УДК 519.63:532.5.031 doi 10.26089/NumMet.v18r215

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ БЕССЕТОЧНОГО МЕТОДА РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ ИДЕАЛЬНОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ

В. Н. Говорухин[1]

Предложен параллельный алгоритм для расчета двумерной динамики невязкой несжимаемой жидкости на вращающейся сфере. Основой алгоритма является бессеточный метод вихрей в ячейках для решения начально-краевой задачи для нестационарных уравнений движения идеальной жидкости в терминах абсолютной завихренности и функции тока. Метод базируется на аппроксимации функции тока отрезком ряда Фурье, приближении поля завихренности ее значениями в частицах и расчете траекторий частиц с использованием псевдосимплектического интегратора. Схема распараллеливания на каждом временно́м шаге включает в себя расщепление по подмножествам частиц и декомпозицию области течения. Представлено описание алгоритма для вычислительных систем с общей памятью. Эффективность метода и производительность параллельного алгоритма оценены экспериментально при различных параметрах расчета, показана хорошая масштабируемость алгоритма.

Ключевые слова: бессеточные методы, геофизические течения, невязкая несжимаемая жидкость, вихревая динамика, метод вихрей в ячейках.

1. Введение. Бессеточные методы активно развиваются и используются в последнее время для решения задач математического моделирования динамики жидкостей и газов, электродинамики, молекулярной динамики, биологии, физики. Их достоинством является гибкость в аппроксимации неизвестных функций, отсутствие необходимости построения регулярной сетки, возможность детализации отдельных областей решения, высокий потенциальный параллелизм. К таким методам относятся и методы частиц, основанные на описании математической модели большим набором элементарных объектов (частиц), движущихся в поле скорости, которое может задаваться или определяться расположением и характеристиками частиц. Применение методов частиц приводит к решению систем уравнений (алгебраических или обыкновенных дифференциальных) больших размерностей относительно координат и скоростей частиц. Для таких методов возможно независимое вычисление многих шагов алгоритма, что позволяет создавать их эффективные параллельные реализации. При этом возможны две стратегии разделения задачи на независимые подзадачи: по пространству (расчетная область разбивается на подобласти и в каждой из них решается нужная задача) и по частицам (когда каждый вычислительный процесс работает с подмножеством частиц). Такие подходы к распараллеливанию применялись в последнее время при разработке алгоритмов методов частиц для решения задач электродинамики [1], гидродинамики [2], геофизики [3], близкой в алгоритмическом смысле проблеме N-тел [4], методах контурной динамики расчета движений идеальной жидкости [5] и моделирования в астрофизике [6].

Для анализа динамики невязкой несжимаемой жидкости широкое распространение получили лагранжевы вихревые методы (см. [7, 8] и ссылки в них). В их основе лежит решение уравнений динамики идеальной жидкости в терминах завихренности и функции тока. По известному полю завихренности, заданному в N жидких частицах, вычисляется скорость частиц, а завихренность, в свою очередь, переносится с частицами. Для вихревых методов имеется обоснование сходимости и оценки погрешности [8–11]. Метод особенно популярен, если областью течения является вся плоскость, так как в этом случае скорость явно выражается через поле завихренности с помощью функции Грина уравнения Пуассона. При этом количество операций, требуемое для вычисления скоростей всех N частиц, пропорционально N^2, что существенно ограничивает возможное число используемых частиц. Когда уравнение Пуассона не интегрируется явно в силу наличия дополнительных физических факторов или граничных условий, то его решают численно. В этом случае применяют комбинированные эйлерово-лагранжевы методы “вихрей в ячейках”. Кроме того, методы вихрей в ячейках позволяют существенно сократить вычислительные затраты. На данный момент существуют “быстрые” варианты методов “вихрей в ячейках”, другие вихревые

[1] Институт математики, механики и компьютерных наук, Южный федеральный университет, ул. Мильчакова, 8а, 344090, г. Ростов-на-Дону; доцент, e-mail: vngovoruhin@sfedu.ru

© Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М. В. Ломоносова

алгоритмы, например методы мультипольных разложений и вихревых элементов, которые имеют вычислительную сложность $N \log N$, см. [8, 12–14] и ссылки в них.

В настоящей статье предложен параллельный алгоритм для решения плоских задач динамики невязкой несжимаемой жидкости в геофизических приближениях. Такие модели описывают двумерные течения идеальной несжимаемой жидкости на вращающейся сфере [15] и основаны на уравнениях мелкой воды в баротропном случае с учетом эффектов топографии и силы Кориолиса. В основе алгоритма лежит вариант метода вихрей в ячейках, который первоначально был предложен в [16], а затем развит в [17, 18]. Статья имеет следующую структуру. В разделе 2 дана математическая формулировка модели крупномасштабной вихревой динамики в атмосфере, описан используемый вариант метода вихрей в ячейках. В разделе 3 приведена схема распараллеливания метода, обсуждается параллельный алгоритм, даны оценки его производительности. Раздел 4 посвящен тестовым расчетам и экспериментальному анализу эффективности и масштабируемости алгоритма.

2. Математическая формулировка задачи и метод вихрей в ячейках. Двумерные геофизические течения идеальной несжимаемой жидкости на вращающейся сфере при ряде допущений описываются уравнением переноса абсолютной завихренности q [15, 19]:

$$\frac{dq}{dt} \equiv q_t + \psi_y q_x - \psi_x q_y = 0. \tag{1}$$

Здесь $\dfrac{d}{dt}$ — материальная производная, t — время, x, y — декартовы координаты, ψ — функция тока в относительной вращению сферы системе координат. Нижние символы в уравнении (1) означают дифференцирование по соответствующей переменной. Абсолютная завихренность q является суммой

$$q = \omega + f, \tag{2}$$

где ω — относительная завихренность, а $f = f(x, y) = \Omega \sin(\phi)$ — планетарная завихренность, описывающая влияние силы Кориолиса. Здесь Ω — планетарная угловая скорость вращения и ϕ — географическая широта, равная нулю на экваторе и $\pm\dfrac{\pi}{2}$ на полюсах.

Второе уравнение связывает завихренность q и функцию тока ψ:

$$\Delta\psi = -\omega = -q + f. \tag{3}$$

При отсутствии вращения, т.е. при $f = 0$ и $q \equiv \omega$, система (1)–(3) является уравнениями Эйлера динамики идеальной несжимаемой жидкости.

Для описания динамики атмосферы в окрестности полюса используют приближение γ-плоскости $f(x, y) = f_0 - \dfrac{1}{2}\gamma\big(x^2 + y^2\big)$, где γ — параметр, а f_0 без потери общности может быть взят равным нулю [15, 20].

Поле скорости жидкости $\boldsymbol{v} = \big(v^{(x)}, v^{(y)}\big)$ связано с функцией тока соотношениями

$$v^{(x)} = \psi_y, \quad v^{(y)} = -\psi_x. \tag{4}$$

Для завихренности задается условие в начальный момент времени:

$$q\big|_{t=0} = \omega_0(x, y) + f(x, y) = q^{(0)}(x, y). \tag{5}$$

Для рассматриваемой здесь γ-плоскости уравнение (3) принимает вид

$$-\Delta\psi = q - \frac{1}{2}\gamma\big(x^2 + y^2\big). \tag{6}$$

Равенство нулю материальной производной в уравнении (1) означает, что абсолютная завихренность q переносится пассивно полем скорости (4). Иными словами, значения q, заданные в начальный момент условием (5), сохраняются со временем в каждой жидкой частице. Относительная завихренность ω является пассивно переносимой величиной только при $f = 0$ и изменяет свое значение с течением времени в жидких частицах, если $f \neq 0$. Свойство пассивного переноса лежит в основе вихревых численных методов.

В настоящей статье будем рассматривать прямоугольную область течения (рис. 1)

$$D = \left\{(x, y) : -\frac{a}{2} \leqslant x \leqslant \frac{a}{2}\,;\, -\frac{b}{2} \leqslant y \leqslant \frac{b}{2}\right\} \tag{7}$$

с граничными условиями

$$\psi\big|_{\partial D} = 0. \tag{8}$$

Предложенный ниже алгоритм без существенных изменений может быть адаптирован и к другим постановкам задачи (1)–(3). Это может быть наличие протекания сквозь область, периодические граничные условия, учет β-эффекта.

Для численного решения задачи (1)–(8) используется вариант метода вихрей в ячейках, который был предложен в [16] и развит в [17, 18]. В основе метода лежат следующие положения.

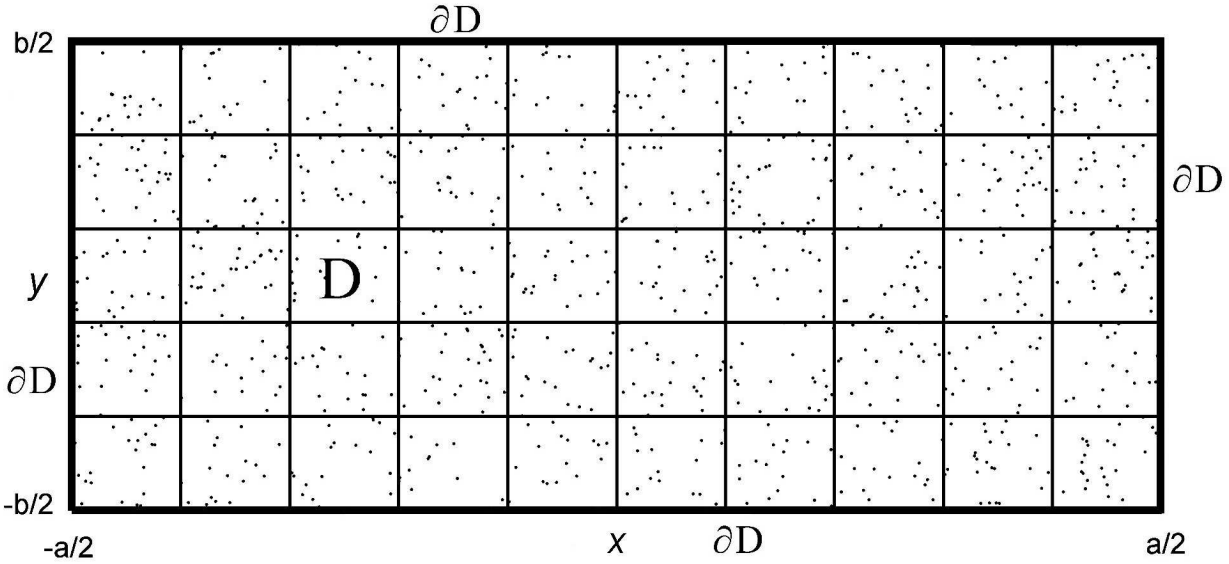

Рис. 1. Разбиение области D на ячейки и распределение частиц в области течения

1. В начальный момент времени в D задается N частиц с координатами $\Big\{\big(x_i(0), y_i(0)\big),\ i = 1, \ldots, N\Big\}$. Координаты частиц могут быть равномерно распределены в узлах прямоугольной сетки или случайным образом (рис. 1). Отметим, что для повышения качества расчета начальное распределение частиц должно сохранять симметрию области течения.

2. Функция завихренности $q(x, y)$ задана значениями q_i в частицах с координатами $\big(x_i(t), y_i(t)\big)$, $i = 1, \ldots, N$. Величина q_i определяется начальным условием (5), т.е. $q_i = q^{(0)}\big(x_i(0), y_i(0)\big)$.

3. Значение q_i сохраняется в жидкой частице (т.е. переносится пассивно) с течением времени t, что следует из уравнения (1). Динамика жидких частиц описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{x}_i = v^{(x)}(x_i, y_i), \quad \dot{y}_i = v^{(y)}(x_i, y_i), \tag{9}$$

где точка — дифференцирование по t. Для решения задач Коши для систем динамики жидких частиц (9) использовался псевдосимплектический интегратор PS36 [21], эффективность которого для подобных задач показана в [22].

4. Для получения выражения компонент скорости $\big(v^{(x)},\ v^{(y)}\big)$ функция ψ в каждый момент времени t приближается отрезком ряда Фурье

$$\psi \approx \tilde{\psi} = \sum_{i=1}^{k_x} \sum_{j=1}^{k_y} \psi_{ij}(t) g_{ij}(x, y), \tag{10}$$

где $g_{ij}(x, y)$ — базисные функции. В случае (7) и условий (8) используются

$$g_{ij}(x, y) = \frac{2}{\sqrt{a\,b}} \sin\left(i\pi\,\frac{(x - a/2)}{a}\right) \sin\left(j\pi\,\frac{(y - b/2)}{b}\right). \tag{11}$$

5. Для аппроксимации $q(x, y)$ область D разбивается на $N_{\text{box}} = n_x \times n_y$ ячеек прямоугольной формы (рис. 1), в каждой из которых

$$q(x, y) \approx q^{(ap)} = \sum_{k=1}^{N_{\text{box}}} \sum_{i,j=0, i+j \leqslant 3}^{3} c_{k,i,j} x^i y^j. \tag{12}$$

Вне k-й ячейки коэффициенты $c_{k,i,j}$ равны нулю, а внутри нее находятся из минимизации следующего выражения (метод наименьших квадратов):

$$\sum_m \left(\sum_{i,j=0, i+j\leqslant 3}^{3} c_{k,i,j} x^i y^j - q_m \right)^2 . \tag{13}$$

Здесь суммирование по индексу m идет для номеров частиц, принадлежащих ячейке с номером k.

6. Для каждого t неизвестные коэффициенты ψ_{ij} находятся из решения уравнения (6) методом Бубнова–Галеркина [17]. После стандартных операций проектирования невязки на базисные функции $g_{ij}(x,y)$ возникает система линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов ψ_{ij}. В результате ее решения находятся ψ_{ij} и вычисляется функция тока (10). В случае рассматриваемой здесь задачи коэффициенты находятся явно, а интегралы вида

$$I_{i,j} = \int\limits_D q^{(ap)} g_{i\,j}(x,y)\, dx\, dy \tag{14}$$

вычисляются аналитически, т.е. только с погрешностью аппроксимации (12) функции $q(x,y)$.

7. После того как коэффициенты ψ_{ij} найдены, приближенное выражение для вектора скорости примет вид

$$\begin{aligned} v^{(x)} &\approx \sum_{i=1}^{k_x}\sum_{j=1}^{k_y} \psi_{ij} \frac{2j\pi}{b\sqrt{a\,b}} \sin\left(i\pi\,\frac{(x-a/2)}{a}\right) \cos\left(j\pi\,\frac{(y-b/2)}{b}\right), \\ v^{(y)} &\approx -\sum_{i=1}^{k_x}\sum_{j=1}^{k_y} \psi_{ij} \frac{2i\pi}{a\sqrt{a\,b}} \cos\left(i\pi\,\frac{(x-a/2)}{a}\right) \sin\left(j\pi\,\frac{(y-b/2)}{b}\right). \end{aligned} \tag{15}$$

Описанный метод сохраняет преимущества классического метода Галеркина, а именно: непрерывность полученного решения во всей области течения для любого t, автоматическое удовлетворение граничных условий, возможность использования аналитических выражений при вычислении интегралов и пространственных дифференциальных операторов. При этом этот метод имеет и все достоинства лагранжевых методов, такие как сохранение переносимой скалярной величины в частицах, свобода в распределении частиц и возможность локальной детализации решений, простота программной реализации.

3. Параллельный алгоритм метода вихрей в ячейках. Представленный здесь вариант метода вихрей в ячейках может быть эффективно распараллелен с использованием пространственной декомпозиции области течения на ячейки и распределением расчета динамики частиц по вычислительным узлам. Ниже приведена реализация параллельного алгоритма для многопотоковых компьютеров с общей оперативной памятью, но с некоторыми доработками может быть реализована и на вычислительных комплексах с разделенной памятью. Преобладающими операциями алгоритма являются арифметические вычисления с плавающей запятой с двойной точностью, все данные располагаются в оперативной памяти, что не требует операций с жестким диском и множественных обменов данными между вычислительными узлами.

Бóльшая часть вычислительной нагрузки алгоритма приходится на решение задачи Коши для системы (9), описывающей динамику жидких частиц. Для ее интегрирования применяется псевдосимплектический явный метод Рунге–Кутты PS36, требующий пять вычислений правой части системы (9) на одном временнóм шаге. Чтобы определить вектор скорости частиц, необходимо найти коэффициенты в разложении (10) функции тока ψ. Для этого нужно решать уравнение (6) для каждого t.

Алгоритм метода позволяет выделить ряд величин, которые не зависят от времени. В их вычислении состоит подготовительный этап алгоритма, который включает в себя

— вычисление в узлах разбиения области D на ячейки значений функций $\sin(j\,\pi x_i)$, $\cos(j\,\pi x_i)$, $\sin(k\,\pi y_l)$, $\cos(k\,\pi y_l)$, $j=1,\ldots,k_x$, $k=1,\ldots,k_y$, где x_i, $i=1,\ldots,n_x$ и y_l, $l=1,\ldots,n_y$ — координаты узлов,

— вычисление интегралов вида $\tilde{I}_{i,j} = \int\limits_D \gamma\left(x^2+y^2\right) g_{i,j}(x,y)\, dx\, dy$ для построения решения уравнения (6) методом Бубнова–Галеркина.

Далее описаны фазы алгоритма, которые требуется выполнить при каждом вычислении правой части системы уравнений (9), описывающей динамику N частиц. Для каждой фазы дана оценка вычислительной сложности T_i, выраженная через параметры метода и количество вычислительных узлов p.

1. Определение номеров частиц (*последовательно*), принадлежащих каждой ячейке с номером k расчетной области D. *Вычислительная сложность:* $T_1 = C_1\,N$.

2. Для каждой ячейки с номером k (*параллельно*, распараллеливание по пространству) решается система десяти линейных уравнений (13). Результатом являются значения коэффициентов $c_{k,l,m}$ кусочно-непрерывного приближения (12) с помощью многочленов третьей степени по координатам x и y. *Вычислительная сложность:* $T_2 = C_2\,n_x\,n_y/p$.

3. Вычисление (*параллельно*, распараллеливание по пространству) интегралов (14) с использованием полученных $c_{k,l,m}$ и точного аналитического выражения для $I_{i,j}$ при использовании приближения (12) и базисных функций (11). *Вычислительная сложность:* $T_3 = C_3\,n_x\,n_y/p$.

4. Вычисление (*параллельно*, распараллеливание по базисным функциям метода Галеркина) коэффициентов $\psi_{i,j}$ разложения (10) с использованием полученных значений $I_{i,j}$ и $\tilde{I}_{i,j}$. *Вычислительная сложность:* $T_4 = C_4\,k_x\,k_y/p$.

5. Вычисление (*параллельно*, распараллеливание по номерам частиц) вектора скорости для всех жидких частиц с использованием найденных коэффициентов $\psi_{i,j}$ и выражений (4). В данной работе для вычисления функций $\sin(i\,\pi\,u)$ и $\cos(i\,\pi\,u)$ для каждого фиксированного u при разных i применялись рекуррентные формулы, требующие двух элементарных операций для каждого значения [23]. *Вычислительная сложность:* $T_5 = C_5\,N\,k_x\,k_y/p$.

Пункты 1–5 выполняются пять раз на каждом шаге метода Рунге–Кутты. После вычисления новых координат частиц происходит проверка критериев окончания расчета, контроль положения жидких частиц. Для расчета динамики вихревой конфигурации на временно́м интервале $t \in [0, T_c]$ потребуется $5\lfloor T_c/h_t \rfloor$ вычислений вектора скорости, где h_t — шаг по времени метода PS36.

В шагах 1–5 алгоритма величины C_i, $i = 1, \ldots, 5$, не зависят от параметров метода и являются константами, зависящими от реализации машинной арифметики, метода решения системы десяти линейных алгебраических уравнений (C_2), вида используемых аналитических выражений (C_3, C_4), алгоритмов вычисления тригонометрических функций (C_5).

Общая грубая оценка вычислительной сложности алгоритма на одном временно́м шаге имеет вид

$$T_{\text{step}} \sim 5\left(C_1\,N + \frac{C_2\,n_x\,n_y + C_3\,n_x\,n_y + C_4\,k_x\,k_y + C_5\,N\,k_x\,k_y}{p}\right).$$

Очевидно, что наиболее затратным является последний этап алгоритма — вычисление вектора скорости жидких частиц. Однако количество базисных функций в разложении (10) существенно меньше количества используемых частиц, т.е. $k_x k_y \ll N$, что делает представленный вариант вихревого метода эффективнее обычного метода точечных вихрей, для которого $T_{\text{step}} \sim N^2$.

Алгоритм разработан для многопотоковых компьютеров с общей памятью и реализован на языке C++ с использованием библиотеки OpenMP.

4. Вычислительные эксперименты. Для оценки правильности, точности, вычислительной эффективности и масштабируемости предложенного алгоритма был проведен ряд численных экспериментов, результаты которых приведены в этом разделе. Большинство расчетов проводилось на вычислительном узле с двумя 8-ядерными процессорами Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2667 v2 3.30GHz с 128 Гб оперативной памяти DDR3.

4.1. Расчет неустойчивого стационарного режима. Одним из способов проверки численной схемы решения динамических задач является расчет стационарного режима. Адекватная численная схема сохраняет устойчивый стационарный режим, а неустойчивые режимы не должны разрушаться на достаточно больших временах расчета. Для рассматриваемой здесь задачи таким примером являются следующие стационарные распределения завихренности и функция тока при $\gamma = 0$:

$$\omega(x,y) = \sin\left(i\pi\,\frac{x-a/2}{a}\right)\,\sin\left(j\pi\,\frac{y-b/2}{b}\right), \tag{16}$$

$$\psi(x,y) = \frac{a^2b^2}{\pi^2\left(a^2j^2+b^2i^2\right)}\,\sin\left(i\pi\,\frac{x-a/2}{a}\right)\,\sin\left(j\pi\,\frac{y-b/2}{b}\right). \tag{17}$$

Отметим, что режим (16)–(17) при $i = j = 1$ соответствует устойчивой вихревой стационарной конфигурации, а при всех остальных целочисленных значениях параметров i, j — неустойчивой.

Все представленные в этом разделе расчеты проводились по стандартной схеме контроля точности — вдвое увеличивались параметры метода (число функций, частиц и пр.), и результаты считались корректными, если увеличение не приводило к качественным изменениям, а характерные интегральные величины

не отличались более чем на 1% на стационарной стадии расчета (т.е. до распада стационарной структуры). Ниже приведены результаты только для наиболее детальной дискретизации со следующими параметрами метода: $N = 300\,000$, $k_x = k_y = 50$, $n_x = 180$, $n_y = 60$, $T_c = 250$, $h_t = 0.005$. Часть частиц (100 000) в начальный момент были расположены в узлах равномерной прямоугольной сетки, а остальные случайным образом с равномерным распределением. В первую очередь проводились расчеты для устойчивого режима.

Вычисления показали, что предложенный алгоритм сохраняет устойчивое стационарное распределение ω (16)–(17) при $i = j = 1$ на временах $t \in [0, 5000]$, что соответствует приблизительно сотне оборотов жидких частиц в вихревых ячейках. Для бóльших временны́х интервалов вычисления не проводились. Кроме того, исследовалось сохранение численным алгоритмом неустойчивой стационарной вихревой конфигурации (16)–(17) при $i = 6$, $j = 2$ и размерах прямоугольной области течения $a = 3$, $b = 1$. В качестве вычислимых характеристик погрешности расчета использовались интегральные инварианты задачи. В каждый момент времени вычислялись:

— интеграл завихренности $I_1 = \int\limits_D \omega(x, y)\, dx\, dy$ и его абсолютное отклонение от нулевого значения при $i = 6$, $j = 2$. Вычисление величины I_1 проводилось с использованием аппроксимации поля завихренности (12);

— энстрофия $I_2 = \int\limits_D \omega^2(x, y)\, dx\, dy)$ и ее относительное отклонение от точного значения 0.75 при $i = 6$, $j = 2$. Для вычисления I_2 использовалась интегральная сумма вида $I_2 \approx \sum\limits_j^{N_{\text{box}}} \dfrac{\sum\limits_{i=1} \omega(x_i, y_i)}{N_j}$, где x_i, y_i — координаты частиц в ячейке с номером j, а N_j — количество частиц, находящихся в этой ячейке;

— кинетическая энергия $I_3 = \int\limits_D \boldsymbol{v}^2\, dx\, dy$, которая при $i = 6$, $j = 2$ в начальный момент равна $\dfrac{3}{32\pi^2}$. Значение I_3 находилось интегрированием соответствующего выражения с использованием аппроксимации поля скорости (15).

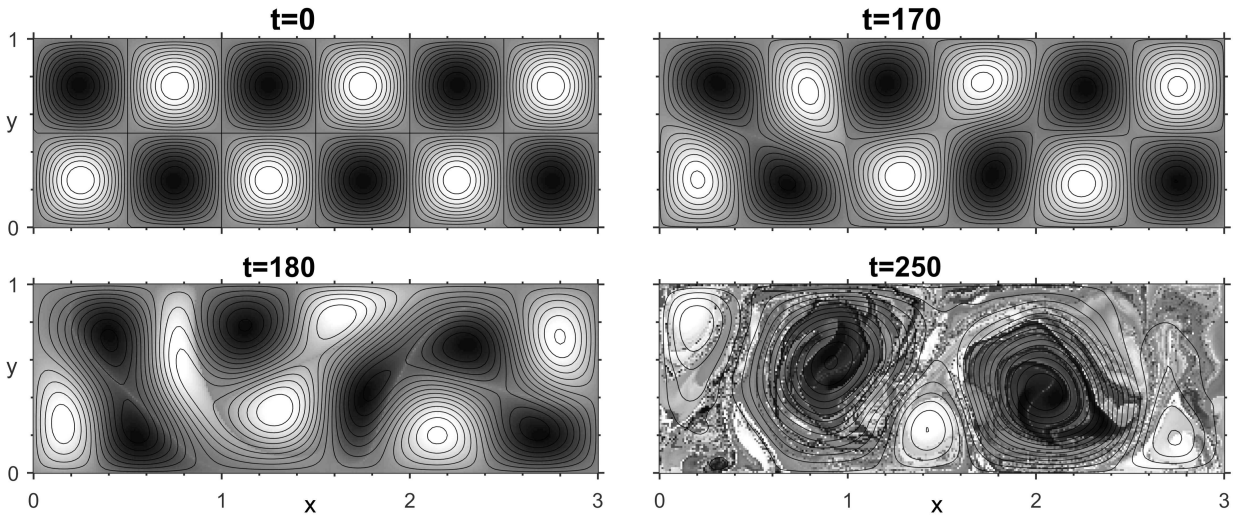

Рис. 2. Линии тока и распределение завихренности в разные моменты времени для расчета с начальным условием (16) при $i = 6$, $j = 2$, $a = 3$, $b = 1$

Результаты вычислений представлены на рис. 2 и 3. На рис. 2 изображены линии тока и распределения завихренности в различные моменты времени t. Видно, что неустойчивая стационарная вихревая конфигурация, выбранная в качестве q_0 в начальном условии (5), сохраняется при расчете нестационарной задачи на временах вплоть до $t \approx 160$, что в среднем соответствует десяткам оборотам жидких частиц в вихревых ячейках. При $t \approx 170$ возмущения режима (здесь они обусловлены накопленной вычислительной погрешностью) приводят к распаду структуры, взаимодействию вихревых пятен и формированию

крупномасштабных конфигураций при $t = 250$, что полностью согласуется с законами вихревой динамики.

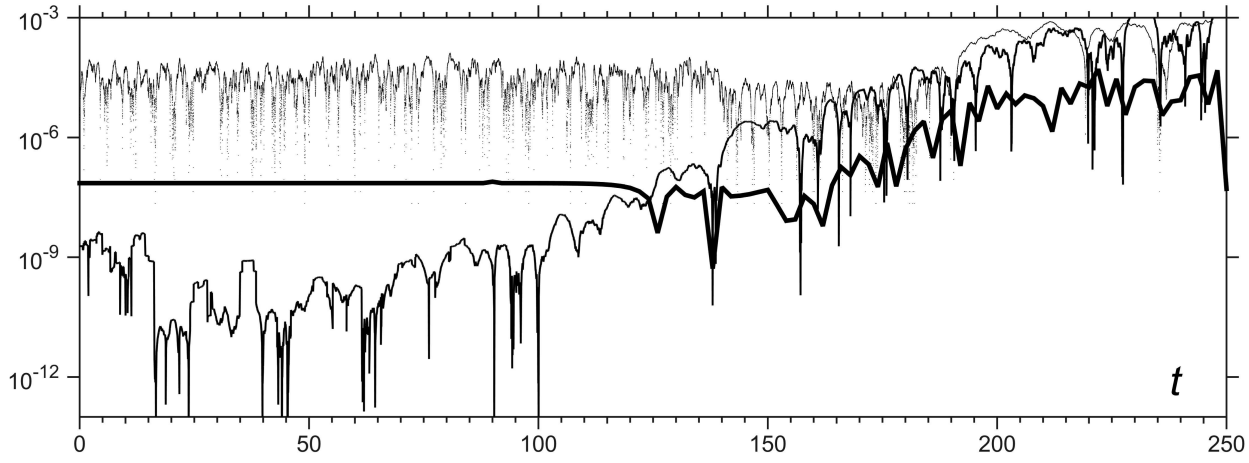

Рис. 3. Динамика абсолютной погрешности интеграла завихренности I_1 (сплошная линия), относительной погрешности вычисления интеграла энстрофии I_2 (точки) и абсолютной погрешности кинетической энергии I_3 (жирная линия)

Динамика вычисленных значений инвариантов задачи представлена на рис. 3. На протяжении всего расчета относительные погрешности величин I_1, I_2, I_3 не превышают 10^{-3}. Разные способы вычисления интегралов позволяют оценить качество различных этапов алгоритма. В частности, высокая точность вычисления I_1 в начале и ее ухудшение с ростом t показывают, что кусочное приближение (12) распределения завихренности требует измельчения разбиения на ячейки при усложнении вихревой структуры. Однако влияние этой погрешности нивелируется при вычислении коэффициентов разложения (10) с использованием (12) в результате операций интегрирования, см. графики величин I_2 и I_3. Относительно малое изменение величины I_3, которая вычисляется с помощью варианта метода Монте-Карло, указывает на то, что на протяжении всего расчета сохраняется близкое к равномерному распределение частиц по ячейкам. Таким образом, представленные результаты расчетов демонстрируют хорошее поведение алгоритма даже в сложных с вычислительной точки зрения ситуациях, таких как расчет экспоненциально неустойчивой вихревой конфигурации.

Параметры метода частиц в ячейках для пяти тестовых расчетов анализа производительности алгоритма

Расчет	N	k_x	k_y	n_x	n_y	T_c	h
1	120000	30	30	60	20	10	0.02
2	240000	30	30	60	20	10	0.02
3	120000	60	60	60	20	10	0.02
4	120000	30	30	75	25	10	0.02
5	240000	60	60	60	20	10	0.02

4.2. Эксперименты по оценке производительности алгоритма. Серия вычислительных экспериментов проводилась для оценки производительности параллельного алгоритма. Исследовалась его масштабируемость, т.е. изменение времени вычисления при увеличении числа процессоров и сохранении общего размера задачи. В качестве тестового примера рассматривался расчет динамики с начальным распределением завихренности (16) при $i = 6$, $j = 2$ в прямоугольнике D со сторонами $a = 3$, $b = 1$ на интервале $t \in [0, 10]$. Вычисления проводились для различных параметров численного метода (см. таблицу) в трех вычислительных средах: на узлах вычислительного Linux-кластера Южного федерального университета (ЮФУ), которые представляют собой компьютер с двумя 4-ядерными процессорами Intel Xeon E5345 2.33GHz (всего 8 потоков) и оперативной памятью 16 Гб; на персональном компьютере с процессором Intel Core I7-3612QM 2.1GHz (4 ядра и 8 потоков) и оперативной памятью 4 Гб под управлением операционной системы Windows 8; на Linux-кластере физического факультета ЮФУ на узле с двумя 8-ядерными процессорами (16 потоков) Intel(R) Xeon(R) E5-2667 v2 3.30GHz и 128 Гб оперативной памяти. В первом случае использовался компилятор GCC [24], во втором — Visual Studio 2012 C++ [25], а в третьем — icpc Intel(R) C++ Compiler. У всех компиляторов использовалась опции оптимизации кода для скорости вычислений. Результаты для всех вычислительных сред получились качественно одинаковыми, и в статье представлены только для 16-потокового узла.

Результаты численных экспериментов представлены графически на рис. 4. Видно, что при малом числе вычислительных потоков ускорение близко к линейному, что демонстрирует хорошую масштабиру-

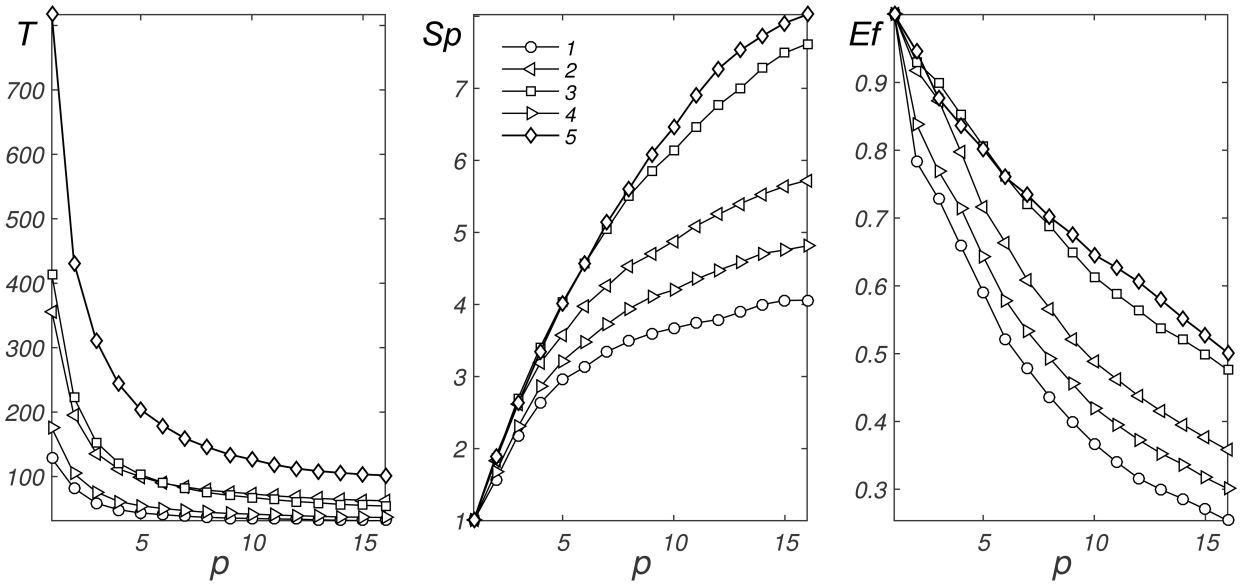

Рис. 4. Время вычисления (T), ускорение (Sp) и эффективность (Ef) параллельного алгоритма в зависимости от числа вычислительных потоков для пяти наборов параметров метода (см. таблицу)

емость разработанного параллельного алгоритма. При росте числа потоков эффективность распараллеливания снижается, что можно объяснить растущими "накладными расходами", связанными с организацией параллельной работы алгоритма. Наибольшее ускорение достигается для набора параметров 5 из таблицы, который соответствует самому затратному с точки зрения вычислительной сложности тестовому расчету. Очевидно, что доминирующим является последний 5-й шаг алгоритма. Об этом свидетельствуют как приведенные выше оценки вычислительной сложности этапов алгоритма, так и результаты вычислений. При росте количества частиц и членов в разложении (10) растет время расчета и вычислительная сложность, но также увеличивается и коэффициент ускорения алгоритма при параллельных расчетах. При больших значениях параметров N, k_x, k_y рост коэффициента ускорения близок к линейному при увеличении числа вычислительных потоков. Использование более мелкого разбиения расчетной области на ячейки приводит к незначительному снижению эффективности параллельного алгоритма. Таким образом, использование многопроцессорной техники позволяет существенно ускорить расчеты при использовании большого числа частиц в предложенном вихревом методе с помощью увеличения количества вычислительных потоков.

4.3. Динамика вихревого пятна эллиптической формы. В работах [26] и [27] исследовалось развитие вихревого пятна эллиптической формы на плоскости с заданной нулевой завихренностью на бесконечности и при $\gamma = 0$. Для вычислений в [27] применялся метод частиц, основанный на использовании известного при таких граничных условиях точного выражения оператора Грина для уравнения (1) при $\gamma = 0$. Результаты этих работ были воспроизведены с высокой степенью качественного совпадения с использованием предложенного алгоритма. Цель полностью повторить расчеты не ставилась, так как описываемый здесь метод предназначен для решения уравнения в ограниченной области.

При вычислениях рассматривался квадратный контейнер со стороной 10, а начальное вихревое поле задавалось функцией распределения относительной завихренности

$$\omega(x,y)\big|_{t=t_0} = e^{-45(x-3/2)^2-15(y-3/2)^2}. \tag{18}$$

Использовались следующие параметры метода: $N = 360\,000$, $k_x = k_y = 50$, $n_x = n_y = 100$, $T_c = 100$, $h_t = 0.01$. Картины распределения завихренности для различных значений t представлены на рис. 5. При $\gamma = 0$ расчеты качественно повторяют результаты работ [26, 27], что демонстрирует корректность и эффективность предложенного алгоритма.

Разработанный алгоритм позволяет исследовать влияние скорости вращения сферы на вихревую динамику на ее поверхности. Были проведены численные эксперименты при росте параметра $\gamma > 0$ и начальном эллиптическом вихревом пятне (18). Некоторые результаты даны на рис. 5. Известно, что существенное влияние на динамику, развитие и взаимодействие распределенных в пространстве вихрей оказывают процессы филаментации [28]. Проделанные расчеты позволяют утверждать, что вращение подавляет филаментацию (рис. 5). Так, при $\gamma = 0$ формируются тонкие структуры, которые развиваются

и усложняются со временем, занимая области вокруг ядра вихря. При росте γ эти области сокращаются. Другим эффектом, обусловленным наличием вращения, является возникновение волн Росби, которые отчетливо видны на рис. 5 при $\gamma = 0.5$ и $t = 40$, 100.

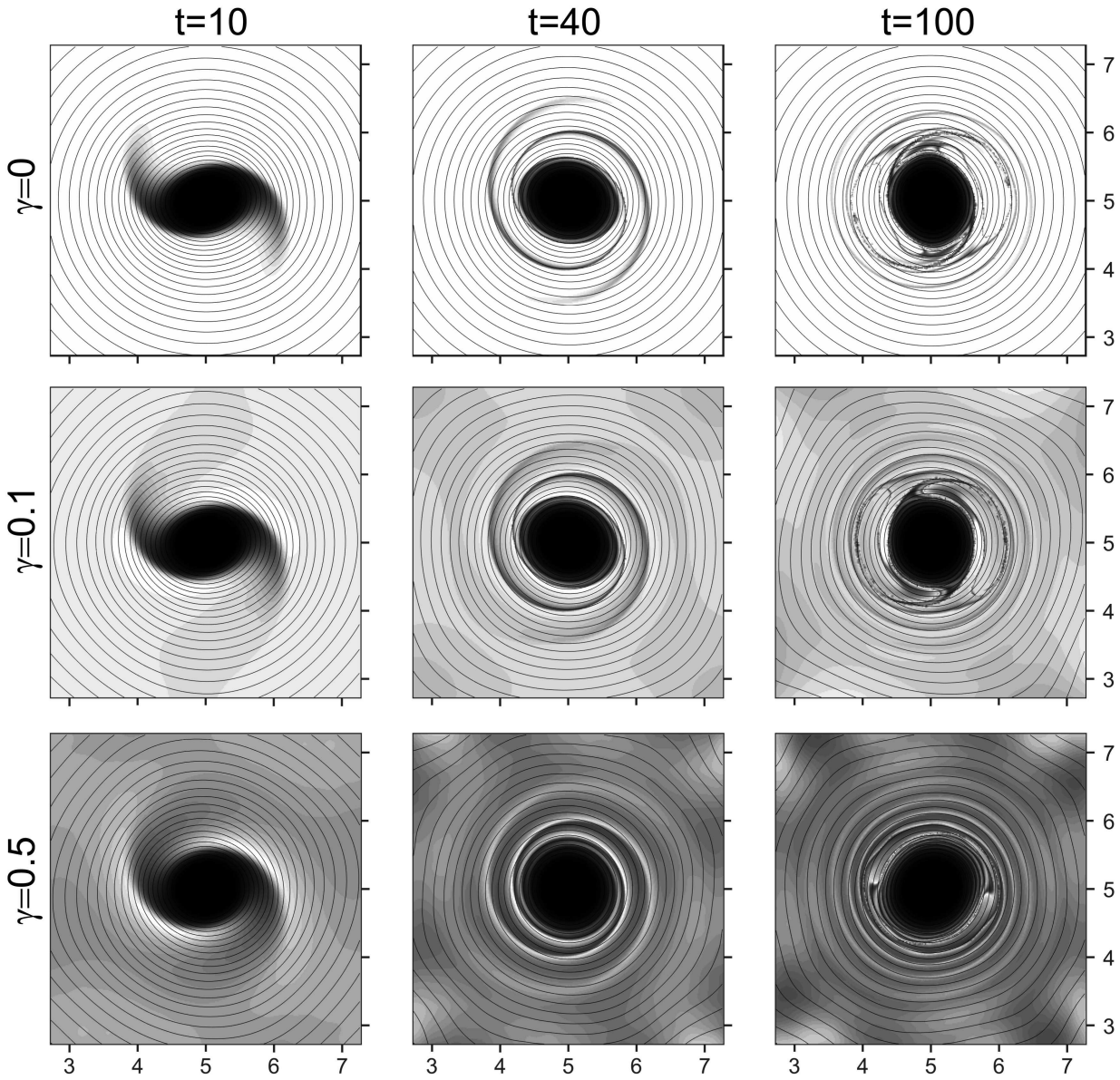

Рис. 5. Линии тока и распределение относительной завихренности ω в различные моменты времени t при разных значениях γ

5. Заключение. Предложен численный метод решения широкого класса задач вихревой динамики. Для реализации метода разработан эффективный параллельный алгоритм, позволяющий проводить исследования вихревой динамики на достаточно больших модельных временах при сравнительно малых временах расчета. В силу большого объема вычислений и консервативности решаемых задач такие расчеты являются вычислительной проблемой для многих альтернативных методов. В статье описана реализация алгоритма для компьютеров с общей оперативной памятью, но его схема без значительных изменений может быть использована и для кластерных систем с разделенной памятью. В этом случае после каждого временно́го шага потребуется обмен данными между вычислительными узлами о частицах, переходящих из одной ячейки в другую. Расчеты показали, что процент таких частиц не велик и необходимые обмены данными не будут приводить к большому объему межпроцессорных коммуникаций на каждом шаге алгоритма. Показанная хорошая масштабируемость алгоритма позволяет предположить, что он окажется эффективным для большого числа вычислительных узлов с распределенной памятью.

Работы по разработке модификаций алгоритма для кластерных систем и графических ускорителей сейчас нами ведутся.

Проведено решение ряда тестовых задач; результаты расчетов хорошо согласуются с точными аналитическими решениями и известными результатами вычислительных экспериментов. С помощью развитого вычислительного подхода начато исследование влияния вращения сферы на вихревую динамику на ней. В частности, показано, что наличие силы Кориолиса подавляет процессы филаментации вблизи полюса, но может возбуждать волны Росби.

Анализ алгоритма позволяет предложить направления его усовершенствования и развития. Очевидно, что при усложнении вихревой структуры необходимы процедуры адаптации и детализации разбиения области течения на ячейки. Это позволит повысить точность вычисления, но потребует разработки процедур добавления частиц в измельченных ячейках и задания значений завихренности в них.

В статье описан алгоритм для расчета течений на так называемой γ-плоскости, т.е. с учетом силы Кориолиса в окрестности полюса. Без существенных переделок метод может быть адаптирован для решения задач как на β-плоскости, так и в более общих постановках для (3). В случае иных граничных условий схема метода сохранится, но потребуется использование других базисных функций в методе Бубнова–Галеркина. Для учета вязкости жидкости может быть применена схема расщепления задачи на адвективную и диффузионную стадии, которая широко применяется в вихревых методах. Еще одним возможным направлением развития метода может быть применение его для расчетов в областях сложной формы. Для этого потребуются следующие дополнительные шаги алгоритма: приближение области течения прямоугольными элементами; построение численного решения для каждого элемента с использованием описанного алгоритма, но с изменением набора базисных функций (с учетом условий на границах элемента); отслеживание перемещения частиц между элементами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (код проекта 14–01–00470).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Андрианов А.Н., Ефимкин К.Н.* Подход к параллельной реализации метода частиц в ячейках. Препринт № 9. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша, 2009.
2. *Гречкин-Погребняков С.Р., Кузьмина К.С., Марчевский И.К.* О реализации вихревых методов моделирования двумерных течений несжимаемой среды с использованием технологии CUDA // Вычислительные методы и программирование. 2015. **16**, № 1. 165–176.
3. *Myerscough K.W., Frank J.* Explicit, parallel Poisson integration of point vortices on the sphere // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2016. **304**. 100–119.
4. *Winkel M., Speck R., Hübner H., et al.* A massively parallel, multi-disciplinary Barnes–Hut tree code for extreme-scale N-body simulations // Computer Physics Communications. 2012. **183**, N 4. 880–889.
5. *Schoemaker R.M., de Haas P.C.A., Clercx H.J.H., Mattheij R.M.M.* A parallel hierarchical-element method for contour dynamics simulations // Computers and Fluids. 2005. **34**, N 10. 1173–1198.
6. *Кукшева Э.А., Снытников В.Н.* Параллельный алгоритм решения задач гравитационной физики, основанный на декомпозиции области // Вычислительные методы и программирование. 2010. **11**. 168–175.
7. *Белоцерковский С.М., Гиневский А.С.* Моделирование турбулентных струй и следов на основе метода дискретных вихрей. М.: Физматлит, 1995.
8. *Cottet G.-H., Koumoutsakos P.D.* Vortex methods: theory and practice. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
9. *Hald O.H.* Convergence of vortex methods for Euler's equations. II // SIAM J. Numer. Anal. 1979. **16**, N 5. 726–755.
10. *Beale J.T., Majda A.* Vortex methods. II: Higher order accuracy in two and three dimensions // Math. Comput. 1982. **39**, N 159. 29–52.
11. *Anderson C., Greengard C.* On vortex methods // SIAM J. Numer. Anal. 1985. **22**, N 3. 413–440.
12. *Strain J.* Fast adaptive 2D vortex methods // Journal of Computational Physics. 1997. **132**, N 1. 108–122.
13. *Дынникова Г.Я.* Использование быстрого метода решения "задачи N тел" при вихревом моделировании течений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009. **49**, № 8. 1458–1465.
14. *Кузьмина К.С., Марчевский И.К.* Об оценках вычислительной сложности и погрешности быстрого алгоритма в методе вихревых элементов // Труды ИСП РАН. 2016. **28**, № 1. 259–274.
15. *Педлоски Дж.* Геофизическая гидродинамика. М.: Мир, 1984.
16. *Govorukhin V.N., Il'in K.I.* Numerical study of an inviscid incompressible flow through a channel of finite length // Int. J. Numer. Methods Fluids. 2009. **60**, N 12. 1315–1333.
17. *Говорухин В.Н.* Вариант метода вихрей в ячейках для расчета плоских течений идеальной несжимаемой жидкости // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2011. **51**, № 6. 1133–1147.
18. *Govorukhin V.N.* A meshfree method for the analysis of planar flows of inviscid fluids // Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Vol. 89. Heidelberg: Springer, 2013. 171–180.

19. *Van Heijst G.J.F.* Topography effects on vortices in a rotating fluid // Meccanica. 1994. **29**, N 4. 431–451.
20. *Должанский Ф.В.* Лекции по геофизической гидродинамике. М.: Изд-во ИВМ РАН, 2006.
21. *Aubry A., Chartier P.* Pseudo-symplectic Runge-Kutta methods // BIT Numer. Math. 1998. **38**, N 3. 439–461.
22. *Говорухин В.Н.* О выборе метода интегрирования уравнений движения множества жидких частиц // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2014. **54**, № 4. 697–710.
23. *Хемминг Р.В.* Численные методы для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1972.
24. GCC, the GNU Compiler Collection. http://gcc.gnu.org/.
25. Microsoft Visual Studio 2012. http://www.microsoft.com.
26. *Driscoll C.F., Fine K.S.* Experiments on vortex dynamics in pure electron plasmas // Physics of Fluids B. 1990. **2**, N 6. 1359–1366.
27. *Koumoutsakos P.* Inviscid axisymmetrization of an elliptical vortex // J. Comput. Phys. 1997. **138**, N 2. 821–857.
28. *Velasco Fuentes O.U.* Vortex filamentation: its onset and its role on axisymmetrization and merger // Dynamics of Atmospheres and Oceans. 2005. **40**, N 1–2. 23–42.

Поступила в редакцию
17.02.2017

Parallel Implementation of a Meshfree Method for Calculating Flows of Ideal Incompressible Fluid

V. N. Govorukhin [1]

[1] *Institute of Mathematics, Mechanics and Computer Sciences, Southern Federal University; ulitsa Milchakova 8a, Rostov-on-Don, 344090, Russia; Ph.D., Associate Professor, e-mail: vngovoruhin@sfedu.ru*

Received February 17, 2017

Abstract: A parallel algorithm for calculating the two-dimensional dynamics of inviscid incompressible fluids on a rotating sphere is proposed. The algorithm is based on the meshfree vortex-in-cell method for solving an initial boundary value problem for unsteady equations describing the motion of an ideal fluid in terms of the absolute vorticity and stream function. The method is based on the approximation of the stream function using the Fourier series. The vorticity field is defined by its values on a set of particles. The particle trajectories are calculated using a pseudo-symplectic integrator. At each time step, the parallelization involves the splitting into subsets of particles and the decomposition of the flow region. The efficiency of the parallel algorithm and its performance are evaluated experimentally for various parameters of the method. The numerical results show a good scalability of the algorithm.

Keywords: meshfree methods, geophysical flows, inviscid incompressible fluid, vortex dynamics, vortex-in-cell method.

References

1. A. N. Andrianov and K. N. Efimkin, *Approach to Parallel Implementation of the Particles in Cell Method*, Preprint No. 9 (Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow, 2009).

2. S. R. Grechkin-Pogrebnyakov, K. S. Kuzmina, and I. K. Marchevsky, "An Implementation of Vortex Methods for Modeling 2D Incompressible Flows Using the CUDA Technology," Vychisl. Metody Programm. **16**, 165–176 (2015).

3. K. W. Myerscough and J. Frank, "Explicit, Parallel Poisson Integration of Point Vortices on the Sphere," J. Comput. Appl. Math. 2016. **304**, 100–119 (2016).

4. M. Winkel, R. Speck, H. Hübner, et al., "A Massively Parallel, Multi-Disciplinary Barnes–Hut Tree Code for Extreme-Scale N-body Simulations," Comput. Phys. Commun. **183** (4), 880–889 (2012).

5. R. M. Schoemaker, P. C. A. de Haas, H. J. H. Clercx, and R. M. M. Mattheij, "A Parallel Hierarchical-Element Method for Contour Dynamics Simulations," Comput. Fluids **34** (10), 1173–1198 (2005).

6. E. A. Kuksheva and V. N. Snytnikov, "A Parallel Algorithm for Solving the Gravitational Physics Problems Based on Domain Decomposition," Vychisl. Metody Programm. **11**, 168–175 (2010).

7. S. M. Belotserkovskii and A. S. Ginevskii, *Simulation of Turbulent Jets and Wakes on the Basis of the Discrete Vortex Method* (Fizmatlit, Moscow, 1995) [in Russian].

8. G.-H. Cottet and P. D. Koumoutsakos, *Vortex Methods: Theory and Practice* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).

9. O. H. Hald, "Convergence of Vortex Methods for Euler's Equations. II," SIAM J. Numer. Anal. **16** (5), 726–755 (1979).

10. J. T. Beale and A. Majda, "Vortex Methods. II: Higher Order Accuracy in Two and Three Dimensions," Math. Comput. **39** (159), 29–52 (1982).

11. C. Anderson and C. Greengard, "On Vortex Methods," SIAM J. Numer. Anal. **22** (3), 413–440 (1985).

12. J. Strain, "Fast Adaptive 2D Vortex Methods," J. Comput. Phys. **132** (1), 108–122 (1997).

13. G. Ya. Dynnikova, "Fast Technique for Solving the N-Body Problem in Flow Simulation by Vortex Methods," Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. **49** (8), 1458–1465 (2009) [Comput. Math. Math. Phys. **49** (8), 1389–1396 (2009)].

14. K. S. Kuzmina and I. K. Marchevsky, "On the Estimations of Efficiency and Error of Fast Algorithm in Vortex Element Method," Tr. Inst. System. Programm., Ross. Akad. Nauk **28** (1), 259–274 (2016).

15. J. Pedlosky, *Geophysical Fluid Dynamics* (Springer, New York, 1979; Mir, Moscow, 1984).

16. V. N. Govorukhin and K. I. Il'in, "Numerical Study of an Inviscid Incompressible Flow through a Channel of Finite Length," Int. J. Numer. Methods Fluids **60** (12), 1315–1333 (2009).

17. V. N. Govorukhin, "A Vortex Method for Computing Two-Dimensional Inviscid Incompressible Flows," Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. **51** (6), 1133–1147 (2011) [Comput. Math. Math. Phys. **51** (6), 1061–1073 (2011)].

18. V. N. Govorukhin, "A Meshfree Method for the Analysis of Planar Flows of Inviscid Fluids," in *Lecture Notes in Computational Science and Engineering* (Springer, Heidelberg, 2013), Vol. 89, pp. 171–180.

19. G. J. F. Van Heijst, "Topography Effects on Vortices in a Rotating Fluid," Meccanica **29** (4), 431–451 (1994).

20. F. V. Dolzhanskii, *Lectures on Geophysical Fluid Dynamics* (Inst. Vychisl. Mat. Ross. Akad. Nauk, Moscow, 2006) [in Russian].

21. A. Aubry and P. Chartier, "Pseudo-Symplectic Runge–Kutta Methods," BIT Numer. Math. **38** (3), 439–461 (1998).

22. V. N. Govorukhin, "On the Choice of a Method for Integrating the Equations of Motion of a Set of Fluid Particles," Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. **54** (4), 697–710 (2014) [Comput. Math. Math. Phys. **54** (4), 706–718 (2014)].

23. R. W. Hamming, *Numerical Methods for Scientists and Engineers* (McGraw-Hill, New York, 1973; Nauka, Moscow, 1972).

24. GCC, the GNU Compiler Collection. http://gcc.gnu.org. Cited May 8, 2017.

25. Microsoft Visual Studio 2012. http://www.microsoft.com. Cited May 8, 2017.

26. C. F. Driscoll and K. S. Fine, "Experiments on Vortex Dynamics in Pure Electron Plasmas," Phys. Fluids B **2** (6), 1359–1366 (1990).

27. P. Koumoutsakos, "Inviscid Axisymmetrization of an Elliptical Vortex," J. Comput. Phys. **138** (2), 821–857 (1997).

28. O. U. Velasco Fuentes, "Vortex Filamentation: Its Onset and Its Role on Axisymmetrization and Merger," Dyn. Atmos. Oceans **40** (1–2), 23–42 (2005).