



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 277 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Бахвалов П.А., Горобец А.В.

К вопросу об эффективной
параллельной реализации
вершинно-центрированных
схем на скользящих сетках

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Бахвалов П.А., Горобец А.В. К вопросу об эффективной параллельной реализации вершинно-центрированных схем на скользящих сетках // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 277. 16 с. doi:[10.20948/prepr-2018-277](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-277)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-277>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.КЕЛДЫША
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

П. А. Бахвалов, А. В. Горобец

К вопросу
об эффективной параллельной реализации
вершинно-центрированных схем
на скользящих сетках

Москва — 2018

Бахвалов П. А., Горобец А. В.

К вопросу об эффективной параллельной реализации вершинно-центрированных схем на скользящих сетках

В данной работе рёберно-ориентированные схемы применяются к моделированию динамики газа в системах ротор–статор с использованием скользящих сеток. Описывается реализованный численный алгоритм и предлагается комбинированное MPI+OpenMP распараллеливание этого алгоритма для кластерных систем.

Ключевые слова: рёберно-ориентированная схема, неструктурированная сетка, ротор–статор, MPI, OpenMP

Pavel Alexeevich Bakhvalov, Andrey Vladimirovich Gorobets

On effective parallel implementation of vertex-centered schemes on sliding meshes

Edge-based schemes are applied to gas dynamics simulation in rotor–stator systems using sliding meshes. Numerical algorithm is presented. Multilevel MPI+OpenMP parallelization for cluster systems is described in detail.

Key words: edge-based scheme, unstructured mesh, rotor–stator, MPI, OpenMP

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 18-01-00445 (разработка численного метода), и Совета по грантам Президента РФ, проект МД-5968.2018.1 (снижение вычислительной ресурсоемкости), с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.nrcki.ru/>.

Оглавление

Введение	3
Конечно-объёмные схемы на движущихся сетках	4
Контрольные объёмы на скользящих сетках	6
Повышение точности	8
Параллельный алгоритм и программная реализация	10
Заключение	15
Список литературы	15

Введение

Численное моделирование активно применяется для исследования течений газа около систем тел, вращающихся друг относительно друга. Таковыми, в частности, являются несущий винт вертолёта и фюзеляж, соосные винты, винт в кольце и компрессор турбореактивного двигателя. Задача существенно упрощается, если либо ротор, либо статор является телом вращения; при этом расчёт удобно проводить на монолитной сетке, а вращение моделировать при помощи граничного условия (см., например, [1]). Однако в общем случае, оставаясь в рамках подхода, при котором граница расчётной области повторяет форму твёрдого тела (*body-fitted method*), для моделирования течения вокруг тел, движущихся друг относительно друга, невозможно использовать монолитную сетку. Поэтому в таких задачах обычно используются перекрывающиеся или скользящие сетки. Более редкой альтернативой являются погруженные граничные условия, уступающие *body-fitted* подходу при необходимости качественного разрешения пристеночной области.

В отличие от численных алгоритмов, подразумевающих деформацию сетки без изменения её топологии (см., например, [2, 3]), при использовании двух сеток, жёстко связанных, соответственно, с ротором и статором, их взаимное движение непрерывно изменяет и взаимное расположение этих сеток. Это имеет место как при использовании перекрывающихся, так и при использовании скользящих сеток. В первом случае требуется динамическое переопределение шаблона интерполяции с одной сетки на другую, а во втором случае, при расчётах в рамках конечно-объёмного подхода, – перевычисление пересечений между сеточными ячейками, одна из которых лежит во вращающейся, а вторая – в покоящейся подобласти, и соприкасающимися по границе этих подобластей. Таким образом, происходит изменение шаблона разностной схемы, что при параллельной реализации в системах с распределённой памятью влечёт за собой изменение схемы обменов.

В конечно-объёмных схемах с определением переменных в узлах для обеспечения консервативности расчётная область разбивается на контрольные объёмы, соответствующие сеточным узлам. Рёберно-ориентированные схемы представляют собой особый класс таких схем, в которых сеточные функции интерпретируются как точечные значения в узлах, а потоки аппроксимируются в серединах рёбер. Такой подход позволяет обеспечить точность на линейной функции, если контрольные объёмы определяются как барицентрические (на симплицальной сетке) или как полупрозрачные (на гибридной сетке) [4, 5]. Примерами рёберно-ориентированных схем являются схемы с реконструкцией вдоль ребра (*Edge-Based Reconstruction, EBR*) [6, 7]. Схемы EBR на равномерных решётчатых сетках вырождаются в конечно-разностные схемы высокого порядка. На неструктурированных сетках, формально являясь конечно-

объёмными схемами с линейной реконструкцией переменных, обеспечивают повышенную точность среди других схем этого класса.

На скользящих сетках из-за принципиальной невозможности обеспечить построение на интерфейсе барицентрических контрольных объёмов точность существенно теряется, из-за чего рёберно-ориентированные схемы для решения задач ротор-статор используются редко [8]. Тем не менее и в обычных конечно-объёмных схемах, где можно обеспечить расчёт в системах ротор-статор без качественной потери точности на интерфейсе, на практике иногда используются схемы с аналогичной потерей точности [9]. Следовательно, для моделирования течения в системах ротор-статор можно применять и рёберно-ориентированные схемы.

В настоящей работе описывается алгоритм расчёта течения сжимаемого невязкого газа на скользящих сетках с помощью рёберно-ориентированных схем. Основное внимание уделяется особенностям параллельной реализации.

Конечно-объёмные схемы на движущихся сетках

Будем рассматривать уравнения Эйлера для идеального газа

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}(\mathbf{Q}) = 0, \quad (1)$$

где $\mathbf{Q} = (\rho, \rho \mathbf{u}, E)^T$, $E = \rho \mathbf{u}^2 / 2 + p / (\gamma - 1)$, и

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I} \\ (E + p) \mathbf{u} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Здесь γ – показатель адиабаты, \mathbf{I} – единичная матрица.

Для произвольного (в т. ч. деформируемого) объёма $K(t)$ уравнение (1) переписывается в интегральном виде

$$\frac{d}{dt} \int_{K(t)} \mathbf{Q} dV + \int_{\partial K(t)} (\mathcal{F}(\mathbf{Q}) - \mathbf{v} \mathbf{Q}) \cdot \mathbf{n} dS = 0, \quad (3)$$

где \mathbf{n} – внешняя единичная нормаль к границе объёма, а \mathbf{v} – её скорость. Для записи конечно-объёмной схемы расчётная область разбивается на ячейки $K_i(t)$, в которых определяются значения консервативных переменных $\mathbf{Q}_i(t)$. Объёмы ячеек обозначим через $V_i(t)$, а множество ячеек, имеющих общую границу ненулевой меры с $K_i(t)$, – через $N_1(i)$. Множество граней ячейки $K_i(t)$, лежащих на границе расчётной области, обозначим через $N_\Gamma(i)$. С использованием этих обозначений полудискретная конечно-объёмная схема для (3) может быть

представлена в общем виде

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{Q}_i(t)V_i(t)) + \sum_{j \in N_1(i) \cup N_\Gamma(i)} \mathbf{h}_{ij}(t)|\mathbf{n}_{ij}(t)| = 0, \quad (4)$$

Далее общую границу двух ячеек, имеющую ненулевую меру, будем называть **внутренним сегментом**, а граничные грани – **граничными сегментами**.

Для внутренних сегментов

$$\mathbf{n}_{ij} = \int_{\partial K_i \cap \partial K_j} \mathbf{n} dS,$$

где \mathbf{n} – единичная нормаль, ориентированная внешним образом к K_i . Поток \mathbf{h}_{ij} определяется из приближённого решения задачи о распаде разрыва, например,

$$\begin{aligned} \mathbf{h}_{ij} = & \frac{\mathcal{F}(\mathbf{Q}_{ij}^-) + \mathcal{F}(\mathbf{Q}_{ij}^+)}{2} \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{ij} - v_{ij} \frac{\mathbf{Q}_{ij}^- + \mathbf{Q}_{ij}^+}{2} - \\ & - \delta \mathbf{S}_{ij} \Lambda_{ij} - v_{ij} |\mathbf{S}_{ij}^{-1}| \frac{\mathbf{Q}_{ij}^+ - \mathbf{Q}_{ij}^-}{2}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\tilde{\mathbf{n}}_{ij} = \mathbf{n}_{ij}/|\mathbf{n}_{ij}|$, \mathbf{Q}_{ij}^\pm – некоторым образом определённые реконструированные значения,

$$\mathbf{S}_{ij} \Lambda_{ij} \mathbf{S}_{ij}^{-1} = \frac{d(\mathcal{F}(\mathbf{Q}) \cdot \tilde{\mathbf{n}}_{ij})}{d\mathbf{Q}}(\mathbf{Q}_{ij}), \quad (6)$$

\mathbf{Q}_{ij} – среднее по Роу от \mathbf{Q}_{ij}^\pm , Λ_{ij} – диагональная матрица, а δ – коэффициент диссипации, как правило, выбираемый равным 1. Скорость сегмента определяется как интеграл по сегменту от скорости движения его точки:

$$v_{ij} = \frac{1}{|\mathbf{n}_{ij}|} \int_{\partial K_i \cap \partial K_j} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (7)$$

Для граничных сегментов формула аналогичная, интеграл берётся по граничной грани. Для сегментов, лежащих на осесимметрических поверхностях (боковых стенках цилиндров и цилиндрических поверхностях раздела между статической и вращающейся подобластями) принципиально важен учёт кривизны поверхности. Соответствующая модификация формулы (7) описана в [10].

При определении $\mathbf{Q}_{ij}^- = \mathbf{Q}_i$ и $\mathbf{Q}_{ij}^+ = \mathbf{Q}_j$ схема (4), (5) совпадает с простейшей конечно-объёмной схемой на расчётной сетке, составленной из контрольных объёмов K_i . Схема (4), (5) называется **рёберно-ориентированной**, если на гладких решениях предраспадные значения \mathbf{Q}_{ij}^\pm отличаются от $(\mathbf{Q}_i + \mathbf{Q}_j)/2$ на

величину порядка $O(h^2)$. Такой подход обеспечивает первый порядок аппроксимации на произвольной сетке, если используются медианные (на симплицеальной сетке) или полупрозрачные (на гибридной сетке) контрольные объёмы. Конкретный алгоритм определения Q_{ij}^\pm характеризует конкретную рёберно-ориентированную схему.

Для граничных сегментов n_{ij} также определяется как ориентированная площадь соответствующей поверхности:

$$n_{ij} = \int_{\Gamma_{ij}} n dS,$$

а поток зависит от типа граничного условия. В случае входной/выходной границы расчётной области поток также считается по формулам (5)–(6), причём $Q_{ij}^- = Q_i$, а Q_{ij}^+ – некоторым образом определённое значение с внешней стороны расчётной области. Примеры выбора этих значений см. в [11]. В качестве Q_{ij} вместо среднего по Роу берётся Q_i .

В случае условий непротекания поток определяется по формуле $h_{ij} = \mathcal{F}(\tilde{Q}_i) \cdot \tilde{n}_{ij} - v_{ij}\tilde{Q}_i$, где \tilde{Q}_i – набор консервативных переменных, полученный из Q_i путём сохранения плотности и давления и замены нормальной компоненты скорости потока в узле $u_i \cdot \tilde{n}_{ij}$ на скорость границы v_{ij} . Упрощая выражения, получаем

$$(h_{ij})_\rho = 0, \quad (h_{ij})_{\rho u} = p_i \tilde{n}_{ij}, \quad (h_{ij})_E = p_i v_{ij}. \quad (8)$$

Контрольные объёмы на скользящих сетках

Для простоты будем рассматривать случай, когда подобластей, вращающихся друг относительно друга, две. Случай множества областей сводится к этому, хотя и приводит к дополнительным техническим трудностям при пересчёте координат и скоростей из абсолютных в связанные с конкретной подобластью.

В настоящей работе используется реализация скользящих сеток с зазором. При этом расчётная область представляется в виде объединения двух подобластей, внешней (покоящейся) и внутренней (вращающейся). Расчётная сетка не покрывает всю расчётную область: между покоящейся и вращающейся частями имеется зазор размером примерно в одну длину ребра вблизи него. Однако, чтобы в каждый момент времени в соответствии с конечно-объёмным подходом расчётная область представляла собой объединение непересекающихся контрольных объёмов, контрольные объёмы строятся так, чтобы они полностью заполняли расчётную область. При этом существует некоторая поверхность, которую будем называть разделительной, такая что в каждый момент

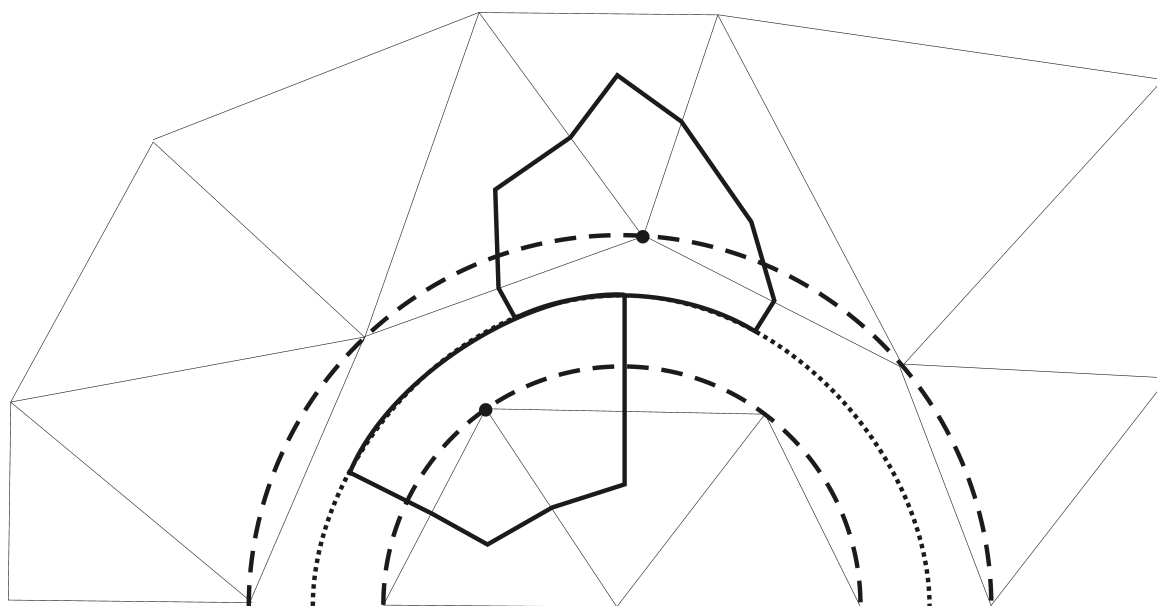


Рис. 1. Схема расчётной области вблизи разделительной поверхности

времени совокупность всех контрольных объёмов узлов, лежащих во внешней части, лежит по одну сторону от разделительной поверхности, а лежащих во внутренней части – по другую.

Обозначим объединение всех сеточных элементов через G , а расчётную область (включающую в себя зазор) – через \bar{G} . Зазор, очевидно, должен быть распределён по контрольным объёмам узлов, лежащих на границе этого зазора. Эти контрольные объёмы \bar{K}_i , таким образом, составляются из обычных контрольных объёмов K_i и добавочных частей \hat{K}_i .

В двумерном случае предполагается, что разделительная поверхность является окружностью. Границей между двумя добавочными частями $\hat{K}_i \cap \hat{K}_j$ является отрезок, соединяющий точку $K_i \cap K_j \cap \partial G$ с её проекцией на разделительную поверхность. Половина расчётной области схематично изображена на рис. 1. Тонкими линиями начерчены сеточные рёбра. Разделительная поверхность отмечена точками. Толстыми сплошными линиями отмечены границы контрольных объёмов \bar{K}_i и \bar{K}_j .

В трёхмерном случае было реализовано два случая скользящих поверхностей:

- 1) разделительная поверхность является плоской фигурой вращения (кругом или кольцевым сегментом);
- 2) разделительная поверхность является боковой поверхностью конечного прямого кругового цилиндра.

Граница между двумя добавочными частями контрольных объёмов $\hat{K}_i \cap \hat{K}_j$ является многогранной поверхностью, проведённой через ломаную $K_i \cap K_j \cap \partial G$ и её проекцию на разделительную поверхность.

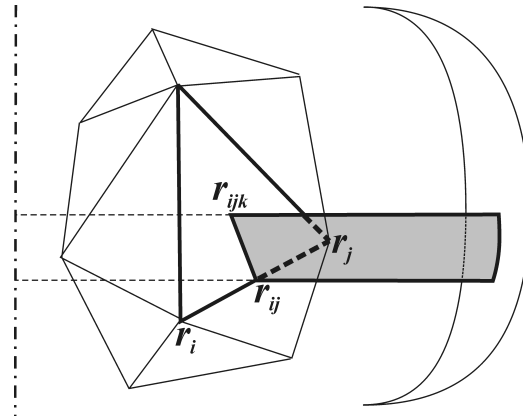


Рис. 2. Схема построения поверхности $\partial\hat{K}_i \cap \partial\hat{K}_j$

Аналогичную достройку контрольных объёмов нужно проводить и на осесимметрическом теле, физически неподвижном, но таком, что в рамках рассматриваемой модели связанная с ним сетка вращается. Чтобы избавиться от генерации паразитных волн из-за вращения многогранной поверхности, нужно учесть её кривизну. Для этого введём расширенные контрольные объёмы \bar{K}_i так, чтобы их объединение было осесимметрическим телом.

Предположим для простоты, что вся расчётная область \bar{G} , в которой решаются уравнения газовой динамики, представляет собой выпуклое тело вращения вокруг оси OZ . Будем называть её вертикальной, а все прямые и плоскости, перпендикулярные ей – горизонтальными. Пусть объединение всех сеточных элементов, G , также является выпуклым телом, причём пересечение \bar{G} с осью целиком лежит в G и все узлы, лежащие на ∂G , также лежат и на $\partial\bar{G}$. Пусть на всей границе \bar{G} заданы условия непротекания.

Итак, пусть $G = \cup T_i = \cup K_i$ – исходная расчётная область. Тогда $\partial K_i \cap \partial G$ – след ячейки K_i на границе расчётной области. Выпустим из каждой точки $B \in \partial K_i \cap \partial G$ горизонтальный луч, направленный наружу из G , причём так, чтобы прямая, содержащая этот луч, пересекала ось OZ . Пусть этот луч пересекает $\partial\bar{G}$ в точке C . Объединение всех таких отрезков BC будет объёмной фигурой; обозначим её через \hat{K}_i . Наконец, положим $\bar{K}_i = K_i \cup \hat{K}_i$. Очевидно, что $\cup \bar{K}_i = \bar{G}$. Поверхность $\partial\hat{K}_i \cap \partial\hat{K}_j$ изображена на рис. 2. После определения форм контрольных объёмов фактически остаётся только определить величины n_{ij} и v_{ij} по приведённым выше формулам.

Повышение точности

Описанный выше подход не позволяет обеспечить точность на линейной функции, что негативным образом сказывается на точности расчёта вблизи разделительной поверхности. Тем не менее, линейное восполнение переменных

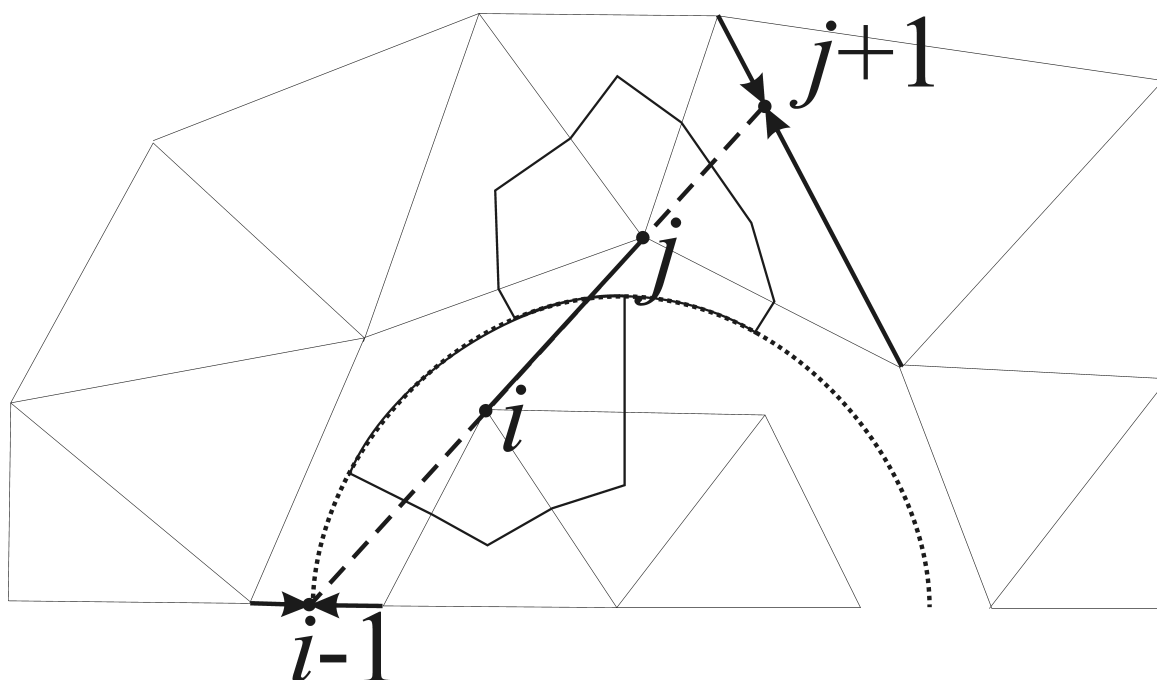


Рис. 3. Схема определения потока между ячейками i и j

всё равно помогает улучшить точность расчёта по сравнению с простейшей конечно-объёмной схемой. В настоящей работе значения Q_{ij}^{\pm} определялись при помощи 3-точечной реконструкции, по аналогии со схемой EBR3 [6].

Для выполнения реконструкции на каждом шаге зазор заполнялся сеточными элементами. В трёхмерном случае заполнение зазора конформной тетраэдральной сеткой без достройки дополнительных узлов, вероятно, не всегда возможно. Однако для целей реконструкции не требуется конформность сетки.

Схематично определение значений Q_{ij}^{\pm} изображено на рис. 3. Оно проводится в четыре этапа.

- Вначале определяются всевозможные пары (в 2D) или тройки (в 3D) узлов, доступных для интерполяции. Для интерполяции в точку $i - 1$ доступными узлами считаются все узлы, входящие с узлом i хотя бы в один общий элемент, включая элементы, достроенные в зазоре.
- Из пар (троек) узлов выбирается та, выпуклая оболочка которых пересекает луч, выпущенный из узла i по направлению, противоположному направлению на узел j . Если таких пар (троек) несколько, выбирается та, которая наиболее удалена от узла i .
- По выбранной паре (тройке) узлов проводится интерполяция консервативных переменных Q в точку $i - 1$, лежащую на прямой, проходящей через узлы i и j .
- Наконец, обозначим через x_i , x_j , x_{i-1} и x_{j+1} координаты этих точек на этой прямой. Тогда итоговые значения, подаваемые на вход схеме для

решения задачи о распаде разрыва, определяются как

$$\mathbf{Q}_{ij}^- = \mathbf{Q}_i + \frac{x_j - x_i}{2} \left(\frac{2}{3} \frac{\mathbf{Q}_j - \mathbf{Q}_i}{x_j - x_i} + \frac{1}{3} \frac{\mathbf{Q}_i - \mathbf{Q}_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right). \quad (9)$$

Аналогичным образом определяется значение \mathbf{Q}_{j+1} и, с его использованием,

$$\mathbf{Q}_{ij}^+ = \mathbf{Q}_j - \frac{x_j - x_i}{2} \left(\frac{2}{3} \frac{\mathbf{Q}_j - \mathbf{Q}_i}{x_j - x_i} + \frac{1}{3} \frac{\mathbf{Q}_{j+1} - \mathbf{Q}_j}{x_{j+1} - x_j} \right). \quad (10)$$

При необходимости использования монотонизации решения вместо формул (9)–(10) используется

$$\mathbf{Q}_{ij}^- = \mathbf{Q}_i + \frac{x_j - x_i}{2} \mathbf{S}_{ij} \text{minmod} \left\{ \mathbf{S}_{ij}^{-1} \frac{\mathbf{Q}_j - \mathbf{Q}_i}{x_j - x_i}, \mathbf{S}_{ij}^{-1} \frac{\mathbf{Q}_i - \mathbf{Q}_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right\}, \quad (11)$$

$$\mathbf{Q}_{ij}^+ = \mathbf{Q}_j - \frac{x_j - x_i}{2} \mathbf{S}_{ij} \text{minmod} \left\{ \mathbf{S}_{ij}^{-1} \frac{\mathbf{Q}_j - \mathbf{Q}_i}{x_j - x_i}, \mathbf{S}_{ij}^{-1} \frac{\mathbf{Q}_{j+1} - \mathbf{Q}_j}{x_{j+1} - x_j} \right\}, \quad (12)$$

где матрицы \mathbf{S}_{ij} определены (6),

$$\text{minmod}\{a, b\} = \begin{cases} \text{sign}(a) \min\{|a|, |b|\}, & \text{sign}(a) = \text{sign}(b), \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases}$$

а применительно к векторам minmod выполняется покомпонентно.

Параллельный алгоритм и программная реализация

Программная реализация представленной методики выполнена на базе программного комплекса NOISette [12, 13]. Параллельный алгоритм построен на основе многоуровневой технологии распараллеливания [14], сочетающей интерфейсы прикладного программирования MPI и OpenMP для параллельных моделей с распределенной и общей памятью соответственно.

На верхнем уровне вычислительная нагрузка распределяется между узлами кластерной системы путем декомпозиции расчетной сетки на подобласти MPI процессов. Чтобы задействовать многоядерные процессоры узлов кластера, эти подобласти разделяются далее на части для распределения вычислений между множественными потоками (нитеями) процессов в рамках OpenMP распараллеливания с общей памятью.

Относительно базового алгоритма на статической сетке использование скользящего интерфейса имеет следующие особенности:

- существенная неоднородность вычислительной стоимости обработки расчетных ячеек;
- динамически меняющиеся связи между ячейками.

Неоднородность возникает из-за того, что обработка скользящего интерфейса имеет заметно более высокую ресурсоемкость, поскольку требуется динамическое перестроение контрольных объемов и связей между ними. Этот факт необходимо корректно учесть при декомпозиции. Динамическое изменение связей требует согласованного между процессами перестроения схемы обмена данными, т.е. списков ячеек на отправку и получение между соседними процессами. Помимо балансировки загрузки и изменения структуры обмена данными, при реализации методики также необходимо минимизировать изменения в базовом программном комплексе и его вычислительном алгоритме.

Модификация декомпозиции расчетной области. Разделение сетки на под-области выполняется путем декомпозиции графа связей расчетных ячеек (нодальный граф сетки). Для балансировки загрузки можно было бы модифицировать веса вершин графа в соответствии с соотношением вычислительной стоимости обработки ячеек, входящих в скользящий интерфейс, и обычных ячеек статической сетки. Минусом данного подхода является необходимость эмпирического определения этого соотношения, причем для каждой конкретной конфигурации численного метода. Данное соотношение чувствительно и к выбору численной схемы дискретизации по пространству, и к выбору метода интегрирования по времени, и к конфигурации решателя СЛАУ для якобиана (в случае неявной схемы), и к другим параметрам. Чтобы полностью исключить эту проблему при балансировке, декомпозиция сетки выполняется в два этапа. Сначала из графа исключаются все вершины, принадлежащие скользящему интерфейсу, и выполняется декомпозиция оставшейся части сетки. Затем отдельно выполняется декомпозиция скользящего интерфейса. После чего под-области скользящего интерфейса объединяются с подобластями фиксированной части сетки. Это гарантирует равномерное распределение “дорогих” ячеек из скользящего интерфейса между обрабатываемыми процессами. При этом количество подобластей для скользящего интерфейса необязательно должно быть равно общему числу процессов. Для обработки скользящего интерфейса может быть выделена подгруппа процессов оптимального для данного числа ячеек размера. Это позволяет минимизировать временные затраты на обработку скользящего интерфейса.

Организация обмена данными. Для организации вычислений с распределенной памятью требуется динамическое перестроение набора гало-ячеек (т.е. ячеек, принадлежащих другим процессам, но связанных в данный момент шаблонной численной схемы с ячейкой данного процесса). Соответственно, на каждом шаге интегрирования по времени требуется перестроение схемы обмена данными, изменение состава входящих и исходящих сообщений. Такой режим обме-

на данными имеет заметные накладные расходы на построение согласованной схемы обмена данными. Процессам требуется передавать списки ячеек, попадающих в зону поиска пересечений, передавать информацию о своих ячейках, понадобившихся в данный момент времени другим процессам, и так далее. Из-за этого в несколько раз увеличивается количество сообщений и объем трафика, по сравнению со статическим обменом данными. Кроме того, программная реализация такого обмена и динамической модификации подобластей намного более сложна, чем в случае фиксированного обмена.

Чтобы избежать этих проблем, зона скользящего интерфейса может быть реплицирована между всеми процессорами подгруппы, его обрабатывающей. В этом случае возникают некоторые дополнительные накладные расходы с точки зрения потребления оперативной памяти, но при этом полностью исключается необходимость согласования схемы обменов. Поскольку каждый процесс знает, какие ячейки пересекаются с его ячейками и каким процессам они принадлежат, процессы могут формировать сообщения без каких-либо дополнительных обменов.

Поскольку количество ячеек в зоне скользящего интерфейса асимптотически меньше, чем общее число ячеек, $O(N^{2/3})$ против $O(N)$, дополнительный расход памяти представляется незначительным. Для крупного расчета на сетке из миллиарда узлов требуется репликация зоны из нескольких миллионов узлов, что соответствует объему в несколько гигабайт. Это не представляет проблем для современных кластерных систем, имеющих на узлах десятки гигабайт оперативной памяти.

При таком подходе набор гало ячеек полностью фиксирован, каждый процесс может находить пересечения на скользящем интерфейсе самостоятельно без дополнительных обменов, также не требуется согласование схемы обмена данными. В результате устраняются существенные сложности в программной реализации, уменьшается объем трафика при обмене данными, минимизируются изменения в исходном коде базового программного комплекса. Обмен данными может быть реализован аналогичным образом пересылкой точка-точка с использованием тех же подпрограмм обмена данными, что и в базовом программном комплексе в алгоритме для фиксированной сетки. В NOISEtte обмен с соседними процессами реализован в асинхронном режиме на основе неблокирующих вызовов функций в `MPI_Isend` и `MPI_Irecv`.

Репликация зоны скользящего интерфейса осуществляется на этапе инициализации при запуске расчета. Каждый процесс выполняет построение топологии связей и вычисление геометрических данных для своих ячеек, затем процессы восстанавливают полную интерфейсную зону путем серии вызовов функций группового обмена данными `MPI_Allgather`.

При необходимости накладные расходы на репликацию скользящего интер-

фейса могут быть снижены в 2 раза следующим образом. Поверхности скользящего интерфейса разделяются на “внутренние” и “внешние” таким образом, что любые две соприкасающиеся поверхности принадлежат разным группам. Внешние и внутренние поверхности обрабатываются двумя разными подгруппами MPI процессов. За счет этого внутри каждой из групп процессов требуется репликация только поверхностей противоположной группы, т.е. половины от всего интерфейса. При наличии множественных независимых зон скользящего интерфейса (например, несколько уровней вложенности, несколько разных вращающихся объектов, и т.д.) подгруппы процессов могут быть обособлены под каждый из таких интерфейсов, за счет этого расход памяти на репликацию также уменьшается пропорционально количеству таких интерфейсов.

Многопоточное распараллеливание. Для параллельных вычислений с общей памятью используются средства стандарта OpenMP. Распараллеливание вычислений по скользящему интерфейсу реализуется по аналогичному принципу, что и в случае алгоритма на фиксированной сетке [13]. Зависимость по данным при обработке граней ячеек устраняется путем многоуровневой декомпозиции зоны скользящего интерфейса.

Параллельная эффективность на кластерной системе. Для проверки на практике эффективности работы параллельного режима вычислений с комбинированным MPI+OpenMP распараллеливанием выполнено тестирование ускорения на сравнительно грубой сетке, содержащей 590 тыс. узлов и 2.9 млн элементов (моделирование осевого вентилятора в круглом канале).

Для тестирования использовался кластер HPC4 Курчатовского института, узлы которого имеют по два 12-ядерных CPU Intel Xeon E5-2680 v3 (Haswell) 2.5 ГГц с 4 каналами доступа к памяти DDR4 каждый и 128 GB RAM. Узлы объединены коммуникационной средой InfiniBand FDR.

Применен комбинированный MPI+OpenMP режим с распределением по 2 MPI процесса на узел кластера, т.е. по одному процессу на многоядерный процессор. Такой режим, во-первых, имеет заметно меньшие коммуникационные накладные расходы, чем при использовании только MPI, а во-вторых, исключает потери на неоднородность доступа к памяти, которая возникала бы при размещении по одному MPI процессу на узел. Все потоки MPI процесса в явном виде привязываются к своему процессору с целью исключения миграции потоков между процессорами. MPI процессы порождают по 24 потока, чтобы задействовать 12 ядер в режиме одновременной многопоточности Hyper-threading по 2 потока на ядро.

Результаты измерения параллельного ускорения представлены на рис. 4. В тестировании оценивалась деградация параллельной эффективности при сни-

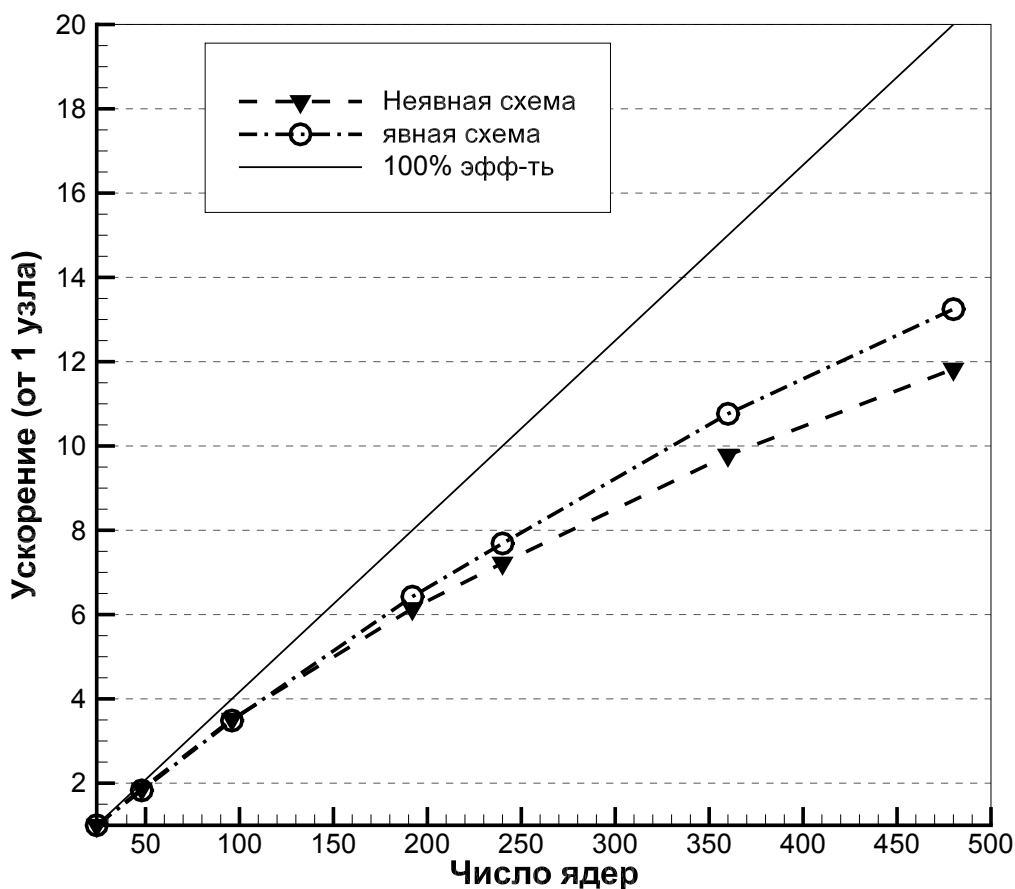


Рис. 4. Ускорение относительно одного узла в MPI+OpenMP режиме, сетка 590 тыс. узлов

жении объема работы, приходящегося на одно процессорное ядро. Было задействовано до 480 процессорных ядер. Получены следующие примерные уровни параллельной эффективности: для 5 тыс. узлов на ядро - 90%, 2.5 тыс. – 80%, 1 тыс. – 60%. Поскольку в реальных задачах загрузка обычно составляет 20 – 100 тыс. узлов на ядро, эти результаты демонстрируют многократный запас по степени параллелизма.

Измерения выполнены для явной схемы интегрирования (4-шаговая схема Рунге–Кутты 4-го порядка) и для неявной схемы 2-го порядка с линеаризацией по Ньютону. В случае неявной схемы в качестве решателя СЛАУ для якобиана использовался метод Bi-CGSTAB [15] с блочным предобуславливателем Якоби на основе неполного LU разложения ILU(0). Явная и неявная схемы продемонстрировали сопоставимую параллельную эффективность. Неявная схема показывает немного меньшее ускорение из-за большей интенсивности обменов данными, которые происходят на этапе решения СЛАУ.

Накладные расходы на дополнительные обмены по скользящему интерфейсу не оказали заметного влияния на производительность относительно базового

алгоритма на фиксированной сетке. На максимальном числе процессоров вклад таких обменов в общее время вычислений составил 4–6%.

Также было измерено ускорение за счет OpenMP распараллеливания при запуске на одном узле. На 12-ядерных процессорах с 4 каналами памяти оно составило 7 раз как для явной, так и для неявной схемы.

Заключение

Алгоритм расчета на скользящих сетках был полностью адаптирован к существующему комбинированному MPI+OpenMP распараллеливанию базового алгоритма на статической сетке. Дополнительные накладные расходы на обмен данными по скользящему интерфейсу не оказали заметного влияния на масштабируемость и параллельную эффективность. При тестировании на кластерной системе показана высокая параллельная эффективность.

Список литературы

1. Численное исследование аэродинамических и акустических свойств винта в кольце / Абалакин И. В., Аникин В. А., Бахвалов П. А. [и др.] // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2016. № 3. С. 130–145.
2. Koobus B., Farhat C. Second-order time-accurate and geometrically conservative implicit schemes for flow computations on unstructured dynamic meshes // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 1999. no. 170. P. 103–129.
3. Бахвалов П. А., Вершков В. А. Рёберно-ориентированные схемы на подвижных гибридных сетках в коде NOISEtte // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 127. С. 1–36. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-127>.
4. Barth T. J. Numerical aspects of computing high Reynolds number flows on unstructured meshes // *AIAA Paper No. 91-0721*. 1991.
5. Бахвалов П. А., Козубская Т. К. О построении рёберно-ориентированных схем, обеспечивающих точность на линейной функции, для решения уравнений Эйлера на неструктурированных сетках // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2017. Т. 57, № 4. С. 92–111.
6. Abalakin I., Bakhvalov P., Kozubskaya T. Edge-based reconstruction schemes for unstructured tetrahedral meshes // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2016. Vol. 81. P. 331–356.

7. Бахвалов П. А., Козубская Т. К. Схема EBR-WENO для решения задач газовой динамики с разрывами на неструктурированных сетках // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2017. № 23. С. 1–32.
8. Burgos M. A., Contreras J., Corral R. Efficient Edge-Based Rotor/Stator Interaction Method // AIAA Journal. 2011. Vol. 49, no. 1. P. 19–31.
9. Численное моделирование влияния взаимного расположения винта и пилона на шум турбовинтового самолёта / Титарев В. А., Фараносов Г. А., Чернышёв С. А. [и др.] // Акустический журнал. 2018. Т. 64, № 6. С. 737–751.
10. Бахвалов П. А. Моделирование течения в системах ротор–статор с осесимметричным статором рёберно-ориентированными схемами // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 124. С. 1–16. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-124>.
11. Carlson J.-R. Inflow/Outflow Boundary Conditions with Application to FUN3D: Tech. Rep.: NASA/TM–2011-217181: NASA, 2011.
12. Параллельный программный комплекс NOISETTE для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики / Абалакин И.В., Бахвалов П.А., Горобец А.В. [и др.] // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13. С. 110–125.
13. A.Gorobets. Parallel Algorithm of the NOISEtte Code for CFD and CAA Simulations // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2018. Vol. 39. p. 524–532.
14. Горобец А. В. Параллельная технология численного моделирования задач газовой динамики алгоритмами повышенной точности // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2015. Т. 55. С. 641–652.
15. H. A. Van der Vorst. Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems // SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing. 1992. Vol. 13. P. 631–644.