

# Оцінка ефективності розпаралелювання обчислень при моделюванні турбулентних течій методом великих вихорів

Шквар Є.О., Козлова Т.В., Самусенко О.В.

Національний авіаційний університет, просп. Космонавта Комарова, 1, Київ, Україна, 03680

eush@ukr.net, t\_kozlova@ukr.net, o.samusenko@ukr.net

**Анотація.** Для одного з ресурсовитратних методів розрахунку аерогідродинамічних задач, що стрімко набуває популярності у зв'язку зі зростанням потужності швидкодіючої обчислювальної техніки та зменшенням собівартості обчислень, а саме метода великих вихорів (Large Eddy Simulation – LES), виконано його структурування на етапи і здійснено аналіз їх спроможності до багатопоточного розпаралелювання. Обґрунтовано перевагу явних скінченно-різницевих схем у порівнянні з неявними за критерієм ефективності розпаралелювання при алгоритмізації та програмуванні метода LES. У результаті порівняльного аналізу продемонстровано, що найбільш вимогливими до утилізації комп'ютерних ресурсів є розв'язання диференціального рівняння Пуассона та реалізація першого кроку метода розщеплення за фізичними процесами. Отримані результати знайдуть ефективне застосування при обґрунтуванні вибору розрахункової методології, а також при оптимізації паралельних алгоритмів розв'язання широкого кола ресурсоемних аерогідродинамічних задач різноманітного спрямування.

## Ключові слова

Паралельні багатопоточні обчислення, турбулентні течії, математичне моделювання, метод великих вихорів (LES).

## 1 Вступ

Сучасна обчислювальна гідроаеродинаміка є однією з тих наук, потреби яких інтенсивно стимулюють розвиток та практичне впровадження методів та технологій паралельних обчислень. Наочним прикладом цього є поступове зміщення протягом останнього двадцятиліття 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 чисельного 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, безумовно, значний прогрес і бурхливе зростання ефективності та, зокрема, швидкодії обчислювальної техніки, а також сприятливі умови щодо збільшення доступності останньої.

Метод LES являє собою 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 у порівнянні з DNS.

Оцінити вимогливість цих різних технологій моделювання до комп'ютерних ресурсів можна по пропорційності витрат до числа Рейнольдса  $Re = U_0 L / \nu$ , яке характеризує співвідношення сил інерції до сил в'язкості в течії і є кількісною мірою, що визначає режим обтікання, де  $U_0$ ,  $L$  – характерні швидкість потоку та розмір обтічного тіла,  $\nu$  – кінематичний коефіцієнт в'язкості рідини чи газу. Так, якщо кількість вузлів різницевої сітки для реалізації методу DNS мусить зростати пропорційно  $Re^{2,25}$ , LES технологія при моделюванні вільної турбулентності потребує пропорційності  $Re^{1,125}$ , при моделюванні зсувної турбулентної

течії поблизу обтічних поверхонь у примежовому шарі в цілому – пропорційності  $Re^{1,2}$ , а для досягнення достатньої роздільної здатності розрахунку в'язкого підшару – пропорційності  $Re^{1,8}$  [1, 2].

Наведені оцінки демонструють значно менші вимоги метода LES у порівнянні з DNS, але вони також наочно ілюструють і 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 ресурсоемною, 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, так само 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-різницевої схеми та відповідних чисельних процедур, оскільки далеко не всі економічні розрахункові методи при реалізації послідовного алгоритму будуть ефективні при розпаралелюванні. Вагомими також є і фактори раціональної декомпозиції розрахункової області з урахуванням особливостей розташування елементів масивів, прийнятих у різних мовах програмування, а також паралельна реалізація задачі та узгодження межових умов, що може суттєво впливати на стійкість та збіжність ітераційного процесу відшукування розв'язку.

Таким чином побудову паралельного алгоритму краще розпочинати не зі спроб паралелізації вже існуючих послідовних реалізацій, а з самого початку постановки задачі та вибору обчислювальної методології, ефективної щодо її розгалуження. Тому, враховуючи трудомісткість процесу побудови та подальшого відлагодження коду паралельної програми, важливість апріорної інформації щодо розстановки пріоритетів при розпаралелюванні різних етапів обчислювального процесу важко переоцінити.

Саме оцінка та визначення найбільш актуальних типових етапів обчислювального алгоритму LES з точки зору докладання зусиль для забезпечення ефективного розпаралелювання складає мету даного дослідження.

## 2 Постановка задачі: 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 збезрозмірних рівнянь Нав'є-Стокса, останні у наближенні нестисливої рідини набувають вигляду

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

де  $\bar{x}_j = x_j / L$ ,  $x_j$  - вісь декартової системи координат  $j$ -го напрямку,  $j=1,2,3$ ;  $u_j$  - фільтрована компонента швидкості  $j$ -го напрямку,  $\bar{p} = p / (\rho U_0^2)$  - фільтрований збезрозмірений тиск,  $\rho$  - густина,  $\bar{\tau}_{ij} = \tau_{ij} / (\rho U_0^2) = \bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j$  - збезрозмірені напруження тертя, що обумовлені дисипативним впливом дрібномасштабної турбулентності,  $\bar{t} = t U_0 / L$  - збезрозмірена часова змінна.

Одним із перших і досить широко уживаних досі способів визначення  $\bar{\tau}_{ij}$  є модель Смагорінського

$$\bar{\tau}_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \bar{\tau}_{kk} = -2 \bar{\nu}_t \text{SGS} \bar{S}_{ij}, \quad \bar{\nu}_t \text{SGS} = \bar{l}_{mix}^2 \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}}, \quad \bar{l}_{mix} = C_S \bar{\Delta}, \quad C_S = 0.06 - 0.25. \quad (2)$$

де  $\delta_{ij}$  - символ Кронекера,  $\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \bar{x}_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial \bar{x}_i} \right)$  - тензор швидкостей деформацій фільтрованого поля збезрозміреної швидкості,  $\bar{\nu}_t \text{SGS}$  - збезрозмірений коефіцієнт підсіткової турбулентної в'язкості,  $\bar{\Delta} = \Delta / L$ ,  $\Delta$  - характерний масштаб фільтра:  $\Delta = \sqrt[3]{\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3}$  або  $\Delta = \sqrt[2]{\Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \Delta x_3^2}$ ,  $\Delta x_j$  - крок різницевої сітки у  $j$ -му напрямку.

Для коректного і надійного виділення надсіткових вихрових структур метод LES передбачає застосування процедури фільтрації, яка реалізується для будь-якої розрахункової змінної  $\bar{\varphi}_j$  шляхом виділення їх великомасштабної складової  $\bar{\varphi}_j$  за наступним правилом осереднення за простором з використанням функції фільтру  $\bar{\varphi}_j(\bar{x}, t) = \int_D G(\bar{r}) \bar{\varphi}_j(\bar{x} - \bar{r}, t) d\bar{r}$ , де  $D$  - об'єм обчислювальної області, по якій здійснюється фільтрація,

$\vec{r} = \{r_1, r_2, r_3\}$  – вектор напрямків, вздовж яких здійснюється інтегрування,  $G(\vec{r})$  – функція фільтру, в ролі якої в рамках даного дослідження використовувався гаусівський фільтр  $G(\vec{r}) = \prod_{j=1}^3 \frac{6}{\pi \Delta^2} \exp(-6r_j^2 / \Delta^2)$ .

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  $D$ :  $\bar{x} \in [0, \bar{x}_{M_x}]$ ,  $\bar{y} \in [0, \bar{y}_{M_y}]$ ,  $\bar{z} \in [0, \bar{z}_{M_z}]$ . Тут і у подальшому для полегшення викладення застосовуватимемо для просторових координат та відповідних проєкцій швидкості наступні альтернативні позначення:  $\{x_1, x_2, x_3\} = \{x, y, z\}$ ,  $\{u_1, u_2, u_3\} = \{u, v, w\}$ . Зауважимо також, що навіть у випадку двовимірних течій задача розв'язку (1,2) мусить розглядатися у просторовій постановці, що обумовлено, перш за все, просторовим характером турбулентного руху. Постановка межових умов через обмеженість області  $D$  та нестационарний характер розв'язку, який мусить відтворювати особливості вихрової структури турбулентного руху, має ряд специфічних особливостей у порівнянні з методологією RANS і, безумовно, залежить від геометрії області та напрямку потоку.

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

$$\begin{aligned} \bar{x}_{i+1,j,k} &= \bar{x}_{i,j,k} + \Delta \bar{x}, \quad i = 1, \dots, M_x, \quad \bar{x}_{1,j,k} = 0, \quad \Delta \bar{x} = \bar{x}_{M_x} / (M_x - 1); \\ \bar{y}_{i,j+1,k} &= \bar{y}_{i,j,k} + \Delta \bar{y}, \quad j = 1, \dots, M_y, \quad \bar{y}_{i,1,k} = 0, \quad \Delta \bar{y} = \bar{y}_{M_y} / (M_y - 1); \\ \bar{z}_{i,j,k+1} &= \bar{z}_{i,j,k} + \Delta \bar{z}, \quad k = 1, \dots, M_z, \quad \bar{z}_{i,j,1} = 0, \quad \Delta \bar{z} = \bar{z}_{M_z} / (M_z - 1). \end{aligned} \quad (3)$$

Сітки для складових швидкості  $\bar{\phi}_i = (\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$  побудуємо зсувом сітки (3) на півкроку у напрямку відповідної змінної (рис. 1), тобто:

$$\begin{aligned} (\bar{x}_u)_{i,j,k} &= \bar{x}_{i,j,k} + 0.5\Delta \bar{x}, \quad (\bar{y}_u)_{i,j,k} = \bar{y}_{i,j,k}, \quad (\bar{z}_u)_{i,j,k} = \bar{z}_{i,j,k} \quad \text{– для } \bar{u}; \\ (\bar{x}_v)_{i,j,k} &= \bar{x}_{i,j,k}, \quad (\bar{y}_v)_{i,j,k} = \bar{y}_{i,j,k} + 0.5\Delta \bar{y}, \quad (\bar{z}_v)_{i,j,k} = \bar{z}_{i,j,k} \quad \text{– для } \bar{v}; \\ (\bar{x}_w)_{i,j,k} &= \bar{x}_{i,j,k}, \quad (\bar{y}_w)_{i,j,k} = \bar{y}_{i,j,k}, \quad (\bar{z}_w)_{i,j,k} = \bar{z}_{i,j,k} + 0.5\Delta \bar{z} \quad \text{– для } \bar{w}; \end{aligned} \quad (4)$$

Крім того, введемо в розгляд сітку за часовою змінною  $\bar{t}^{n+1} = \bar{t}^n + \Delta \bar{t}_n$ ,  $\bar{t}_1 = \bar{t}_{init}$ .

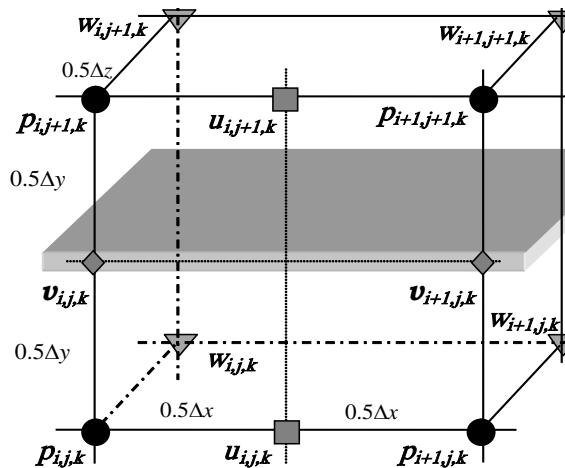


Рис. 1. Різницьовий шаблон для (1). Нумерація та позначення вузлів

**Обтічна поверхня** ( $\bar{y} = 0$ ). Для зручності розташовуватимемо обтічну поверхню так, щоб вона співпадала з вузлами сітки нормальної до поверхні координати. У даному випадку це дозволяє записати сіткові представлення умов прилипання наступним чином:

$$\bar{v}_{i,1,k} = 0, \quad \bar{u}_{i,1,k} = -\bar{u}_{i,2,k}, \quad \bar{w}_{i,1,k} = -\bar{w}_{i,2,k}. \quad (5)$$

Слід зауважити, що існують значно більш довершені і, відповідно, складніші підходи у порівнянні з "очевидними" умовами прилипання до визначення межових умов на стінці.

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

$$\bar{u}_{i,M_y,k} = 1, \quad \bar{v}_{i,M_y,k} = \bar{v}_{i,M_y-1,k}, \quad \bar{w}_{i,M_y,k} = \bar{w}_{i,M_y-1,k}. \quad (6)$$

**Періодичні межові умови** є особливим типом граничних умов, які є традиційною практикою використання в рамках даного метода. Вони зв'язують значення сіткових функцій у чотирьох перерізах розрахункової області (по два на протилежних гранях). Наприклад, в напрямку осі  $z$  :

$$\tilde{\varphi}_{i,j,M_z} = \tilde{\varphi}_{i,j,1}, \quad \tilde{\varphi}_{i,j,2} = \tilde{\varphi}_{i,j,M_z-1}, \quad (7)$$

де  $\tilde{\varphi} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}, \tilde{p})$ . Аналогічний підхід застосовується і у напрямку осі  $x$ , яка зазвичай співпадає з напрямком розв'язку основного потоку. Отже система (1), підсіткова модель турбулентності (2), межові умови (5-7), записані для прилежових значень розрахункових величин на сітці (3, 4), а також початкові умови  $\tilde{\varphi} = \tilde{\varphi}(x, y, z, t_{init})$  повністю формують початково-крайову задачу Коші.

### 3 Структурні особливості методу розрахунку

Побудова скінченно-різницевої апроксимації вихідних рівнянь (1) може здійснюватися на основі як явних, так і неявних різницевих схем. Неявні схеми є у меншій мірі обмежувальними щодо значення кроку інтегрування за часом  $\Delta t$  залежно від розмірів комірок просторової сітки та параметрів течії. Але ці схеми зводять задачу на кожному кроці  $\Delta t$  до системи лінійних алгебраїчних 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 з вагомих факторів, що впливають на швидкодію. Водночас слід зауважити, що для відтворення динаміки вихрових структур течії варто зберігати крок інтегрування досить малим, що суттєво зменшує переваги неявних схем перед явними. Явні схеми простіші за структурою і, відповідно, їх реалізація забезпечує перевагу в швидкодії отримання розв'язку на кожному розрахунковому кроці. Але навіть і в цьому випадку метод розрахунку залишається вкрай вимогливим до обчислювальних ресурсів. При пошуку можливостей збільшення швидкості обчислень явні схеми демонструють одну з найсуттєвіших переваг перед неявними схемами. Як відомо, алгоритми розв'язання СЛАР з тридіагональною матрицею коефіцієнтів практично не розпаралелюються, тобто реалізація неявних схем в рамках LES передбачає послідовні алгоритми обчислень. Натомість, явні схеми згідно своєї структури дозволяють ефективно здійснювати розпаралелювання їх програмної реалізації, що обґрунтовує саме їх втілення у паралельні алгоритми LES методів. Даний підхід є сьогодні вкрай 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 наявності 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  $\tilde{\varphi} = \{\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}\}$ , запишемо вихідне рівняння руху системи (1) в узагальненому вигляді:

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial t} = DIFF - CONV - \nabla p,$$

де  $DIFF$ ,  $CONV$ ,  $\nabla p$  – позначення дифузійних, конвективних членів та градієнта тиску, котрі визначаються наступним чином:

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

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

де  $v_{t\ eff} = Re^{-1} + v_{t\ SGS}$  – ефективна підсіткова в'язкість.

Скориставшись різницевою апроксимацією похідної  $\frac{\partial \varphi}{\partial \bar{t}} = \frac{\varphi^{n+1} - \varphi^n}{\Delta \bar{t}}$ , матимемо

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

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

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

Позначаючи праву частину отриманого рівняння як  $\varphi^*$ , отримуємо структуру методу розщеплення по фізичним процесам

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

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

Застосування операції обчислення дивергенції до (9) з припущенням виконання рівняння нерозривності  $\text{div}(\varphi^{n+1}) = 0$  на часовому кроці  $(n+1)$  дозволяє отримати рівняння Пуассона для тиску

$$\left(\nabla^2 \bar{p}\right)^{n+1} = \frac{\partial^2 \bar{p}^{n+1}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{p}^{n+1}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{p}^{n+1}}{\partial z^2} = \frac{1}{\Delta t} \text{div}(\varphi^*). \quad (10)$$

Для інтегрування різницевого рівняння (8) за часовою змінною  $\bar{t}$ , як показано, наприклад, Woersma В.І. (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  $\varphi^*$ , що не враховує вплив поля тиску, маємо наступний дискретний за часом аналог (8):

$$\varphi^* = \varphi^n + \left[ 1.5(DIFF - CONV)^n - 0.5(DIFF - CONV)^{n-1} \right] \Delta \bar{t}_n. \quad (11)$$

Зауважимо, що схема (11) не є ані єдиним, ані оптимальним вибором, а лише типовим прикладом, що цілком задовольняє задачі даного дослідження і, подібно іншим явним схемам, є зручною для демонстрації способу реалізації та ефективності використаних у даному дослідженні технологій розпаралелювання обчислень.

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

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

Дане рівняння 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 (12) формулюються умови Неймана  $\frac{\partial \bar{p}}{\partial n} = \dots$ , які однозначно визначаються зі спрощених форм рівнянь (1) при їх розгляді разом з типовими межовими умовами для компонент швидкості (5-7). На основі знайденого поля тиску відшуковуються нові наближення поля швидкостей шляхом розв'язку наступних різницевих представлень рівняння (9)

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

Після проведення процедури фільтрації отриманих розподілів сіткових змінних  $\varphi^{n+1}$  виконується переприсвоювання номерів часових кроків  $(n+1) \rightarrow (n)$ ,  $(n) \rightarrow (n-1)$ ,  $(n-1) \rightarrow (n-2)$  і здійснюється вибір значення наступного кроку часової змінної  $\Delta \bar{t}^{n+1}$

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

де  $C = 0.5$  – число Куранта. Описана процедура повторюється крок за кроком вздовж часової змінної  $\bar{t}$  і завершується при проході усього часового інтервалу  $[\bar{t}_{init}, \bar{t}_{final}]$ , заданого умовами задачі. Зазначимо, що 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 обумовлює необхідність пошуку та розробки ефективних рішень паралельної стратегії реалізації числових алгоритмів методу LES. Висвітленню результатів, здобутих авторами при проведенні даного дослідження у напрямку розвитку технологій розпаралелювання обчислень, присвячено наступний пункт.

#### 4 Аналіз можливостей та особливостей паралельної реалізації методу розрахунку

Числове розв'язання системи (8-10) згідно наведеного вище алгоритму 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 у паралельному варіанті також є можливим, але еліптичний тип задачі обумовлює ряд складностей. При застосуванні пакету сторонніх розробників (FISHPAK) з метою прямого чисельного інтегрування (10), як це зроблено, наприклад, в [4], задача перепрограмування навіть окремих складових пакету виглядає вкрай нераціональною, 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 відшукання 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 явним методом Гауса-Зейделя, який нескладно реалізувати у паралельному варіанті, але явна схема є обмежувальною з точки зору збіжності, а тому орієнтація на цей підхід приведе до необхідності застосування нижньої релаксації, що уповільнить процес відшукання розв'язку, чим зменшить ефективність розпаралелювання, а, цілком можливо, що й повністю зведе його переваги нанівець. Оскільки пошук оптимальних релаксаційних коефіцієнтів у залежності від масштабування задачі являє собою самостійну задачу, яка не входила в основні цілі даного дослідження, цей підхід на даному етапі вибору розрахункової технології був також відкинутий. Застосування неявних схем передбачає використання алгоритму прогонки, який, як зазначалося вище, не піддається розпаралелюванню. Більше того, 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 у залежності від шаблону різницевої схеми). Цей фактор позитивно впливає на збіжність подібно до запропонованої Зейделем модифікації метода простої ітерації при розв'язанні СЛАР. Тим не менш, розбиття області на стрічки (рис. 2) і їх паралельна обробка дозволяють розгалузити процес відшукання розв'язку на комп'ютері паралельної архітектури навіть і при неявній схемі. Ефективність даного методу, як показали тестові дослідження авторів, суттєво залежить від розмірності сітки, а також від кількості фрагментів, на які розподіляється розрахункова область.

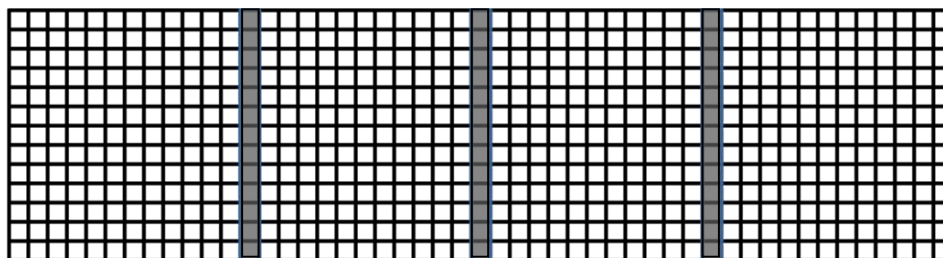


Рис. 2. Декомпозиція розрахункової області на стрічки у вертикальному напрямку.

У цілому, як показали дослідження авторів, при розбитті області на кількість фрагментів, що не перевищує 8 і при застосуванні відповідного SMP (Symmetric Multiprocessing) чи CMP (Chip-Level Multiprocessing) комп'ютера з двома 4-х ядерними 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 у порівнянні з послідовним алгоритмом несуттєво (в межах 3-7%), що забезпечувалося чергуванням напрямків здійснення прогонки. Слід зауважити, що зазначена зміна напрямків обходу вузлів сітки потребує додаткових зусиль

шляхом використання допоміжних масивів задля забезпечення ефективності паралельних обрахунків у тих напрямках, які не відповідають обумовленню мовою програмування порядком розміщення даних в багатовимірних масивах (для Fortran найефективнішим з точки зору швидкості доступу к даним є перебір елементів масиву по останньому з його індексів, для мов C та Pascal – навпаки, по першому з 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 також показали, що ефективність розпаралелювання описаного вище явного метода інтегрування системи (8-10) зростає по мірі збільшення розмірності сітки, тоді як при порівняльно грубих сітках (40x40x40 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, причому 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 у даному дослідженні було програмним шляхом реалізовано хронометрування виконання ряду функціонально важливих елементів програми розрахунку (11-13), написаної мовою Фортран з використанням технології багатопоточності. В ролі інструменту програмування багатопоточного програмного коду використано технологію OpenMP в її реалізації компіляторами компанії Intel. Серед найважливіших структурних елементів програми виділені ключові процедури відшукування розв'язків наведених вище різницевих рівнянь (11-13), обчислення дивергенції  $\phi^*$  для правої частини рівняння Пуассона (10), та коригування межових умов. Решта елементів програми значно менш вимоглива до обчислювальних ресурсів у порівнянні з зазначеним вище комплексом і не перевищує 1% сумарних витрат часу. Хронометрування кожної зі складових, а також сумарного часу, який потрібний для виконання розрахунку, здійснювалося протягом усієї тривалості розрахунку. Розрахунки здійснювалися на кластерах НТУУ "КПІ" під управлінням як Linux, так і Windows. Отримані дані щодо часових витрат окремих складових програми при її запусках з різною кількістю використаних при розпаралелюванні потоків подано табл. 1.

**Табл. 1.** Часові витрати різних складових програми моделювання характеристик течії в плоскому каналі методом LES на сітці 300x300x300.

Умовне позначення	Складові елементи програми	Кількість виділених для обчислень потоків				
		1	2	4	6	8
<b>a</b>	Знаходження $\phi^*$ за (11)	472.6	278.7	205.5	143.2	128.4
<b>b</b>	Розв'язання рівняння Пуассона (10) чи (12)	487.6	335.2	228.4	180.5	171.8
<b>c</b>	Обчислення $\phi^{n+1}$ за скоригованим тиском $p$ (9) згідно (13)	92.9	72.8	64.7	58.8	55.9
<b>d</b>	Обчислення $\text{div}\phi^*$ для правої частини (10) згідно (12)	23.2	19.8	18.7	16.0	14.8
<b>e</b>	Коригування межових умов	10	8.3	7.5	6.3	5.9
<b>f</b>	Сумарний час обчислень усієї програми	1093.3	721.6	531.5	410.6	382.4

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 слідує з аналізу цього коефіцієнта для зазначених вище структурних складових розрахунку (рис. 3) найкращим чином, як і передбачалося, піддається масштабуванню процес інтегрування за явною схемою рівнянь (11). Друге місце по ефективності зростання швидкодії займає найбільш вимоглива до ресурсів комп'ютера процедура розв'язання рівняння Пуассона (12). Решта розглянутих в табл. 1 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).

Таким чином, 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, а також порівняти різні етапи по спроможності до розпаралелювання. Ця інформація є важливою як з точки зору удосконалення використаного розрахункового метода, так і при аналізі інших скінченно-різницевого схем.

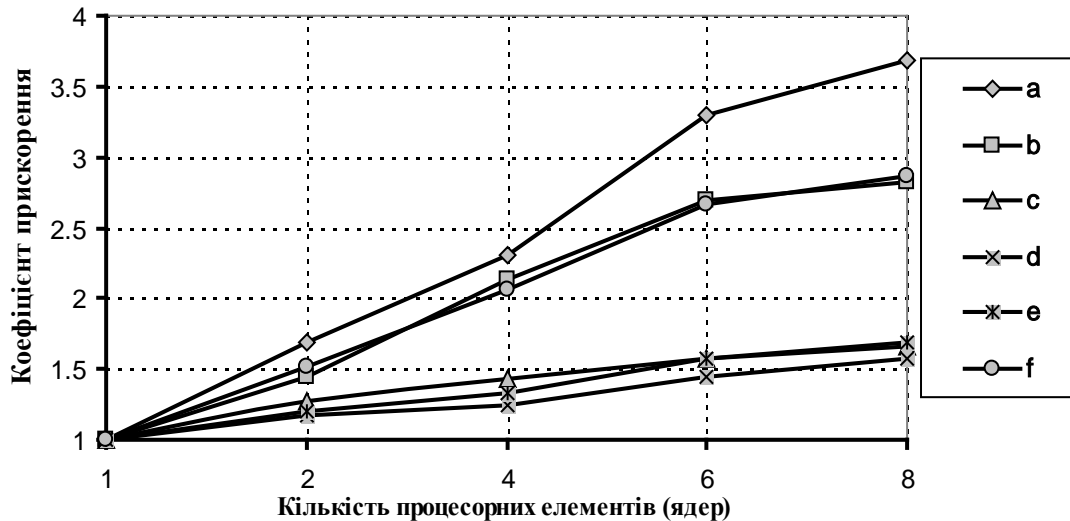


Рис. 3. Порівняння залежності коефіцієнту прискорення обчислень від кількості задіяних процесорів при розв'язанні (11-13) по ряду елементів (а-ф) обчислювального алгоритму (табл. 1).

## 5 Висновки

Проведене структурування процесу паралельних обчислень однієї з типових чисельних реалізацій LES метода та наведений вище аналіз часових витрат його складових дозволили виділити дві суттєві особливості. По-перше, масштабування швидкодії на комп'ютері SMP архітектури не є прямо пропорційним до числа задіяних процесорних елементів. Так, навіть для найкращої (серед розглянутих) у відношенні розпаралелювання процедури знаходження  $\varphi^*$  за (11), коефіцієнт прискорення на 8-ми 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 ( $\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}$ ) з масивів, розташованих у різних ділянках оперативної пам'яті (Random Access Mode–RAM), яка при багатопоточній обробці на комп'ютерах SMP чи CMP архітектур є спільною. Саме тому при обчисленні по мірі зростання числа задіяних процесорних елементів приріст коефіцієнта прискорення обчислень поступово зменшується. Друга особливість полягає у виділенні саме тих структурних елементів обчислювального процесу і, зокрема, рівняння (11) для знаходження  $\varphi^*$  та рівняння Пуассона (12) для обчислення тиску, які слід вважати об'єктами першочергового і найбільш ретельного докладання зусиль у напрямку подальшого удосконалення технологій паралельних обрахунків процесу формування турбулентних течій за методом LES.

## 6 Подяки

Автори вважають своїм приємним обов'язком висловити щирю подяку керівництву та персоналу Центру суперкомп'ютерних обчислень НТУУ "КПІ" за надані можливості користування обчислювальними ресурсами кластерних систем Центру, що суттєво посприяло виконанню даного дослідження.

## Література

- [1] Chapmann D. Computational aerodynamics, development and outlook / D. Chapmann // AIAA J. – 1979. – V. 17. – P. 1293–1313.
- [2] Moin P. Tackling Turbulence with Supercomputers / P. Moin, J. Kim // Scientific American. – 1997. – №276. – P. 62–68.
- [3] Роуч П. Вычислительная гидромеханика / П. Роуч; [пер. с англ.]. – М: Мир, 1980. – 616 с.
- [4] Ferziger Joel H. Recent advances in large eddy simulation / Joel H. Ferziger // Department of mechanical engineering Stanford University. – Stanford CA. – 1996. – P. 1–13.