

КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЙ ВЯЗКОГО ГАЗА НА СОВРЕМЕННЫХ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

ЕВГЕНИЙ В. ШИЛЬНИКОВ*

* Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
Москва, Россия
e-mail: shiva@imamod.ru

Ключевые слова: Газовая динамика, кинетические схемы, устойчивость явных схем, графические ускорители, гибридная архитектура ЭВМ

Аннотация. В работе рассматривается логически простой алгоритм на основе явных разностных схем для численного моделирования газодинамических течений в широком диапазоне чисел Маха. В качестве исходной математической модели используется гиперболический вариант квазигазодинамической системы. Для повышения устойчивости явных схем для параболических уравнений и систем предложен физически обоснованный метод релаксации потоков. Численные эксперименты, проведенные на гибридном вычислительном кластере K-100, продемонстрировали эффективность данного алгоритма.

1 ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в России и за рубежом существуют вычислительные системы производительностью свыше 1 PTFLOPS. Это открывает новые большие возможности в математическом моделировании, позволяя моделировать сложные процессы как можно ближе к их реальному протеканию. В первую очередь это относится к междисциплинарным промышленным приложениям, которые требуют высокой точности решения в связи с оптимизацией технологических процессов. Однако, число задач, использующих свыше 100 TFLOPS или более 10000 ядер на один расчет, невелико. Это связано отнюдь не с отсутствием задач, требующих для своего решения использования всех доступных вычислительных мощностей. Напротив, таких задач множество, причем многие из них очень актуальны. Это явление носит объективный и фундаментальный характер. Проблема связана с необходимостью использования для высокопроизводительных параллельных вычислений алгоритмов, хорошо адаптирующихся к быстро меняющейся архитектуре современных вычислительных систем. Опыт показывает, что такие алгоритмы должны быть логически простыми и в то же время эффективными. Ситуация только обостряется в случае использования гибридных вычислительных систем. Данные системы, где в качестве вычислителей, кроме универсальных процессоров, используются графические платы, становятся одним из основных направлений развития вычислительной техники.

На решение этой проблемы, как показывают публикации и материалы последних международных конференций, направлены усилия ученых и специалистов развитых

стран. Одним из направлений создания логически простых и эффективных алгоритмов является использование кинетических моделей для решения задач механики сплошных сред. Как показывает опыт применения Lattice Boltzmann Schemes (LBS) и оригинальных кинетических схем, разрабатываемых в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, эти алгоритмы хорошо адаптируются к архитектуре современных вычислительных систем сверхвысокой производительности. Использование таких вычислительных систем для математического моделирования требует разработки специального математического обеспечения, учитывающего гибридную структуру памяти: распределенную между процессорами и общую для ядер одного процессора. В этом смысле очень привлекательными оказываются явные схемы, которые легко адаптируются к различной архитектуре ЭВМ и позволяют эффективно использовать вычислительные системы, содержащие 10^3 - 10^4 ядер. Однако явные схемы, ренессанс интереса к которым наблюдается в последние годы, накладывают жесткое ограничение на шаг по времени, связанное с требованием устойчивости, особенно при решении уравнений и систем параболического типа. В связи с этим перспективным направлением является разработка явных схем с как можно более мягким условием устойчивости. В данной статье описывается использование явных разностных схем на базе квазигазодинамической (КГД) системы уравнений для моделирования проблем газовой и гидродинамики, при расчетах на гибридных вычислительных системах, наиболее мощных в настоящее время.

2 КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКАЯ СИСТЕМА И КИНЕТИЧЕСКИЕ СХЕМЫ

Направление, связанное с кинетическими алгоритмами, является одним из наиболее актуальных в современных высокопроизводительных вычислениях. Так приблизительно треть докладов на конференции Parallel CFD (Барселона – 2011) была посвящена применению LBS в высокопроизводительных вычислениях, а половина докладов была связана с использованием гибридных вычислительных систем. Приблизительно такая же картина наблюдается и на других конференциях по этой тематике. В последние десятилетия в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН интенсивно ведут работы в направлении разработки кинетических подходов, позволяющих моделировать задачи гидро- и газовой динамики на многопроцессорных вычислительных системах различной архитектуры. Эти работы начались в 90-х годах с расчетов на транспьютерах, затем продолжились с использованием однородных кластеров. В настоящее время основные усилия сосредоточены на адаптации алгоритмов к гибридной архитектуре современных суперкомпьютеров. Следует отметить, что кинетические схемы (КС) были предложены раньше LBS и имеют перед ними ряд преимуществ за счет использования оригинальной КГД системы, которую можно трактовать, как дифференциальное приближение как для КС, так и для LBS.

Для трехмерного течения идеального политропного газа КГД система уравнений, записанная в стандартных обозначениях в прямоугольных декартовых координатах с учетом внешней силы \mathbf{F} , согласно [1], [2] в консервативной форме имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_i + \frac{\partial}{\partial x_j} j_{mj} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} p = \rho_* F_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ji}, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E + \frac{\partial}{\partial x_j} j_{mj} \left(\frac{E+p}{\rho} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} q_j = j_{mj} F_j + \frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ji} u_i. \quad (2.3)$$

Здесь и далее по повторяющимся индексам подразумевается суммирование, $E = \rho(\mathbf{u}^2/2 + \varepsilon)$ – полная энергия. Поток массы задается как

$$j_{mi} = \rho(u_i - w_i), \quad w_i = \frac{\tau}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_j u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} p \right). \quad (2.4)$$

Тензор вязких напряжений Π , тепловой поток q и соотношения, замыкающие систему, определяются следующими соотношениями:

$$\Pi_{ij} = \Pi_{ij}^{NS} + \tau \rho u_i \left(u_k \frac{\partial}{\partial x_k} u_j + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} p \right) + \tau \delta_{ij} \left(u_k \frac{\partial}{\partial x_k} p + \gamma p \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right), \quad (2.5)$$

$$\Pi_{ij}^{NS} = +\mu \left(\frac{\partial}{\partial x_i} u_j + \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right), \quad (2.6)$$

$$q_i = q_i^{NS} - \tau \rho u_i u_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \varepsilon + p \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{1}{\rho} \right), \quad q_i^{NS} = -\kappa \frac{\partial}{\partial x_i} T, \quad (2.7)$$

$$p = \rho \varepsilon (\gamma - 1), \quad T = \frac{p}{\rho R}, \quad \rho_* = \rho - \tau \frac{\partial}{\partial x_k} \rho u_k. \quad (2.8)$$

Динамическая вязкость μ , коэффициент теплопроводности κ и релаксационный параметр τ , имеющий размерность времени, имеют следующий вид

$$\mu = \mu_\infty \left(\frac{T}{T_\infty} \right)^\omega, \quad \kappa = \mu \frac{\gamma R}{(\gamma - 1) \text{Pr}}, \quad \tau = \frac{\mu}{p \text{Sc}}, \quad (2.9)$$

где γ – показатель адиабаты, Pr и Sc – числа Прандтля и Шмидта соответственно. Заметим, что диссипативные слагаемые, образующие КГД добавки, пропорциональные τ , обращаются в нуль в областях течения, где решение удовлетворяет стационарным уравнениям Эйлера. Различные способы вывода КГД системы уравнений, а также большое количество задач, решенных с применением этой системы можно найти в [1 – 3].

Конечно-разностная аппроксимация системы (2.1) – (2.3) строится на основе метода контрольных объемов. Все газодинамические параметры относятся к центрам

ячеек разностной сетки, а в качестве контрольного объема берется сама ячейка. Интегрируя уравнения (2.1) – (2.3) по объему ячейки, мы получаем законы сохранения в интегральной форме. При этом изменение газодинамических параметров в ячейке определяется суммой потоков консервативных переменных (плотности ρ , импульса ρu и полной энергии E) через все ее грани. Для аппроксимации пространственных производных, входящих в выражения для потоков, используются центральные разности, а значения газодинамических переменных в центрах граней вычисляются с помощью линейной интерполяции. Для обеспечения устойчивости счета по явной схеме к релаксационному параметру τ в (2.9) добавляется слагаемое, пропорциональное шагу пространственной сетки

$$\tau = \frac{\mu}{\rho S c} + \alpha \frac{h}{c}, \quad (2.10)$$

где c – локальная скорость звука, $h = \sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \Delta x_3^2}$, $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3$ – шаги прямоугольной пространственной сетки, α – числовой параметр порядка единицы, подбираемый экспериментально.

Можно показать [1], что если истинные вязкие члены малы по сравнению с конвективными, то дополнительные члены дискретного происхождения в (2.1) – (2.3) играют роль искусственной вязкости, используемой при решении уравнений Эйлера для идеального газа. Если же истинные вязкие члены одного порядка с конвективными, то члены сеточного происхождения малы по сравнению с теми и другими. Таким образом, при разумной дискретизации (например, достаточное число узлов поперек пограничного слоя) они не искажают картину течения, но выполняют функцию регуляризаторов численного решения. Успешный опыт использования кинетических схем для решения широкого спектра задач гидро- и газовой динамики показывает, что они описывают вязкие теплопроводные течения так же хорошо, как и система уравнений Навье-Стокса в области применимости последней.

В [3], [4] было показано, что при численном моделировании невязких течений, когда все диссипативные члены в системе (2.1) – (2.3) являются искусственными регуляризаторами, условие устойчивости явной схемы для этой системы имеет Курантовский вид (i – номер ячейки пространственной сетки):

$$\Delta t = \beta \cdot \min_i \frac{h_i}{c_i + |u_i|}. \quad (2.11)$$

При этом максимальная величина коэффициента β , допустимого из требования устойчивости, сильно зависит от параметра α в (2.10) и практически не зависит от шага по пространству. Опыт моделирования течений вязкого газа по описанной схеме показывает, что в случае сверх- и трансзвуковых течений условие устойчивости оказывается таким же. Эта ситуация сохраняется и для не слишком медленных дозвуковых течений (числа Маха $Ma > 0.1$). Однако, при дальнейшем уменьшении числа Маха ситуация меняется: максимально допустимый коэффициент β начинает уменьшаться при уменьшении шага пространственной сетки. При очень низких скоростях течения ($Ma \leq 0.01$) зависимость $\beta(h)$ становится практически линейной, и условие устойчивости приобретает вид $\Delta t \sim h^2$, характерный для уравнений и систем

параболического типа. Этот эффект вполне естественен, поскольку в [5] показано, что КГД система имеет параболический тип. Однако, такое жесткое условие устойчивости неприемлемо для расчетов на современных суперкомпьютерах, поскольку в случае использования очень подробных сеток (ради чего, собственно, эти компьютеры и применяют) допустимый шаг по времени оказывается настолько малым, что время счета становится необозримым. С другой стороны, Курантовское условие, характерное для гиперболических уравнений не является таким серьезным ограничением. Это связано с тем, что добиваясь высокого разрешения по пространству путем использования подробной сетки, мы должны иметь соответствующее разрешение по времени. Поэтому соотношение $\Delta t \sim h$ представляется вполне естественным. Разумеется, это не относится к задачам на установление, когда сам процесс выхода на стационар нас не интересует. В данной работе речь идет только о существенно нестационарных процессах. Таким образом, мы оказываемся перед необходимостью находить пути повышения устойчивости явных разностных схем для параболических уравнений и систем.

3 МЕТОД ПОВЫШЕНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ ЯВНОЙ СХЕМЫ

Попробуем разобраться, почему так катастрофически различаются свойства параболических и гиперболических уравнений. Является ли это различие чисто математическим эффектом или у него есть более глубокие физические причины? Еще в середине прошлого века физики обратили внимание на абсолютно нефизичное свойство уравнения теплопроводности, основанного на законе Фурье для теплового потока: бесконечная скорость распространения возмущений. Оно практически не сказывается, когда исследуются квазистационарные процессы без больших перепадов температур (на базе таких экспериментов и был, собственно, получен закон Фурье). Однако, при исследовании быстро протекающих процессов с большими градиентами температур, таких, как течения разреженных газов, низкотемпературный теплоперенос в твердых телах, электронная теплопроводность в плазме и др. этот факт приводит к явному расхождению с экспериментальными данными. В этих случаях закон Фурье может давать физически абсолютно невозможные значения числового потока, и необходимо учитывать конечность скорости распространения возмущений. Чтобы избежать этого и обеспечить конечную скорость распространения возмущений, было предложено гиперболическое уравнение теплопроводности [6], [7].

$$\frac{\partial}{\partial t} T + \nabla q = 0, \quad \tau \frac{\partial}{\partial t} q = q_F - q, \quad q_F = -\kappa \nabla T. \quad (3.1)$$

Здесь q_F – поток тепла, определяемый законом Фурье, q – действительный тепловой поток, τ – время релаксации теплового потока. Система (3.1) – это система гиперболического типа, следовательно, она обеспечивает конечную «скорость звука» и при правильном подборе времени релаксации не допускает возникновения нефизичных значений теплового потока. Физический смысл члена $\tau \frac{\partial}{\partial t} q$, а с ним и параметра τ можно пояснить следующим образом: В соответствии с (3.1) поток тепла не может, в

отличие от классического уравнения теплопроводности, мгновенно достичь значения, определяемого законом Фурье. Он стремится к нему, стартуя со значения в предыдущий момент времени с характерным временем релаксации τ . При малых по сравнению с характерным временем протекания процесса значениях τ можно пренебречь левой частью второго из уравнений (3.1), и мы получим привычное уравнение теплопроводности, поскольку в этом случае $q = q_F$.

Отметим, что упомянутый выше дефект свойственен всем параболическим уравнениям, поэтому к использованию их для описания нестационарных физических процессов следует подходить весьма осторожно. Представляется, что вообще никакой физической процесс не может быть в полном объеме адекватно описан параболическим уравнением, поскольку бесконечная скорость распространения возмущений в природе невозможна.

Рассмотрим явную разностную схему для системы (3.1), построенную стандартным способом:

$$T_i^{j+1} = T_i^j + \frac{\Delta t}{h} (q_{i+1/2}^{j+1} - q_{i-1/2}^{j+1}), \quad q_{F,i+1/2} = k \left(\frac{T_{i+1}^j + T_i^j}{2} \right) \cdot \frac{T_{i+1}^j - T_i^j}{h}. \quad (3.2)$$

Второе из уравнений этой системы – линейное ОДУ, и его решение на интервале времени (t^j, t^{j+1}) можно выписать явно:

$$q^{j+1} = q^j D + q_F (1 - D), \quad D = \exp(-\Delta t / \tau), \quad \Delta t = t^{j+1} - t^j. \quad (3.3)$$

Условие устойчивости для этой схемы имеет Курантовский вид $\Delta t \sim h$, поскольку рассматриваемая система является гиперболической. В связи с этим возникает идея использовать схему (3.2) – (3.3) для решения обычного параболического уравнения теплопроводности и тогда, когда релаксация потока не требуется из физических соображений. В этом случае параметр релаксации можно использовать как регуляризатор, повышающий устойчивость разностной схемы. Естественно, он должен быть достаточно малым, чтобы не вносить больших искажений в решение задачи. Такой подход был проверен на решении одномерной начально-краевой задачи для квазилинейного уравнения теплопроводности:

$$\frac{\partial}{\partial t} T = \nabla T^2 \nabla T, \quad T(x, 0) = 1, \quad T(0, t) = 10, \quad T(5, t) = 1. \quad (3.4)$$

Решение такой задачи представляет собой тепловую волну, распространяющуюся вправо от начала координат. Были проведены расчеты на различных пространственных сетках с различными шагами по времени по схеме (3.2) – (3.3). Результаты сравнивались с результатами расчетов по явной схеме с центральными разностями для параболического уравнения [8]. На Рис. 1 представлена зависимость получаемого решения задачи (3.4) от релаксационного параметра τ . При достаточно больших значениях релаксационного параметра решение заметно отличается от классического. Так при $\tau = 4 \cdot 10^{-3}$ формируется структура, похожая на ударную волну в газовой динамике. С уменьшением τ деформация решения также уменьшается, и при $\tau = 1.5 \cdot 10^{-3}$ решение по схеме (3.2) – (3.3) практически совпадает с решением

параболического уравнения.

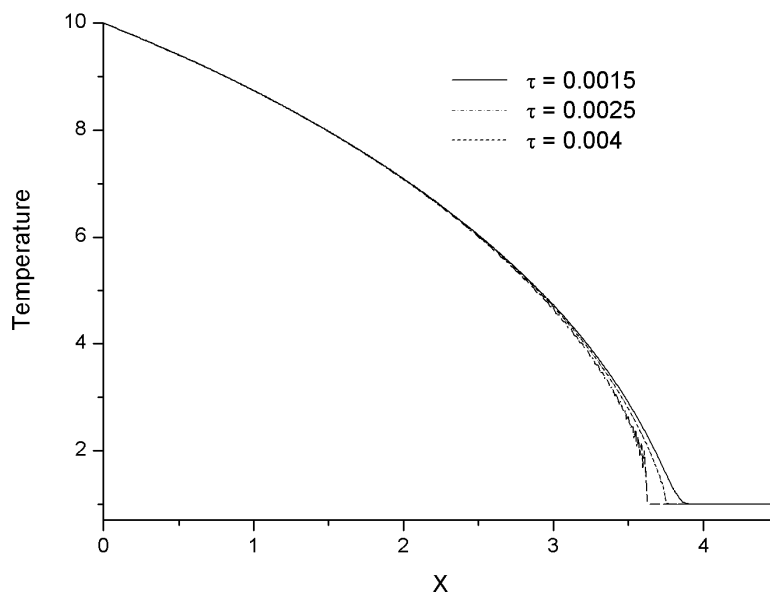


Рис. 1: Решение задачи (3.4) на пространственной сетке $h = 0.01$ при различных параметрах релаксации.

Таким образом, хотя релаксация потока позволяет существенно увеличить шаг по времени, требование точности накладывает ограничение сверху на величину релаксационного параметра. Были проведены расчеты на различных пространственных сетках с целью определения максимального значения параметра τ , обеспечивающего близость получаемого решения к решению параболического уравнения с точностью до 2-3%. Результаты этих расчетов собраны в Табл.1.

h	$\Delta t, 1$	$\Delta t, 2$	τ_{opt}
0.05	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$2.3 \cdot 10^{-4}$	0.0015
0.025	$3.2 \cdot 10^{-6}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.002
0.01	$5.1 \cdot 10^{-7}$	$3.7 \cdot 10^{-5}$	0.0016
0.005	$1.2 \cdot 10^{-7}$	$1.9 \cdot 10^{-5}$	0.0019

Таблица 1 : Сравнение максимально допустимого шага по времени для параболического ($\Delta t, 1$) и гиперболического ($\Delta t, 2$) уравнений; τ_{opt} – оптимальное значение параметра релаксации потока.

Легко убедиться, что для схемы (3.2) – (3.3) шаг по времени действительно пропорционален шагу пространственной сетки, т.е. мы добились Курантовского условия устойчивости при решении уравнения теплопроводности по явной схеме. Оптимальный параметр τ_{opt} , при котором получается практически не искаженное решение, очень слабо зависит от шага пространственной сетки.

4 ПРИМЕНЕНИЕ РЕЛАКСАЦИИ ПОТОКОВ К КГД СИСТЕМЕ

Как было отмечено выше, условие (2.11) не обеспечивает устойчивого счета при моделировании с помощью КГД системы уравнений существенно дозвуковых течений слабосжимаемого газа. Применим метод релаксации потоков к системе (2.1) – (2.3). Введя релаксационный параметр τ_f , преобразуем эту систему к следующему виду:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} = \nabla \mathbf{F}, \quad \tau_f \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{F} = \mathbf{F}_{QGD} - \mathbf{F}. \quad (4.1)$$

Здесь $\mathbf{U} = (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, E)^T$, $E = \rho(\mathbf{u}^2 / 2 + \varepsilon)$ – полная энергия, \mathbf{F}_{QGD} – потоки консервативных переменных, соответствующие системе (2.1) – (2.3). Используя параметр τ_f в качестве регуляризатора, мы можем повысить устойчивость явной схемы для моделирования низкомаховых течений. Как и в случае решения уравнения теплопроводности, величина параметра релаксации ограничивается требованием точности получаемого таким образом решения.

При построении разностной схемы для гиперболической системы (4.1) используем ту же пространственную аппроксимацию потоков \mathbf{F}_{QGD} , как и для системы (2.1) – (2.3), предложенную в [2]. Переход на новый временной слой осуществляется в следующем порядке. Сначала по значениям газодинамических величин в момент времени t^j вычисляются потоки \mathbf{F}_{QGD} для уравнений, описывающих изменение скалярных переменных. Затем в соответствии формулой, аналогичной (3.3) находим новые значения потоков этих переменных \mathbf{F}^{j+1} . Используя простейшую аппроксимацию по времени первого уравнения (4.1), $\mathbf{U}^{j+1} = \mathbf{U}^j + \Delta t \cdot \nabla \mathbf{F}^{j+1}$, вычисляем новые значения плотности и энергии. После этого та же процедура производится с уравнением импульса, причем потоки \mathbf{F}_{QGD} для этого уравнения вычисляются по вновь полученным значениям ρ^{j+1} и ε^{j+1} . Переход на слой t^{j+1} завершается вычислением новых значений скоростей \mathbf{u}^{j+1} .

Построенная таким образом разностная схема была применена к решению задачи о циркуляционном течении в плоской квадратной каверне с движущейся верхней крышкой, которая является хорошо изученным тестом [9], [10]. Практически все численные методы для решения уравнений Навье – Стокса были протестированы на этой задаче, и на ней по существу можно проиллюстрировать всю историю развития вычислительной аэродинамики. Как правило, рассматривалось течение несжимаемой жидкости. Однако, при небольших скоростях течения газа ($Ma \leq 0.1$) сжимаемость оказывается очень малой (изменения плотности не превосходят долей процента), и картина течения практически не отличается от картины течения жидкости. При невысоких числах Рейнольдса (в данной работе бралось $Re = 100$) вязкие эффекты преобладают над всеми остальными, и их влияние распространяется на всю область течения. Сначала образуется большой вихрь, охватывающий практически всю каверну, позже формируются небольшие вторичные вихри в нижних углах каверны, сначала в наветренном, потом – в подветренном. В конце концов, через некоторое время, определяемое числом Маха, в каверне устанавливается стационарное течение.

Были выполнены расчеты описанной задачи при числах Маха $Ma = 0.05$ и $Ma = 0.1$. Для расчета использовались явные кинетические схемы, аппроксимирующие системы

(2.1) – (2.3) и (4.1) на ортогональной равномерной по каждому направлению сетке. При расчетах на различных пространственных сетках определялся максимально допустимый с точки зрения устойчивости коэффициент β_{\max} (число Куранта в (2.11)) для каждой схемы. Следует отметить, что сравнивались получаемые стационарные решения, а добавление нестационарных членов, связанных с релаксацией потоков, может повлиять только на процесс установления, а не на установившееся течение, поэтому в данной задаче отсутствовало ограничение на параметр релаксации, связанное с точностью. Результаты этих исследований для варианта $Ma = 0.05$ представлены на Рис. 2.

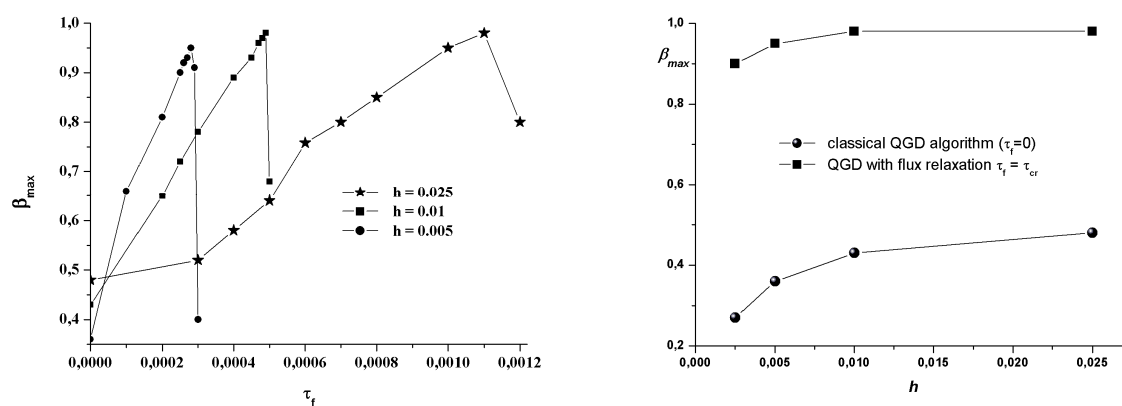


Рис. 2: Зависимость максимально допустимого числа Куранта от параметра релаксации (слева) и от шага пространственной сетки (справа).

Видно, что для классической схемы β_{\max} оказывается существенно меньше и убывает с дроблением шага быстрее, чем для модифицированной, для которой он практически не зависит от h . Таким образом, условие устойчивости остается Курантовским и для очень медленного течения. При этом оптимальное значение параметра релаксации оказывается пропорциональным шагу по времени.

При расчетах варианта с $Ma = 0.1$ результаты оказались аналогичными: для оптимального значения τ_f число Куранта близко к единице, а само это оптимальное значение примерно вдвое больше, чем при $Ma = 0.05$. В Табл. 2 представлены оптимальные значения τ_f и соответствующих величин β_{\max} , полученные при расчетах с различными числами Маха на различных пространственных сетках. Анализируя эти результаты, можно отметить, что оптимальное значение τ_f близко к произведению числа Маха на шаг пространственной сетки $Ma \cdot h$, т.е. параметр релаксации потоков должен быть порядка шага по времени. С физической точки зрения такой вывод представляется вполне естественным.

Эта же задача была решена и в трехмерной постановке для случая $Ma = 0.1$ на различных пространственных сетках. Зависимость β_{\max} от τ_f для трехмерных расчетов представлена на Рис. 3. В этой постановке максимально допустимые число Куранта оказались несколько меньше, чем в 2D случае, однако зависимости остались прежними.

		$Ma = 0.05$	$Ma = 0.1$
$h = 0.025$	τ_f	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$2.2 \cdot 10^{-3}$
	β_{\max}	0.98	0.99
$h = 0.01$	τ_f	$4.9 \cdot 10^{-4}$	$9.8 \cdot 10^{-4}$
	β_{\max}	0.98	0.95
$h = 0.005$	τ_f	$2.8 \cdot 10^{-4}$	$5.9 \cdot 10^{-4}$
	β_{\max}	0.95	0.94
$h = 0.0025$	τ_f	$1.62 \cdot 10^{-4}$	$3.4 \cdot 10^{-4}$
	β_{\max}	0.88	0.89
$h = 0.00125$	τ_f	$1.09 \cdot 10^{-4}$	
	β_{\max}	0.82	

Таблица 2 :Сравнение оптимальных параметров релаксации и чисел Куранта.

Отметим, что установившиеся распределения газодинамических величин и структура течения во всех вариантах расчета оказываются практически одинаковыми и совпадают с результатами других авторов. Естественное различие – лучшее разрешение вторичных вихрей в углах каверны на более подробных пространственных сетках.

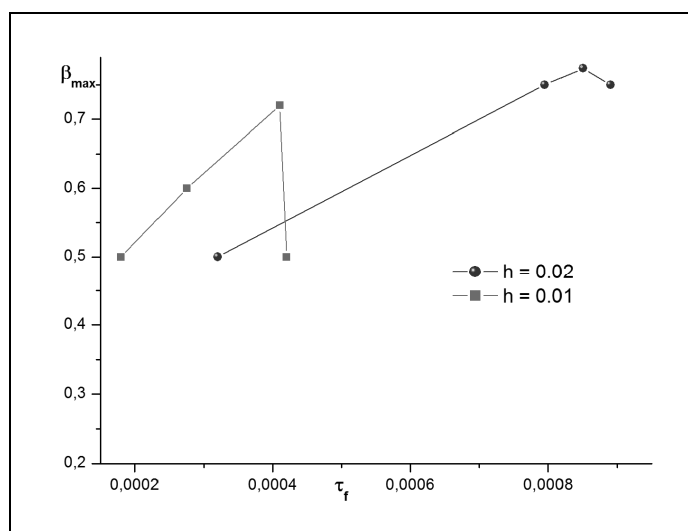


Рис. 3: Числа Куранта для 3D расчета.

4 ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ

Расчеты проводились на гибридном суперкомпьютере К-100, установленном в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Он состоит из 64 узлов, каждый из которых включает в себя два 6-ядерных процессора Intel Xeon (2.93 GHz) и 3 графических платы NVidia Fermi C2050 каждая с 448 CUDA ядрами. Узлы соединены посредством 8 высокоскоростных

каналов связи PCI-Express, см. Рис. 4.

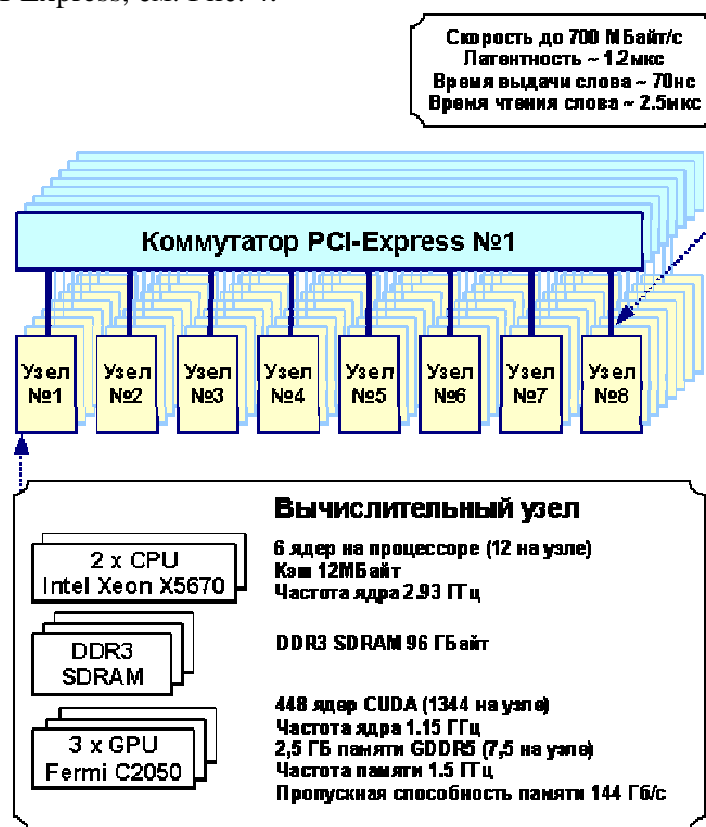


Рис. 4: Структурная схема вычислительного кластера K-100.

GPU с архитектурой CUDA (Compute Unified Device Architecture) состоит из собственной глобальной памяти и набора потоковых мультипроцессоров (Streaming Multiprocessors - SMs). Мультипроцессор содержит восемь скалярных процессорных ядер (Scalar Processor - SP), двух устройств специальных функций, устройства многопоточных инструкций и сверхбыстрой общей памяти (shared memory). Архитектура графических плат CUDA имеет очень малое ядро параллелизма и таким образом прекрасно подходит для реализации явных разностных методов. Построим работу таким образом, чтобы каждый CUDA поток обрабатывал свою ячейку разностной сетки. А точнее, разобьем вычисления на несколько ядер (функций выполняемых на графическом ускорителе), часть из которых будет вычислять потоки через грани ячейки сетки, а другая часть газодинамические величины в ячейке. Каждый CUDA поток в ядре будет обрабатывать совою грань или свою ячейку соответственно.

Исследование ускорения и масштабируемости проводились на решении 3D задачи на сетке, состоящей из 27 блоков, каждый из которых содержал по $50 \times 50 \times 50$ расчетных ячеек. Общее количество ячеек составило более 3 миллионов. Первая серия расчетов проводилась только на CPU, те вычислительная система использовалась, как однородный кластер. В этом случае ускорение практически линейно зависит от количества используемых процессоров, что естественно для многопроцессорных расчетов по явным схемам. Результаты представлены в Табл. 3 (в скобках указано

число используемых узлов K-100).

Число используемых CPU и узлов	1 (1)	3 (1)	9 (2)	27 (6)
время	358,34	117,98	41,36	13,93
ускорение	1,00	3,04	8,66	25,72
эффективность	100,00%	101,24%	96,27%	95,28%

Таблица 3 : Ускорение и эффективность при расчетах на CPU.

Следующая серия расчетов, результаты которой приведены в Табл. 4, проводилась только на графических платах. Эффективность параллельной реализации в этом случае оказалась несколько ниже, чем для CPU, однако, легко заметить, что GPU работает примерно в 12 раз быстрее, чем универсальный процессор. В связи с этим представляется бессмысленным использовать в одном расчете одновременно и универсальные процессоры и графические платы, поскольку это сильно усложнит программу и затруднит балансировку загрузки, а выигрыш во времени счета оказывается слишком мал.

Число используемых CPU и узлов	1 (1)	3 (1)	9 (3)	27 (9)
время	27,90	9,88	3,58	1,35
ускорение	1,00	2,82	7,79	20,67
эффективность	100,00%	94,13%	86,59%	76,54%

Таблица 4 : Ускорение и эффективность при расчетах на GPU.

Расчеты на пространственной сетке в 3 раза меньшей по каждому направлению продемонстрировали несколько меньшие ускорения, что связано, по-видимому, с недостаточным количеством вычислительной работы, приходящейся на каждое ядро. С другой стороны, суперкомпьютеры и не предназначены для расчетов на маленьких сетках. Преимущество же графических плат над универсальными процессорами сохранилось и в этом случае.

4 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вычислительные системы на основе существенно многоядерных процессоров с различной архитектурой является перспективным направлением развития высокопроизводительных систем. Система K-100 является реальным воплощением этой тенденции. Возможность эффективного использования этой системы проверена на решении целого ряда задач. Эффективность использования многоядерных систем, в том числе, на основе графических плат NVidia, во многом зависит от свойств

применяемых вычислительных алгоритмов. Они, с одной стороны, должны быть логически простыми, а с другой – достаточно эффективными. Этим жестким требованиям удовлетворяют алгоритмы, опирающиеся на использование гиперболического варианта квазигазодинамической системы.

Описанный в данной работе метод релаксации потоков позволяет добиться мягкого практически Курантовского условия устойчивости для явных схем для параболических уравнений, в том числе и для моделирования медленных течений слабосжимаемого газа. Это открывает широкие перспективы для численного моделирования реальных научных и инженерных задач с использованием явных схем, легко реализуемых на современных высокопроизводительных вычислительных системах с различной (особенно гибридной) архитектурой.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты №№ 11-07-00779, 12-01-00556 и 12-01-00769

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Четверушкин Б.Н. *Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений*. М.: Макс Пресс, (2004).
- [2] Елизарова Т.Г. *Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений*. М.: Научный мир, (2007).
- [3] Шеретов Ю.В. *Математическое моделирование течений жидкости и газа на основе квазигидродинамических и квазигазодинамических уравнений*. Тверь, Тверской Гос. Ун-т, (2000).
- [4] T.G. Elizarova and E.V. Shilnikov, “Numerical Analysis of a Quasi_Gasdynamics Algorithm as Applied to the Euler Equations”, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **49**(11), 1869-1884 (2009).
- [5] A. A. Zlotnik and B. N. Chetverushkin, “Parabolicity of the Quasi-Gasdynamics System of Equations, Its Hyperbolic Second-Order Modification, and the Stability of Small Perturbations for Them”, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **48**(3), 420-446 (2008).
- [6] А.В. Лыков, *Тепло- и массоперенос*, Энергиya, Moscow, (1972).
- [7] Голант В.Е., Жилинский А.П., Сахаров И.Е., *Основы физики плазмы*. М.: Атомиздат, (1977).
- [8] А.А. Самарский. *Теория разностных схем*. М.:Наука, (1989).
- [9] Роч П. *Вычислительная гидродинамика*. М.: Мир, (1980).
- [10] Белов И.А., Исаев С.А., Коробков В.А. *Задачи и методы расчета отрывных течений несжимаемой жидкости*. Л.: Судостроение, (1989).