

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ НА GPU-СИСТЕМАХ ПЕТАФЛОПНОГО УРОВНЯ

П.В. Павлухин¹, И.С. Меньшов²

¹ ФГУП НИИ «Квант», Москва

² ИПМ им М.В. Келдыша РАН, Москва

Численные методы решения задач газовой динамики в рамках модели Навье-Стокса разделяются по типу используемого сеточного разбиения. Коммерческие продукты преимущественно используют нерегулярные сетки, которые достаточно просто строятся для расчетных областей со сложной геометрией. Однако данный тип сеток плохо подходит для использования на графических ускорителях, поскольку порождает неструктурированные обращения в память. Даже при использовании специальных техник переупорядочивания расчетных ячеек скорость работы на GPU ограничивается не вычислительной производительностью ускорителя, а пропускной способностью его подсистемы памяти.

С другой стороны, регулярные сетки, включая многоблочные, гораздо лучше подходят для архитектуры графических ускорителей, поскольку структурированный доступ к данным позволяет более эффективно работать с памятью графического ускорителя. Но применение этого типа сеточного разбиения ограничивается расчетными областями со сравнительно простой геометрией, поскольку построение регулярных сеток, конформных к поверхностям раздела двух сред (газ и твердые включения), - непростая, а во многих трехмерных случаях неразрешимая задача.

Решение задач в областях со сложной геометрией, но при этом с использованием простых декартовых сеток возможно в рамках предлагаемого ниже подхода, в основе которого – метод свободной границы [1]. Рассмотрим стандартную постановку задачи о течении сжимаемой жидкости в области с твердыми включениями D (с полем скоростей U_s) в рамках уравнений Эйлера:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$(\mathbf{U} - \mathbf{U}_s, \mathbf{n})_{\partial D} = 0 \quad (2)$$

Предположим на мгновение, что граница $\Gamma = \partial D$ проницаема — внутреннее граничное условие (2) не выполняется. Тогда для того, чтобы получаемое решение вновь стало верным для (1, 2), необходимо выполнить его корректировку вблизи Γ . Альтернативная постановка для метода свободной границы в этом случае состоит во введении специальной правой части, называемой компенсационным потоком, так, чтобы сужение решения новой модифицированной задачи, получаемого во всей области (включая D), на область без твердых включений (вне D) было эквивалентно решению задачи (1, 2):

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} = -\mathbf{F}_w \quad (3)$$

Не сложно проверить, что условие непроницаемости (2) выполняется для компенсационного потока следующего вида:

$$\mathbf{F}_w = \left(\begin{array}{c} \rho(\mathbf{U} - \mathbf{U}_s, \mathbf{n}) \\ \rho(\mathbf{U} - \mathbf{U}_s, \mathbf{n})\mathbf{U} + (p - p_w)\mathbf{n} \\ \rho(\mathbf{U} - \mathbf{U}_s, \mathbf{n})E + (p\mathbf{U} - p_w\mathbf{U}_s, \mathbf{n}) \end{array} \right) \delta(\mathbf{x}, \Gamma) \quad (4)$$

Для идеального газа мгновенная реакция p_w жесткой стенки на воздействие потока жидкости есть давление за фронтом формирующейся ударной волны или волны разрежения в зависимости от знака нормальной составляющей скорости $U - U_s$ на границе $\Gamma = \partial D$.

Во всей расчетной области строится простая декартова сетка, не связанная с границами Γ твердых включений, на которой выполняется пространственная дискретизация и интегрирование (3) методом конечных объемов. Численный метод приводит к сквозному единообразному расчету по ячейкам 3-х типов: фиктивным, расположенным полностью внутри твердых включений, внешним, находящимся полностью в газовой среде, и пересекающим границу Γ твердых включений, в которых и выполняется корректировка значений с помощью компенсационного потока. На этапе инициализации задачи выполняется поиск пересечений границы $\Gamma = \partial D$ с ячейками декартовой сетки, и в пересекаемых ячейках выполняется линейное приближение Γ . Полученные таким образом значения нормалей и площадей частей Γ внутри пересекаемых ячеек используются в основном расчетном цикле. Достоинство данной схемы – сквозной единообразный расчет по всем ячейкам области на

простой декартовой сетке, не зависящий от сложности геометрии твердых включений, поэтому она эффективно реализуется на графических ускорителях. Следует заметить, что описанный метод позволяет решать задачи и в случае подвижных твердых включений, но в настоящий момент реализована версия с неподвижными включениями.

Еще одно важное свойство, по которому можно разделить численные методы, - тип схемы интегрирования по времени. Явные схемы эффективно и сравнительно просто реализуются на GPU, но обладают ограниченной применимостью из-за жесткого ограничения на выбор временного шага интегрирования. Неявные же схемы лишены этого недостатка, однако гораздо сложнее адаптируются для графических ускорителей. Часть итеративных решателей активно используют операцию умножения разреженной матрицы на вектор (SpMV), которая помимо неэффективного использования одного GPU плохо масштабируется на большее их число. Метод LU-SGS [2, 3, 4] не использует этой операции и, по сути, является безматричным методом, однако его распараллеливание сильно осложняется из-за зависимости по данным. В LU-SGS факторизованная СЛАУ решается с помощью обхода по всем ячейкам расчетной области в прямом и обратном направлении. Именно выбор порядка обхода ячеек порождает указанную зависимость по данным. В работе [5] предложен оригинальный параллельный алгоритм LU-SGS, доказана его корректность и идентичность его работы последовательному прототипу. Эффективная его реализация для трехмерных задач на multi-GPU выполнена с задействованием асинхронной схемы: расчет на GPU совмещен по времени с передачей данных GPU↔CPU и межзловыми пересылками с помощью MPI, благодаря чему производительность масштабируется до нескольких сотен одновременно задействуемых GPU.

На рис 1. представлена численная шпирен-визуализация взаимодействия плоской ударной волны с несколькими цилиндрами. Расчет проводился на сетке 1024x1024 с использованием 32 GPU методом свободной границы (слева). Для сравнения представлен аналогичный расчет, выполненный с помощью другого метода погруженной границы [6] (справа). Результаты оказались очень близки, причем в методе свободной границы за счет подсеточного разрешения поверхностей твердых тел отсутствуют возмущения вблизи цилиндров, связанные с более грубым их представлением во втором методе (с точностью до ячейки сетки).

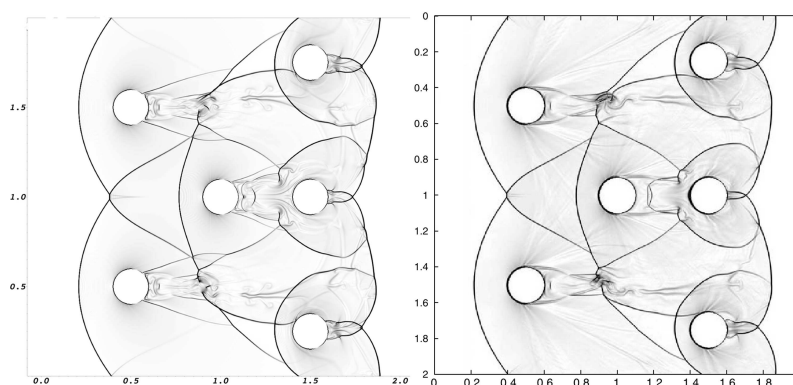


Рис. 1. Численный шпирен, $M=3$, $t=0.5$; слева – метод свободной границы, справа – метод [6].

В качестве иллюстрации на стадии установления решения задачи об обтекании модели самолета DLR F6 с углом атаки $\alpha=0.03$ и числом Маха $M=0.75$ на рис. 2 представлено распределение давления. Среднее значение коэффициента подъемной силы C_l получилось равным 0.55 , экспериментальное значение для этого угла атаки $C_{l,exp}=0.6$. Полученное расхождение, возможно, объясняется решением в рамках эйлеровой модели жидкости, без учета вязких эффектов. Расчет проводился на сетке с разрешением 80 млн ячеек с использованием 117 GPU Kepler K20X кластера «Лобачевский» ННГУ им Н.И. Лобачевского.

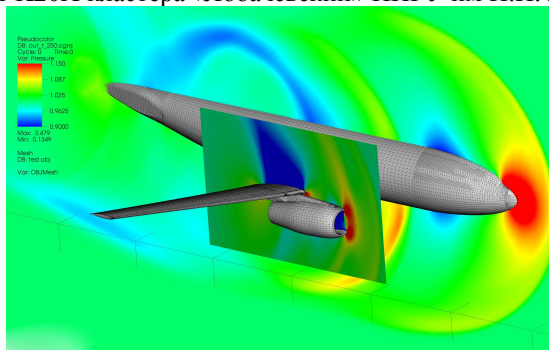


Рис. 2. Распределение давления, DLR F6, $\alpha=0.03$, $M=0.75$, $t=250$.

На рис 3. представлен график сильной масштабируемости (strong scaling) на суперкомпьютере «Ломоносов», МГУ им М.В. Ломоносова. Размер расчетной области был фиксированным, 150 млн ячеек,

варьировалось число одновременно задействованных GPU (Tesla X2090). Как видно, время счета одного шага по времени сокращалось практически обратно пропорционально числу ускорителей, т.е. масштабируемость оказалась близкой к линейной, и на 768 GPU эффективность счета составила 75% (относительно 32 GPU).

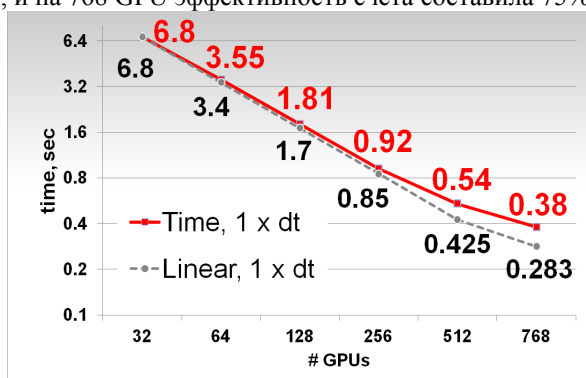


Рис. 3. Время счета одного шага по времени, сетка 150 млн ячеек.

Заключение.

В работе представлен программный комплекс для решения задач газовой динамики в областях со сложной геометрией на основе метода свободной границы и параллельной версии LU-SGS. Приведенные результаты расчетов показали корректность его работы и масштабируемость до нескольких сотен GPU на суперкомпьютерных системах. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Проекты № 12-01-00915-а, № 14-01-31480-мол_а).

ЛИТЕРАТУРА:

1. И.С. Меньшов, М.А. Корнев "Метод свободной границы для численного решения уравнений газовой динамики в областях с изменяющейся геометрией" // Матем. Моделирование, 26:5 (2014), 99–112
2. A. Jameson, E. Turkel Implicit schemes and LU decomposition // Math.of Comp., v.37, № 156, pp.385-397, 1981.
3. I. Menshov, Y. Nakamura On implicit Godunov's method with exactly linearized numerical flux //Computers & Fluids, 29 (6), pp. 595 – 616, 2000
4. I. Menshov, Y. Nakamura Hybrid Explicit-Implicit, Unconditionally Stable Scheme for Unsteady Compressible Flows //AIAA Journal,vol. 42, № 3, pp. 551-559, 2004
5. П.В. Павлухин Реализация параллельного метода LU-SGS для задач газовой динамики на кластерных системах с графическими ускорителями // Вестник ННГУ, Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород. 2013. № 1, стр. 213-218
6. O. Boiron, G. Chiavassa, R. Donat A high-resolution penalization method for large Mach number flows in the presence of obstacles // Computers & Fluids, 38, pp. 703 – 714, 2009