ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА ЧАСТИЦ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГИДРОДИНАМИКИ СО СВОБОДНЫМИ ГРАНИЦАМИ

В.В. Малышенко

Кемеровский государственный университет

Развитие компьютерной техники и технологий, ориентированное на создание суперкомпьютеров, кластерных установок, увеличение производительности, объема оперативной памяти и размера дисковых массивов, позволяет использовать ресурсоемкие численные методы для решения задач в полной нелинейной постановке. К данному классу методов относятся разновидности методов частиц: Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method, Mixed Fixed Element Method (MFEM), MeshFree Method, метод свободно-лагранжевых частиц [1]. «Методами частиц» называются методы, использующие представление жидкости в виде набора материальных точек и решающие гидродинамические задачи, сопровождающиеся сильными нелинейными эффектами, значительными деформациями свободной границы, например, взаимодействие солитона с подводным уступом, накат уединенной волны на пологий берег, взаимодействие солитона с частично погруженным в жидкость телом. Использование частиц, не связанных сеткой, позволяет численно моделировать задачи гидродинамики со свободными границами, в которых происходит изменение связности области во время расчета, например в результате обрушения уединенной волны на береговую зону.

Методы частиц относятся к классу ресурсоемких методов, так как область течения жидкости представляется в виде набора материальных точек. Для каждой точки помимо пространственных координат необходимо хранить и другие характеристики: скорость, плотность, давление и т.д. Моделирование, например, нестационарной задачи о движении двух солитонов требует задания протяженного бассейна для изучения эффектов взаимодействия. В таких задачах количество частиц не менее 30–50 тысяч, это требует несколько гигабайт оперативной памяти. Время расчета одного шага по времени требует 1–4 мин. процессорного времени (Pentium IV 2,4 GHz). Поэтому необходимо использовать параллельные реализации методов частиц на суперкомпьютерах и кластерных установках.

Распараллеливание метода свободно-лагранжевых частиц [1] позволит эффективно и быстро решать задачи гидродинамики со свободными границами. В статье рассматривается решение нестационарной задачи о схло-

пывании выемки на свободной поверхности. Нестационарные задачи о схлопывании выемки на свободной поверхности всегда были объектом пристального внимания исследователей в силу того, что в процессе схлопывания образуется кумулятивная струя жидкости, обладающая высокой скоростью и сложной геометрией, вследствие чего данное явление становится трудным для математического моделирования. При решении задачи методами граничных элементов (МГЭ) и методами конечных элементов (МКЭ) невозможно производить исследование при отрыве от кумулятивной струйки капель жидкости и при обрушении волн, образующихся у основания выплеска, т.к. происходит изменение связности области расчета [2].

Постановка задачи

Рассмотрим движение идеальной несжимаемой жидкости в области V (рис. 1), ограниченной свободной поверхностью C_1 с полукруговой выемкой радиуса R, твердыми стенками и дном C_2, расположенным на глубине H.

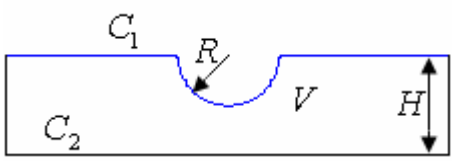


Рис. 1. Схема начальной геометрии области

В области V решается уравнение Эйлера:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \frac{\vec{F}}{r},\ r \in V. \qquad (1)$$

Поле перемещений $\frac{d\vec{r}}{dt}$ определяется следующим образом:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{u},\ r \in V. \qquad (2)$$

Условие несжимаемости жидкости и условие непротекания на твердых стенках выписывается в виде

$$div\vec{u} = 0,\ r \in V. \qquad (3)$$

$$u_n = 0,\ r \in C_2, \qquad (4)$$

где n – внешняя нормаль к границе жидкости. Так как задача нестационарная, то требуется задание начального положения частиц жидкости и поля скоростей во всей области течения. Начальное поле скоростей $\vec{u}_0 = (u_0, v_0)$:

$$\begin{cases} u_0 = 0, \\ v_0 = 0. \end{cases}$$

От дифференциальной постановки задачи перейдем к вариационной постановке. Согласно принципу наименьшего принуждения Гаусса в каждый момент времени t жидкость будет двигаться так, чтобы минимизировать функционал:

$$S = \frac{1}{2}\int_V r(\dot{u} - \frac{F}{r})^2 dr \to \min, \tag{5}$$

$$div u = 0, \tag{6}$$

$$u_n|_{C_2} = 0. \tag{7}$$

Аппроксимируем объем V конечной системой материальных частиц с координатами r_k, массами m_k и скоростями u_k, $k = 1,K,N$. Обозначим шаг по времени t, $r_k^n = r_k(nt)$, $u_k^n = u_k(nt)$. Непрерывную задачу (5)–(7) аппроксимируем конечномерной задачей, которая имеет вид

$$S^n = \frac{1}{2}\sum_k m_k(\frac{\varphi_k - u_k^n}{t} - g)^2 \to \min,$$

$$div\varphi = 0, \tag{8}$$

$$\varphi_n|_{C_2} = 0,$$

где $\varphi_k = \varphi(r_k^{n+1})$, φ принадлежит некоторому конечномерному пространству H гладких соленоидальных функций. Для построения полностью консервативной схемы второго порядка аппроксимации по t, вводим предиктор

$$r_k^{n+1/2} = r_k^n + \frac{t}{2}u_k^n. \tag{9}$$

Тогда на шаге $n + \frac{1}{2}$ функционал будет иметь вид

$$S^{n+1/2} = \sum_k m_k(\frac{\varphi(r_k^{n+1/2}) - u_k^n}{t/2} - g)^2 \to \min, \tag{10}$$

а скорость и координаты точки на $n + 1$ шаге находятся по соответствующим формулам:

$$u_k^{n+1} = 2\varphi(r_k^{n+1/2}) - u_k^n,$$

$$r_k^{n+1} = r_k^n + t\varphi(r_r^{n+1/2}). \tag{11}$$

Разложим φ по базису пространства H

$$\varphi(r) = \sum_j b_j v_j(r). \tag{12}$$

Тогда, варьируя (10), получаем:

$$\sum_k m_k(\varphi_k - u_k^n - \frac{t}{2}g)v_i(r_k^{n+1/2}) = 0, i = 1K\,m, \tag{13}$$

где $\varphi_k = \varphi(r_k^{n+1/2})$.

Из (12), (13) получается система линейных уравнений относительно коэффициентов разложения b_j:

$$\sum_j a_{ij} b_j = \sum_k m_k (u_k^n + \frac{t}{2} g) v_i(r_k^{n+1/2}), \qquad (14)$$

где $a_{ij} = \sum_k m_k v_i(r_k^{n+1/2}) v_j(r_k^{n+1/2})$. Матрица a_{ij} является матрицей Грамма. Ее невырожденность при достаточно большом числе частиц обеспечивается линейной независимостью функций v_i.

Таким образом, один шаг по времени выглядит следующим образом. После предиктора (9) вычисляем матрицу и правую часть системы (14), решаем ее, из (10) находим гладкое поле θ, и, наконец, находим новые координаты и скорости частиц.

Построение базисных функций на основе кубического B-сплайна

Пусть на отрезке $[a,b]$ задано разбиение $\Delta x : a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{m_x} = b$. Для построения кубического B-сплайна дополним сетку Δx узлами $x_{-3} < x_{-2} < x_{-1} < a$, $b < x_{m_x+1} < x_{m_x+2} < x_{m_x+3}$.

B-сплайн произвольной размерности задается рекуррентным соотношением, которое имеет следующий вид [6]:

$$B_i^0 = \begin{cases} 1, x \in [x_{i-1}, x_i], \\ 0, x \notin [x_{i-1}, x_i], \end{cases}$$

$$B_n^i(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+n} - x_i} B_{n-1}^i(x) + \frac{x_{i+n+1} - x}{x_{i+n+1} - x_{i+1}} B_{n-1}^{i+1}(x).$$

Построим кубический B-сплайн, отличный от нуля, на интервале $(x_{i-2}; x_{i+2})$. В приложениях B-сплайны нечетных степеней удобно нумеровать по среднему узлу их интервалов-носителей. Искомый B-сплайн будем обозначать через $B_i(x)$ вместо $B_3^{i-2}(x)$. При решении задач гидродинамики в пространстве R^2 необходимо построение кубического B-сплайна по координате y, которое задается аналогичным образом.

Теперь построим базисные функции на основе B-сплайнов. В методе частиц базисные функции для решения задач гидродинамики со свободными границами имеют следующий вид:

$$v_{ij}(x,y) = rot(0,0,B_i(x)B_j(y)) = (\frac{dB_j(y)}{dy} B_i(x), -\frac{dB_i(x)}{dx} B_j(y), 0).$$

Базисная функция $v_{ij}(x,y)$ на основе B-сплайнов имеет ненулевое значение только в области $(x_{i-2}; x_{i+2}) \times (y_{j-2}; y_{j+2})$. Пусть эта область называется *основанием*.

Базисные функции такого вида удовлетворяют условию несжимаемости жидкости для функции скорости частиц.

Формирование матрицы Грамма

Эта матрица имеет некоторые особенности. Во-первых, при вычислениях она получается блочная, то есть только некоторые блоки матрицы имеют ненулевые элементы. Для удобства указания свойств матрицы Грамма в индексах базисной функции $v_{ij}(x,y)$ перейдем от двойного индекса ij к одинарному $-$ i, взаимнооднозначным соответствием $f : i * m_y + j \to i$.

Матрица $\{a_{ij}\}$, задаваемая по формуле $a_{ij} = \sum_k m_k v_i(r_k^{n+1/2}) v_j(r_k^{n+1/2})$, является матрицей Грамма. Если основания базисных функций v_i и v_j не пересекаются, то элемент a_{ij} будет заведомо нулевым, он так же будет нулевым, если в области пересечения оснований этих функций нет частиц. Тогда, если предопределять эти моменты, не будет необходимости в прямых вычислениях, что уменьшит количество операций, приходящихся на одну итерацию. Так же матрица $\{a_{ij}\}$ будет симметричной, так как элементы a_{ij} и a_{ji} будут вычисляться по тем же базисным функциям, причем положение частиц при этом не изменится.

Распараллеливание алгоритма метода частиц

Представление жидкости в виде набора частиц сопряжено с рядом проблем:

– количество частиц, аппроксимирующих объем жидкости в реальных расчетах составляет не менее 20–40 тыс. частиц;

– количество базисных функций – не менее 1000.

Эти ограничения накладывают определенные условия на используемые вычислители: не менее 512 Мбайт оперативной памяти и не менее 1 ГГц – тактовая частота процессора, но при таких условиях расчет задачи для данного, наперед заданного набора параметров происходит довольно долго – порядка 10 – 20 ч.

Поэтому целесообразно распараллелить данный численный алгоритм и в дальнейшем производить расчеты на суперкомпьютерах и кластерах. В качестве языка программирования выбран Фортран, параллельный интерфейс: MPI (Message Passing Interface) – интерфейс передачи сообщений, вычислительный ресурс – многопроцессорный гетерогенный вычислительный кластер, созданный на базе учебных компьютерных классов, производительностью 5 GFlops.

Анализ численного алгоритма показывает, что наиболее затратными по времени и ресурсоемкими по оперативной памяти являются следующие блоки: формирование матрицы и решение СЛАУ. На основе подходов к распараллеливанию, описанных в работе [3], данные блоки, занимающие

99% времени расчета, было принято решение распараллелить, а остальные изменить с учетом специфики параллельного программирования и необходимости синхронизации данных. Для решения СЛАУ используются разработанные и описанные в работе [4] параллельные алгоритмы численных методов решения СЛАУ.

Распараллеливание дополнительного блока вычисления дополнительной матрицы

Матрица $Mv\left(i,r_k\right)$, содержащая значения базисных функций в точках $v_i\left(r_k^{n+1/2}\right)$, разбивается на np равных частей по числу процессоров, на которых запускается параллельное приложение.

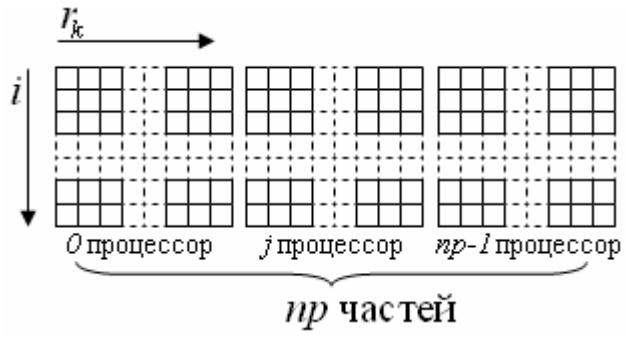


Рис. 2. Блочное разбиение матрицы $Mv\left(i,r_k\right)$ по процессорам

Нулевой процессор вычисляет значение 16 базисных функций $i = 1,\text{K},16$ в точках $r_k, k = 1,\text{K},\frac{N}{np}$, второй – в точках $r_k, k = \frac{N}{np} + 1,\text{K},2?\frac{N}{np}$ и т.д., последний – в точках $r_k, k = \frac{N}{np}?(np - 1) + 1,\text{K},\frac{N}{np}$. После вычисления производится пересылка полученных данных между процессорами. Данное разбиение матрицы $Mv(i,r_k)$ позволяет увеличить скорость вычисления почти в np раз.

Распараллеливание блока формирования матрицы A и вектора правой b части производилось с учетом того, что система линейных алгебраических уравнений $Ab = f$ решается параллельным методом Гаусса с выбором ведущего элемента и того, что язык программирования Фортран хранит матрицы по столбцам. Поэтому процессор p_i формирует свой блок столбцов $a_{ij}, i = 1 + id?\frac{m}{np}, (id + 1)?\frac{m}{np}, j = 1,m$. Это позволяет, не производя пересылок между процессорами, перейти к решению СЛАУ методом Гаусса с выбором ведущего элемента.

Тестирование численного алгоритма

Для тестирования метода была выбрана задача Овсянникова о деформации жидкого эллипса [5]. Данная задача принадлежит к классу задач со свободными границами. Задача формулируется следующим образом: в начальный момент времени область расчета представляет собой круг радиуса 1, в который заключена несжимаемая жидкость. Деформация круга в эллипс начинается под действием начального распределения скоростей в отсутствие внешних сил. Для обеспечения несжимаемости необходимо, чтобы площадь эллипса оставалась постоянной, т.е. $ab = 1$ во все время расчета, где a, b – полуоси эллипса.

Начальное поле скоростей следующее:

$$\begin{cases} u_0 = a'(0)/a(0)\,x, \\ v_0 = -a'(0)/a(0)\,y. \end{cases}$$

С ростом t круг деформируется в эллипс $\frac{x^2}{a^2(t)} + a^2(t)y^2 = 1$, большая полуось которого $a(t) \to \infty$, а малая $\frac{1}{a(t)} \to 0$ при $t \to \infty$.

Коэффициент $a(t)$ находится из решения задачи

$$\begin{cases} \left(a^4(t)+1\right)a(t)a''(t) = 2\left(a'(t)\right)^2, \\ a(0) = 1, \\ a'(0) = 1. \end{cases} \qquad (15)$$

Обыкновенное дифференциальное уравнение (15) второго порядка было решено методом Рунге–Кутта–Фельберга с точностью $O\left(t^4\right)$. Полученные значения $a(t)$ при $t \in [0;6,5]$ использовались для построения свободной границы жидкого эллипса и сравнения с численными расчетами.

Задача решалась только в верхней полуплоскости ввиду симметрии. Количество жидких частиц равно $N = 1700$, шаг сетки, в узлах которой были помещены частицы, $h = 0,05$, количество базисных функций – $m = 300$, шаг разбиения сеток Δx и Δy – $h = 0,2$. В расчете использовались базисные функции вида: $v_i(x,y) = rot(0,0,B_i(x)B_j(y)(y^3 + y^2 + y))$.

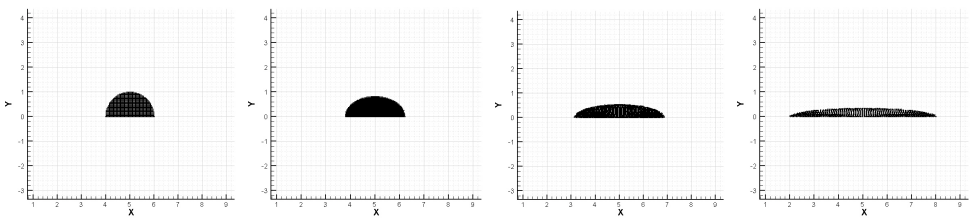


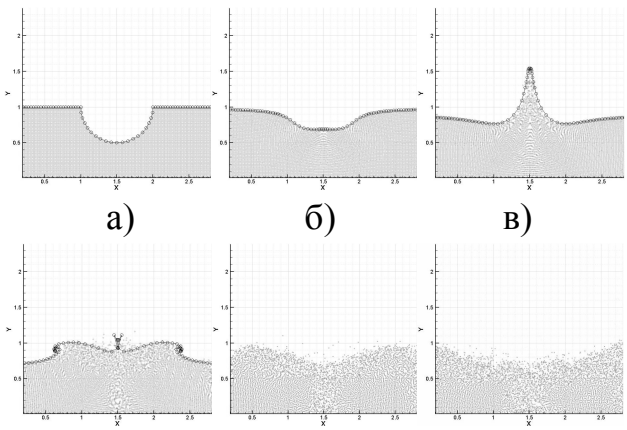
Рис. 3. Распределение жидких частиц в моменты времени $t = 0$ с, $t = 0,3$ с, $t = 0,9$ с и $t = 1,2$ с соответственно

Расчеты производились до времени $t = 6,5$ с, что составляет более 1000 итерационных шагов. Относительная погрешность отклонения $a(t)$ не превысила 1%. При этом абсолютная погрешность кинетической энергии равна 0,0024, а относительная – $5,41 * 10^{-8}$ процента. Выполненные расчеты показывают высокую точность полученного решения. На рис. 3 приведены результаты расчета задачи Овсянникова, при заданном начальном распределении скорости $\vec{v}_0 = (u_0, v_0) = (x, -y)$.

Решение задачи об эволюции полукруговой выемки

Количество жидких частиц равно $N = 6512$, шаг сетки, в узлах которой были помещены частицы, $h = 0,05$, количество базисных функций – $m = 60 ? 35 = 2100$, шаг разбиения сеток Dx и Dy – $h = 0,2$. В расчете использовались базисные функции, основанные на кубических B-сплайнах [6], вида: $v_{ij}(x,y) = rot(0,0,B_i(x)gB_j(y)g(y^3 + y^2 + y))$.

Для подтверждения достоверности результатов расчета, представленного на рис. 4, приведено сравнение полученных форм свободной поверхности с результатами, полученными при решении данной задачи методом граничных элементов [1], для соответствующих моментов времени. Глубина бассейна выбиралась равной $H = 2R$.



а) б) в)

г) д) е)

Рис. 4. Положение свободной границы и распределение жидких частиц в моменты времени $t = 0,0c$ $t = 0,5$ с, $t = 1,0$ с, $t = 2,0$ с, $t = 2,5$ с и $t = 3,0$ с соответственно

На рис. 4, а–г черным цветом показано положение свободной границы, полученной при решении поставленной задачи методом граничных элементов, серым цветом – положение частиц, полученных в результате решения задачи представленным методом. Сравнение показало количест-

венное и качественное совпадение результатов данной работы и работы [2]. Однако в связи с возникающими перехлестами свободной границы и образованием многосвязности расчетной области провести расчет МГЭ далее не удается. Метод частиц не критичен к указанным проблемам и позволяет провести расчет далее (после возникающих обрушений) – рис. 4, д, е.

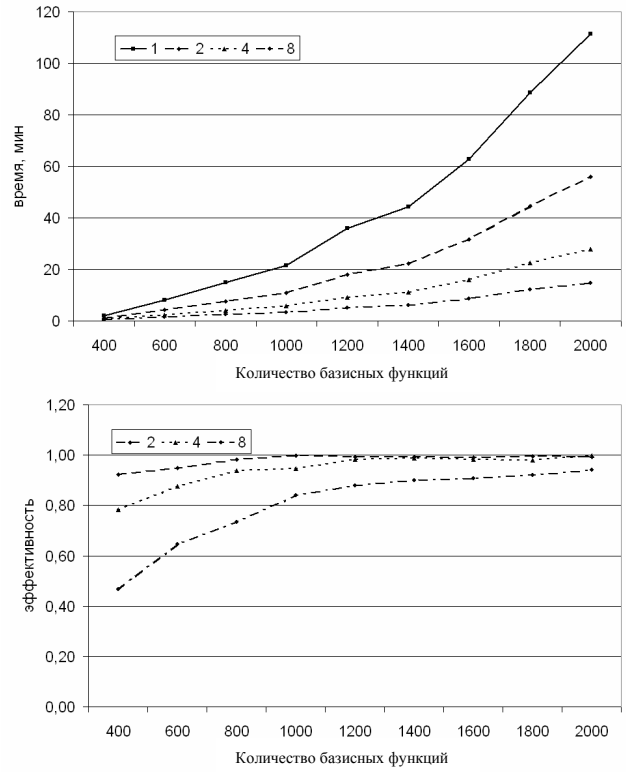


Рис. 5. Время и ускорение расчета параллельного алгоритма в зависимости от количества базисных функций

Решение задач гидродинамики со свободными границами параллельным методом частиц позволяет сократить время вычисления в среднем в 9 раз на 10 процессорах (рис. 5). Высокая степень параллелизма численного алгоритма позволяет эффективно проводить расчеты как на кластерах с низкой латентностью сетью, так и на кластере с сетевой инфраструктурой FastEthernet. Созданный параллельный программный комплекс в дальнейшем будет использоваться при решении задач взаимодействия поверхностных волн жидкости с препятствиями.

Литература

1. Франк А.М. Дискретные модели несжимаемой жидкости. – М.:Физматлит, 2001. – 181 с.
2. Afanas’ev K.E., Korotkov G.G. The development of a semi-circular cavity on the free surface in both plane and axisymmetrical cases // The Interna-

tional Summer Scientific School «High Speed Hydrodynamics», June 2002, Cheboksary. – P. 219–225.

3. Афанасьев К.Е., Стуколов С.В. КМГЭ для решения плоских задач гидродинамики и его реализация на параллельных компьютерах: Учебное пособие. – Кемерово: КемГУ, 2001. – 208 с.
4. Афанасьев К.Е., Домрачев В.Г., Ретинская И.В. и др. Многопроцессорные системы: построение, развитие, обучение / Под ред. А.Н. Тихонова. – М.: КУДИЦ-ОБРАЗ, 2005. – 224 с.
5. Овсянников Л.В. Общие уравнения и примеры: Задачи о неустановившемся движении жидкости со свободной границей. – Новосибирск: Наука, 1967. – С. 5–75.
6. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. – М.: Наука, 1980. – 352 с.