

УДК 519.6

АЛГОРИТМ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ПРИ РЕШЕНИИ МНОГОМЕРНЫХ ЗАДАЧ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ

К.т.н. М. В. Амброжевич, д.т.н. В. А. Серeda, Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт»

Рассмотрены методы ускорения решения задач газовой динамики за счет распараллеливания вычислений. Предложен алгоритм распараллеливания по принципу расщепления по направлениям путем создания нитей выполнения. Представлены математический аппарат и программный продукт, с помощью которых проводились исследования. Приведены оценки сокращения потребных временных ресурсов на примере моделирования рабочего процесса в расширительной тепловой машине.

Розглянуто методи прискорення вирішення завдань газової динаміки за рахунок розпаралелювання обчислень. Запропоновано алгоритм розпаралелювання за принципом розщеплення за напрямками шляхом створення ниток виконання. Представлені математичний апарат і програмний продукт, за допомогою яких проводилися дослідження. Наведено оцінки скорочення потрібних часових ресурсів на прикладі моделювання робочого процесу в розширювальній тепловій машині.

Methods for accelerating the solution of problems of gas dynamics due to parallelization of computations are considered. A parallelization algorithm is proposed according to the principle of splitting in directions by creating execution threads. The mathematical apparatus and software product with the help of which research was carried out is presented. Estimates of the reduction of the required time resources are given on the example of modeling a work process in an expansion heat engine.

Ключевые слова: расщепление по направлениям, нити выполнения, математическая модель, метод особенностей

Введение

В настоящее время моделирование сложных объектов техники с привлечением пространственно неоднородных нестационарных моделей вошло в повседневную практику. Однако достигаемая при этом полнота представлений об объекте исследований требует существенных временных затрат. Например, для моделирования рабочего процесса (0,18 с физического времени) в пневматической расширительной машине на расчетной сетке размерами 262×29×29 ячеек с пространственным шагом 10 мм требуется 13 ч машинного времени на 1 ядре. Процессоры современных персональных компьютеров и мобильных устройств уже привычно обладают несколькими ядрами, а операционные системы поддерживают многозадачность. Поэтому применение алгоритмов распараллеливания в ресурсоемких задачах, в т.ч. и газодинамических, представляется вполне оправданным.

Анализ методов распараллеливания

Получил распространение метод параллельных вычислений, в котором расчетная область разбивается на субдомены (рис. 1 а), а нити создаются для каждого из них [1, 2 и др.]. Достоинством данного метода является возможность создания большого числа нитей, вплоть до равного количеству ячеек в расчетной области. К существенным недостаткам можно отнести необходимость сшивки решений в местах стыковки субдоменов (ячеек). Это усложняет алгоритм и требует дополнительных вычислительных ресурсов. Однако метод принципиально реализуем в односвязных областях, не содержащих особенностей, т.к. до момента сшивки решения соседние субдомены не обмениваются информацией и возникает неопределенностей.

Возможно распараллеливание отдельных вспомогательных процедур при решении эволюционной задачи, как, например, графическое отображение фаз процесса и промежуточное сохранение результатов расчета. Однако эффективность такого подхода невелика по причине низкой периодичности обращения к этим процедурам. Прочие вспомогательные процедуры временного цикла (например, вычисление экстремальных значений физических полей и интегральных характеристик) не требуют привлечения существенных ресурсов и поэтому создание для них отдельных нитей нецелесообразно.

Авторами статьи культивируются интерпретации метода расщепления по направлениям в пространстве [3] (рис. 1 б), недостатком которого является необходимость ожидания завершения каждой нити, отвечающей за направление. Поэтому в задаче, где расчетная область будет представлять собой параллелепипед размерами $p_x \times p_y \times p_z$ (причем $p_x > p_y > p_z$), полное время расчета будет определяться временем завершения самой «длинной» нити (p_x – в данном случае), в то время как нити, отвечающие за направления p_y и p_z , будут «простаивать». Также к недостаткам следует отнести возможность создания только 2 нитей для двумерной задачи и 3 – для пространственной.

Описание математического аппарата

Процесс движения среды во внешних и внутренних объемах расчетной области характеризуется базовым набором, состоящим из двух термодинамических параметров, одного кинематического и функций субстанциональных свойств, что отображается в модели матрицей состояния физических полей:

$$P(\vec{x}, t) = \left\{ p, T, \vec{w}, C \right\}(\vec{x}, t), \quad (1)$$

где t – время; \vec{x} – координатный вектор; \vec{w} – вектор скорости; $C = \{\omega, S\}$ – матрица функций субстанциональных свойств; ω – концентрация массы; S – энтропия; ρ – плотность; p – давление; T – температура.

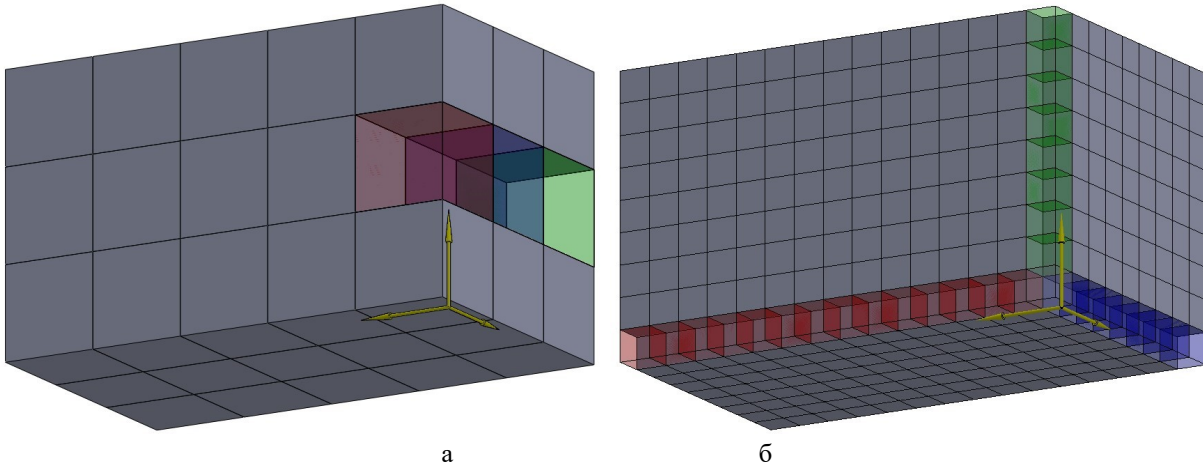


Рис. 1. Способы разбиения расчетной области при распараллеливании:
а – разбиение на субдомены; б – расщепление по направлениям

Пространственное течение многокомпонентной сжимаемой среды в расчетной области описывается уравнениями баланса массы, импульса (в проекциях на оси координат) и энергии в декартовой системе координат. Уравнения дополняются начальными и граничными условиями, термическим и калорическим уравнениями состояния, соотношениями, определяющими мощности особенностей. В векторно-матричной форме система уравнений имеет вид:

$$\frac{\partial \vec{F}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{\Phi}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \vec{\Phi}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \vec{\Phi}_3}{\partial x_3} = \sum_{n=1}^{M_M} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \vec{\Lambda} \right)_n + \sum_{m=1}^{M_C} \left(\vec{\Delta} \right)_m ; \quad (2)$$

$$\vec{F} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \omega \\ \rho S \\ \rho w_1 \\ \rho w_2 \\ \rho w_3 \\ \rho \varepsilon^0 \end{pmatrix}; \quad \vec{\Phi}_1 = \begin{pmatrix} \rho w_1 \\ \rho w_1 \omega \\ \rho w_1 S \\ \rho w_1^2 + p \\ \rho w_1 w_2 \\ \rho w_1 w_3 \\ \rho w_1 i^0 \end{pmatrix}; \quad \vec{\Phi}_2 = \begin{pmatrix} \rho w_2 \\ \rho w_2 \omega \\ \rho w_2 S \\ \rho w_2 w_1 \\ \rho w_2^2 + p \\ \rho w_2 w_3 \\ \rho w_2 i^0 \end{pmatrix};$$

$$\vec{\Phi}_3 = \begin{pmatrix} \rho w_3 \\ \rho w_3 \omega \\ \rho w_3 S \\ \rho w_3 w_1 \\ \rho w_3 w_2 \\ \rho w_3^2 + p \\ \rho w_3 i^0 \end{pmatrix}; \quad \vec{\Lambda} = \begin{pmatrix} 1 \\ \omega \\ S \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \varepsilon^0 \end{pmatrix}; \quad \vec{\Delta} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\partial(\rho \omega)} \\ \frac{\partial t}{\partial(\rho S)} \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \frac{\partial(\rho \varepsilon^0)}{\partial t} \end{pmatrix},$$

где \vec{F} – вектор-матрица потоковых факторов; $\vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2, \vec{\Phi}_3$ – вектор-матрицы конвективных и волновых факторов; w_1, w_2, w_3 – компоненты вектора скорости; f_1, f_2, f_3 – компоненты вектора напряженности поля массовых сил; ε^0, i^0 – внутренняя энергия и энтальпия системы по полным параметрам; $\vec{\Delta}$ – тензор «свободных» источников-стоков (ИС); M_M – общее число групп ИС, связанных с массопереносом; M_C – общее число «свободных» групп ИС.

Для решения эволюционной задачи используется модифицированная схема «распада разрыва», дополненная решением ряда автомодельных задач на внешних и внутренних границах расчетной области [4, 5]. Внешние факторы отображаются методом особенностей вида ИС. Имитация границ сложной формы также осуществляется методом особенностей. Для моделирования вязких эффектов в дополнение к компонентам тензора скоростей деформаций используется нормирование аппроксимационной вязкости.

Численная реализация модели

Подсистема (2) $\left[\frac{\partial \vec{F}}{\partial t} \right]_0 = \Lambda_0$ учитывает только изменения «автономного» течения, а подсистема $\left[\frac{\partial \vec{F}}{\partial t} \right]_n = \Lambda_n$ – возмущения основного решения. Таким образом, приращение локальной производной представляет собой линейную форму, образуемую совокупностью факторов «автономного» течения и групп ИС:

$$\frac{\partial \vec{F}}{\partial t} = \left[\frac{\partial \vec{F}}{\partial t} \right]_0 + \sum_{n=1}^M \left[\frac{\partial \vec{F}}{\partial t} \right]_n . \quad (3)$$

Представление (3) органически сочетается с принципом расщепления по физическим процессам $n=0, \dots, M$ в применении к операциям каждого временного шага [4, 5]. Явный разностный аналог системы дифференциальных уравнений с использованием на каждом временном шаге принципа расщепления по направлениям в пространстве принимает вид:

$$\vec{F}_{i_1, i_2, i_3}^{l+1} = \vec{F}_{i_1, i_2, i_3}^l + \tau \sum_{n=0}^M (\Lambda_n)'_{i_1, i_2, i_3} , \quad (4)$$

где τ – временной шаг; « $(\dots)'$ », « $(\dots)_{i_1, i_2, i_3}$ » – индексы временного слоя и узлов прямоугольной сетки.

Разностные аналоги $(\Lambda_n)'_{i_1, i_2, i_3}$ на каждом новом временном слое отвечают независимым (параллельным) вычислительным шагам и находятся по состоянию предыдущего $P_{i_1+\sigma_1, i_2+\sigma_2, i_3+\sigma_3}^l$, где $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ – совокупность относительных индексов шаблона

разностной схемы шага расщепления № n. Для определения потоковых компонент $\Phi_{i_1+\frac{\beta\delta_{k,1}}{2}, i_2+\frac{\beta\delta_{k,2}}{2}, i_3+\frac{\beta\delta_{k,3}}{2}}^{\rightarrow l+\frac{1}{2}}$ ($\beta = -1, 1$) при расчете параметров «автономного» течения используются известные автотельные решения [4, 5].

Часть операций на очередном временном шаге выполняются последовательно (определение интегральных характеристик, графическое отображение результатов расчета и т. д.). В результате чего программа содержит 40% кода, который не может быть распараллелен предлагаемым методом, поэтому согласно закону Амдала [6] теоретическое ускорение вычислений будет полуторакартным.

Алгоритм распараллеливания

Распаковка исходного потокового вектора $F_{i_1, i_2, i_3}^{\rightarrow l+1}$ (заданного изначально или найденного на предыдущем временном слое) проходит независимо в каждой ячейке. Новая нить начинается на этапе выбора направления расщепления в пространстве. После завершения нитей решение в ячейке на новом временном слое формируется суперпозицией решений по направлениям. В каждой нити последовательно проводится вычисление следующих параметров (рис. 2):

- 1) потоков на левой границе в нулевой ячейке ($i = 0$);
 - 2) потоков между ячейками внутри расчетной области ($0 < i < nx$);
 - 3) потоков на правой границе в крайней ячейке ($i = nx$);
 - 4) нахождение параметров в ячейках, прилегающих к твердым границам;
 - 5) решение системы разностных уравнений;
- После завершения всех нитей проводится

очередное обновление потокового вектора $F_{i_1, i_2, i_3}^{\rightarrow l+1}$. Распараллеливание проводится в системе с общей памятью, т. е. предназначено для решения на одном персональном компьютере. Для решения задачи на суперкомпьютере с распределенной памятью необходимо решение вопроса об обмене значениями $F_{i_1, i_2, i_3}^{\rightarrow l+1}$ по скоростной сети (например, Omni-Path, QDR).

Чтобы сделать участок кода недоступным для выполнения других потоков (исключить случай, когда три конкурирующих потока одновременно находятся в критической секции кода) используются т. н. мьютексы [7] библиотеки pthreads. Основной программный модуль ожидает завершения всех потоков, и только после этого переходит к расчету параметров на следующем временном слое. Участок кода, отвечающий за распараллеливание, выглядит следующим образом:

```
// Процедура распараллеливания
void *flow(void *thraid)
{
    int id = (int)thraid;
    pthread_mutex_lock(&mutext);
    // Выбор направления
    switch (id)
    {
```

```
case 0: N_1 = nz; N_2 = ny; N_3 = nx;
break;
case 1: N_1 = nz; N_2 = nx; N_3 = ny;
break;
case 2: N_1 = nx; N_2 = ny; N_3 = nz;
break;
```

```
}
// Расчет течения
...
pthread_mutex_unlock(&mutext);
pthread_exit(NULL);
return NULL;
}
```



Рис. 2. Блок-схема алгоритма распараллеливания

Результаты моделирования

Расчеты проводились в авторском пакете программ (ПП), разработанном на языке C++ в среде программирования Code::Blocks EP. ПП включает в себя сеточный генератор, вычислительный модуль и графический интерфейс. Также предусмотрено сохранение промежуточных результатов расчета в виде контрольных точек и их импорт во внешнюю среду визуализации TechPlot360. Сеточный генератор позволяет генерировать маски на основании созданного в любом CAD приложении геометрического образа объекта исследования в формате STL. Графический модуль построен на основе библиотеки graphics.h графического интерфейса Borland – WinBGIm.

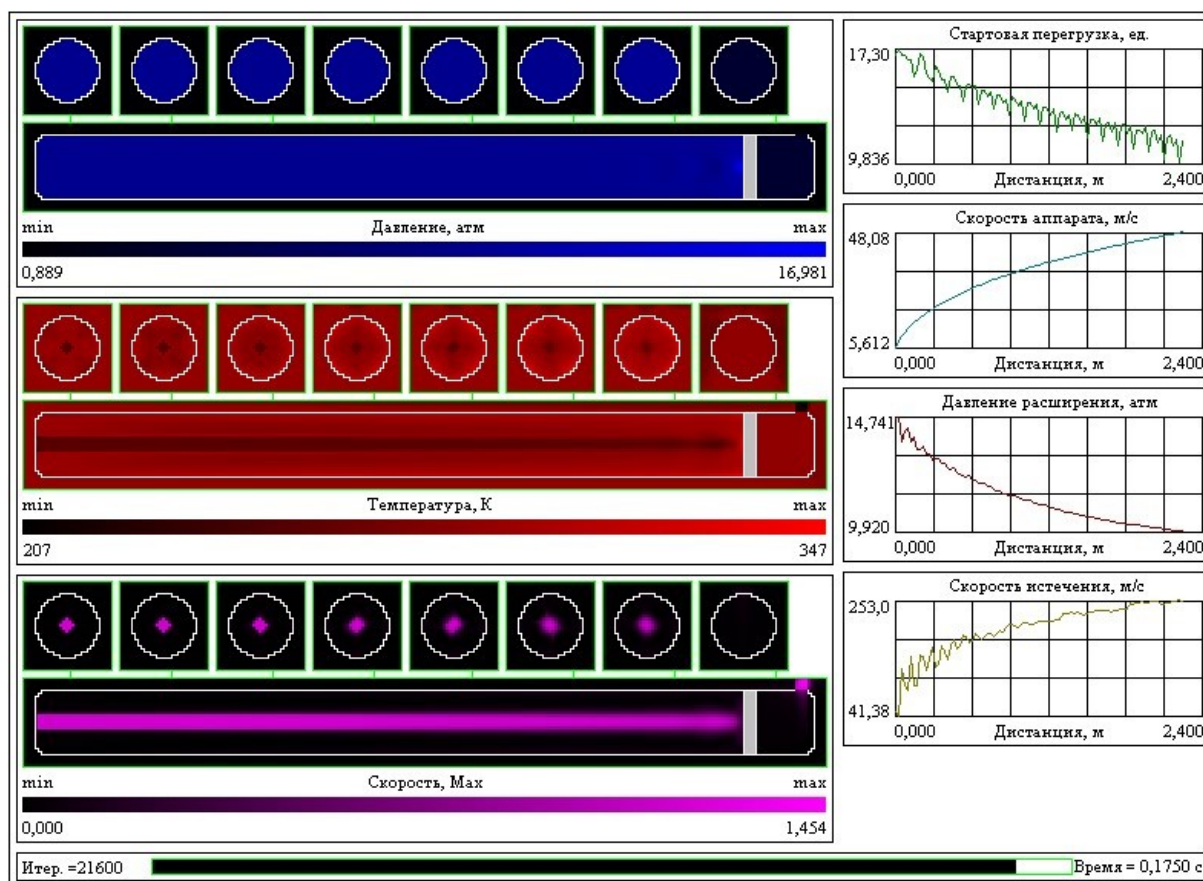


Рис. 3. Временной срез расчетной области пневматической катапульти, подвергаемый распараллеливанию

Распараллеливание выполнялось с помощью библиотеки `pthread.h`, реализующей стандарт выполнения потоков POSIX Threads на 32- и 64-разрядных операционных системах Windows 7 и 10. Расчеты проводились на 2-ядерном (4 потока) персональных компьютерах с процессором Intel(R) Core(TM)2 Quad CPU Q8200 2,33GHz и оперативной памятью 4096Mb, а также Intel(R) Core(TM) i3-7100 CPU @ 3,9GHz и памятью 8192Mb, соответственно.

Проведены измерения ускорения при моделировании рабочего процесса в пневматической катапульти (рис. 3). Получено ускорение вычислений на 18-19 % независимо от типа системы и частоты процессора, что на 30 % меньше теоретического. Причиной невысоких показателей распараллеливания может являться неэффективное использование кэш-памяти микропроцессора в случае использования одной нити памяти большей, чем сам кэш.

Выводы

Предложенный метод распараллеливания органично сочетается с принципом расщепления по направлениям, поэтому не требует никаких модификаций культивируемой явной многошаговой разностной схемы. Основная причина невысоких показателей ускорения усматривается в неэффективном управлении кэшем процессора и приоритетом распараллеливания потока. Для увеличения скорости вычислений целесообразно использовать функцию `pthread_setschedparam()` для

задания приоритета потоку. Максимальное повышение производительности данным методом будет достигаться при решении трехмерных нестационарных задач.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Performance of Parallel Implementations of an Explicit Finite-Volume Shallow-Water Model [Text] / John C. Paul, Brett F. Sanders // *Journal of Computing in Civil Engineering*. – Vol. 20, Issue 2 – March 2006. – 12 p.
2. A parallel multigrid algorithm for solving the incompressible Navier-Stokes equations with nonconforming finite elements in three dimensions [Text] / H. Oswald, S. Turek // *Parallel Computational Fluid Dynamics: Algorithms and Results Using Advanced Computers*. – Elsevier Science B. V., 1997. – P. 220-227.
3. Амброжевич, А. В. Численное моделирование комплекса нестационарных газодинамических процессов в тепловых двигателях [Текст]: монография / А. В. Амброжевич. – Харьков: изд-во ХГАДТУ, 1999. – 77 с.
4. Пульсирующие воздушно-реактивные двигатели [Текст]: монография / А. В. Амброжевич, К. В. Мизалин, С. Н. Ларьков, В. А. Серета и др. – Тольятти: изд-во ТГУ, 2014. – 296 с.
5. Ковеня, В. М. Метод расщепления в газовой динамике [Текст] / В. М. Ковеня, Н. Н. Яненко. – Новосибирск: Наука, 1981. – 304 с.
6. Эхтер, Ш. Многоядерное программирование [Текст] / Ш. Эхтер, Дж. Робертс. – СПб: Питер, 2010. – 320 с. Камерон, Х. Параллельное и распределенное программирование с использованием C++ [Текст]: пер. с англ. / Камерон Хьюз, Трейси Хьюз // М.-СПб-К.: изд. дом «Вильямс», 2004. – 672 с.