Эффективная программная реализация метода вихревых элементов при моделировании двумерных течений несжимаемой среды^{*}

К.С. Кузьмина, И.К. Марчевский МГТУ им. Н.Э. Баумана

В основу вихревых методов вычислительной гидродинамики положено описание движения среды через перемещение изолированных вихревых элементов, моделирующих распределение завихренности. Наибольшую вычислительную производительность обеспечивают реализации, основанные на использовании приближенных алгоритмов вычисления вихревого влияния. Для таких алгоритмов построена оценка трудоемкости, использование которой позволяет наиболее эффективно выбрать параметры алгоритма и организовать параллельные вычисления. Для всех основных операций разработаны параллельные реализации, рассмотрена возможность использования различных технологий программирования.

Ключевые слова: метод вихревых элементов, закон Био — Савара, вязкая жидкость, диффузионная скорость, алгоритм Барнса — Хата, быстрый метод, вычислительная сложность, оценка погрешности, параллельные вычисления.

1. Введение

Расчет дозвукового обтекания тел является классической задачей вычислительной гидромеханики, однако разработка эффективных численных схем и алгоритмов, позволяющих использовать их в инженерных приложениях и получать приемлемые по точности результаты моделирования при сравнительно малых затратах вычислительных ресурсов, является актуальной задачей. Еще более сложной проблемой является моделирование гидроупругих колебаний, когда обтекаемое тело может перемещаться и/или деформироваться в потоке под действием гидродинамических нагрузок. В этом случае необходимо решать сопряженную задачу, при этом область течения изменяется на каждом шаге расчета.

Известно, что в ряде инженерных приложений (промышленная аэродинамика зданий и сооружений, расчет парашютных систем, моделирование колебаний пучков трубок-теплообменников энергетических установок, механика подводных трубопроводов и кабелей, расчет ветровых колебаний проводов воздушных ЛЭП) широко используются вихревые методы, относящиеся к классу бессеточных лагранжевых методов вычислительной гидродинамики. Первичной расчетной величиной в них является завихренность, а моделирование течения сводится к расчету генерации завихренности на поверхности обтекаемых тел и перемещению вихревых элементов в области течения в соответствии с уравнениями гидродинамики. Вихревые методы решения двумерных задач хорошо разработаны (метод вязких вихревых доменов, метод дискретных вихрей) и успешно применяются как для решения инженерных задач, связанных прежде всего с определением гидродинамических нагрузок, действующих на профили, так и для моделирования «тонких» гидродинамических эффектов — эффекта Танеды, кризиса обтекания профиля при высоких числах Рейнольдса.

Целью данной работы является получение и анализ оценок вычислительной сложности алгоритма вихревого метода и его параллельная программная реализация, позволяющая существенно сократить время выполнения расчетов, и тем самым расширить возможности практического применения вихревых методов при решении актуальных инженерных задач.

^{*}Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-7431.2016.8

2. Постановка задачи и краткое описание вихревых методов

Рассматривается двумерная задача о моделировании внешнего обтекания профиля потоком вязкой несжимаемой среды постоянной плотности, движение которой описывается уравнением неразрывности и уравнением Навье — Стокса:

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0,\tag{1}$$

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \nu \Delta \vec{V} \,. \tag{2}$$

Здесь $\vec{V} = \vec{V}(\vec{r},t)$ — скорость среды, $p = p(\vec{r},t)$ — давление, $\rho = \text{const}$ — плотность, $\nu = \text{const}$ — кинематическая вязкость; ∇ и Δ — дифференциальные операторы Гамильтона и Лапласа. Начальное распределение скоростей в среде полагается известным; в качестве граничных условий используются условие затухания возмущений на бесконечности

$$ec{V}(ec{r},t)
ightarrow ec{V}_{\infty}, \quad p(ec{r},t)
ightarrow p_{\infty}$$
 при $|ec{r}|
ightarrow \infty$

и условие прилипания на границе K профиля

$$\vec{V}(\vec{r},t) = \vec{V}_K(\vec{r},t)$$
 при $\vec{r} \in K$,

где $\vec{V}_K(\vec{r},t)$ — скорость движения точек профиля, которая может быть известна из постановки задачи или вычисляться в процессе решения сопряженной задачи гидроупругости.

При проведении практических расчетов чаще всего наибольший интерес представляют гидродинамические нагрузки, действующие на обтекаемый профиль. Если сам профиль является жестким (при этом он может оставаться упругозакрепленным), обычно достаточно вычисления их интегральных величин — силы лобового сопротивления, подъемной силы и аэродинамического момента. В более сложных постановках требуется рассчитать распределение нагрузок — давления и вязких напряжений — по поверхности профиля, или исследовать поле течения. Это несколько повышает трудоемкость решения задачи, однако не приводит к принципиальному усложнению алгоритма и его программной реализации.

3. Краткое описание вихревых методов

Использование вихревых методов предполагает переход к завихренности $\vec{\Omega} = \nabla \times \vec{V}$ как к первичной расчетной величине; при этом в плоских задачах гидродинамики вектор $\vec{\Omega}$ имеет лишь одну ненулевую компоненту. Поле скоростей может быть восстановлено по известному распределению завихренности при помощи закона Био — Савара

$$\vec{V}(\vec{r},t) = \vec{V}_{\infty} + \iint_{S} \frac{\vec{\Omega}(\vec{\xi},t) \times (\vec{r}-\vec{\xi})}{2\pi |\vec{r}-\vec{\xi}|^2} dS_{\xi},$$
(3)

где интеграл берется по области течения S; при этом уравнение неразрывности (1) выполняется автоматически. Для расчета давления наиболее удобен аналог интегралов Бернулли и Коши — Лагранжа [1], при этом для вычисления главного вектора и момента гидродинамических сил можно использовать простые выражения, также приведенные в [1].

В терминах завихренности уравнение (2) принимает простой вид

$$\frac{D\vec{\Omega}}{Dt}\Big|_{\vec{V}} = \nu\Delta\vec{\Omega},\tag{4}$$

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

В случае моделирования течения идеальной (невязкой) несжимаемой среды, т.е. при $\nu = 0$, уравнение (4) выражает собой закон Гельмгольца, в соответствии с которым завихренность «вморожена» в жидкость, а эволюция завихренности, таким образом, представляет собой ее перенос вместе с частицами жидкости.

Отметим, что во многих инженерных приложениях, в частности, при моделировании обтекания профилей, имеющих острые кромки и угловые точки, при проведении моделирования течений и расчете нагрузок можно ограничиться моделью идеальной жидкости. Данный подход положен в основу известного метода дискретных вихрей (МДВ) [2], активно развиваемого еще с 60-х годов и хорошо зарекомендовавшего себя в целом ряде отраслей.

Если влияние вязкости существенно и требуется ее корректный учет в расчете, возможно использование нескольких подходов. Одним из них является расчет диффузионной скорости $\vec{W} = -\nu \frac{\nabla \Omega}{\Omega}$, эффективный способ вычисления которой разработан в методе вязких вихревых доменов (ВВД) [1,3]. С учетом диффузионной скорости уравнение (4) можно привести к виду

$$\frac{D\vec{\Omega}}{Dt}\Big|_{\vec{V}+\vec{W}} = 0,\tag{5}$$

где по аналогии с субстанциональной производной введено обозначение

$$\frac{D}{Dt}\Big|_{\vec{V}+\vec{W}} = \frac{\partial}{\partial t} + \left((\vec{V} + \vec{W}) \cdot \nabla \right).$$

Механический смысл уравнения (5) заключается в том, что в области течения S происходит перенос имеющейся завихренности со скоростью $\vec{V} + \vec{W}$, при этом «новая» завихренность внутри области течения не образуется. Генерация завихренности происходит лишь на границе области течения, т.е. на обтекаемом профиле.

Вихревые методы относятся к так называемым методам частиц (particle methods), при этом в качестве таких частиц выступают элементарные поля завихренности — вихревые элементы (ВЭ), при помощи которых моделируется распределение завихренности в области течения. Общее количество N вихревых элементов может быть достаточно большим и достигать десятков-сотен тысяч и даже миллионов; сами вихревые частицы в методах МДВ и ВВД представляют собой круглые вихри постоянного малого радиуса ε .

Положение каждого вихревого элемента в пространстве характеризуется радиус-вектором $\vec{r_i}$, а содержащаяся в нем завихренность определяет его циркуляцию Γ_i , i = 1, ..., N. Влияние ВЭ на скорость среды в произвольной точке \vec{r} вычисляется в соответствии с дискретным аналогом закона Био — Савара (3)

$$\vec{V}(\vec{r},t) = \vec{V}_{\infty} + \sum_{i=1}^{N} \frac{\Gamma_i}{2\pi} \frac{\vec{k} \times (\vec{r} - \vec{r}_i)}{\max\{|\vec{r} - \vec{r}_i|^2, \varepsilon^2\}},\tag{6}$$

где \vec{k} — единичный вектор, перпендикулярный плоскости течения.

Основной смысл вихревых методов состоит в переходе от решения уравнения Навье — Стокса (2), или, после преобразований, уравнения в частных производных (4) или (5), к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих движение ВЭ (описанный выше «механический смысл» уравнения (5) позволяет считать, что циркуляции ВЭ остаются постоянными, а их перемещение происходит со скоростью $\vec{V} + \vec{W}$):

$$\begin{cases} \frac{d\Gamma_i}{dt} = 0, \\ i = 1, \dots N. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{V}(\vec{r}_i) + \vec{W}(\vec{r}_i), \end{cases}$$

$$(7)$$

Здесь $\vec{V}(\vec{r_i})$ — скорость среды в точке расположения *i*-го вихревого элемента, вычисляемая по формуле (6), $\vec{W}(\vec{r_i})$ — диффузионная скорость в этой точке.

Граничное условие на бесконечности в вихревых методах выполняется автоматически, при этом не требуется искусственно ограничивать расчетную область. Выполнение граничного условия прилипания на профиле (или условия непротекания, если моделируется течение невязкой среды) обеспечивается генерацией на нем вихревого слоя на каждом шаге расчета по времени, также моделируемого набором ВЭ. Этот вихревой слой является присоединенным, если обтекание невязкое, т. е. ВЭ, его моделирующие, остаются на своих местах и заменяются новыми на следующем шаге расчета, и является свободным при обтекании профиля вязкой жидкостью. Последнее означает, что ВЭ «сходят в поток» и становятся частью вихревого следа, образующегося вблизи обтекаемого профиля и позади него. Одним из способов моделирования обтекания подвижного (деформируемого) профиля является размещение на его поверхности присоединенного вихревого слоя и присоединенного слоя источников, интенсивности которых определяются по скоростям соответствующих точек профиля [1].

Для определения интенсивности вихревого слоя на профиле и последующего расчета циркуляций ВЭ можно применять различные методы и подходы, сводящиеся к решению системы линейных алгебраических уравнений, размерность которой соответствует густоте дискретизации профиля. Наибольшую эффективность, особенно применительно к методу ВВД, показал метод, основанный на обеспечении равенства нулю среднего значения касательной компоненты скорости на панелях — отрезках ломаной, аппроксимирующей профиль [4, 5]; он во многих случаях превосходит по точности подход, обычно используемый в МДВ, на один-два порядка при одинаковой дискретизации профиля.

Отметим, что количество профилей может быть произвольным; алгоритм метода вихревых элементов в этом случае естественным образом модифицируется и позволяет решать широкий класс задач как по моделированию обтеканию систем неподвижных профилей (например, воспроизводить гидродинамические эффекты при их интерференции, в частности, снижение лобового сопротивление и возникновение подсасывающей силы у подветренного цилиндра [6]), так и их гидроупругие колебания.

4. Оценка вычислительной сложности алгоритма

Несмотря на сравнительно низкую вычислительную сложность вихревых методов (по сравнению с сеточными), время проведения вычислений в представляющих практический интерес задачах оказывается довольно большим и может составлять от нескольких часов до многих суток.

Построим оценку вычислительной сложности алгоритма, выделив в нем наиболее существенные операции и оценив трудоемкость каждой из них. Далее будем использовать следующие обозначения:

- *N* число вихревых элементов в области течения;
- *n* число вихревых элементов, моделирующих вихревой слой на всех профилях;
- *T* количество выполняемых шагов расчета по времени.

4.1. Описание модельных задач

Для оценки вычислительной сложности и целесообразности распараллеливания отдельных операций рассмотрим две весьма типичные для вихревых методов модельные задачи.

Задача 1. Моделирование гидроупругих колебаний двух цилиндров. Рассмотрим обтекание двух подвижных цилиндров, вихревой слой на поверхности каждого из которых моделируется с помощью $n_{p0} = 200$ вихревых элементов; в этом случае $n_0 = 2n_{p0} = 400$. Примем, что вихревой след за каждым цилиндром образован из $N_0 = 10\,000$ вихревых элементов, следы за двумя цилиндрами смешиваются мало, и в расчете выполняется $T_0 = 30\,000$ временных шагов. Данные оценки взяты из практического расчета и вполне отвечают параметрам реального алгоритма. Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2016) || Parallel computational technologies (PCT'2016) agora.guru.ru/pavt



Рис. 1. К постановке тестовой задачи 1

Для повышения точности расчета, которое необходимо, в частности, для моделирования течения при больших числах Рейнольдса (опыт показывает, что $n_{p0} = 200$ позволяет моделировать течение только при $\text{Re} \leq 10^3$), количество ВЭ на каждом из профилей n_p должно быть увеличено, при этом, очевидно, пропорционально увеличится число n. Количество ВЭ в потоке N примем пропорциональным n^2 , шаг расчета по времени пропорционально уменьшится, а само количество шагов — возрастает:

$$n = 2n_p, \quad N = 2N_0 \cdot \left(\frac{n_p}{n_{p0}}\right)^2, \quad T = T_0 \cdot \left(\frac{n_p}{n_{p0}}\right).$$
 (8)

Задача 2. Моделирование колебаний цилиндра при наличии экрана. В [7,8] рассмотрена задача о гидроупругих колебаниях кругового профиля вблизи твердой поверхности (экрана). В рамках вычислительного эксперимента обтекание профиля, моделирующего экран, можно считать безотрывным, что позволяет существенно снизить количество ВЭ в области течения за счет того, что в поток сходят лишь вихри с подвижного цилиндра, а вихревой слой на экране остается присоединенным. В качестве «базовых» параметров расчетной схемы для этого случая примем, что вихревой слой на цилиндре моделируется при помощи $n_{p0} = 200$ ВЭ, вихревой слой на экране — при помощи $n_{e0} = 3n_{p0} = 600$ ВЭ, число вихрей в следе $N_0 = 10000$. Тогда для произвольного n_p получим

$$n = 4n_p, \quad N = N_0 \cdot \left(\frac{n_p}{n_{p0}}\right)^2, \quad T = T_0 \cdot \left(\frac{n_p}{n_{p0}}\right). \tag{9}$$

Для решения этих задач будут использованы два подхода: непосредственная («медленная») реализация вихревого метода и применение быстрого алгоритма.

4.2. Основные операции вихревого метода и их «медленная» реализация

Ниже перечислены основные операции алгоритма вихревого метода, последовательно выполняемые на каждом шаге расчета, и сделана оценка их вычислительной сложности. В расчет принимаются операции умножения, деления, извлечения корня, вычисления экспоненты, логарифма, арктангенса и им подобные; операции сложения и вычитания не учитываются. В оценках везде приведены только главные слагаемые, содержащее N и n в наибольшей степени. Операции, сложность которых линейна по N и n, не упоминаются.

Операция 1. Формирование матрицы системы линейных уравнений для определения циркуляций генерируемых на профиле вихревых элементов. Данная операция сводится к вычислению проекций на нормаль либо касательную попарных влияний друг на друга ВЭ единичной интенсивности, расположенных на поверхности обтекаемого профиля и моделирующих вихревой слой на нем. В простейшем случае в методе дискретных вихрей сложность данной операции составляет $Q_1 = 6n^2$ операций; при использовании алгоритма [4,5], обеспечивающего существенно более высокую точность, сложность вырастает почти в 14 раз и составляет $Q_1 = 83n^2$. Если относительное расположение точек на поверхности всех обтекаемых профилей остается неизменным на протяжении всего расчета (т. е. при недеформируемых профилях, которые не перемещаются друг относительно друга), матрица системы остается постоянной и формируется однократно.

Операция 2. Вычисление правой части системы линейных уравнений. По смыслу данная операция аналогична предыдущей, однако здесь производится расчет влияния ВЭ, составляющих спутный след за профилем, на вихри, моделирующие профиль, а также учитывается влияние присоединенного вихревого слоя и слоя источников, моделирующих движения профиля. В простом случае (МДВ) сложность операции вычисления правой части СЛАУ составляет $Q_2 = 7Nn + 10n^2$; при использовании алгоритма [4,5] $Q_2 = 30Nn + 85n^2$.

Операция 3. Решение системы алгебраических уравнений. В случае постоянной на протяжении всего расчета матрицы (см. Операция 1) производится однократное ее обращение и в дальнейшем решение находится путем умножения обратной матрицы на вектор правой части. В общем случае решение системы производится методом Гаусса (LU-разложения); вычислительная сложность данной операции $Q_3 = n^3/3$.

Операция 4. Вычисление конвективных скоростей вихревых элементов. Данная операция наиболее трудоемка; непосредственное вычисление скоростей по формуле (6) требует выполнения $Q_4 = 6N^2 + 8Nn$ операций.

Операция 5. Вычисление диффузионных скоростей вихревых элементов. При непосредственном вычислении диффузионных скоростей в соответствии с формулами [1] требуется выполнение $Q_5 = 9N^2 + 14Nn$ операций, т.е. при $N \gg n$ эта операция в 1,5 раза более трудоемка по сравнению с предыдущей.

Операция 6. Контроль протекания. Данная операция необходима для исключения вихревых элементов, проникших в результате перемещения внутрь обтекаемого профиля. Ее трудоемкость зависит от конкретной реализации; в первом приближении она пропорциональна n^2 , а коэффициент пропорциональности составляет величину порядка 10.

Операция 7. Реструктуризация вихревого следа. Близкорасположенные ВЭ объединяются в один, также исключаются ВЭ, удалившиеся далеко от обтекаемого профиля (обычно на 10...20 диаметров). Вычислительная сложность этого алгоритма, как показывают расчеты, порядка N^2 , коэффициент пропорциональности сравнительно мал.

Таким образом, вычислительная сложность последних двух операций хотя и может быть высокой, существенно ниже суммарной трудоемкости остальных операций, поэтому их трудоемкость можно учитывать приближенно; положим $Q_6 = Q_1$ и $Q_7 = 0.2Q_4$. Тогда

$$Q = \frac{n^3}{3} + 251n^2 + 536Nn + 162N^2.$$

Здесь и далее принято, что задача решается в гидроупругой постановке, матрица системы формируется заново на каждом шаге расчета, используется уточненная схема [4,5].

В этом случае суммарная вычислительная сложность решения модельных задач при $n_p = 200$ составляет $S_1(200) = Q_1(200) \cdot T_0 \approx 2.1 \cdot 10^{14}$ и $S_2(200) = Q_2(200) \cdot T_0 \approx 7.1 \cdot 10^{13}$.

В табл. 1 представлены оценки трудоемкости расчета $S_{1,2}(n_p)$ при различном значении n_p , отнесенные к соответствующим величинам $S_{1,2}(200)$.

n_p	100	200	400	600	800	1 000
$\frac{S_1(n_p)}{S_1(200)}$	0,03	1	31	231	969	2946
$\frac{S_2(n_p)}{S_2(200)}$	0,05	1	26	188	766	2293

Таблица 1. Вычислительная сложность алгоритма при различных n_p по сравнению с S(200)

В табл. 2 показаны выраженные в процентах доли, приходящиеся на операции $Q_1 \dots Q_7$, в общей трудоемкости выполнения одного шага расчета при различных значениях n_p .

Операция	Q_1		Q_2		Q_3		Q_4		Q_5		Q_6		Q_7	
Задача	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
$n_p = 100$	0,7	6,1	7,1	20,2	0,6	9,9	33,5	21,0	50,7	32,5	0,7	6,1	6,7	4,2
$n_p = 200$	0,2	2,2	3,6	12,4	0,3	7,2	35,4	27,9	53,3	42,5	0,2	2,2	7,1	5,6
$n_p = 400$	0,0	0,7	1,8	6,8	0,2	4,4	36,2	32,2	54,4	48,8	0,0	0,7	7,2	6,4
$n_p = 1000$	0,0	0,1	0,7	2,9	0,1	2,0	36,7	35,1	55,1	52,8	0,0	0,1	7,3	7,0

Таблица 2. Доли операций $Q_1 \dots Q_7$ (в %) при различных значениях n_p

В приведенном примере расчет при $n_p = 200$ в последовательном режиме в тестовой задаче 1 занимает порядка 150 часов. Использование параллельных вычислительных алгоритмов позволяет существенно сократить затраты времени на проведение расчетов, в частности, в [9] описана реализация вихревого метода, в которой параллельные алгоритмы на основе технологии MPI использованы для выполнения операций 2, 4, 5, 7 (в обозначениях данной статьи). Это позволяет существенно сократить время выполнения расчета — ускорение достигает 25–30 раз при проведении расчетов на 64-ядерном кластере. Отметим, что оценка по закону Амдала [10] предсказывает величину ускорения в 45 раз.

При решении в параллельном режиме тестовой задачи 2 ускорение оказывается во много раз меньше и составляет около 5 раз (по оценке Амдала — 7,5 раз). Это означает, что распараллеливания только лишь 4 вышеуказанных операций в данном случае недостаточно.

С увеличением количества ВЭ вычислительная сложность задачи резко возрастает (табл. 1). Ясно, что непосредственное решение задачи при значениях n_p , превышающих 200...400, едва ли возможно даже с привлечением параллельных алгоритмов.

4.3. Использование приближенного быстрого метода

При большом количестве вихревых элементов N в области течения фактически единственным способом решения задачи за приемлемое время становится использование приближенных быстрых методов учета вихревого влияния, основанных на приближенных методах решения задачи N тел. Эти методы базируются на алгоритме Барнса — Хата [11], весьма удобная адаптация которого к вихревым методам описана в [12]. Смысл данного метода заключается в том, что влияние компактно расположенных ВЭ на другие компактно расположенные на значительном расстоянии группы может быть вычислено приближенно.

Известно, что вычислительная сложность расчета конвективных скоростей ВЭ в таком методе пропорциональна $N \log N$. Известны также и асимптотические оценки точности, например, [13], однако они едва ли применимы при решении практических задач, когда необходимо так подобрать параметры быстрого метода, чтобы иметь возможность рассчитывать скорости ВЭ с приемлемой погрешностью, к примеру, на уровне 0,1...0,2%. Также необходимо разработать алгоритм вычисления диффузионных скоростей быстрым методом, оценить его сложность и точность; рассмотреть возможность ускорения остальных операций алгоритма. Данные задачи являются актуальными, определенные шаги в направлении их решения были сделаны авторами настоящей статьи в работах [14, 15].

4.3.1. Вычисление конвективных скоростей вихревых элементов

В работе [14] получена весьма точная оценка для вычислительной сложности алгоритма расчета конвективных скоростей вихревых элементов:

$$\begin{split} Q_4^{fast} &= \frac{24N^2}{2^k} \left(\frac{4}{\theta}\right)^2 \left(1 - \alpha \frac{(\sqrt{2})^k - 1}{\sqrt{N}}\right)^2 \left(1 - \frac{4}{\theta(\sqrt{2})^k} \left(1 - \alpha \frac{(\sqrt{2})^k - 1}{\sqrt{N}}\right)\right) + \\ &\quad + \frac{896 \cdot 2^k \cdot \beta}{\theta^2} \left(4 \left(\frac{1}{4 + \theta} + \frac{1}{4 - (\sqrt{2})^k \theta}\right) + \ln\left(\frac{(\sqrt{2})^k - 4}{4 + \theta}\right)\right) + 4N. \end{split}$$

Здесь k — количество уровней бинарного дерева в области течения, в ячейках которого располагаются ВЭ; θ — параметр, отвечающий за точность вычисления скоростей и существенно влияющий на время выполнения расчетов; α и β — эмпирические коэффициенты, для которых в [15] из вычислительного эксперимента получены значения $\alpha \approx 0.84$, $\beta \approx 0.56$.

Сделанные в работе [15] оценки показывают, что для обеспечения уровня погрешности в 0,1...0,2 % в расчете следует выбрать $\theta \approx 0,4$; там же описана методика определения оптимального значения параметра k. Ниже в табл. 3 приведена оценка ускорения выполнения операции 4 для различных значений n_p за счет использования быстрого метода. При этом следует помнить, что одним и тем же значениям n_p в рассматриваемых задачах отвечает различающееся в 2 раза количество N ВЭ в вихревом следе, как это следует из (8) и (9).

4.3.2. Вычисление диффузионных скоростей вихревых элементов

Вычисление диффузионной скорости вихревого элемента производится по формулам [1]; вклад одних вихревых элементов в диффузионную скорость других экспоненциально затухает с ростом расстояния между ними, поэтому при приближенном расчете диффузионных скоростей быстрым методом представляется целесообразным ограничиться рассмотрением лишь ближней области, внутри которой будем рассчитывать диффузионную скорость непосредственно. В этом случае оценка трудоемкости операции Q_5 имеет вид

$$Q_5 = Q_4 \big|_{\theta = \theta_{dif}} \cdot N \cdot \theta_{dif} \cdot \frac{\gamma}{2^k}.$$
 (10)

Здесь γ — эмпирический коэффициент, который, как показывают расчеты [15], оказывается близким к значению $\gamma = 0.7$; параметр θ_{dif} определяет точность метода и скорость расчета; k — как и ранее, количество уровней бинарного дерева. Систематические исследования показали, что для обеспечения уровня погрешности вычисления диффузионной скорости в $0.1 \dots 0.2$ % необходимо выбрать значение $\theta_{dif} = 0.1$.

Ниже в табл. 3 приведена оценка ускорения выполнения операции 5 для различных значений n_p за счет использования быстрого метода.

Видно, что в обеих тестовых задачах эффективность использования быстрого метода для расчета диффузионных скоростей ВЭ оказывается в 1,5...2,0 раза меньшей, чем для расчета конвективных скоростей.

4.3.3. Вычисление правых частей системы линейных алгебраических уравнений

Для операции 2, действуя по аналогии с работами [14,15], можно получить следующую оценку трудоемкости:

$$\begin{aligned} Q_2^{fast} &= \frac{130Nn}{2^k} \left(\frac{4}{\theta}\right)^2 \left(1 - \alpha \frac{(\sqrt{2})^k - 1}{\sqrt{N}}\right)^2 \left(1 - \frac{4}{\theta(\sqrt{2})^k} \left(1 - \alpha \frac{(\sqrt{2})^k - 1}{\sqrt{N}}\right)\right) + \\ &+ \frac{896 \cdot n \cdot \beta}{\theta^2} \left(4 \left(\frac{1}{4 + \theta} + \frac{1}{4 - (\sqrt{2})^k \theta}\right) + \ln\left(\frac{(\sqrt{2})^k - 4}{4 + \theta}\right)\right) + 85n^2. \end{aligned}$$

Зависимость ускорения выполнения операции 2 для различных значений n_p за счет использования быстрого метода также показана в табл. 3.

n_p	100		200		400		600		800		1 000	
Задача	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
$\frac{Q_2}{Q_2^{fast}}$	5,9	2,0	12,2	4,4	24,1	8,6	43,9	12,8	61,3	17,3	79,4	21,8
$\frac{\overline{Q_4}}{\overline{Q_4^{fast}}}$	3,6	4,1	20,4	12,1	69,7	38,4	151,4	82,7	240,7	130,4	414,8	220,2
$\frac{Q_5}{Q_5^{fast}}$	6,6	2,1	13,1	10,7	21,7	22,8	75,0	42,0	132,2	72,6	210,3	114,4

Таблица 3. Ускорение опер. Q2, Q4, Q5 за счет использования быстрого метода при различных np

4.3.4. Остальные операции алгоритма вихревого метода и его общая трудоемкость

Для операции 6 контроля протекания и операции 7 реструктуризации вихревого следа разработаны оптимизированные варианты, позволяющие для ускорения вычислений использовать структуру дерева, построенного в области течения. Результаты вычислительного эксперимента показывают, что оценки их трудоемкостей, принятые ранее для «медленной» реализации алгоритма, остаются пригодными и в данном случае, поэтому снова будем считать, что $Q_6^{fast} = Q_1^{fast}$ и $Q_7^{fast} = 0.2Q_4^{fast}$.

Операции 1 и 3 формирования и решения линейной системы за счет применения быстрого метода ускорены быть не могут, их трудоемкости сохраняются: $Q_1^{fast} = Q_1$ и $Q_3^{fast} = Q_3$.

Суммарная трудоемкость расчета с использованием быстрого метода оказывается существенно меньше, чем при непосредственном расчете. В табл. 4 приведены величины отношения вычислительной сложности всего расчета «медленным» методом $S(n_p)$ к трудоемкости расчета быстрым методом $S(n_p)^{fast}$.

n_p	100 200		400	600	800	1 000	
Задача 1	4,5	14,0	28,8	83,4	138,9	$175,\!6$	
Задача 2	1,9	4,7	10,4	17,2	24,9	32,8	

Таблица 4. Вычислительная сложность расчета S по отношению к S^{fast} при различных n_p

Анализ табл. 4 показывает, что применение быстрого метода при решении задачи 2 существенно менее эффективно, чем в случае задачи 1. Табл. 5 дает представление о соотношении трудоемкостей отдельных операций при использовании быстрого метода.

5. Использование параллельных вычислительных технологий при реализации вихревых методов

Оценим долю вычислений, которые должны выполняться в параллельном режиме, чтобы обеспечить необходимую масштабируемость программы. Применяя закон Амдала [10], получаем, что доля параллельного кода f должна составлять

$$f \ge \frac{1-1/s}{1-1/p},$$

Операция	Q_1		Q_2		Q_3		Q_4		Q_5		Q_6		Q_7	
Задача	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
$n_p = 100$	3,2	11,3	5,5	19,0	2,6	18,1	42,3	9,4	34,8	29,1	3,2	11,3	8,4	1,9
$n_p = 200$	2,7	10,5	4,2	13,4	4,3	33,8	24,4	10,9	56,9	18,8	2,7	10,5	4,9	2,2
$n_p = 400$	2,1	7,0	2,8	8,2	6,8	45,1	22,4	8,7	59,4	22,2	2,1	7,0	4,5	1,7
$n_p = 1000$	1,4	3,8	1,7	4,3	11,4	61,4	15,5	5,0	65,4	20,1	1,4	3,8	3,1	1,0

Таблица 5. Доли операций $Q_1 \dots Q_7$ (в %) при использовании быстрого метода

где p — количество процессоров, s — ускорение. К примеру, если при расчете с использованием p = 64 процессоров желаемое ускорение составляет s = 32 (будем считать достаточной эффективность распараллеливания 50%), доля параллельного кода должна быть не менее f = 0,984, а с учетом неизбежных «накладных расходов» на пересылку данных и синхронизацию параллельных процессов — еще выше. Это означает, что при использовании быстрого метода (см. табл. 5) необходима разработка параллельных алгоритмов для всех семи основных операций вихревого метода.

Рассмотрим эффективность использования различных технологий параллельного программирования.

5.1. Использование технологии OpenMP

Разработка параллельных реализаций операций вихревого метода с использованием технологии OpenMP является, по-видимому, наименее трудоемкой. При помощи директивы **#pragma omp** достаточно лишь обозначить задачи, выполняемые параллельно, и при необходимости указать соответствующие опции, а организация управления потоками и работы с ними определяются самой технологией.

Результаты вычислительных экспериментов показывают, что ускорение выполнения операций в алгоритме вихревого метода оказывается практически линейным, что напрямую связано с низкой интенсивностью обменов данными; несколько меньшее ускорение, что вполне ожидаемо, наблюдается в отношении операции 3 решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Здесь наиболее эффективными оказываются так называемые «блочные» алгоритмы [16], предполагающие выполнение LU-разложения матрицы системы и последующее решение двух линейных систем с треугольными матрицами.

Очевидным недостатком реализации, основанной на данной технологии, является ограниченность числа доступных процессорных ядер. Тем не менее, они чрезвычайно эффективны при проведении вычислений на персональных ЭВМ, поскольку при небольших значениях n, n_p и N (в терминах рассмотренных задач) задачи аэрогидродинамики и гидроупругости могут быть решены вихревыми методами на ПЭВМ за приемлемое время.

5.2. Использование технологии МРІ

Именно использование технологии MPI дает возможность проведения расчетов на кластерных системах. Поскольку характерной особенностью вихревых методов, как и многих других методов частиц, является возможность независимой обработки отдельных ВЭ или их групп, при распараллеливании вычислений наблюдается низкая интенсивность межпроцессорных обменов. Это позволяет сравнительно легко разработать эффективные параллельные алгоритмы реализации всех операций алгоритма. Для «медленного» метода при сравнительно малом количестве ВЭ особенности MPI-реализации наиболее трудоемких операций описаны в [9]. Для быстрого метода принцип организации параллельных вычислений остается тем же, однако разделение задачи на подзадачи производится не по обрабатываемым ВЭ, а по вершинам дерева нижнего уровня (с учетом числа ВЭ в них).

Для решения СЛАУ (операция 3) могут использоваться либо упомянутые выше «блочные» алгоритмы [16], либо высокооптимизированные внешние библиотеки (ScaLAPACK, PETS). Эффективная параллельная реализация алгоритма решения СЛАУ исключительно важна; к примеру, в рассмотренной тестовой задаче 2 доля вычислений, приходящихся на эту операцию, при больших значениях n_p доходит до 60% (см. табл. 5).

Результаты расчетов показывают, что масштабируемость алгоритма, основанного на использовании быстрого метода, несколько уступает масштабируемости «медленного» метода, однако при проведении расчета на 64 ядрах удается достичь ускорения в 25–30 раз.

5.3. Использование технологии NVidia CUDA

Высокая эффективность использования вычислительных возможностей современных видеоускорителей может быть достигнута только за счет глубокой переработки имеющихся программ; по сути — разработки новых алгоритмов, учитывающих особенности архитектуры видеоускорителей. Применительно к вихревым методам такая реализация разработана авторами [17], однако она позволяет решать ограниченный класс задач — расчет обтекания неподвижных недеформируемых профилей, при этом быстрый метод расчета вихревого влияния не используется. Результаты вычислительных экспериментов показывают, что данная реализация обеспечивает достаточно высокую скорость расчета: при решении тестовой задачи Блазиуса о моделировании обтекания тонкой пластинки потоком вязкой жидкости (n = 2576, $N \approx 43\,000$) ускорение по сравнению с последовательным «медленным» кодом составляет до 135 раз, по сравнению с последовательным «быстрым» кодом — более, чем 12 раз. Расчеты проводились на графических ускорителях Tesla C2050 и GeForce GTX 970.

6. Заключение

В работе построены оценки вычислительной сложности алгоритма метода вихревых элементов, основанного на использовании быстрых методов расчета вихревого влияния. Показано, что в зависимости от постановки задачи, сложность отдельных операций может существенно различаться. Данные оценки дают возможность оптимального выбора параметров алгоритма вихревого метода и позволили осуществить эффективную программную реализацию с использованием различных технологий параллельного программирования.

Литература

- 1. Андронов П.Р., Гувернюк С.В., Дынникова Г.Я. Вихревые методы расчета нестационарных гидродинамических нагрузок. М.: Изд-во Моск. ун-та, 2006. 184 с.
- 2. Белоцерковский С.М., Котовский В.Н., Ништ М.И., Федоров Р.М. Математическое моделирование плоскопараллельного отрывного обтекания тел. М.: Наука, 1988. 231 с.
- 3. Гувернюк С.В., Дынникова Г.Я. Моделирование обтекания колеблющегося профиля методом вязких вихревых доменов // Известия РАН. МЖГ. 2007. № 1. С. 3–14.
- Moreva V.S., Marchevsky I.K. Vortex element method for 2D flow simulation with tangent velocity components on airfoil surface // ECCOMAS 2012 — European Congr. on Comp. Meth. in Appl. Sciences and Eng. Vienna, 2012. E-Book Full Papers. Pp. 5952–5965.
- Kuzmina K.S., Marchevsky I.K. The modified numerical scheme for 2D flow-structure interaction simulation using meshless vortex element method // PARTICLES 2015 — IV Int. Conf. on Particle-based Meth. Barcelona, 2015. E-Book Full Papers. Pp. 680–691.

- 6. Paidoussis M.P., Price S.J., de Langre E. Fluid-Structure Interactions: Cross-Flow-Induced Instabilities. Cambridge University Press, 2010. 414 p.
- 7. Bearman P.W., Zdravkovich M.M. Flow around a circular cylinder near a plane boundary // Journal of Fluid Mechanics. 1978. Vol. 89, Part 1. Pp. 33–47.
- Lei C., Cheng L., Kavanagh K. Re-examination of the effect of a plane boundary on force and vortex shedding of a circular cylinder // Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 1999. Vol. 80, No. 3. Pp. 263–286.
- 9. Марчевский И.К., Морева В.С. Параллельный программный комплекс POLARA для моделирования обтекания профилей и исследования расчетных схем метода вихревых элементов // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2012): Труды международной научной конференции (Новосибирск, 26–30 марта 2012 г.). Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2012. С. 236–247.
- 10. Гергель В.П. Высокопроизводительные вычисления для многопроцессорных многоядерных систем. М.: Изд-во Моск. ун-та, 2010. 544 с.
- 11. Barnes J., Hut P. A hierarchical $O(N\log N)$ force-calculation algorithm // Nature. 1986. Vol. 324, No. 4. Pp. 446–449.
- Дынникова Г.Я. Использование быстрого метода решения «задачи N тел» при вихревом моделировании течений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2009. Т. 49, № 8. С. 1458–1465.
- Grama A., Sarin V., Sameh A. Improving Error Bounds for Multipole-Based Treecodes // SIAM J. Sci. Comp. 2000. Vol. 21. Pp. 1790–1803.
- 14. Кузьмина К.С., Марчевский И.К. Оценка трудоемкости быстрого метода расчета вихревого влияния в методе вихревых элементов // Наука и образование: электронное научно-техническое издание. 2013. № 10. С. 399–414.
- 15. Кузьмина К.С., Марчевский И.К. Об оценках вычислительной сложности и погрешности быстрого алгоритма в методе вихревых элементов // Труды Института системного программирования РАН. 2016. Т. 28. № 1. В печати.
- 16. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. М.: Мир, 2001. 430 с.
- 17. Гречкин-Погребняков С.Р., Кузьмина К.С., Марчевский И.К. О реализации вихревых методов моделирования двумерных течений среды с использованием технологии CUDA // Вычислительные методы и программирование. 2015. Т. 16. С. 165–176.

An Effective Software Implementation of Vortex Element Method for 2D Flow Simulation

K.S. Kuzmina, I.K. Marchevsky

Bauman Moscow State Technical University

The basic idea of the vortex methods of computational fluid dynamics is to describe flow motion through the movement of separate vortex elements, which simulate vorticity distribution. Implementations which are based on approximate algorithms usage for vortex influence calculating provide the highest computing performance. Computational complexity estimation is built for such algorithms. This estimation allows to choice the optimal parameters of the algorithm and to construct its efficient parallel implementation. The parallel algorithms are developed for all basic operations, the possibility of various programming technologies application is considered.

Keywords: vortex element method, Biot – Savart law, viscous flow, diffusive velocity, Barnes–Hut simulation, fast method, computational complexity, error estimation, parallel computations.

References

- Andronov P.R., Guverniuk S.V., Dynnikova G.Ya. Vihrevye metody rascheta nestacionarnyh gidrodinamicheskih nagruzok [Vortex Methods of Calculation of Unsteady Hydrodynamic Loads]. Moscow, Izdat. Mosk. Gos. Univ. [Publishing of the Moscow State University], 2006. 184 p.
- Belotcerkovskii S.M., Kotovskii V.N., Nisht M.I., Fedorov R.M. Matematicheskoe modelirovanie ploskoparallel'nogo otryvnogo obtekaniya tel [Mathematical Modelling of the Parallel-plane Separation Flow around Airfoil]. Moscow, Nauka [Science], 1988. 231 p.
- Guverniuk S.V., Dynnikova G.Ya. Modelirovanie obtekaniya koleblyushchegosya profilya metodom vyazkih vihrevyh domenov [Modeling of the Oscillating Profile Flow Using Viscous Vortex Domain Method] // Izvestiya RAN. MZHG [Proceedings of the Russian Academy of Sciences. Fluid mechanics]. 2007. No. 6. P. 3–14.
- Moreva V.S., Marchevsky I.K. Vortex element method for 2D flow simulation with tangent velocity components on airfoil surface // ECCOMAS 2012 — European Congr. on Comp. Meth. in Appl. Sciences and Eng. Vienna, 2012. E-Book Full Papers. Pp. 5952–5965.
- Kuzmina K.S., Marchevsky I.K. The modified numerical scheme for 2D flow-structure interaction simulation using meshless vortex element method // PARTICLES 2015 — IV Int. Conf. on Particle-based Meth. Barcelona, 2015. E-Book Full Papers. Pp. 680–691.
- 6. Paidoussis M.P., Price S.J., de Langre E. Fluid-Structure Interactions: Cross-Flow-Induced Instabilities. Cambridge University Press, 2010. 414 p.
- 7. Bearman P.W., Zdravkovich M.M. Flow around a circular cylinder near a plane boundary // Journal of Fluid Mechanics. 1978. Vol. 89, Part 1. Pp. 33–47.
- Lei C., Cheng L., Kavanagh K. Re-examination of the effect of a plane boundary on force and vortex shedding of a circular cylinder // Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 1999. Vol. 80, No. 3. Pp. 263–286.
- 9. Marchevsky I.K., Moreva V.S. Parallel'nyj programmnyj kompleks POLARA dlya modelirovaniya obtekaniya profilej i issledovaniya raschetnyh skhem metoda vihrevyh

ehlementov [The Parallel Software Package POLARA for Profile Flow Modelling and Studying of the Computational Scheme of the Vortex Element Method]. Parallelnye vychislitelnye tekhnologii (PaVT'2012): Trudy mezhdunarodnoj nauchnoj konferentsii (Novosibirsk, 26–30 marta 2012) [Parallel Computational Technologies (PCT'2012): Proceedings of the International Scientific Conference (Novosibirsk, Russia, March, 26–30, 2012)]. Chelyabinsk, Izdat. Izdat. Yuzhno-Ural'skogo Gos. Univ. [Publishing of the South Ural State University], 2012. P. 236–247.

- Gergel V.P. Vysokoproizvoditel'nye vychisleniya dlya mnogoprocessornyh mnogoyadernyh sistem [High Performance Computations for Multiprocessor Multicore Systems]. Moscow, Izdat. Mosk. Gos. Univ. [Publishing of the Moscow State University], 2010. 544 p.
- 11. Barnes J., Hut P. A hierarchical $O(N\log N)$ force-calculation algorithm // Nature. 1986. Vol. 324, No. 4. Pp. 446–449.
- Dynnikova G.Ya. Fast technique for solving the N-body problem in flow simulation by vortex methods // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2009. Vol. 49. Pp. 1389–1396.
- Grama A., Sarin V., Sameh A. Improving Error Bounds for Multipole-Based Treecodes // SIAM J. Sci. Comp. 2000. Vol. 21. Pp. 1790–1803.
- 14. Kuzmina K.S., Marchevsky I.K. Ocenka trudoemkosti bystrogo metoda rascheta vihrevogo vliyaniya v metode vihrevyh ehlementov [Estimation of Computational Complexity of the Fast Numerical Algorithm for Vortex Influence Calculating in the Vortex Element Method] // Nauka i obrazovanie: ehlektronnoe nauchno-tekhnicheskoe izdanie [Science and Education: Electronic Scientific and Technical Publication]. 2013. No. 10. Pp. 399–414.
- 15. Kuzmina K.S., Marchevsky I.K. Ob ocenkah vychislitel'noj slozhnosti i pogreshnosti bystrogo algoritma v metode vihrevyh ehlementov [On Estimation of Computation Complexity and Error of Fast Algorithm in Vortex Element Method] // Trudy Instituta sistemnogo programmirovaniya RAN [Proceedings of Institute of system programming of the Russian Academy of Sciences]. 2016. Vol. 28. No. 1. In press.
- 16. Demmel J. Applied Numerical Linear Algebra. SIAM Publishing, 1997. 416 p.
- 17. Grechkin-Pogrebniakov S.R., Kuzmina K.S., Marchevsky I.K. O realizacii vihrevyh metodov modelirovaniya dvumernyh techenij sredy s ispol'zovaniem tekhnologii CUDA [On Implementation of Vortex Methods for 2D Flow Simulation using CUDA Technology] // Vychislitel'nye metody i programmirovanie [Numerical Methods and Programming]. 2015. Vol. 16. Pp. 165–176.