DOI **10.37882/2223–2966.2023.02–2.13**

МЕТОДЫ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ КОНЕЧНООБЪЕМНЫХ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

METHODS FOR PARALLELING COMPUTATIONS FOR FINITE-VOLUME NUMERICAL METHODS

A. Gulicheva

Summary. The task of forming an adaptable computational grid in solving problems of filtration and hydrodynamics, which could adapt to various types of surfaces, taking into account the possibility of their movement, is quite difficult, especially in the case of modeling liquids. The relevance of using finite-volume methods for mathematical models of filtration and flow of non-Newtonian incompressible fluids is determined. The main aspects of the application of finite volume methods in the implementation of this type of modeling are considered. It is noted that the procedures for the formation of surface meshes in the framework of modeling physical processes are often performed using machines with a multithreaded architecture, which indicates the possibility of organizing the calculation of flows in a parallel mode. Techniques for resolving conflicts in accessing data with their corrections as a result of the flow of substance flows are considered. It is concluded that the simplification of the computational process based on finite volume methods in solving the problem of forming an adaptable computational grid by parallelizing computations is a reasonable solution. It is noted that in this case, it is important to correctly parallelize the program and provide procedures for organizing data synchronization in order to ensure the most correct calculation results.

Keywords: finite-volume modeling methods, parallel calculations, adaptable computational grid, hydrodynamic problems, fluid modeling.

Гуличева Анастасия Алексеевна
МИРЭА (Российский технологический университет)
n-gulicheva@yandex.ru

Аннотация. Задача формирования адаптируемой расчетной сетки при решении задач фильтрации и гидродинамики, которая могла бы адаптироваться к различным видам поверхностей с учетом возможности их движения является довольно сложной, особенно в случае с моделированием жидкостей. Определена актуальность использования конечно-объемных методов для математических моделей фильтрации и течения неньютоновских несжимаемых жидкостей. Рассмотрены основных аспектов применения конечно-объемных методов при осуществлении данного вида моделирования. Отмечено, что процедуры формирования поверхностных сеток в рамках моделирования физических процессов часто выполняются с применением машин с многопоточной архитектурой, что говорит о возможности организации вычисления потоков в параллельном режиме. Рассмотрены методики разрешения конфликтов при осуществлении доступа к данным при их корректировках в результате перетекания потоков веществ. Сделан вывод о том, что упрощение процесса вычислений на основании конечно-объемных методов при решении задачи формирования адаптируемой расчетной сетки посредством распараллеливания вычислений является обоснованным решением. Отмечено, что важным при этом является грамотное распараллеливание программы и обеспечение процедур по организации синхронизации данных, с целью обеспечения максимально корректных результатов вычисления.

Ключевые слова: конечно-объемные методы моделирования, параллельные вычисления, адаптируемая расчетная сетка, задачи гидродинамики, моделирование жидкостей.

При осуществлении процессов численного моделирования, направленного на решение задач фильтрации и гидродинамики, часто возникает необходимость максимально корректно осуществлять учет границ и поверхностей тел, которые могут быть как статическими, так и динамическими. Причем часто в роли примера подобных поверхностей могут выступать крупные трещин в пористых средах, либо свободные поверхности однофазных несжимаемых жидкостей. Для того, чтобы обеспечить учет подобного рода поверхностей при решении подобного рода задач часто использует лангранжевый метод отслеживания, при котором происходит формирование адаптируемой расчетной сетки для осуществления разрешения поверхности. В том случае, когда речь идет про движущиеся поверхности, частым примером которых является свободная поверхность жидкости, то данный подход требует на каждом шаге осуществлять построение новое поверхностной сетки, что приводит к существенному увеличению нагрузки на вычислительную систему. Именно по этой причине было принято решение о рассмотрение основных использования конечно-объемных методов для математических моделей фильтрации и течения неньютоновских несжимаемых жидкостей со свободной поверхностью, позволяющих эффективно учитывать вложенные в сетку границы и получать физически корректные дискретные решения [3] .

Практическая значимость выполняемого исследования заключается в рассмотрение методов организа-

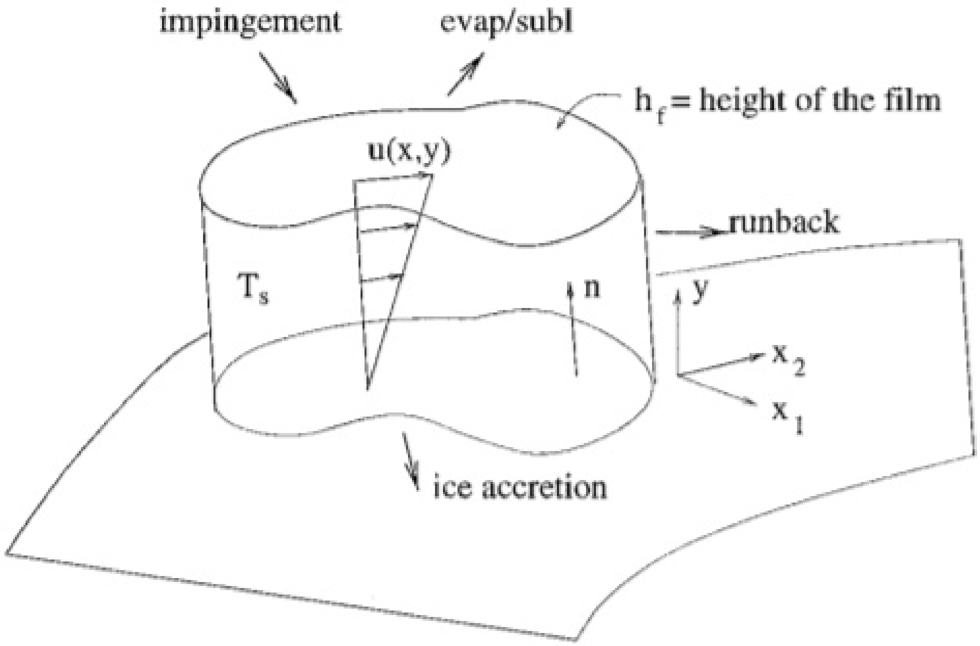

Рис. 1. Учитываемые в рамках модели явления тепло- и массообмена

ции параллельных вычислений для конечно-объемных численных методов в рамках решения практических задач по расчету процессов протекания тонкой пленки по поверхности обтекаемого тела.

Обычно для численного решения задач формулируется математическая модель решения в виде интегральных и дифференциальных уравнений на некоторой многомерной области расчетов. Переход от данной постановки задачи к дискретной математической модели осуществляется заменой функций непрерывного аргумента функциями дискретного аргумента. В результате модель превращается в систему конечноразностных уравнений. Получившаяся модель представляет собой систему алгебраических уравнений, для решения которой с определённой точностью составляется вычислительный алгоритм [6] .

Чаще всего все численные методы реализуются через итерационные процедуры, которые выполняются до тех пор, пока не достигнута заданная точность решения. Такой алгоритм решения задачи подразумевает под собой разбиение всего процесса на определенное количество простых шагов (этапов), выполняемых поочередно.

Другими словами, дискретность — набор действий, имеющих строго определенную, предписанную им алгоритмом последовательность. Каждое следующее действие может быть исполнено только при полном завершении предыдущего этапа [5].

В основе решения практических задач, описанных ранее, часто лежит метод конечных элементов, который представляет собой численный метод решения дифференциальных уравнений с частными производными, а также интегральных уравнений, возникающих при решении задач прикладной физики. Метод широко используется для решения задач механики твёрдого деформируемого тела, теплообмена, гидродинамики, электродинамики и топологической оптимизации.

Суть работы данного метода можно наблюдать в его наименовании — для области, в рамках которой будет производиться решение дифференциальных уравнений, производится её разбиение на конечное число подобластей, которые также называют составными элементами области. В каждом элементе произвольным образом осуществляется выбор вида аппроксимирующей функции — в качестве наиболее простого варианта выступает полином первой степени. Вне данного элемента выбранная аппромиксимирующая функция равняется нулю. Те значения функции, которые были получены на границах элементов будут являться решением задачи. Поиск коэффициентов аппроксимирующих функций производится на основании условий равенства значений соседних функций на границах элементов. Далее происходит выражение коэффициентов с использованием значений функций в узлах элементов. Следующим шагом происходит составление системы линейных алгебраических уравнений, число которых прямо пропорционально количеству неизвестных значений в узлах, в которых происходит поиск решения исходных систем, в количестве, прямо пропорциональном числу элементов. Данное количество часто ограничивается только вычислительной мощностью используемой для расчетов вычислительной системы.

С точки зрения вычислительной математики, суть метода конечных элементов заключается в минимизации функционала вариационной задачи посредством совокупности функций, каждая из которых определяется только в рамках собственной подобласти [6].

Методика стала активно использоваться в различных областях — при проектировании зданий и сооружений, процессов движения поверхностей, в частности активно — в гидродинамике. На рисунке 1 представлены учитываемые в модели явления тепло- и массообмена.

При реализации вычислений важной особенностью является тот факт, что выражение пары уравнений частных производных при решении данной задачи происходит их выражение на в двумерных поверхностях, которые попросту встраивают в трехмерные. По результату получается, что первые производных для данных поверхностей вычисляются вдоль данных поверхностей. В рамках метода конечного объема происходит использование данной особенности. Основой вычисления выступает ячейка конечного объема, представляющая собой ячейку двумерно поверхностной сетки, а поверхностная сетка формируется как оболочка трехмерной сетки.

Перед началом работы по решению определяющих уравнений необходимо выполнить дискретизацию поверхности всех границ, после чего выполнить построение объемной сетки границ поверхности и области течения. Для этого могут быть использованы расчетные сетки двух видов — структурированные и неструктурированные [4].

При структурированной сетки для каждой точки сетки происходит однозначная идентификация как её индексами, так и декартовыми координатами. Ячейки данной сетки могут представлять собой четырехугольники в двухмерном представлении, либо шестигранники в трехмерном представлении.

Неструктурированная сетка характеризуется тем, что ячейки сетки, так же как и точки на сетки, не имеют какого-то определенного порядка, что не позволяет однозначно идентифицировать её ячейки. По этой причине составные элементы сетки представляют собой сочетания четырехугольников и треугольников для двумерной сетки, а также сочетания тетраэдров, призм и пирамид для трехмерной сетки. Это выполнено с целью корректного разрешения пограничных слоев.

При генерации структурированной сетки первым этапом осуществляется распределение точек сетки по граничным кривым. За счет этого достигается возможность формирования сетки поверхности, на основании которых может быть выполнено построение объемной сетки.

При генерации неструктурированных сеток чаще всего использовались треугольники и тетраэдры, однако в последнее время большим уровнем популярности становится построение неструктурированных сеток на основании различных типов элементов, включаю сюда шестигранники, призмы и тетраэдры.

Оба варианта построение сеток поверхности обладают своими сильными сторонами. Так, структурированные сетки позволяют легко и быстро получить доступ к любому узлу данной сетки посредством использования индексов. Однако в случае сложных геометрий генерация структурированных сеток будет довольно сложна. В то время как при использовании неструктурированных сеток появляется возможность быстрого построения сложных геометрий, не требуя при этом вмешательства пользователя. В качестве варианта устранения данных недостатков часто используются смешанные сетки, позволяющие добиться объединения данных подходов [3]. Однако использование смешанных сеток требует больших вычислительных ресурсов. А так как процесс построения сеток поверхности представляет собой сложный вычислительный процесс и требует существенных вычислительных мощностей, то с целью ускорения его выполнения требуется распараллеливание вычислений. Для этого применимо к системам с общей памятью часто используют технологию OpenMP. В качестве основы в данном случае будет выступать последовательная программа, которая преобразуется в параллельную посредством специального набора директив, процедур и переменных окружения.

Для распараллеливания программы её текст разбивается на области с параллельным и последовательным типом выполнения, как это представлено на рисунке 2. При запуске программы происходит порождение «основной нити», запускающей процесс исполнения программного кода со стартовой точки. Именно она осуществляет процесс исполнения последовательных областей программы. Параллелизм программы реализуется посредством схемы FORK/JOIN. При входе в параллельную область происходит формирование основной нитью дополнительных нитей с использованием операции FORK. При появлении каждой дополнительной нити её присваивается уникальный номер, а в рамках самой нити происходит выполнение одного и того же программного кода. После того, как параллельная нить завершить свои вычисления, основной

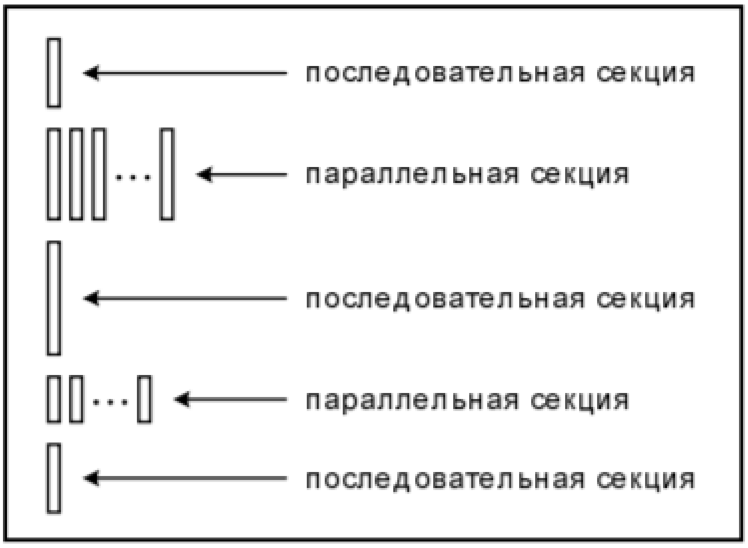

Рис. 2. OpenMP. Процесс исполнения программы

нитью осуществляется ожидание завершение вычислений всеми нитями, и далее программа выполняется уже непосредственно в рамках основной нити — происходит выполнение операции JOIN [8] .

В рамках параллельной области для переменных в рамках программы производится их разделение на два класса: общие (SHARED) и локальные (PRIVATE) переменные. Для общих переменных характерно их существование только в одном экземпляре для всей программы, а также доступ к ним всегда под одним и тем же именем. Локальные переменные создаются каждая для своей нити, никаким образом, не изменяясь в рамках других нитей.

Реализация максимально эффективной параллельной программы возможна только в том случае, когда все нити будут равномерно загружены полезными вычислениями. Для этого важно осуществить балансировку нагрузки, для чего и применяются различные механизмы OpenMP.

Немаловажным моментом является обеспечение синхронизации общих данных, так как с ними будет осуществляться одновременная работа нескольких нитей. По этой причине значительная часть функционала OpenMP направлена как раз на осуществление процессов синхронизации.

Процедуры формирования поверхностных сеток в рамках моделирования физических процессов часто выполняются с применением машин с многопоточной архитектурой, что говорит о возможности организации вычисления потоков в параллельном режиме. С целью обеспечения данного режима важно обеспечить разрешение конфликтов при осуществлении доступа к данным при их корректировках в результате перетекания потоков веществ. Это возможно реализовать несколькими методиками.

Первый метод подразумевает использованием механизма критических секций OpenMP. Является довольно простой, однако может оказаться критичной для некоторых архитектур.

Второй метод подразумевает сохранение потоков сначала на всех границах, после чего произведение единовременного перерасчета для каждой ячейки. Реализация данного механизма потребует сохранения информации обо всех границах, являющимися для конкретной ячейки входными и выходными, что является довольно весомым недостатком.

Третий метод подразумевает выполнение разбиения границ между расчетными ячейками на подмножества таким образом, чтобы в результате внутри каждого подмножества не было конфликтующих границ. Недостатками данного подхода является необходимость дополнительных действий, связанных с реализацией процедур разбиения границ на подмножества без конфликтов [1].

Каждый из представленных методов имеет как положительные, так и отрицательные стороны. В рамках исследовательской работы был использован метод OpenMP по причине простоты его реализации. Метод основан на использовании инструментария, в составе которого находится набор базовых директив. На основании данных директив происходит написание кода программы, позволяющей осуществить построение смешанной сетки с минимальными затратами на написание кода и получить оптимальный результат в плане потребления ресурсов и вычислительного времени.

В заключении необходимо отметить, что упрощение процесса вычислений на основании конечно-объемных методов при решении задачи формирования адаптируемой расчетной сетки посредством распараллеливания вычислений является обоснованным решением. Важным при этом является грамотное распараллеливание программы и обеспечение процедур по организации синхронизации данных, с целью обеспечения максимально корректных результатов вычисления.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бабичев С.Л. Распределенные системы: учебное пособие для вузов / С.Л. Бабичев, К.А. Коньков. М.: Издательство Юрайт, 2022. 507 с.
2. Воробьев Е.С. Численные методы и математическое моделирование. Основы численных методов и приемы построения математических моделей на их основе и эти решения в различных пакетах / Е.С. Воробьев, В.Е. Воробьева. Казань, 2017.
3. Данилов А.А. Технология построения неструктурированных сеток и монотонная дискретизация уравнения диффузии. Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук / А.А. Данилов. М.: Институт вычислительной математики РАН, 2010.
4. Корт Б. Комбинаторная оптимизация // Теория и алгоритмы. 2015.
5. Куштанова Г.Г. Математическое моделирование геофизических процессов. Казань, 2015.
6. Метод конечных элементов. URL: https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4_%D0%BA%D0%BE%D0%BD%D0%B5%D1%87%D0%BD%D1%8B%D1%85_%D1%8D%D0%BB%D0%B5%D0%BC%D0%B5%D0%BD%D1%82%D0%BE%D0%B2 (дата обращения 27.12.2022)
7. Рыбаков А. Внутреннее представление и механизм межпроцессного обмена для блочной сетки для суперкомпьютерных вычислений // Программные продукты и системы // Алгоритмия. 2017. № 8 (1). С.121–134.
8. Рыбаков А. Распределение вычислительной нагрузки между узлами гетерогенного вычислительного кластера // Программные продукты, системы и алгоритмы. 2018. № 1. С. 1–7.

МИРЭА — Российский технологический университет