

ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ РАСЧЕТА СТРУЙНЫХ ТЕЧЕНИЙ*

1. Введение

Данная работа посвящена реализации использованных ранее методов численного решения задач газовой динамики для широкого класса вычислительных многопроцессорных систем, условно называемых «кластерными». В этих системах для распараллеливания прикладных алгоритмов между процессорами используется стандартный интерфейс обмена данными – MPI (Message Passing Interface.) Данный подход используется во всех современных наиболее мощных вычислительных комплексах, включающих от нескольких десятков до нескольких тысяч процессоров. В качестве примера расчета выбрана задача численного моделирования двух взаимодействующих струй, истекающих в область низкого давления.

Необходимость изучения струй, истекающих в область низкого давления, называемых недорасширенными, возникает при решении целого ряда практических задач, в том числе связанных с проектированием и использованием разнообразных высотных летательных аппаратов. При этом естественным является сочетание натурного и численного эксперимента, что позволяет всесторонне исследовать изучаемое явление (e.g. [1] – [3]).

Особенностями рассматриваемых течений является значительных перепад плотности и давления от среза сопла к периферии струи и соответственно существенное изменение геометрических масштабов струи – от нескольких миллиметров у среза сопла до метров вдали от него. Моделирование таких процессов представляет собой трехмерную по пространству задачу, трудоемкость которой требует использования высокопроизводительных вычислительных систем.

Конечно-разностный алгоритм расчета построен на основе квазигазодинамических (КГД) уравнений (e.g. [4]–[6]). Примеры расчета струйных течений на основе КГД уравнений приведены в работах [7], [8]. Некоторые алгоритмы распараллеливания разностных схем для КГД уравнений, реализованные на транспьютерных вычислительных комплексах, описаны в [9].

В данной работе вычисления проводились на вычислительном комплексе МВС–1000М, расположенном в межведомственном суперкомпьютерном центре РАН. Использовалась конфигурация, содержащая от 1 до 24 вычислительных узлов с процессорами ALPHA–21264–667 МГц, со-

* Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 01–01–00061.

единенных высокопроизводительной коммуникационной сетью MYRI-NET.

2. Математическая модель и постановка задачи

Конечно-разностный алгоритм расчета недорасширенных струй построен на основе КГД уравнений. Эти уравнения, полученные и исследованные в [4]–[6] и других работах, описывают течения вязкого теплопроводного газа и отличаются от известной системы Навье-Стокса диффузионными поправками, величина которых определяется «кинетическим» параметром τ , имеющим порядок времени свободного пробега молекулы.

Выпишем систему КГД уравнений в инвариантном относительно системы координат виде (в обычных обозначениях):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i \rho u^i = \nabla_i \tau (\nabla_j \rho u^i u^j + \nabla^i p). \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \nabla_i \tau (\nabla^i p u^k + \nabla^k p u^i) + \nabla^k \tau \nabla_i p u^i \\ & \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i \rho u^i u^k + \nabla^k p = \nabla_i \tau \nabla_j \rho u^i u^j u^k + \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E + \nabla_i u^i (E + p) = \nabla_i \tau (\nabla_j (E + 2p) u^i u^j + \frac{1}{2} \nabla^i u_k u^k p) + \quad (3)$$

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} \nabla_i \tau \frac{p}{\rho} \nabla^i p + \text{Pr}^{-1} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \nabla_i \tau p \nabla^i \frac{p}{\rho}.$$

Здесь γ – постоянная адиабаты, Pr – число Прандтля, $E = \rho u^i u^i / 2 + p / (\gamma - 1)$ – удельная полная энергия; $\tau = \mu / p$ – максвелловское время релаксации, μ – коэффициент динамической вязкости, вычисляемый как

$$\mu = \mu_{\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^\omega. \quad (4)$$

Уравнение состояния записывается в виде $p = \rho(R/M)T$.

На основе этой математической модели разработаны и реализованы конечно-разностные алгоритмы, показавшие высокую эффективность при моделировании течений разреженного газа ([5], [7]). В данной работе описывается реализация одного из таких алгоритмов на многопроцессорных системах. Сначала изложим этот алгоритм (в дальнейшем называемый исходным).

Запишем (1)–(3) в декартовых XYZ -координатах в безразмерном виде, причем в качестве размерных параметров используем значения длины свободного пробега λ_e , плотности и скорости звука на срезе сопла, и до-

полным начальными и граничными условиями, определяемыми физической постановкой задачи (см. ниже).

Рассмотрим трехмерную пространственную область в виде параллелепипеда, определяемую в декартовых координатах выражениями

$$0 \leq x \leq L_x; \quad -L_y \leq y \leq L_y; \quad -L_z \leq z \leq L_z,$$

заполненную газом. В плоскости $x = 0$ находятся срезы сопел, через которые втекают струи того же газа, с другими, вообще говоря, параметрами. Требуется определить стационарное поле течения при фиксированных параметрах на срезах сопел.

Для поиска стационарного решения поставленной начально-краевой задачи используем метод установления. В области (5) введем, вообще говоря, неравномерную сетку, ячейки которой представляют собой прямоугольные параллелепипеды с осями, параллельными осям X, Y, Z .

Запишем аппроксимирующую макроскопические уравнения и граничные условия явную разностную схему, построенную на центральных разностях, второго порядка по пространству (в случае равномерной сетки) и первого по времени.

Поскольку дополнительные диссипативные члены, входящие в КГД уравнения в отсутствующие в традиционных уравнениях НС, играют роль регуляризирующих добавок, можно использовать центрально-разностную аппроксимацию второго порядка точности для всех пространственных производных, включая конвективные слагаемые. Дополнительно к этим регуляризирующим добавкам в схему добавляется искусственная диссипация, способ введения которой для двумерных течений приведен в [5].

Полученную явную разностную схему реализуем в виде четырех вложенных циклов: внешнего по времени и внутренних по x, y и z . Цикл по времени продолжается до тех пор, пока величина

$$\sum (\rho_{j+1} - \rho_j) / (\rho \cdot ht \cdot N_x \cdot N_y \cdot N_z), \quad (6)$$

называемая невязкой, не станет меньше ε , что является критерием установления стационарного решения (j – номер шага по времени, $N_{x,y,z}$ – число точек сетки по X, Y, Z соответственно, ht – шаг по времени, суммирование производится по всем точками сетки).

3. Реализация алгоритма на многопроцессорной системе

Вычислительный алгоритм организован на основе MPI – стандартного интерфейса обмена данными в многопроцессорных системах. С точки зрения программиста, использующего функции MPI, существуют N_n вычислительных узлов, каждый из которых обладает собственным процессором, оперативной памятью, а также, возможно, дисковой памя-

тью и периферией. Обмен информацией реализуется путем передачи сообщений, при этом любой узел может пересылать сообщения любому другому.

Один и тот же выполняемый файл загружается во все используемые вычислительные узлы, и создаются однотипные процессы (по принципу «одна программа – разные данные»). Посредством вызова MPI-функций в программе можно определить, на каком числе узлов выполняется программа, а также номер узла, на котором вызвана функция. Существует большое количество MPI-функций для пересылки данных, но в данной работе используются только две основные: MPI_Send и MPI_Recv. Эти функции похожи на функции Си fwrite и fread, реализующие обмен данными между оперативной и дисковой памятью.

Рассмотрим применение этих средств к рассматриваемому алгоритму. Применим принцип геометрического параллелизма: расчетная область разбивается плоскостями, параллельными плоскости YX, на части, число которых равно числу вычислительных узлов. Каждый узел осуществляет расчет одной, закрепленной за ним области, при этом алгоритм расчета аналогичен исходному однопроцессорному алгоритму. Разница заключается в том, что в случае многопроцессорного алгоритма на границах соседних областей на каждом временном шаге необходим обмен значениями в граничных плоскостях.

Один из узлов (имеющий номер 0, будем называть его глобальным, или мастером) является выделенным и осуществляет управление и синхронизацию работы других (локальных). В начале работы программы глобальный узел реализует начальные условия и пересылает соответствующие части массивов и необходимые параметры локальным узлам. После этого независимо в каждом узле запускается цикл по времени и тройной пространственный цикл, представляющие собой реализацию явной разностной схемы с центральными разностями для уравнений (1)–(3). На каждом шаге по времени происходит синхронизация работы всех узлов и обмен граничными значениями, а также пересылка управляющих сигналов. Такие операции, как сбор вычисленных значений в глобальный узел, запись результатов на диск и проверка критерия прекращения вычислений, производятся периодически (последние две операции осуществляются только на глобальном узле). Результаты представляются как в виде текстовых файлов (в формате графического пакета TECPLOT), так и в виде двоичного файла, который содержит полную информацию о текущем состоянии расчета. Воспользовавшись этим файлом, можно продолжить прерванный расчет. Вычисления продолжают до выполнения необходимого критерия (6), после чего глобальный узел передает локальным сигнал останова, происходит выдача результатов на диск, и программа завершает работу.

Обмен данными между узлами происходит в пяти ситуациях:

- пересылка начальных значений из глобального узла в локальные
- пересылка управляющих сигналов от глобального узла локальным
- обмен граничными значениями
- пересылка специальных массивов из локальных узлов в глобальный для вычисления невязки (6)
- периодическая пересылка вычисленных значений из глобальных узлов в локальный

Интересным и полезным на практике свойством алгоритма является независимость результатов расчета от количества используемых вычислительных узлов, так что это количество можно менять даже в процессе расчета, используя упомянутый двоичный файл для промежуточного сохранения данных.

Если расчет производится на одном узле, MPI-команды пересылки не используются, и алгоритм расчета аналогичен исходному алгоритму, описанному в [7].

Программа написана на языке Си, использовались трансляторы реализации MPICH (MPI Chameleon).

4. Результаты численных экспериментов

Проведено численное моделирование течения в недорасширенных струях, параметры которых соответствуют экспериментам [10] и [11]. Параметр нерасчетности p_e/p_∞ для этих вариантов $\approx 10^3$ (p_e – давление на срезе сопла, p_∞ – давление на бесконечности). Параметр Берда, характеризующий разреженность течения, превышает свое предельное значение, соответствующее течению сплошной среды

$$P = Ma \sqrt{\frac{\gamma \pi}{8}} \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial s} \sim 0.02$$

уже на расстоянии нескольких радиусов от среза сопла [8]. (Здесь s – расстояние вдоль линии тока).

В течениях с такой высокой степенью разреженности коэффициент τ , вычисленный на основе степенных соотношений для равновесного газа (4), может оказаться большим и его значение неограниченно растет с увеличением разреженности газа. Действительно,

$$\tau = \frac{\mu}{p} \sim \frac{\lambda}{a},$$

где λ – средняя длина свободного пробега частиц, которая неограниченно растет с уменьшением плотности, $a = \sqrt{\gamma(R/M)T}$ – скорость звука в газе, которая падает в процессе расширения газа в вакуум. Поэтому для адек-

ватного численного моделирования течений газа на основе КГД уравнений при достаточно больших значениях параметра Берда R величину τ следует ограничить. В приведенных расчетах значение τ вычислялась в соответствии с параметрами газа на срезе сопла, где параметру Берда мал ($\sim 10^{-4}$), и далее считалось постоянным. Согласно [7] и начальным условиям для безразмерных величин (см. ниже), безразмерное $\tau = 1.1448$.

Приведенный вариант расчета представляет собой задачу о взаимодействии двух одинаковых параллельных газодинамических струй [11]. Сопло имеет квадратное сечение со стороной D , число Кнудсена $Kn = \lambda_e/D = 4.07 \times 10^{-4}$, расстояние между осями струй $6,5D$. Поскольку рассматриваемая конфигурация имеет две плоскости симметрии, расчетная область ограничена этими плоскостями ($z = 0, y = 0$), плоскостью, на которой расположены сопла ($x = 0$), и плоскостями, соответствующие «бесконечности» ($x = L_x = 14.5D, y = L_y = 2.875D, z = L_z = 6.125D$). На плоскости ($x = 0$) расположена «половина сопла» ($0 \leq y \leq 0.5D, 2.75D \leq z \leq 3.5D$).

Начальные условия для безразмерных параметров ставятся в виде «протащенных» струй, т.е. следующим образом: в области струи ($0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq 0.5D, 2.75D \leq z \leq 3.5D$).

$$\rho = \rho_e = 1, \quad u = u_e = (Ma, 0, 0), \quad p = p_e = 1/\gamma,$$

во внешней области (остальной части расчетной области)

$$\rho = \rho_\infty = 0.000419, \quad u = u_\infty = (0, 0, 0), \quad p = p_\infty = 0.001048/\gamma.$$

Иными словами, степень нерасчетности $p_e/p_\infty \approx 10^3, T_\infty/T_e = 2.502$.

Опишем граничные условия. На плоскостях симметрии ставятся условия симметрии, т.е. равенства нулю нормальных производных всех величин, кроме нормальной составляющей скорости, которая приравнивается нулю. На плоскости ($x = 0$) ставятся условия адиабатической стенки со скольжением скорости. Эти условия фактически совпадают с условиями симметрии, поскольку для квазигазодинамических уравнений на твердой стенке естественна постановка $\partial p/\partial n = 0$ [5]. На остальных плоскостях ставятся так называемые условия сноса, т.е. равенства нулю нормальных производных всех величин.

Газ представляет собой азот ($\gamma = 1.4, \omega = 0.75, Pr = 0.737$). Число Маха $Ma = 2$. Вычислительные параметры: $\beta = 0.5$ (определяет влияние искусственной вязкости), безразмерные шаги пространственной сетки в направлениях Y и Z составляет $D/4$, в направлении x составляет $D/2$, сетка

$N_x = 30$, $N_y = 13$, $N_z = 26$, безразмерный шаг по времени $ht = 10$, параметр сходимости $\varepsilon = 10^{-10}$. Число шагов по времени $N_t = 2847$.

На рис. 1 и 2 приведены линии уровня массовой плотности, полученные при моделировании двух взаимодействующих струй. На рис. 1 показано сечение поля течения, полученное при $y = 0$, на рис. 2 приведено семейство сечений $x = \text{const}$. Величины x , y , z нормированы на размер сопла D , плотность нормирована на плотность на выходе из сопла.

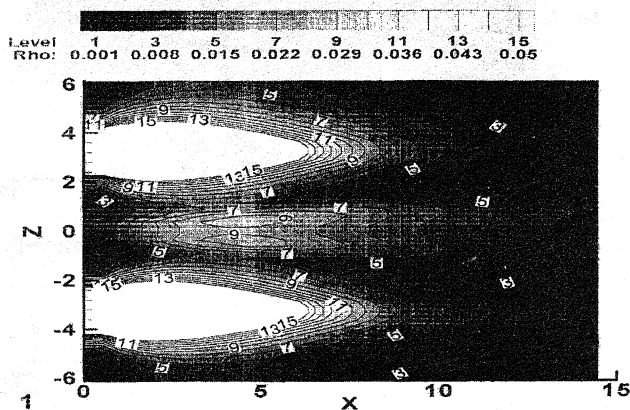


Рис. 1. Линии уровня массовой плотности в сечении $y=0$.

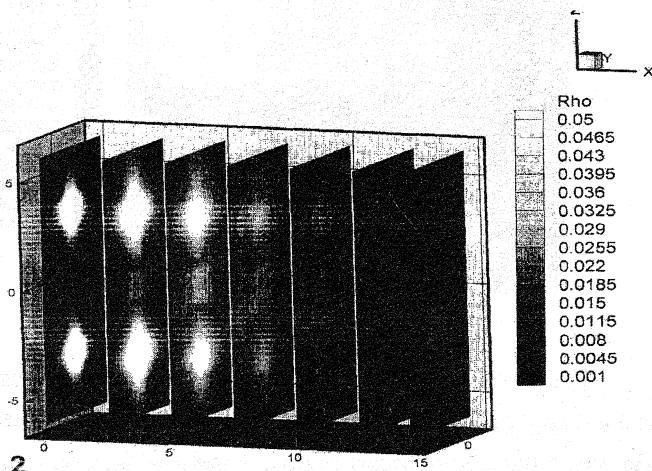


Рис. 2. Линии уровня массовой плотности в сечении $x=\text{const}$.

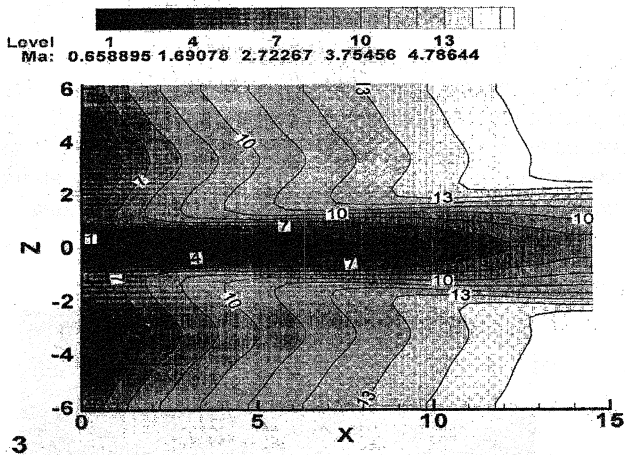


Рис. 3. Линии уровня числа Маха в сечениях $y=0$.

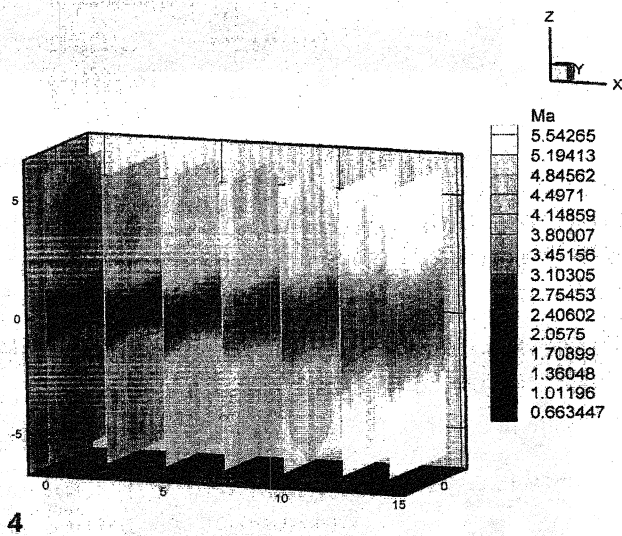


Рис. 4. Линии уровня числа Маха в сечениях $x=\text{const}$.

На рис. 3 и 4 приведены линии уровня числа Маха в тех же сечениях.

На рис. 5 приведен график прироста производительности, полученный при последовательных прогонах программы на различном числе задействованных вычислительных узлов.

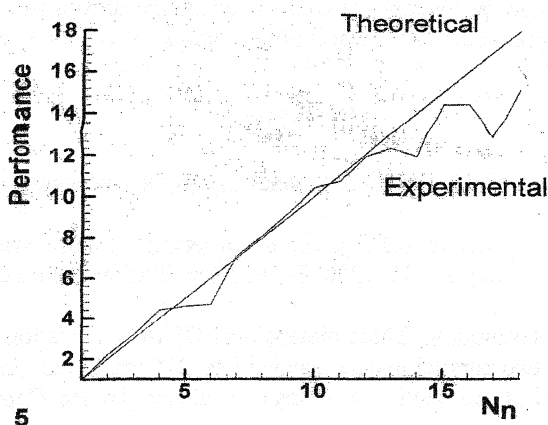


Рис. 5. Кривые прироста производительности в зависимости от числа вычислительных узлов.

Производительность рассчитывалась как $P = T_1 / T_N$, где T_N — время выполнения расчета на N_n вычислительных узлах (без учета времени записи результатов на жесткий диск, которое не зависит от N_n). Теоретически (без учета времени, затрачиваемого на межпроцессорные обмены) прирост производительности должен быть линейным ($P_{theor} = T_1 / (T_1 / N_n) = N_n$).

Реальный прирост производительности близок к линейному. Можно сделать вывод, что время, затрачиваемое на межпроцессорные обмены, мало по сравнению со временем счета, т.е. алгоритм распараллеливания оказался весьма эффективным.

Колебания кривой производительности можно объяснить следующими причинами: неравномерной загрузкой вычислительных узлов при неудачном сочетании количества точек сетки и количества вычислительных узлов, меняющейся во времени нагрузкой на вычислительную сеть, вызванную другими программами.

5. Выводы

Построен параллельный вариант ранее использованного алгоритма расчета газодинамических струй на основе квазигазодинамических уравнений. Данный алгоритм реализован на основе MPI (Message Passing Interface) — стандартного интерфейса обмена данными в многопроцессорных вычислительных системах. Проведено численное моделирование газоди-

намических течений, представляющих практический интерес. К последним относятся течения в струях при и взаимодействии между собой. Предложенный вариант распараллеливания численного алгоритма показал высокую эффективность на многопроцессорном комплексе МВС-1000М.

Литература

[1] Абрамович Г.Н. Прикладная газовая динамика. Москва, Наука, 1991.

[2] Beylich A.E. Structure and applications of jets. 21st Intern/ Symp. on RGD, Marseille, France, July 26–30, 1998. Ed. R. Brun. Toulouse, France, Cepadues, 1999.

[3] Usami M., Techima K. Three dimensional DSMC calculation of interacting flowfield in two parallel underexpanded jets. 21st Int. Symp. on RGD Marseille, France, July 26–30, 1998. Ed. R. Brun. Toulouse, France, Cepadues, 1999.

[4] Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н. Кинетические алгоритмы для расчета газодинамических течений. ЖВМиМФ, 1985, т.25, N 10, с.1526–1533.

[5] Elizarova T.G., Graur I.A., Lengrand J.C, Chpoun A. Rarefied gas flow simulation based on quasigasdynamic equations, AIAA Journal, 1995, V.33, N 12, p. 2316–2324.

[6] Шеретов Ю.В. Квазигидродинамические уравнения как модель течений сжимаемой вязкой теплопроводной среды. В сб. Применение функционального анализа в теории приближений. Тверь, Тверской Гос. Университет, 1997, с.127–155.

[7] Chirokov I.A., Graur I.A., Elizarova T.G., Lengrand J.C. Equations quasi-gazodynamiques (QCD) avec desequilibre translationnel. Application a la detente d'un jet dans le vide. Lab. d'Aérodynamique du CNRS, Meudon (Fr), R 99–1, 1999.

[8] Graur I.A., Elizarova T.G., Lengrand J.C. Numerical computation of shock wave configurations in underexpanded jets. Proc. of the 22nd Int. Symp. on Shock Waves, London, 1999, p. 3820.

[9] Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н. Применение многопроцессорных транспьютерных систем для решения задач математической физики, Журнал Математическое моделирование, 1992, т.4, N 11, с.75–100.

[10] Lengrand J.C., Allègre J., Raffin M. Experimental investigation of underexpanded exhaust plumes, AIAA J 14:692–694. 1976.

[11] Allègre J., Lombardo G., Lengrand J.C. Experimental study of twin-plumes interacting with a simulated satellite wall. Proc. Third European Symp. on Aerothermodynamics for Space Vehicles, 24–26 November 1998, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, ESA SP–426, December 1998, p. 97–103.