

УДК 533.6.011.72:541.126.2

## СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОСТУПАТЕЛЬНОЙ НЕРАВНОВЕСНОСТИ ГАЗОВОЙ СМЕСИ ВО ФРОНТЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ НА МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ КОМПЬЮТЕРАХ

С. В. Куликов<sup>1</sup>, П. К. Берзигияров<sup>1</sup>

Описаны два реализованных способа распараллеливания нестационарного метода статистического моделирования, примененного к задаче расчета ударной волны: крупнозернистый и мелкозернистый параллелизмы. Распараллеливание проводилось без существенного изменения алгоритма вычислений. Первый способ представляет параллелизм “в чистом виде” и хорошо сочетается со статистическим характером задачи. При этом нет почти никаких ограничений на число используемых процессоров. Второй способ распараллеливания (мелкозернистый параллелизм) эффективен на нестационарной стадии процесса.

**Ключевые слова:** крупнозернистый и мелкозернистый параллелизм, газовая смесь, нестационарный метод статистического моделирования, стационарная ударная волна, распределение частиц по скоростям.

**1. Введение.** Развитие авиации, космонавтики и ударно-волновых технологий приводит к необходимости решения задач газовой динамики и кинетической теории газов, в основе которых лежит уравнение Больцмана. Используемый в данной работе нестационарный метод статистического моделирования (НМСМ), основоположником которого является Г. Берд [1, 2], позволяет избежать трудоемкого процесса прямого численного решения уравнения Больцмана. Более того, невозможность прямого численного решения данного уравнения во многих случаях и наблюдаемое интенсивное развитие вычислительной техники способствует тому, что НМСМ все шире применяется в вышеупомянутых областях науки и техники. При этом актуальным становится использование многопроцессорных ЭВМ, чему и посвящена предлагаемая работа.

**2. Описание метода.** Используемая разновидность нестационарного метода статистического моделирования, примененного к важной задаче расчета ударной волны, описана в [3, 4]. Суть его состоит в следующем. Моделируемая газовая среда заменяется системой модельных частиц. Исследуемое пространство разбивается на ячейки размера  $\Delta x$ , по которым, в соответствии с начальными условиями, распределяются частицы. Полагается, что столкновения частиц являются парными и могут происходить с определенной вероятностью только между частицами, находящимися в одной ячейке.

Процесс эволюции рассматриваемой системы за интервал времени  $\Delta t$  расщепляется на два этапа: 1) только перемещение частиц с неизменными скоростями в промежутке времени  $\Delta t$  и 2) только изменение скоростей частиц в результате столкновений в этом же промежутке времени при их фиксированных положениях.

Моделирование плоской стационарной ударной волны было выполнено в одномерном пространстве координат и в трехмерном пространстве скоростей. На границах области моделирования функции распределения скоростей полагались максвелловскими в соответствии с температурами перед и за ударной волной. В начальный момент времени ударная волна задавалась в виде поверхности разрыва.

При эволюции системы во времени частицы, пересекающие границы области моделирования, исключались из рассмотрения. С целью компенсации этих потерь задавались потоки новых частиц вовнутрь области моделирования.

После выхода системы на стационар (в статистическом смысле, т.е. когда средние значения параметров газа в ячейках менялись очень мало в течение значительного промежутка времени) периодически проводилась выборка параметров потока по мере обновления частиц в ячейках. Причем организация запоминания выборок была такой, чтобы значения средних величин определялись в конце расчета после выполнения необходимого количества данных выборок. Применительно, например, к средней скорости частиц вдоль потока в ячейке в каждой выборке определялась сумма значений данной скорости всех частиц в ячейке и сумма всех этих частиц. Эти две величины суммировались с соответствующими значениями

<sup>1</sup> Институт проблем химической физики РАН, Институтский просп., 18, 142432, Московская обл., Ногинский район, п. Черноголовка; e-mail: kuls@icp.ac.ru; parvaz@pro.icp.ac.ru

этих величин, полученными в предыдущих выборках. В конце расчета полная сумма значений данной скорости делилась на полную сумму всех частиц в ячейке, по которым производились выборки, и таким образом определялась средняя скорость.

**3. Реализация.** Первоначально был реализован крупнозернистый параллелизм: последовательная программа запускается на каждом из используемых процессоров со своими параметрами и записывает результаты на диск. Затем производится считывание всех полученных результатов и их обработка (например — усреднение). При этом нет почти никаких ограничений на число используемых процессоров. Кроме того, не только алгоритм, но и программный код не требует значительных изменений и сочетается со статистическим характером задачи, для которой счет варианта требует гораздо большего времени, чем процедура усреднения вариантов. Данная реализация представляет параллелизм “в чистом виде”. Однако это не позволяет проводить расчеты на нескольких процессорах до выхода системы модельных частиц на стационар, т.е. до формирования вместо математического разрыва физически определенной области поступательной неравновесности ударной волны, в которой параметры газа изменяются от одного равновесного состояния перед волной к другому равновесному состоянию за волной. Эта область будет называться, как и принято, фронтом ударной волны. Поэтому было принято решение перейти от крупнозернистого параллелизма (независимый набор статистик) к мелкозернистому.

Для лучшего понимания следует рассмотреть алгоритм вычислений более подробно (см. рис. 1). Вначале считываются данные, вычисляются необходимые константы, задается начальное состояние системы модельных частиц. Затем выполняются этапы перемещений и столкновений, а через определенные интервалы времени — выборка параметров потока. В конце производится заключительный расчет статистических данных и запись результатов в файл и печать.

Анализ времени исполнения каждого из блоков последовательной программы показал, что этап столкновений частиц (блок 5) требует в 50 раз больше времени счета, чем этап перемещений (блок 4). Кроме того, было принято решение распараллелить этап выборки параметров потока (блок 6), поскольку вычисления на этом этапе независимы и не приводят к межпроцессорным взаимодействиям, то есть представляют собой параллелизм “в чистом виде”. Более того, с увеличением числа модельных частиц в ячейке растет доля времени расчета данного этапа от общего времени счета задачи.

Переход к мелкозернистому параллелизму основывался на том, что большая часть вычислений (исключая этап перемещения), связанных с частицами одной ячейки, не зависит от частиц других ячеек. В целях балансировки загрузки процессов наилучшим оказалось проводить декомпозицию области циклическим методом, распределяя в порядке очередности по одной ячейке на каждый процессор, с последующим повторением этой операции до окончательного распределения всей области счета (см. рис. 2).

Структура параллельного алгоритма включает в себя следующие этапы.

*Этап 1.* Считывание данных из файла корневым процессором.

*Этап 2.* Рассылка начальных данных всем остальным процессорам.

*Этап 3.* Установление начального состояния моделирующих частиц и вычисление констант (проводится независимо на каждом процессоре над одними и теми же данными с целью экономии при рассылке результатов).

*Этап 4.* Расчет перемещений частиц (проводится независимо на каждом процессоре над одними и теми же данными с целью экономии при рассылке результатов).

*Этап 5.* Расчет столкновений частиц (включает обсчет каждым процессором своих ячеек и последующие обмены данными между процессорами).

*Этап 6.* Выборка параметров потока (включает независимый подсчет статистики каждым процессором над своими данными).

*Этап 7.* Сбор результатов расчета на корневой процессор.

*Этап 8.* Запись данных в файл корневым процессором.

Программный код реализован на Фортране. Для обеспечения межпроцессорных взаимодействий использовалась стандартная коммуникационная библиотека MPI (Message Passing Interface) [5].

**4. Эффективность мелкозернистого параллелизма.** Были проведены расчеты для смеси He, O<sub>2</sub> и H<sub>2</sub> с отношением молярных концентраций 17:1:2 при числе Маха ударной волны  $M = 2,5$  и среднем числе модельных частиц в ячейке перед фронтом  $N = 6000$ . При столкновениях молекулы рассматривались как твердые сферы. Внутренняя структура молекул не учитывалась. Время расщепления  $\Delta t = 0,05\lambda/\nu$ , где  $\lambda$  — средняя длина свободного пробега в смеси перед волной,  $\nu$  — наиболее вероятная тепловая скорость частиц самого легкого сорта в невозмущенном вверх по течению потоке. Размер пространственной ячейки  $\Delta x = 0,15\lambda$ . Время между соседними выборками параметров состояния газовой смеси составило  $0,1\lambda/\nu$ .

Для проведения вычислительного эксперимента была использована SMP-система RM 600 E20/60

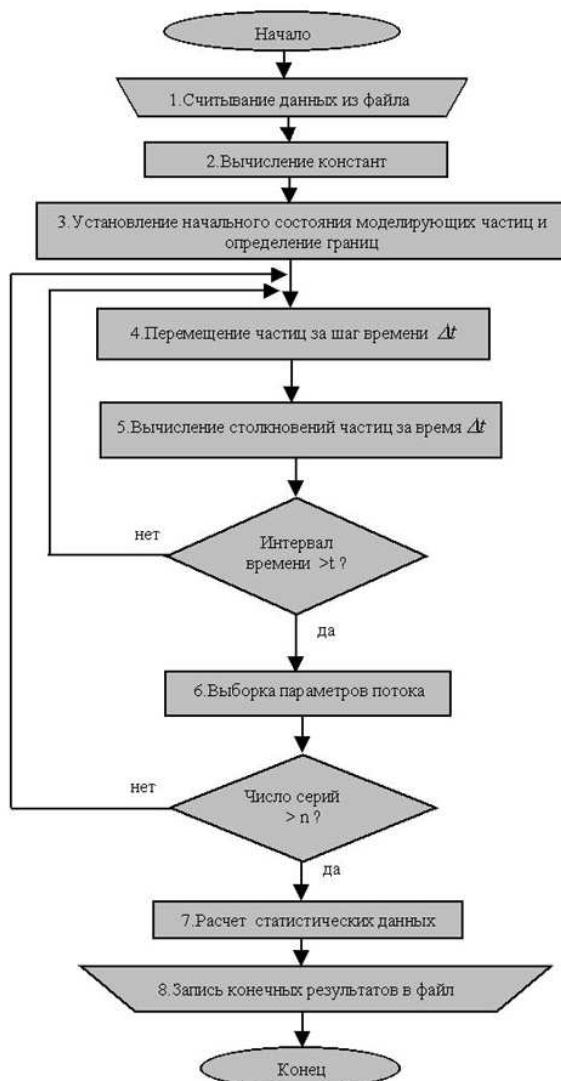


Рис. 1

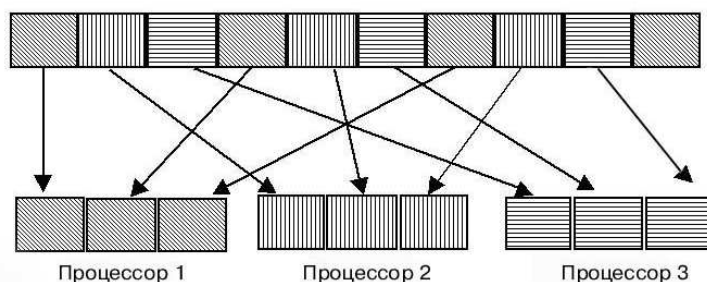


Рис. 2

фирмы Siemens Computer Systems (SNI). Были проведены замеры значения ускорений на 2, 4 и 8 процессорах для всего программного кода и отдельно для блоков столкновений и выборки параметров потока при выходе системы на стационар в течение времени  $0 < t < 10\lambda/\nu$ . При этом производилась выборка только макропараметров потока. В табл. 1 приведены в секундах времена счета всей задачи ( $t_a$ ), этапов столкновений ( $t_c$ ) и выборок параметров потока ( $t_s$ ).

Таблица 1

	RM 600	MBC-1000M	MBC-1000M (стационар)
$t_a$	41414	2643	20876
$t_c$	38353	2387	446
$t_s$	917	67	20230

На рис. 3 представлены данные по ускорению задачи в зависимости от используемого числа процессоров (кривая 1 — полное ускорение задачи, 2 — ускорение счета блока столкновений, 3 — ускорение счета блока выборка параметров потока). Видно, что для числа процессоров меньше восьми производительность изменяется по линейному закону и программа хорошо масштабируется. На восьми процессорах производительность программы резко падает.

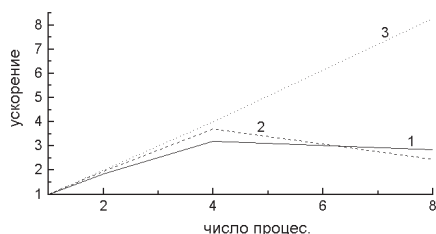


Рис. 3

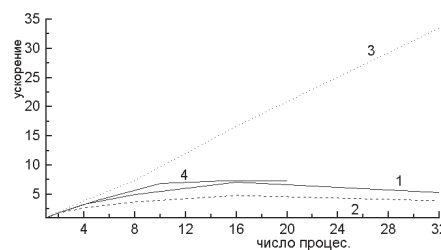


Рис. 4

Затем были проведены аналогичные расчеты на MBC-1000M в Межведомственном суперкомпьютерном центре (МСЦ) для  $0 < t < 5\lambda/\nu$  на 2, 4, 8, 16 и 32 процессорах. Полученные результаты приведены в табл. 1 и на рис. 4. (Для кривых 1–3 обозначения такие же, как и на рис. 3.) Видно, что не имеет смысла использовать более 16 процессоров.

Далее были проведены замеры значения ускорений на 2, 5, 10, 15 и 20 процессорах MBC-1000M после выхода модельной системы на стационар, когда в 10 ячейках производилась выборка значений функций распределения частиц по скоростям, в том числе и их пар по относительным скоростям  $g$ . Результаты представлены в табл. 1 и на рис. 4 (кривая 4). При этом циклическим методом проводилась дополнительная декомпозиция данных 10 ячеек. Отсюда становится понятным выбор количества процессоров при проведении замеров ускорения. Замеры производились по 10 выборкам параметров потока. Видно, что не имеет смысла использовать более 10 процессоров.

Не очень хорошая масштабируемость программного кода объясняется большим количеством вызовов функции `MPI_ALLGATHER` в блоке столкновений и тем, что с увеличением числа процессоров растет время работы этой и других коммуникационных функций. Следует отметить, что на MBC-1000M пересылка данных происходит более эффективно. Для повышения эффективности необходимо сократить количество вызовов `MPI_ALLGATHER` (хотя бы путем формирования для пересылки пакетов данных большего размера, а еще лучше, и путем уменьшения количества пересылаемых данных). Этого можно достичь, используя другие схемы параллельных вычислений.

Следует отметить, что с увеличением числа ячеек, в которых определяются функции распределения частиц по скоростям, в том числе и их пар по  $g$ , становится эффективнее использование большего числа процессоров. Это обусловлено тем, что при этом все большая часть счетного времени идет на выборку параметров потока, а обмен информацией происходит только один раз при завершении счета. Иными словами, наблюдается все большее приближение к параллелизму “в чистом виде”.

**5. Результаты моделирования с применением мелкозернистого параллелизма.** Представленные результаты прежде всего иллюстрируют возможности программного кода и получены на 10 процессорах с применением мелкозернистого параллелизма на основании 6700 выборок.

На рис. 5 показаны профили относительных концентраций  $n_i^0 = (n_i - n_{ia}) / (n_{ib} - n_{ia})$  (1 — He; 2 — O<sub>2</sub>; 3 — H<sub>2</sub>) и относительных кинетических температур компонентов  $T_i^0 = (T_i - T_a) / (T_b - T_a)$  (4 — He; 5 — O<sub>2</sub>; 6 — H<sub>2</sub>). Здесь и далее индексы  $a$  и  $b$  относятся к параметрам газа перед и за ударной волной, расстояние нормировано на  $\lambda$ .

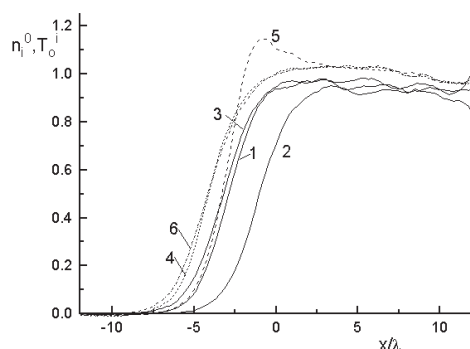


Рис. 5

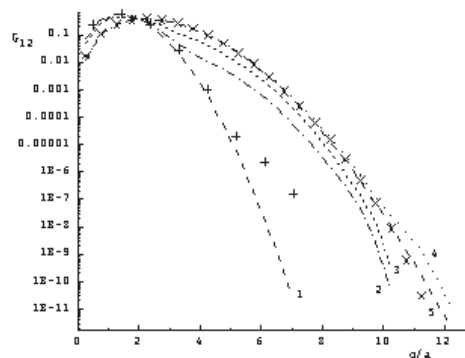


Рис. 6

На рис. 6 приведены распределения  $G_{12}$  по  $g$  парам частиц, состоящих из одной молекулы He и одной молекулы  $O_2$ . Относительные скорости нормированы по скорости звука  $a$  в газовой смеси перед волной. Штриховые кривые 1 и 5 соответствуют равновесным распределениям перед и за волной, прямые и косые крестики — численно полученным значениям  $G_{12}$  на левой и правой границе области моделирования. Остальные кривые представляют значения  $G_{12}$  на фронте: 2 —  $x = -6,075$ ; 3 —  $x = -4,575$ ; 4 —  $x = 2,925$ . Как видно,  $G_{12}$  на пределе разрешения превышает свои равновесные значения за волной при больших  $g$ . Наибольшая величина данного превышения, достигнутая в рассматриваемом случае (MCP12), равна 7. Это означает, что при прохождении газового потока через фронт волны заметно возрастает число столкновений частиц  $O_2$  и He с большими  $g$ . (Расхождение при больших  $g$  между равновесными значениями  $G_{12}$  перед фронтом и полученными на левой границе области моделирования обусловлено влиянием волны. При увеличении области моделирования вниз по потоку оно должно уменьшаться, стремясь к исчезновению.)

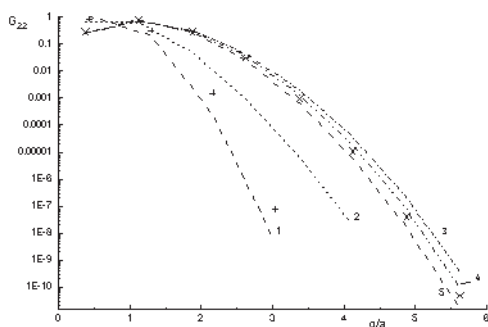


Рис. 7

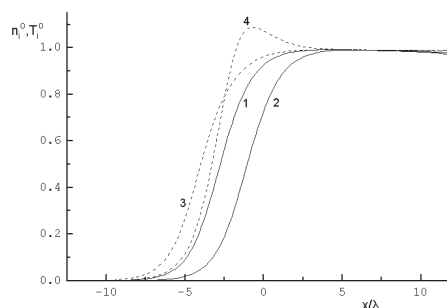


Рис. 8

На рис. 7 приведены распределения  $G_{22}$  по  $g$  парам частиц, состоящих из одной молекулы  $O_2$  и одной молекулы  $O_2$ . (Обозначения почти такие же, как и на рис. 6: 2 —  $x = -4,575$ ; 3 —  $x = -0,075$ ; 4 —  $x = 5,925$ .) Как видно,  $G_{22}$  на пределе разрешения также превышает свои равновесные значения за волной при больших  $g$ , MCP22 = 12. Это означает, что во фронте заметно возрастает число столкновений частиц  $O_2$  между собой с большими  $g$ .

**6. Результаты моделирования с крупнозернистым параллелизмом.** Были проведены расчеты с применением крупнозернистого параллелизма на 15 процессорах для смеси He и  $O_2$  с отношением мольных концентраций 19:1. Все остальные параметры остались неизменными.

На рис. 8 показаны профили  $n_i^0$  (1 — He; 2 —  $O_2$ ;) и  $T_i^0$  (3 — He; 4 —  $O_2$ ). Профили для He и  $O_2$  аналогичны представленным на рис. 5.

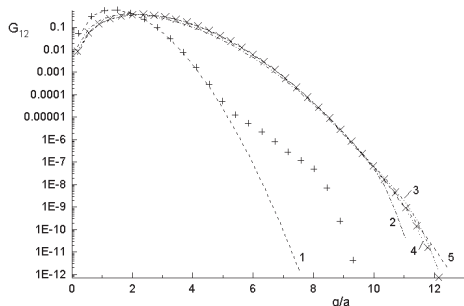


Рис. 9

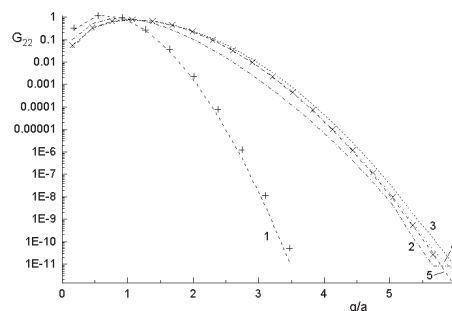


Рис. 10

Распределения  $G_{12}$  и  $G_{22}$  представлены на рис. 9 ( $2 - x = -3,075$ ;  $3 - x = 4,425$ ;  $4 - x = 5,925$ ) и на рис. 10 ( $2 - x = -3,075$ ;  $3 - x = -0,075$ ;  $4 - x = 5,925$ ) соответственно. Как видно, для  $G_{12}$   $MSP12 = 2$  и для  $G_{22}$   $MSP22 = 7$ .

Следовательно, замена 10% Не водородом усиливает эффект сверхравновесного превышения. Это обусловлено увеличением скорости звука в смеси.

**7. Заключение.** В работе описана одна из модификаций нестационарного метода статистического моделирования и два реализованных способа ее распараллеливания: крупнозернистый и мелкозернистый параллелизмы. Распараллеливание проводилось без существенного изменения алгоритма вычислений. Первый способ представляет параллелизм “в чистом виде” и хорошо сочетается со статистическим характером задачи. При этом нет почти никаких ограничений на число используемых процессоров. Вторым способом распараллеливания (мелкозернистый параллелизм) эффективен на нестационарной стадии процесса. Оценки его производительности показали хорошие результаты для 2 и 4 процессоров при использовании RM 600 и для 2–10 процессоров при использовании МВС-1000М. При увеличении числа ячеек, в которых определяются функции распределения частиц по скоростям, в том числе и их пар по  $g$ , становится эффективнее использование еще большего числа процессоров.

Авторы выражают благодарность Ю. П. Луговской за помощь при выполнении данной работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bird G.A.* Molecular Gas Dynamics. Oxford: Clarendon Press, 1976 (Рус. пер.: Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981).
2. *Bird G.A.* Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994.
3. *Генич А.Р., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Сериков В.В., Яницкий В.Е.* Приложение весовых схем статистического моделирования течений многокомпонентного газа к расчету структуры ударной волны // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1986. **26**, № 12. 1839–1854.
4. *Genich A.P., Kulikov S.V., Manelis G.B., Chereshevnev S.L.* Thermophysics of translational relaxation in shock waves in gases // Sov. Tech. Rev. B. Therm. Phys. 1992. **4**, N 1. 1–69.
5. *Snir M., Otto S., Huss-Lederman S., Walker D., Dongarra J.* MPI: The Complete Reference. Volume 1. Boston: MIT Press, 1998.

Поступила в редакцию  
18.05.2002