Параллельная реализация метода вихревых элементов с использованием модели симметричного вортона-отрезка^{*}

И.К. Марчевский, Г.А. Щеглов

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

На примере задачи о моделировании эволюции пространственных вихревых структур в идеальной несжимаемой среде исследованы вопросы ускорения вычислений в методе вихревых элементов. В качестве вихревого элемента использована разработанная авторами модель симметричного вортона-отрезка, позволяющая моделировать такие эффекты, как деформация и перезамыкание вихревых линий. Возможны несколько способов ускорения вычислений: распараллеливание исходного алгоритма с помощью средств MPI и OpenMP, использование метода мультипольных разложений, а также комбинация указанных подходов. Приведены результаты тестовых расчетов. Для метода мультипольных разложений построены оценки оптимальных параметров.

1. Введение

Численное моделирование пространственных течений среды и определение нестационарных аэродинамических нагрузок, действующих на плохообтекаемые тела, является достаточно трудоемкой задачей. В случае внешних течений с малыми дозвуковыми скоростями, когда сжимаемостью среды можно пренебречь, наиболее эффективными с вычислительной точки зрения являются бессеточные лагранжевы методы: метод дискретных вихрей, метод вихревых частиц, метод вихревых элементов [1–2]. Первичной расчетной величиной в этих методах является завихренность, переносимая вихревыми элементами (ВЭ), а поле скоростей и давление восстанавливаются при помощи закона Био — Савара и аналога интеграла Коши — Лагранжа [3]. Определение скоростей, необходимых для интегрирования уравнений движения ВЭ, основано на расчете парных взаимодействий всех ВЭ, что делает эту задачу аналогичной гравитационной задаче N тел. Понятно, что с повышением точности моделирования при увеличении количества вихревых элементов вычислительная сложность возрастает пропорционально квадрату числа элементов.

Ускорению вычислений методом вихревых элементов посвящено значительное количество работ, среди которых можно выделить два основных подхода: использование параллельных алгоритмов и применение приближенных «быстрых» алгоритмов решения задачи N тел. Для различных классов задач и используемых моделей вихревых элементов в литературе, как правило, используется либо один, либо другой подход.

В работе [4] рассмотрен параллельный алгоритм расчета пространственного обтекания тел методом вихревых элементов с использованием модели симметричного вортона-отрезка. На основе анализа трудоемкостей всех операций алгоритма показано, что распараллеливание только одной операции вычисления парных влияний не позволяет получить существенного ускорений вычислений при проведении расчетов на многопроцессорных 'ЭВМ. Распараллеливание всех операций позволяет довести долю параллельного кода до 98...99 %, что в соответствии с законом Амдала делает алгоритм решения задачи более масштабируемым за счет сохранения относительных трудоемкостей всех операций алгоритма.

При решении практических задач этот подход позволил сократить время вычислений в 9–10 раз при проведении расчетов на 16-ядерном кластере, при этом около половины

^{*}Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 11-08-00699-а и гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук MK-6482.2012.08

времени счета приходится на вычисление парных влияний ВЭ. Существенное сокращение времени выполнения данной операции, как представляется, может быть получено внедрением в параллельный алгоритм «быстрого» метода решения задачи N тел, вычислительная сложность которого пропорциональна $N \lg N$. Такой алгоритм применительно к расчету пространственной эволюции завихренности в методе вихревых элементов при использовании модели симметричного вортона-отрезка реализован авторами и рассмотрен в настоящей статье.

2. Описание модельной задачи

В качестве тестовой задачи вычислительной гидродинамики рассматривается эволюция вихревых структур в безграничном объеме идеальной жидкости, описываемая уравнением неразрывности и уравнением Эйлера (уравнением сохранения импульса)

$$\begin{split} \nabla\cdot\vec{V} &= 0,\\ \frac{\partial\vec{V}}{\partial t} + \left(\vec{V}\cdot\nabla\right)\,\vec{V} &= -\nabla\left(\frac{p}{\rho_{\infty}}\right), \end{split}$$

где $\vec{V}(\vec{r},t)$ — поле скоростей, $p(\vec{r},t)$ — давление, ρ_{∞} — плотность среды, \vec{r} — радиус-вектор в неподвижной декартовой системе координат, $\nabla = \vec{i} \partial/\partial x + \vec{j} \partial/\partial y + \vec{k} \partial/\partial z$. В качестве граничных условий используется условие затухания возмущений на бесконечности

$$\lim_{r \to \infty} \vec{V} = 0, \quad \lim_{r \to \infty} p = p_{\infty}.$$

В качестве начального условия задается поле скоростей $\vec{V}(\vec{r},t_0) = \vec{V}_0$, индуцируемое начальным распределением завихренности $\vec{\Omega}(\vec{r},t_0) = \nabla \times \vec{V}_0$.

Использование для решения поставленной задачи лагранжева метода вихревых элементов позволяет обеспечить тождественное выполнение уравнения неразрывности, а уравнение Эйлера записать в форме Лагранжа

$$\frac{D\vec{r}}{Dt} = \vec{V}, \quad \frac{D\Omega}{Dt} = \left(\vec{\Omega} \cdot \nabla\right) \vec{V},\tag{1}$$

где $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) - \text{субстанциональная (материальная)}_{\vec{J}}$ производная.

Вихревые структуры, образующие поле завихренности $\vec{\Omega}(\vec{r},t)$ в (1), могут быть приближенно представлены виде суперпозиции N_V элементарных полей завихренности вихревых элементов (ВЭ)

$$\vec{\Omega}\left(\vec{r},t\right)\approx\sum_{i=1}^{N_{V}}\vec{\Omega}_{0i}.$$

В этом случае дифференциальные уравнения в частных производных (1) могут быть сведены к системе обыкновенных дифференциальных уравнений относительно параметров ВЭ [1]. В случае моделирования пространственного течения выбор ВЭ представляет собой нетривиальную задачу, поскольку возникает необходимость моделирования эволюции вихревых линий (растяжения, перезамыкания и пр.). В данной работе в качестве модели ВЭ используется модель симметричного вортона-отрезка [5], который можно рассматривать как цепочку, составленную из точечных вортонов [6].

Симметричный вортон-отрезок, как показано на рис. 1, представляет собой отрезок вихревой линии циркуляции Γ длиной 2h с заданным центром \vec{r}_0 и вектором \vec{h} , определяющим его «полуразмах». Вектор вортона может быть представлен в виде $\vec{h} = h\vec{e}$, где $\vec{e} = \vec{h}/|\vec{h}|$ — направляющий вектор вортона. На рис. 1 также обозначены $\vec{s}_0 = \vec{r} - \vec{r}_0$ вектор, соединяющий центр вортона и точку наблюдения, т.е. точку, в которой вычисляется индуцированная им скорость; $\vec{s}_1 = \vec{s}_0 - \vec{h} = \vec{r} - (\vec{r}_0 + \vec{h})$ – вектор, соединяющий конец вортона с точкой наблюдения; $\vec{s}_2 = \vec{s}_0 + \vec{h} = \vec{r} - (\vec{r}_0 - \vec{h})$ – вектор, соединяющий начало вортона и точку наблюдения.



Рис. 1. Симметричный вортон-отрезок

Система уравнений, описывающая эволюцию параметров ВЭ, имеет вид

$$\frac{d\vec{r}_{0i}}{dt} = \vec{V}(\vec{r}_{0i}, t), \quad \frac{d\vec{h}_i}{dt} = [H] \cdot \vec{h}_i, \quad \frac{d\Gamma_i}{dt} = 0, \qquad i = 1, \dots, N_V.$$

$$\tag{2}$$

Поле скоросте
й \vec{V} в (2) определяется суммарным влиянием всех ВЭ

$$\vec{V}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_V} \Gamma_i \int_{-1}^1 \vec{v}(\vec{r}, \vec{r}_{0i} + s\vec{h}_i, \vec{h}_i, \varepsilon) \, ds,$$
(3)

вычисляемым по закону Био — Савара с учетом цилиндрически симметричной функции сглаживания

$$\vec{v}(\vec{r},\vec{r}_{i},\vec{h}_{i},\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi}c_{v}\,\vec{a}_{v}, & R \ge \varepsilon, \\ \frac{1}{4\pi}\frac{R}{\varepsilon}c_{v}^{*}\vec{a}_{v}^{*}, & R < \varepsilon, \end{cases}$$

$$\vec{r}^{*} = \vec{r} + \left(\frac{\varepsilon}{R} - 1\right)\left(\vec{h}_{i}\frac{\vec{s}_{0}\vec{h}_{i}}{h_{i}^{2}} - \vec{s}_{0}\right), & R = |\vec{e} \times \vec{s}_{0}|, \end{cases}$$

$$\vec{a}_{v} = \vec{h} \times \vec{s}_{0}, \quad c_{v} = |\vec{a}_{v}|^{-2}\left[\left(\frac{\vec{s}_{2}}{|\vec{s}_{2}|} - \frac{\vec{s}_{1}}{|\vec{s}_{1}|}\right) \cdot \vec{h}\right],$$

$$\vec{a}_{v}^{*} = \vec{h} \times (\vec{r}^{*} - \vec{r}_{i}), \quad c_{v}^{*} = |\vec{a}_{v}^{*}|^{-2}\left[\left(\frac{\vec{r}^{*} - \vec{r}_{i} + \vec{h}}{|\vec{r}^{*} - \vec{r}_{i} - \vec{h}_{i}|} - \frac{\vec{r}^{*} - \vec{r}_{i} - \vec{h}_{i}}{|\vec{r}^{*} - \vec{r}_{i} - \vec{h}_{i}|}\right) \cdot \vec{h}_{i}\right], \qquad (4)$$

где ε — радиус сглаживания поля скоростей вортона-отрезка.

Тензор деформации вектора ВЭ в (2) вычисляется по симметричной схеме [7]

$$[H] = \frac{[\mathbf{B}(\vec{r}_{0i})] + [\mathbf{B}(\vec{r}_{0i})]^{T}}{2},$$

где тензор $[\mathbf{B}\left(\vec{r}_{0i}
ight)] = \nabla \vec{V}$ определяется формулой

$$[\mathbf{B}(\vec{r}_{0i})] = \sum_{j=1}^{N_{V}} \int_{-1}^{1} \left[\mathbf{B}\left(\vec{r}_{0j} + s\vec{h}_{j}, \vec{r}_{0i}\right) \right] ds,$$
(5)
$$[\mathbf{B}(\vec{r}_{0j}, \vec{r}_{i})] = \begin{pmatrix} \partial \left(V_{0j}(\vec{r}_{i})\right)_{x} / \partial x_{i} & \partial \left(V_{0j}(\vec{r}_{0i})\right)_{x} / \partial y_{i} & \partial \left(V_{0j}(\vec{r}_{i})\right)_{x} / \partial z_{i} \\ \partial \left(V_{0j}(\vec{r}_{i})\right)_{y} / \partial x_{i} & \partial \left(V_{0j}(\vec{r}_{0i})\right)_{y} / \partial y_{i} & \partial \left(V_{0j}(\vec{r}_{i})\right)_{y} / \partial z_{i} \\ \partial \left(V_{0j}(\vec{r}_{i})\right)_{z} / \partial x_{i} & \partial \left(V_{0j}(\vec{r}_{0i})\right)_{z} / \partial y_{i} & \partial \left(V_{0j}(\vec{r}_{i})\right)_{z} / \partial z_{i} \end{pmatrix}.$$

Частные производные компонентов вектора скорости $\vec{V}_{0j}(\vec{r}_i)$ по компонентам радиус-вектора \vec{r}_i найдены по аналитическим формулам, полученным дифференцированием выражений для \vec{a}_v и c_v [8].

При численном определении градиента скорости в правой части (2) необходимо вводить сглаживание особенности на отрезке ВЭ. Сглаживание производится аналогично (4) с использованием функций c_v^*, \vec{a}_v^* , вычисленных в точке \vec{r}^* :

$$\left[\mathbf{B}\left(\vec{r}_{0j},\vec{r}_{i}\right)\right] = \begin{cases} \left[\mathbf{B}\left(\vec{r}_{0j},\vec{r}_{i}\right)\right], & R \geq \varepsilon, \\ \frac{R}{\varepsilon} \left[\mathbf{B}\left(\vec{r}_{0j},\vec{r}_{i},\vec{r}^{*},c_{v}^{*}\vec{a}_{v}^{*}\right)\right], & R < \varepsilon. \end{cases}$$

Вычисление интегралов в (3) и (5) проводится с использованием квадратурных формул Гаусса. Методические расчеты показывают, что использование 3 гауссовых точек обеспечивает необходимую точность вычисления интеграла.

Представление вихревых структур (вихревых колец, рамок и нитей) с помощью симметричных вортонов-отрезков оказывается более эффективным по сравнению с использованием других типов ВЭ (точечные вортоны, вихревые сгустки и др.), поскольку использование модели вортона-отрезка позволяет точнее описывать процесс удлинения и изгибания вихревых нитей с использованием меньшего числа вихревых элементов.

Ранее в работе [9] на примере задачи о моделировании явления чехарды вихревых колец было показано, что с помощью симметричных вортонов-отрезков удается сохранять строгую периодичность решения на протяжении большего времени расчета по сравнению с другими типами ВЭ. Это свидетельствует о высокой точности расчета растяжения вихревых нитей с помощью симметричных вортонов-отрезков.

В данной работе задача о чехарде вихревых колец используется для тестирования предлагаемого метода ускорения вычислений. В качестве начального поля завихренности $\vec{\Omega}(\vec{r}, t_0)$ при $t_0 = 0$ в идеальной жидкости с единичной плотностью рассматриваются два тороидальных вихревых кольца одинакового радиуса $R_1 = R_2 = 1$ имеющих круглое поперечное сечение с радиусом $r_R = 0,1$ и отстоящие друг от друга на расстоянии z = 1,2 как показано на рис. 2.



Рис. 2. Расчетная схема для моделирования чехарды вихревых колец

Распределение завихренности в сечении вихревого кольца задавалось соотношением $|\Omega_0| = A(r_R - r)/r_R$, где A — константа, выбираемая из условия единичной циркуляции вектора скорости по контуру, охватывающему сечение тора. Аппроксимация завихренности в торе при помощи N_V вихревых элементов производилась путем разбиения тора на ячейки примерно равного объема (рис. 3) и замены завихренности в ячейке эквивалентным по циркуляции ВЭ.

Интегрирование системы обыкновенных дифференциальных уравнений (2) производилось методом второго порядка точности с шагом по времени $\Delta t = 0,005$. Радиус сглаживания вортона принимался равным $\varepsilon = 0,10$.



Рис. 3. Разбиение поперечного сечения кольца на ячейки

3. Актуальность применения «быстрого» метода

При использовании «прямого» метода расчета парных взаимодействий, даже используя параллельные вычислительные алгоритмы, число ВЭ в расчетных схемах на практике не превышает 10–20 тысяч. Однако для повышения точности моделирования количество ВЭ необходимо увеличивать, при этом желательно это делать не путем повышения эффективности распараллеливания и задействования в расчетах все большего числа вычислительных ядер, а за счет использования приближенных «быстрых» алгоритмов. При этом ресурс распараллеливания вычислений также может быть использован для еще большего ускорения вычислений. Представляется, что для эффективного решения актуальных на сегодня инженерных задач необходимо обеспечить возможность проведения расчетов для $N_V \sim 10\,000$ ВЭ, используя возможности персональных ЭВМ с многоядерными процессорами.

Эффективный «быстрый» метод приближенного решения гравитационной задачи N тел предложен и описан в работе [10], его модификация применительно к двумерным задачам моделирования обтекания профилей методом вихревых элементов рассмотрена в работе [11]. Вычислительная сложность данного метода пропорциональна $N_V \lg N_V$ против N_V^2 для «прямого» метода. Использование «быстрого» метода позволило довести число ВЭ (в двумерных задачах — бесконечных вихревых нитей, перпендикулярных плоскости течения) до нескольких миллионов. При этом расчет одного парного взаимодействия «плоских» ВЭ требует выполнения всего 6 операций умножения/деления, тогда как расчет взаимодействия двух вортонов-отрезков предполагает выполнение 170...850 операций в зависимости от выбираемой схемы интегрирования системы (2). Таким образом, для схемы интегрирования с 3 гауссовыми точками одно вычисление парного влияния вортонов-отрезков является почти на 2 порядка более затратной операцией по сравнению с плоским случаем, поэтому актуальность разработки эффективного алгоритма быстрого метода для решения подобных задач становится очевидной.

Отметим, что существуют и асимптотически более эффективные методы, вычислительная трудоемкость которых порядка N_V , однако они становятся эффективными лишь при экстремально больших N_V (порядка миллионов), тогда как актуальной является задача ускорения вычислений при N_V порядка нескольких тысяч либо десятков тысяч.

4. Описание «быстрого» метода решения задачи

Первым этапом алгоритма «быстрого» метода вычисления скоростей ВЭ является построение дерева — иерархической структуры областей, имеющих форму прямоугольного параллелепипеда (рис. 4).

Параллелепипед нулевого уровня содержит все ВЭ. Он делится по ребру наибольшей длины на два одинаковых параллелепипеда первого уровня. Путем перебора ВЭ определяется их принадлежность к одному из них. После этого каждый параллелепипед «обрезается» по всем измерениям, чтобы исключить из него области, не содержащие ни одного ВЭ. Заметим, что такая простая процедура позволяет с одной стороны существенно повысить эффективность метода, а с другой — упростить алгоритм.

Далее аналогичным образом эти параллелепипеды делятся пополам, образуя области второго уровня. Деление прекращается при выполнении заданного критерия по размеру



Рис. 4. Дерево, имеющее максимальную глубину 4 уровня, и направление его обхода

параллелепипеда, числу ВЭ в нем и (или) номеру уровня. Отметим, что «обрезание» всех параллелепипедов обеспечивает непустоту областей следующего уровня.

На втором этапе для каждой области определяются положение и вектор эквивалентного вортона, а также его интенсивность. Положение и вектор эквивалентного вортона вычисляются в 2 этапа: сначала находится «средний» радиус-вектор и «средний» вектор вортонов ячейки

$$\vec{\xi_e} = \frac{\sum \vec{r_i} |\Gamma_i|}{\sum |\Gamma_i|}, \quad \vec{\eta_e} = \frac{\sum \vec{h_i} |\Gamma_i|}{\sum |\Gamma_i|},$$

где суммирование производится по всем вортонам, находящимся в соответствующей ячейке.

Начало и конец эквивалентного вортона находятся в точках пересечения прямой, проходящей через точку $\vec{\xi_e}$ в направлении вектора $\vec{\eta_e}$, с гранями параллелепипеда. Центр этого отрезка определяет положение $\vec{r_e}$ эквивалентного вортона; вектор эквивалентного вортона $\vec{h_e}$ оказывается коллинеарным вектору $\vec{\eta_e}$, а его длина равна половине длины эквивалентного вортона (рис. 5).



Рис. 5. Алгоритм построения эквивалентного вортона

Интенсивность эквивалентного вортона вычисляется по формуле

$$\Gamma_e = \frac{|\vec{\eta}_e|}{|\vec{h}_e|} \cdot \sum \Gamma_i.$$

Отметим, что для вершин дерева (тех ячеек, которые не имеют потомков следующего уровня), указанные величины вычисляются непосредственно. В дополнение к ним запоминаются также сумма модулей интенсивностей ВЭ и так называемые моменты:

$$\Gamma_e^* = \frac{|\vec{\eta_e}|}{|\vec{h_e}|} \cdot \sum |\Gamma_i| \,, \quad \vec{M_e^r} = \sum \vec{r_i} |\Gamma_i| \,, \quad \vec{M_e^h} = \sum \vec{h_i} |\Gamma_i| \,.$$

Для ячеек более высокого уровня моменты, суммарные интенсивности и суммарные модули интенсивностей ВЭ вычисляется простым суммированием соответствующих характеристик дочерних областей, тогда «среднее» положение и «средний» вектор вортона будут определяться по формулам

$$ec{\xi_e} = rac{ec{M_e^r}}{\Gamma_e^*}, \quad ec{\eta_e} = rac{ec{M_e^h}}{\Gamma_e^*},$$

Важно отметить, что процедура построения дерева и вычисления характеристик всех ячеек является исключительно малозатратной, при этом расчеты показывают, что время построения дерева и вычисления его характеристик растет практически линейно с увеличением количества ВЭ. Ниже в табл. 1 приведено отношение времени построения дерева ко времени вычисления парных влияний «прямым» методом для различного количества ВЭ в расчетной схеме.

Таблица 1. Временные затраты на построение дерева по отношению ко времени счета «прямым методом» (в %)

N_V	2 000	4000	8 000	12000	16 000	20 000
$\frac{t_{tree}}{t_{slow}} \cdot 100\%$	0,130	0,049	0,025	0,023	0,020	0,015

Таким образом, труднораспараллеливаемая операция построения дерева не является «узким местом» алгоритма быстрого метода. Следует также отметить, что в программной реализации процедуры построения дерева активно используется работа с динамической памятью, поэтому при работе с вычислительными машинами с распределенной памятью рассылка дерева на все вычислительные узлы является нетривиальной задачей. Наиболее рациональным способом решения возникающей проблемы представляется рассылка на все вычислительные узлы параметров всех вортонов и независимое построение деревьев на всех узлах. В силу полной детерминированности алгоритма и идентичности исходных данных все деревья получатся одинаковыми.

На рис. 6 приведены параллелепипеды 1...8 уровня структуры дерева для задачи о моделировании эволюции вихревых колец.



Рис. 6. Параллелепипеды 1...8 уровней

Третьим этапом является вычисление скоростей ВЭ в областях нижнего уровня (т.е. не имеющих дочерних областей): влияние ВЭ, находящихся в той же области, а также близкорасположенных ВЭ из других областей рассчитывается непосредственно по закону Био — Савара, а затем осуществляется обход дерева, и влияние ВЭ, расположенных в достаточно удаленных областях, учитывается приближенно как влияние эквивалентных вортонов.

На рис. 7 представлена схема, на которой показано, как осуществляется вычисление влияния на один из вортонов (обозначенный кружком) от всех остальных вортонов, образующих вихревые кольца.



Рис. 7. Схема вычисления вихревого влияния на один из вортонов (обозначен кружком)

Непосредственное вычисление влияния происходит лишь от сравнительно небольшого числа вортонов, находящихся рядом с контрольным; от элементов дерева, изображенных на рис. 7 параллелепипедами, влияние вычисляется как от эквивалентных вортонов.

Критерием близости ячеек является отношение суммы длин их диагоналей к расстоянию между положениями эквивалентных вортонов. На рис. 7 критерием близости являлось превышение указанного отношения величины $\theta = 0.25$. На рис. 8 показаны схемы вычисления вихревого влияния в этой же задаче при $\theta = 0.10$ и $\theta = 0.50$.



Рис. 8. Схема вычисления вихревого влияния на один из вортонов (обозначен кружком) для $\theta = 0.10$ и $\theta = 0.50$

Ясно, что при увеличении величины θ скорость счета увеличивается, однако точность получаемых результатов снижается. Значение $\theta = 0$ формально означает, что критерий дальности никогда не выполняется, следовательно алгоритм «быстрого» метода не работает и расчет производится «прямым» методом. Ниже на графике на рис. 9 представлены зависимости времени счета от величины θ для 2000, 4000, 8000 и 20000 ВЭ в расчетной схеме (все результаты отнесены к времени счета прямым методом в соответствующей задаче). Видно, что чем выше вычислительная сложность задачи, тем эффективнее оказывается использование быстрого метода.

Следует отметить, что при фиксированном значении θ (т.е. при одном и том же предельном уровне погрешности) скорость расчета существенно зависит от максимального числа



Рис. 9. Время счета с использованием быстрого метода в зависимости от величины параметра θ (сплошная линия – 2000 ВЭ, пунктир – 4000 ВЭ, точки – 8000 ВЭ, штрихпунктир – 20000 ВЭ)

уровней дерева, которое задается в алгоритме его построения. При этом ошибка на 2-3 уровня от оптимального значения приводит к очень существенному росту затрат времени.

Расчеты показывают, что для обеспечения необходимой для практических целей точности величину критерия θ дальности двух ячеек дерева необходимо выбирать не превышающей 0,2...0,3. Далее во всех расчетах полагалось $\theta = 0,2$.

5. Использование параллельных вычислительных технологий

Применение «быстрого» метода расчета парных взаимодействий ВЭ позволяет существенным образом сократить время счета. Ниже в табл. 2 приведено отношение времени выполнения одного шага расчета в задаче о моделировании эволюции вихревых колец при использовании «быстрого» и «прямого» методов при достаточно большом числе ВЭ в расчетной схеме.

Таблица	2 .	Отношение	времени	счета	«быстрым»	методом	КО	времени	счета	«прямым»
методом										

N_V	10 000	20000	30 000	40 000	50000
$\frac{t_{fast}}{t_{slow}}$	0,090	$0,\!053$	0,033	0,029	0,022

Видно, что скорость решения задач с расчетными схемами, содержащими десятки тысяч ВЭ, представляющими интерес на практике, возрастает в десятки раз, однако время выполнения одного шага расчета, к примеру, при $N_V = 50\,000$ на персональной ЭВМ составляет более 20 секунд, что все равно неприемлемо, поскольку для решения представляющих практический интерес задач требуется выполнять не менее нескольких сотен, а чаще даже тысяч шагов.

Единственным путем дальнейшего ускорения вычислений является использование параллельных вычислительных технологий. Предпочтительным представляется использование технологии MPI, поскольку она является универсальной и позволяет производить расчеты как на системах с общей памятью (в частности, на персональных ЭВМ с многоядерными процессорами), так и на кластерных системах с распределенной памятью. Отметим, что при распараллеливании с использованием OpenMP для систем с общей памятью с 2–8 вычислительными ядрами выигрыш во времени счета по сравнению с применением MPI составлял не более 2–5 %.

При использовании «прямого» метода расчета [4] идея распараллеливания операции вычисления вихревого влияния сводилась к разделению всего множества ВЭ на равные блоки по числу задействованных вычислительных узлов и последующему независимому вычислению скоростей всех ВЭ. При этом, очевидно, перед каждым шагом требуется рассылка на все вычислительные узлы полной информации о всех ВЭ. При достаточно большом числе ВЭ ускорение вычислений оказывается близким к линейному, например, для расчета на 16 вычислительных узлах при $N_v = 50\,000$ ускорение составляет 15,97, однако общее время выполнения шага при таком расчете превышает 60 секунд.

В табл. 3 приведены значения ускорения расчета при использовании «прямого» метода вычисления вихревого влияния для различного числа ВЭ в расчетной схеме.

N_V	Число вычислительных узлов						
	1	2	4	8	12	16	
5000	1,00	2,00	3,90	7,81	$11,\!53$	14,92	
10 000	1,00	2,00	3,97	7,90	11,85	15,45	
50000	1,00	2,00	3,98	7,93	11,88	15,97	

Таблица 3. Ускорение при использовании MPI для решения задачи «прямым» методом

Распараллеливание вычислений при использовании «быстрого» метода расчета вихревого влияния основано на сходной идее, однако по вычислительным узлам распределяются не отдельные ВЭ, а вершины дерева, т.е. те его ячейки, которые не имеют потомков. При этом после рассылки на все вычислительные узлы в начале каждого шага полной информации о всех ВЭ на них выполняются процедуры построения дерева. В случае неудачно выбранного критерия окончания деления ячеек-параллелепипедов в алгоритме построения дерева, а также при сильной несимметрии распределения завихренности в пространстве предлагаемый метод разделения задачи на «подобласти» может приводить к существенному снижению равномерности загрузки вычислительных узлов, однако в практически интересных случаях получаемое ускорение оказывается довольно высоким.

Ниже в табл. 4 показаны значения ускорения расчета при использовании «быстрого» метода вычисления вихревого влияния ($\theta = 0,2$) для того же числа ВЭ в расчетной схеме, что и в табл. 3, а также для $N = 100\,000$.

N_V	Число вычислительных узлов						
	1	2	4	8	12	16	
5000	1,00	1,95	3,62	6,33	8,94	10,13	
10 000	1,00	1,96	3,66	6,54	8,93	11,44	
50000	1,00	1,96	3,69	6,67	9,29	11,95	
100 000	1,00	1,97	3,76	6,96	9,64	12,36	

Таблица 4. Ускорение при использовании MPI для решения задачи «быстрым» методом

В случае $N_V = 50\,000$ при использовании 16 вычислительных узлов время выполнения одного шага расчета составляет менее 2 секунд, а при $N_V = 100\,000$ — менее 4 секунд, что позволяет использовать подобные алгоритмы на практике. Дальнейшее увеличение числа задействованных вычислительных узлов позволяет при необходимости еще сильнее сократить время счета, поскольку, как видно из табл. 4, алгоритм далек от насыщения.

На графике на рис. 10 показано время счета «прямым» методом без распараллеливания и «быстрым» методом на 16-ядерном кластере при сохранении приемлемой точности вычислений (при $\theta = 0,2$). Время счета на обоих графиках отнесено ко времени счета в задаче при $N_V = 10\,000$, при этом на левый график на рис. 10 наложен график функции $\bar{t} = 10^{-8}N_V^2$, а на правый — график функции $\bar{t} = 1,2 \cdot 10^{-4}N_V$.



Рис. 10. Время счета при различных значениях N_V с использованием «прямого» метода (слева) и «быстрого» метода (справа)

Линейный по числу ВЭ рост временных затрат при использовании «быстрого» метода объясняется разнонаправленным влиянием двух факторов: сам по себе алгоритм «быстрого» метода обеспечивает сложность алгоритма, пропорциональную $N_V \lg N_V$, а эффективность распараллеливания с ростом N_V несколько повышается.

На рис. 11 приведен график суммарного ускорения за счет использования «быстрого» метода и параллельного алгоритма. В качестве базового выбиралось время решения задачи «прямым» методом без распараллеливания. Видно, что ускорение растет с ростом N_V практически линейно, на график наложен график функции $u = 0.011 N_V$.



Рис. 11. Достигнутое ускорение при различных значениях N_V по сравнению с расчетом «прямым» методом без распараллеливания

6. Заключение

В работе рассмотрены методы ускорения вычислений при проведении расчетов динамики пространственных вихревых структур методом вихревых элементов. Использование модели симметричного вортона-отрезка дает возможность достаточно точного моделирования эволюции вихревых структур, при этом для решения актуальных задач требуется вводить в расчетные схемы тысячи и десятки тысяч вихревых элементов. Показано, что известные подходы, связанные с использованием параллельных вычислительных алгоритмов, а также приближенных «быстрых» методов, аналогичных методам решения гравитационной задачи N тел, по отдельности не позволяют получить ускорение расчетов, которое сделало бы возможным решение таких задач на практике. В то же время одновременное применение обоих подходов дает возможность достичь суммарного увеличения производительности в 100 ... 1000 раз при проведении расчета на 16-ядерном вычислительном кластере [12]. При этом время выполнения одного шага расчета становится порядка нескольких секунд, что позволяет решать большое число актуальных инженерных задач за приемлемое время.

Использование технологии MPI делает разработанный алгоритм и созданный на его основе программный модуль переносимым и универсальным: расчеты могут проводиться как на многоядерных системах с общей памятью (при этом снижение эффективности по сравнению с применением технологии OpenMP не превышает нескольких процентов), так и на кластерных системах.

Литература

- Cottet G.-H., Koumoutsakos P. Vortex methods: theory and practice. Cambridge University Press, 2000.
- 2. Lewis R.I. Vortex Element Methods For Fluid Dynamic Analysis Of Engineering Systems. Cambridge University Press, 2005.
- 3. Андронов П.Р., Гувернюк С.В., Дынникова Г.Я. Вихревые методы расчета нестационарных гидродинамических нагрузок. М.: Изд-во МГУ, 2006. 184 с.
- 4. Марчевский И.К., Щеглов Г.А. Применение параллельных алгоритмов при решении задач гидродинамики методом вихревых элементов // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11. С. 105–110.
- Марчевский И.К., Щеглов Г.А. Модель симметричного вортона-отрезка для численного моделирования пространственных течений идеальной несжимаемой среды // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2008. № 4. С. 62–71
- 6. Новиков Е.А. Обобщенная динамика трехмерных вихревых особенностей (вортонов) // Журнал эксп. и теор. физики. 1983. Т. 84, Вып. 3. С. 975–981.
- 7. A. J. Q. Alkemade. "On vortex atoms and vortons". PhD Thesis, TU-Delft, April 1994.
- 8. Marchevsky I.K., Shcheglov G.A. 3D vortex structures dynamics simulation using vortex fragmentons // 6th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2012), September 10-14, 2012, Vienna, Austria, Proceedings. Vienna University of Technology. 20 p.
- 9. Богомолов Д.В., Марчевский И.К., Сетуха А.В., Щеглов Г.А. Численное моделирование движения пары вихревых колец в идеальной жидкости методами дискретных вихревых элементов // Инженерная физика. 2008. № 4. С. 8–14.
- 10. Barnes J., Hut P. A hierarchical $O(N\log N)$ force-calculation algorithm // Nature. 1986. V. 324. P. 446–449.
- 11. Дынникова Г.Я. Использование быстрого метода решения «задачи N тел» при вихревом моделировании течений // ЖВМиМФ. 2009. Т. 49, № 8. С. 1458–1465.
- Лукин В.В., Марчевский И.К. Учебно-экспериментальный вычислительный кластер. Ч.1. Инструментарий и возможности // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2011. № 4. С. 28–44.