого схем та відповідних числових процедур, оскільки далеко не всі економічні розрахункові методи при реалізації послідовного алгоритму будуть ефективні при розпаралелюванні.

Вагомими є і фактори раціональної декомпозиції розрахункової області з урахуванням особливостей розташування елементів масивів, прийнятих у різних мовах програмування, а також паралельна реалізація задання та узгодження межових умов, що може суттєво впливати на стійкість та збіжність ітераційного процесу відшукування розв'язку.

Побудову паралельного алгоритму слід розпочинати не зі спроб паралелізації вже існуючих послідовних реалізацій, а з початку постановки задачі та вибору обчислювальної методології, ефективної щодо її розгалуження.

Ураховуючи трудомісткість процесу побудови та подальшого відлагодження коду паралельної програми, важливість апріорної інформації щодо розстановки пріоритетів при розпаралелюванні різних етапів обчислювального процесу важко переоцінити.

Мета роботи – оцінка та визначення найбільш актуальних типових етапів обчислювального алгоритму LES з погляду докладавання зусиль для забезпечення ефективного розпаралелювання.

Вихідні рівняння та межові умови

Розглянемо спрощений, але вкрай вживаний у різноманітних практичних застосуваннях випадок течії нестисливої рідини.

У результаті застосування операції фільтрування до кожної зі змінних збезрозмірених рівнянь Нав'є–Стокса останні в наближенні нестисливої рідини набувають вигляду

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial \tilde{x}_j} &= -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{x}_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_j \partial \tilde{x}_j} - \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}}{\partial \tilde{x}_j}; \\ \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_i} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

де u_j – фільтрована компонента швидкості j -го напрямку;

$$\tilde{x}_j = \frac{x_j}{L},$$

\tilde{t} – збезрозмірена часова змінна:

$$\tilde{t} = \frac{t U_0}{L},$$

x_j – вісь декартової системи координат j -го напрямку, $j = 1, 2, 3$;

\tilde{p} – фільтрований збезрозмірений тиск:

$$\tilde{p} = \frac{p}{(\rho U_0^2)},$$

ρ – густина;

$\tilde{\tau}_{ij}$ – збезрозмірені напруження тертя, що обумовлені дисипативним впливом дрібно-масштабної турбулентності:

$$\tilde{\tau}_{ij} = \tau_{ij} / (\rho U_0^2) = \overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j.$$

Одним із перших і уживаних досі способів визначення τ_{ij} є модель Смагорінського:

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tilde{\tau}_{kk} &= -2 \bar{\nu}_{tSGS} \tilde{S}_{ij}; \\ \bar{\nu}_{tSGS} &= \bar{l}_{mix}^2 \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}}; \\ \bar{l}_{mix} &= C_S \bar{\Delta}; \\ C_S &= 0,06 - 0,25, \end{aligned} \quad (2)$$

де δ_{ij} – символ Кронекера;

$\bar{\nu}_{tSGS}$ – збезрозмірений коефіцієнт підсіткової турбулентної в'язкості;

\tilde{S}_{ij} – тензор швидкостей деформацій фільтрованого поля збезрозміреної швидкості:

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial \tilde{x}_i} \right);$$

$$\bar{\Delta} = \frac{\Delta}{L};$$

Δ – характерний масштаб фільтра:

$$\Delta = \sqrt[3]{\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3}$$

або

$$\Delta = \sqrt[3]{\Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \Delta x_3^2};$$

Δx_j – крок різничевої сітки в j -му напрямку.

Для коректного і надійного виділення надсіткових вихрових структур метод LES передбачає застосування процедури фільтрації, яка реалізується для будь-якої розрахункової змінної $\bar{\Phi}_j$ шляхом виділення її великомасштабної складової $\tilde{\Phi}_j$ за правилом осереднення за простором з використанням функції фільтра:

$$\tilde{\Phi}_j(\vec{x}, t) = \int_D G(\vec{r}) \bar{\Phi}_j(\vec{x} - \vec{r}, t) d\vec{r},$$

де $G(\vec{r})$ – функція фільтра з використанням гауссівського фільтра;

$$G(\vec{r}) = \prod_{j=1}^3 \frac{6}{\pi \Delta^2} \exp(-6r_j^2 / \Delta^2),$$

$\vec{r} = \{r_1, r_2, r_3\}$ – вектор напрямків, уздовж яких здійснюється інтегрування;

D – об'єм обчислювальної області, по якій здійснюється фільтрація,

Задача полягає у розв'язанні системи (1), (2) на заданому проміжку часу $\bar{t} \in [\bar{t}_{init}, \bar{t}_{final}]$ у заданій просторовій області D :

$$\bar{x} \in [0, \bar{x}_{M_x}];$$

$$\bar{y} \in [0, \bar{y}_{M_y}];$$

$$\bar{z} \in [0, \bar{z}_{M_z}].$$

Для полегшення викладення застосовуватимемо для просторових координат та відповідних проєкцій швидкості такі альтернативні позначення:

$$\{x_1, x_2, x_3\} = \{x, y, z\};$$

$$\{u_1, u_2, u_3\} = \{u, v, w\}.$$

У випадку двовимірних течій задача розв'язку (1), (2) має розглядатися у просторовій постановці, що зумовлено, перш за все, просторовим характером турбулентного руху.

Постановка межових умов через обмеженість області D та нестационарний характер розв'язку, який відтворює особливості вихрової структури турбулентного руху, має ряд специфічних особливостей порівняно з методологією RANS і, безумовно, залежить від геометрії області та напрямку потоку.

Продемонструємо постановку межових умов на прикладі примежового шару, що розвивається вздовж осі x над горизонтально розташованою пластиною. Уведемо в розгляд рівномірну сітку для тиску \bar{p} :

$$\bar{x}_{i+1,j,k} = \bar{x}_{i,j,k} + \Delta \bar{x}, \quad i = 1, \dots, M_x,$$

$$\bar{x}_{1,j,k} = 0,$$

$$\Delta \bar{x} = \bar{x}_{M_x} / (M_x - 1);$$

$$\bar{y}_{i,j+1,k} = \bar{y}_{i,j,k} + \Delta \bar{y}, \quad j = 1, \dots, M_y,$$

$$\bar{y}_{i,1,k} = 0,$$

$$\Delta \bar{y} = \bar{y}_{M_y} / (M_y - 1);$$

$$\bar{z}_{i,j,k+1} = \bar{z}_{i,j,k} + \Delta \bar{z}, \quad k = 1, \dots, M_z,$$

$$\bar{z}_{i,j,1} = 0, \quad \Delta \bar{z} = \bar{z}_{M_z} / (M_z - 1). \quad (3)$$

Сітки для складових швидкості $\tilde{\Phi}_i = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})$

побудуємо зсувом сітки (3) на півкроку в напрямку відповідної змінної (рис. 1):

$$(\bar{x}_u)_{i,j,k} = \bar{x}_{i,j,k} + 0,5\Delta \bar{x},$$

$$(\bar{y}_u)_{i,j,k} = \bar{y}_{i,j,k},$$

$$(\bar{z}_u)_{i,j,k} = \bar{z}_{i,j,k} \quad \text{для } \tilde{u};$$

$$(\bar{x}_v)_{i,j,k} = \bar{x}_{i,j,k},$$

$$(\bar{y}_v)_{i,j,k} = \bar{y}_{i,j,k} + 0,5\Delta \bar{y},$$

$$(\bar{z}_v)_{i,j,k} = \bar{z}_{i,j,k} \quad \text{для } \tilde{v};$$

$$(\bar{x}_w)_{i,j,k} = \bar{x}_{i,j,k},$$

$$(\bar{y}_w)_{i,j,k} = \bar{y}_{i,j,k},$$

$$(\bar{z}_w)_{i,j,k} = \bar{z}_{i,j,k} + 0,5\Delta \bar{z} \quad \text{для } \tilde{w}. \quad (4)$$

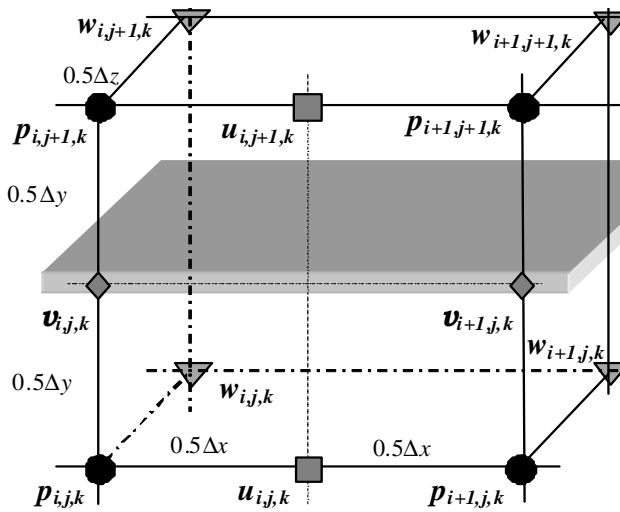


Рис. 1. Різницевий шаблон для рівнянь (1)

Крім того, введемо в розгляд сітку за часовою змінною

$$\bar{t}^{n+1} = \bar{t}^n + \Delta \bar{t}, \quad \bar{t}_1 = \bar{t}_{init}.$$

Для зручності розташовуватимемо обтічну поверхню ($\bar{y} = 0$) так, щоб вона збігалася з вузлами сітки нормальної до поверхні координати. Це дозволяє записати сіткові зображення умов прилипання так:

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{i,1,k} &= 0; \\ \tilde{u}_{i,1,k} &= -\tilde{u}_{i,2,k}; \\ \tilde{w}_{i,1,k} &= -\tilde{w}_{i,2,k}. \end{aligned} \quad (5)$$

Слід зауважити, що існують значно більш довершені та складніші підходи порівняно з «очевидними» умовами прилипання до визначення межових умов на стінці.

На зовнішній межі ($\bar{y} = \bar{y}_{M_y}$) розрахункової області у випадку, коли вона не обмежена твердою поверхнею, формулюються умови

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i,M_y,k} &= 1; \\ \tilde{v}_{i,M_y,k} &= \tilde{v}_{i,M_y-1,k}; \\ \tilde{w}_{i,M_y,k} &= \tilde{w}_{i,M_y-1,k}. \end{aligned} \quad (6)$$

Періодичні межові умови є особливим типом граничних умов, які є традиційною практикою використання в рамках цього методу. Вони зв'язують значення сіткових

функцій у чотирьох перерізах розрахункової області (по два на протилежних гранях), наприклад, в напрямку осі z :

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{i,j,M_z} &= \tilde{\Phi}_{i,j,1}, \\ \tilde{\Phi}_{i,j,2} &= \tilde{\Phi}_{i,j,M_z-1}, \end{aligned} \quad (7)$$

де $\Phi = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}, \tilde{p})$.

Аналогічний підхід застосовується і в напрямку осі x , яка зазвичай збігається з напрямком розвитку основного потоку.

Отже, система (1), підсіткова модель турбулентності (2), межові умови (5)–(7), записані для прилежних значень розрахункових величин на сітці (3), (4). Початкові умови

$$\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}(x, y, z, t_{init})$$

повністю формують початково-крайову задачу Коші.

Структурні особливості методу розрахунку

Побудова скінченно-різницевої апроксимації вихідних рівнянь (1) може здійснюватися на основі як явних, так і неявних різницевоїх схем.

Неявні схеми є меншою мірою обмежувальними щодо значення кроку інтегрування за часом $\Delta \bar{t}$ залежно від розмірів комірок просторової сітки та параметрів течії. Але ці схеми зводять задачу на кожному кроці $\Delta \bar{t}$ до системи лінійних алгебричних рівнянь (СЛАР).

При набагато більшій, ніж у випадку осереднених за Рейнольдсом рівнянь, розмірності сітки при реалізації методу LES розв'язання СЛАР з тридіагональною структурою матриці коефіцієнтів стає одним із вагомих факторів, що впливають на швидкодію.

Для відтворення динаміки вихрових структур течії слід зберігати крок інтегрування досить малим, що суттєво зменшує переваги неявних схем перед явними.

Явні схеми простіші за структурою. Їх реалізація забезпечує перевагу в швидкодії отримання розв'язку на кожному розрахунковому кроці. Але метод розрахунку залишається вкрай вимогливим до обчислювальних ресурсів.

При пошуку можливостей збільшення швидкості обчислень явні схеми демонструють одну з найсуттєвіших переваг перед неявними схемами.

Алгоритми розв'язання СЛАР з тридіагональною матрицею коефіцієнтів майже не розпаралелюються, тобто реалізація неявних схем в рамках LES передбачає послідовні алгоритми обчислень. Натомість, явні схеми згідно зі своєю структурою дозволяють ефективно здійснювати розпаралелювання їх програмної реалізації, що обґрунтовує саме їх втілення в паралельні алгоритми LES методів. Цей підхід є перспективним, оскільки сучасні обчислювальні системи будуються за принципом об'єднання потужностей кількох процесорних ядер та об'єднання комп'ютерних вузлів у надпотужні кластерні системи.

Отже, за умови можливості утилізації наявних розгалужених комп'ютерних ресурсів саме явні схеми демонструють перспективи побудови високошвидкісних програмних реалізацій методу LES з масштабованою швидкодією залежно від архітектури комп'ютерної системи.

Продемонструємо ці можливості на основі побудови скінченно-різницевої апроксимації системи (1), (2).

Ураховуючи подібність структури рівнянь переносу (1) для компонент швидкості

$$\Phi = \{u, v, w\},$$

запишемо вихідне рівняння руху системи (1) в узагальненому вигляді:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \text{DIFF} - \text{CONV} - \nabla p,$$

де DIFF, CONV, ∇p – позначення дифузійних, конвективних членів та градієнта тиску, котрі визначаються так:

$$\text{CONV} = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}\tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{u}\tilde{v}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{u}\tilde{w}}{\partial z} & \text{для } \tilde{u}; \\ \frac{\partial \tilde{v}\tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}\tilde{v}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}\tilde{w}}{\partial z} & \text{для } \tilde{v}; \\ \frac{\partial \tilde{w}\tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{w}\tilde{v}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{w}\tilde{w}}{\partial z} & \text{для } \tilde{w}; \end{cases}$$

$$\nabla p = \text{grad}p = \begin{cases} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x} & \text{для } \tilde{u}; \\ \frac{\partial \tilde{p}}{\partial y} & \text{для } \tilde{v}; \\ \frac{\partial \tilde{p}}{\partial z} & \text{для } \tilde{w}, \end{cases}$$

$$\text{DIFF} = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left[2v_{t \text{ eff}} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[v_{t \text{ eff}} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[v_{t \text{ eff}} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right) \right] & \text{для } \tilde{u}; \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[v_{t \text{ eff}} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \right) \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[2v_{t \text{ eff}} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[v_{t \text{ eff}} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial y} \right) \right] & \text{для } \tilde{v}; \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[v_{t \text{ eff}} \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} \right) \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[v_{t \text{ eff}} \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} \right) \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[2v_{t \text{ eff}} \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right] & \text{для } \tilde{w}, \end{cases}$$

де $v_{t \text{ eff}}$ – ефективна підсіткова в'язкість:

$$v_{t \text{ eff}} = \text{Re}^{-1} + v_{t \text{ SGS}}.$$

Скориставшись різницевою апроксимацією похідної

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{\tilde{\Phi}^{n+1} - \tilde{\Phi}^n}{\Delta t},$$

матимемо

$$\tilde{\Phi}^{n+1} - \tilde{\Phi}^n = (\text{DIFF} - \text{CONV} - \nabla \tilde{p}) \Delta t_n.$$

Перегрупування членів і, зокрема, перенесення градієнта тиску в ліву частину дає

$$\tilde{\Phi}^{n+1} + (\nabla p)^{n+1} \Delta t_n = \tilde{\Phi}^n + (\text{DIFF-CONV}) \Delta \bar{t}_n.$$

Позначаючи праву частину отриманого рівняння як $\tilde{\Phi}^*$, отримуємо структуру методу розщеплення за фізичними процесами:

$$\tilde{\Phi}^* = \tilde{\Phi}^n + (\text{DIFF-CONV}) \Delta \bar{t}_n, \quad (8)$$

$$\tilde{\Phi}^{n+1} = \tilde{\Phi}^* - (\nabla \tilde{p})^{n+1} \Delta \bar{t}_n. \quad (9)$$

Застосування операції обчислення дивергенції до (9) з припущенням виконання рівняння нерозривності

$$\text{div}(\tilde{\Phi}^{n+1}) = 0$$

на часовому кроці $(n+1)$ дозволяє отримати рівняння Пуассона для тиску:

$$\begin{aligned} (\nabla^2 \tilde{p})^{n+1} &= \frac{\partial^2 \tilde{p}^{n+1}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{p}^{n+1}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{p}^{n+1}}{\partial \bar{z}^2} = \\ &= \frac{1}{\Delta t} \text{div}(\tilde{\Phi}^*). \end{aligned} \quad (10)$$

Для інтегрування різницевого рівняння (8) за часовою змінною \bar{t} , як показано, наприклад, Б.Дж. Боєрса (Технологічний університет м. Делфт), є ефективним застосування схеми Адамса-Бешфорта [3], яка використовує дані попередніх обчислень з двох послідовних часових кроків $n-1$ та n , забезпечуючи на кроці $n+1$ другий порядок точності апроксимації за часом. Відповідно до структури цієї схеми для наближення $\tilde{\Phi}^*$, що не враховує вплив поля тиску, маємо такий дискретний за часом аналог (8):

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}^* &= \tilde{\Phi}^n + [1.5(\text{DIFF-CONV})^n - \\ &- 0.5(\text{DIFF-CONV})^{n-1}] \Delta \bar{t}_n. \end{aligned} \quad (11)$$

Схема (11) не є єдиним та оптимальним вибором, а лише типовим прикладом, що задовольняє задачі дослідження і подібно іншим явним схемам є зручною для демонстрації способу реалізації та ефективності використаних технологій розпаралелювання обчислень.

Різницева апроксимація рівняння (10), що здійснюється в точці $\tilde{p}_{i,j,k}$ (рис. 1), має вигляд:

$$\begin{aligned} &\frac{\tilde{p}_{i+1,j,k} - 2\tilde{p}_{i,j,k} + \tilde{p}_{i-1,j,k}}{\Delta \bar{x}^2} + \\ &+ \frac{\tilde{p}_{i,j+1,k} - 2\tilde{p}_{i,j,k} + \tilde{p}_{i,j-1,k}}{\Delta \bar{y}^2} + \\ &+ \frac{\tilde{p}_{i,j,k+1} - 2\tilde{p}_{i,j,k} + \tilde{p}_{i,j,k-1}}{\Delta \bar{z}^2} = \\ &= \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\tilde{u}_{i,j,k}^* + \tilde{u}_{i-1,j,k}^*}{\Delta \bar{x}} + \frac{\tilde{v}_{i,j,k}^* + \tilde{v}_{i,j-1,k}^*}{\Delta \bar{y}} + \right. \\ &\left. + \frac{\tilde{w}_{i,j,k}^* - \tilde{w}_{i,j,k-1}^*}{\Delta \bar{z}} \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Рівняння (12) розв'язується ітераційним шляхом послідовними прогонками вздовж різних напрямків координатних осей сітки (x, y, z) до досягнення збіжності. У випадку областей порівняльно простої форми припустимо використання прямих, наприклад, спектральних методів.

На межах області для апроксимації (12) формулюються умови Неймана $\frac{\partial \tilde{p}}{\partial n} = \dots$, які однозначно визначаються зі спрощених форм рівнянь (1) при їх розгляді разом із типовими межовими умовами для компонент швидкості (5)–(7).

На основі знайденого поля тиску відшукуються нові наближення поля швидкостей шляхом розв'язання різницевих зображень рівняння (9):

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i,j,k}^{n+1} &= \tilde{u}_{i,j,k}^* - \frac{\tilde{p}_{i+1,j,k} - \tilde{p}_{i,j,k}}{\Delta \bar{x}}; \\ \tilde{v}_{i,j,k}^{n+1} &= \tilde{v}_{i,j,k}^* - \frac{\tilde{p}_{i,j+1,k} - \tilde{p}_{i,j,k}}{\Delta \bar{y}}; \\ \tilde{w}_{i,j,k}^{n+1} &= \tilde{w}_{i,j,k}^* - \frac{\tilde{p}_{i,j,k+1} - \tilde{p}_{i,j,k}}{\Delta \bar{z}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Після проведення процедури фільтрації отриманих розподілів сіткових змінних $\tilde{\Phi}^{n+1}$ виконується переприсвоювання номерів часових кроків

$$(n+1) \rightarrow (n), \quad (n) \rightarrow (n-1), \quad (n-1) \rightarrow (n-2)$$

і здійснюється вибір значення наступного кроку часової змінної $\Delta \bar{t}^{n+1}$ згідно з залежністю:

$$\Delta \bar{t}^{n+1} = C \max_D^{-1} \left[\left(\frac{|\tilde{u}_{i,j,k}^{n+1}|}{\Delta \bar{x}} + \frac{|\tilde{v}_{i,j,k}^{n+1}|}{\Delta \bar{y}} + \frac{|\tilde{w}_{i,j,k}^{n+1}|}{\Delta \bar{z}} \right) + v_{eff}^{n+1} \left(\frac{1}{\Delta \bar{x}^2} + \frac{1}{\Delta \bar{x}^2} + \frac{1}{\Delta \bar{x}^2} \right) \right], \quad (14)$$

де $C = 0,5$ – число Куранта.

Описана процедура повторюється крок за кроком уздовж часової змінної \bar{t} і завершується при проході всього часового інтервалу $[\bar{t}_{init}, \bar{t}_{final}]$, заданого умовами задачі.

Умова (14) демонструє зменшення кроку часової змінної $\Delta \bar{t}^{n+1}$ по мірі збільшення роздільної здатності різницевої сітки.

Оскільки розміри комірок останньої мусять узгоджуватися з притаманними досліджуваній течії масштабами дисипативних вихорів, просторова і часова роздільні здатності сітки, як правило, стають серйозними обмеженнями для орієнтації на обчислювальні алгоритми послідовної структури. Це у свою чергу зумовлює необхідність пошуку та розробки ефективних рішень паралельної стратегії реалізації числових алгоритмів методу LES.

Особливості паралельної реалізації методу розрахунку

Числове розв'язання системи (8)–(10) згідно з наведеним алгоритмом передбачає виконання трьох суттєво відмінних операцій.

Дві з них, а саме розв'язок рівнянь переносу з вилученими членами градієнта тиску (8) та корекція цих розв'язків після розв'язання рівняння Пуассона для тиску (10) мають локальну структуру, тобто результат обчислення на кроці $(n+1)$ в деякому вузлі ніяк не залежить від порядку обходу вузлів розрахункової області.

Отже, ці операції можна без докладання зайвих зусиль розпаралелювати.

Розв'язання рівняння Пуассона в паралельному варіанті також можливе, але еліптичний тип задачі зумовлює ряд складностей.

При застосуванні пакета сторонніх розробників (FISHPAK) для прямого числового інтегрування (10), як це зроблено в роботі [4], задача перепрограмування окремих складових пакета нераціональна, оскільки будь-який пакет навіть за наявності відкритого коду являє собою набір взаємопов'язаних процедур та функцій без належного висвітлення їх структури кінцевим користувачам окрім, хіба що призначення модулів і способу організації їх виклику та передачі набору параметрів.

Використання пакетів для типових елементів прикладних задач, яким є відшукування розв'язку рівняння Пуассона, безумовно, є ефективним, оскільки такі пакети проходять процес багаторічної оптимізації, але без участі їх розробників спроби удосконалення їх структури за умови розумних часових обмежень зі значною вірогідністю приречені на невдачу.

При організації ітераційної процедури розв'язання можна скористатися методом Гауса–Зейделя, який нескладно реалізувати в паралельному варіанті, але явна схема є обмежувальною з погляду збіжності.

Орієнтація на цей підхід приведе до необхідності застосування нижньої релаксації, що уповільнить процес відшукування розв'язку, чим зменшить ефективність розпаралелювання, а можливо, й повністю зведе його переваги нанівець.

Оскільки пошук оптимальних релаксаційних коефіцієнтів залежно від масштабування задачі є самостійною задачею, цей підхід на етапі вибору розрахункової технології був також відкинтий.

Застосування неявних схем передбачає використання алгоритму прогонки, який не піддається розпаралелюванню.

При послідовному обході прогонками розрахункової області вздовж ліній сітки, що відповідають зміні лише одного індексу, кожна наступна прогонка використовуватиме

результати, отримані на попередніх лініях (одній чи двох залежно від шаблону різницевої схеми). Цей фактор позитивно впливає на збіжність подібно до запропонованої Зейделем модифікації метода простої ітерації при розв'язанні СЛАР.

Розбиття області на стрічки (рис. 2) і їх паралельна обробка дозволяють розгалузити процес відшукування розв'язку на комп'ютері паралельної архітектури навіть і за неявній схемі.

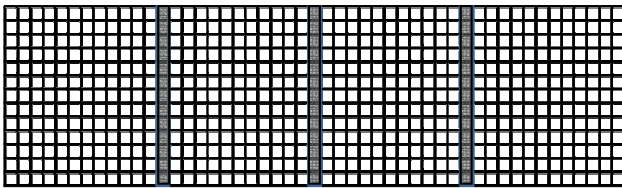


Рис. 2. Декомпозиція розрахункової області вздовж x координати на стрічки (переріз $z = \text{const}$)

Ефективність методу, як показали тестові параметричні дослідження [5; 6], суттєво залежить від розмірності сітки та кількості фрагментів, на які розподіляється розрахункова область.

При розбитті області на кількість фрагментів, що не перевищує восьми і при застосуванні відповідного SMP (Symmetric Multiprocessing) чи CMP (Chip-Level Multiprocessing) комп'ютера з двома чотирьохядерними процесорами та спільною оперативною пам'яттю, зберігається тенденція неухильного збільшення ефективності обчислень алгоритму, що реалізує дискретні аналоги (11)–(13).

При цьому кількість ітерацій, необхідна для досягнення збіжності на кожному кроці за часом, збільшувалася порівняно з послідовним алгоритмом несуттєво (в межах 3–7 %), що забезпечувалося чергуванням напрямків здійснення прогонки.

Зазначена зміна напрямків обходу вузлів сітки потребує додаткових зусиль із використанням допоміжних масивів задля забезпечення ефективності паралельних обрахунків у тих напрямках, які не відповідають зумовленим мовою програмування порядком розміщення даних у багатовимірних масивах.

Для Fortran найефективнішим з точки зору швидкості доступу до даних є перебір елементів масиву за останні з його індексів, для мов C та Pascal – навпаки, за першим із них. Але навіть і такі штучні засоби призводять до додаткових накладних витрат, що має додатковий негативний вплив на масштабування швидкодії при розпаралелюванні обчислень.

Обчислювальні експерименти показали, що ефективність розпаралелювання описаного явного метода інтегрування системи (8–10) зростає по мірі збільшення розмірності сітки, тоді як при порівняльно грубих сітках ($40 \times 40 \times 40$ і менше) прискорення обчислень від розпаралелювання не спостерігається.

Причина полягає у тому, що на малих сітках процесори чи їх ядра одночасно виконують малий обсяг роботи і програма увесь час перемикає процесори з виконання однієї роботи на іншу. Через малий обсяг даних такі перемикання виконуються з високою частотою, що призводить до суттєвих накладних витрат і не дозволяє процесорним елементам працювати на повну потужність та ефективно задіювати внутрішні технології прискорення обчислень шляхом передбачення переходів.

Для з'ясування результату від розпаралелювання реалізовано хронометрування виконання ряду функціонально важливих елементів програми розрахунку (11)–(13), написаної мовою Fortran з використанням технології багатопоточності.

Як інструмент програмування багатопоточного програмного коду використано технологію OpenMP в її реалізації компіляторами компанії Intel.

Серед найважливіших структурних елементів програми виділені ключові процедури відшукування розв'язків різницевої рівнянь (11)–(13), обчислення дивергенції Φ^* для правої частини рівняння Пуассона (10) та коригування межових умов.

Решта елементів програми значно менш вимоглива до обчислювальних ресурсів порівняно з зазначеним комплексом і не перевищує 1 % сумарних витрат часу.

Хронометрування кожної зі складових та сумарного часу, який потрібний для виконання розрахунку, здійснювалося протягом усієї тривалості розрахунку.

Розрахунки здійснювалися на кластерах Національного технічного університету «Київський політехнічний університет» під керуванням як Linux, так і Windows.

Отримані дані щодо часових витрат окремих складових програми при моделюванні характеристик течії в плоскому каналі за методом LES на сітці 300x300x300 при її запусках із різною кількістю використаних при розпаралелюванні потоків наведено в таблиці.

Позитивний ефект підвищення швидкодії виконання обрахунків від застосування розпаралелювання характеризувався коефіцієнтом прискорення, який визначався часткою часу, необхідного для виконання паралельного розрахунку задачі до часу її ж послідовного виконання (на лише одному задіяному процесорному ядрі).

Як впливає з аналізу цього коефіцієнта, для зазначених структурних складових

розрахунку (рис. 3), найкращим чином піддається масштабуванню перший етап процесу інтегрування за явною схемою рівнянь (11).

Друге місце за ефективністю зростання швидкодії займає найбільш вимоглива до ресурсів комп'ютера процедура розв'язання рівняння Пуассона (12).

Решта розглянутих в таблиці операцій є достатньо швидкоплинними. Їх часові витрати складають від одного до десяти відсотків сумарного часу виконання перших двох, а, отже, і ефект від розпаралелювання тут також є суттєво меншим.

Отримані на основі проведеного тестування результати щодо можливостей розпаралелювання ряду функціонально різних структурних елементів програмної реалізації методу LES дозволили визначити етапи, що є найвимогливішими до витрат комп'ютерних ресурсів і, насамперед, часу, та порівняти різні етапи за здатністю до розпаралелювання.

Ця інформація є важливою як з погляду удосконалення використаного розрахункового метода, так і аналізу інших скінченно-різницевоїх схем.

Часові витрати різних складових програми

Умовне позначення	Складові елементи програми	Кількість виділених для обчислень потоків				
		1	2	4	6	8
<i>a</i>	Знаходження Φ^* за виразом (11)	472,6	278,7	205,5	143,2	128,4
<i>b</i>	Розв'язання рівняння Пуассона (10) чи (12)	487,6	335,2	228,4	180,5	171,8
<i>c</i>	Обчислення Φ^{n+1} за скоригованим тиском p (9) згідно з рівнянням (13)	92,9	72,8	64,7	58,8	55,9
<i>d</i>	Обчислення $\text{div}\Phi^*$ для правої частини рівняння (10) згідно з рівнянням (12)	23,2	19,8	18,7	16,0	14,8
<i>e</i>	Коригування межових умов	10	8,3	7,5	6,3	5,9
<i>f</i>	Сумарний час обчислень усієї програми	1093,3	721,6	531,5	410,6	382,4

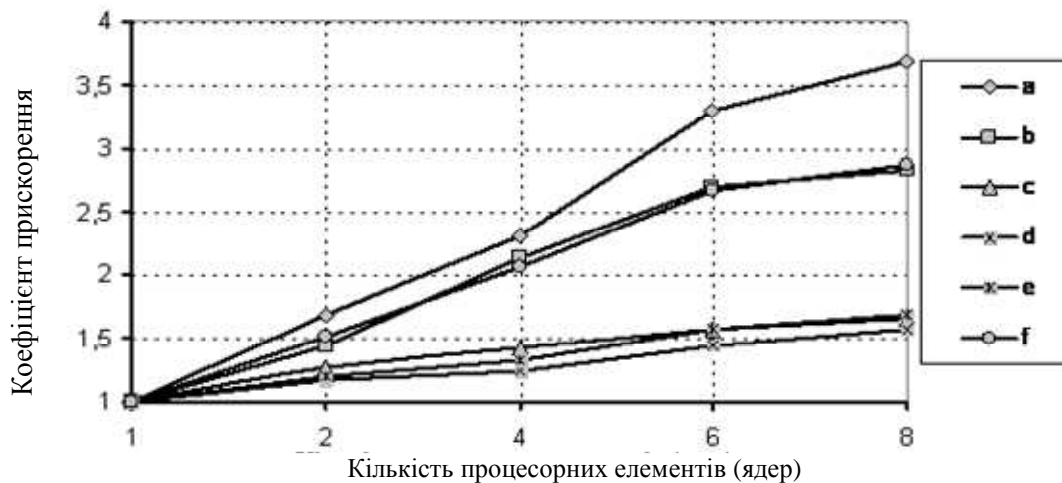


Рис. 3. Залежність коефіцієнту прискорення обчислень від кількості задіяних потоків

Висновки

Проведене структурування процесу паралельних обчислень однієї з типових числових реалізацій LES метода та наведений аналіз часових витрат його складових дозволили виділити дві суттєві особливості.

По-перше, масштабування швидкодії на комп'ютері SMP архітектури не є прямо пропорційним до кількості задіяних процесорних елементів. Так, навіть для найкращого (серед розглянутих) розпаралелювання процедури знаходження Φ^* за виразом (11) коефіцієнт прискорення на восьми процесорних елементах склав лише 3,62 за умови повної відсутності залежності результатів обробки даних одним процесорним елементом від даних, що отримуються іншими.

Однією з можливих причин цього є затримки паралельних виборок різними обчислювальними потоками значень складових швидкості (\tilde{u} , \tilde{v} , \tilde{w}) з масивів, розташованих у різних ділянках оперативної пам'яті (Random Access Mode-RAM), яка при багатопоточній обробці на комп'ютерах SMP чи SMP архітектур є спільною. Саме тому при обчисленні у мірі зростання кількості задіяних процесорних елементів приріст коефіцієнта прискорення обчислень поступово зменшується.

По-друге, особливість полягає у виділенні саме тих структурних елементів обчислювального процесу і, зокрема, рівняння (11)

для знаходження Φ^* та рівняння Пуассона (12) для обчислення тиску, які слід вважати об'єктами першочергового і найбільш ретельного докладання зусиль для удосконалення технологій паралельних обрахунків процесу формування турбулентних течій за методом LES.

Література

1. *Chapmann, D.* 1979. Computational aerodynamics, development and outlook. – AIAA J. Vol. 17: P. 1293–1313.
2. *Moin, P.; Kim, J.* 1997. Tackling Turbulence with Supercomputers. – Scientific American. №276: P. 62–68.
3. *Роч П.* Вычислительная гидромеханика / П. Роч / пер. с англ.. – М: Мир, 1980. – 616 с.
4. *Ferziger, Joel H.* 1996. Recent advances in large eddy simulation. – Department of mechanical engineering Stanford University. Stanford CA: P. 1–13.
5. *Шквар Є.О.* Інтегрована гібридна технологія паралельних обчислень / Є.О. Шквар // Інтегровані технології та енергозбереження: щокварт. наук.-практ. журн. НТУ (ХПІ). – Харків: НТУ (ХПІ). – 2010. – № 1. – С. 86–99.
6. *Шквар Є.О.* Гібридний метод паралельних обчислень / Є.О. Шквар // Вісник Черкаського університету: Сер. Прикладна математика. Інформатика. – 2010. – Вип. 172. – С. 123–136.

Стаття надійшла до редакції 16.09.2012.