Реализация параллельных вычислений в программном комплексе «LS-STAG_turb» для моделирования течений вязкой несжимаемой среды на системах с общей памятью

В.В. Пузикова <valeria.puzikova@gmail.com>
МГТУ им. Н.Э. Баумана,
105005, Россия, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, дом 5.

Аннотация. Метод погруженных границ LS-STAG и его модификации для решения сопряженных задач гидроупругости с использованием моделей турбулентности Смагоринского, Спаларта – Аллмараса, $k-\varepsilon$, $k-\omega$ и $k-\omega$ SST в рамках RANS, LES и DES подходов к моделированию турбулентности реализованы в программном комплексе «LS-STAG_turb» для моделирования движения профилей в потоке вязкой несжимаемой среды. Комплекс позволяет моделировать обтекание движущихся профилей произвольной формы и систем из любого числа профилей, имеющих одну или две степени свободы, например, авторотацию роторов ветроэнергетических установок, ветровой резонанс систем профилей. Для сокращения затрат машинного времени на проведение расчетов разработана параллельная версия алгоритмов и проведена оптимизация участков последовательного кода. Использованы такие технологии параллельного программирования, как Intel® Cilk™ Plus, Intel® Threading Building Blocks и OpenMP.

Ключевые слова: технология OpenMP; технология Intel® Cilk™ Plus; технология Intel® Threading Building Blocks; вязкая несжимаемая среда; метод погруженных границ**.**

DOI: 10.15514/ISPRAS-2016-28(1)-13

Для цитирования: Пузикова В.В. Реализация параллельных вычислений в программном комплексе «LS-STAG_turb» для моделирования течений вязкой несжимаемой среды на системах с общей памятью. Труды ИСП РАН, том 28, вып. 1, 2016 г., с. 221-242. DOI: 10.15514/ISPRAS-2016-28(1)-13

1. Введение

Во многих инженерных приложениях возникает необходимость решения сопряженных задач гидроупругости. В качестве примеров можно привести

расчет обтекания роторов ветроэнергетических установок, труб теплообменников энергетических установок, удлиненных элементов конструкций зданий и сооружений, проводов линий электропередачи и т.п. Такие задачи из-за необходимости моделирования взаимного влияния течения жидкости и движения погруженного в нее тела являются достаточно сложными для численного решения и требуют применения высокоточных численных методов. Кроме того, поскольку из-за движения тела форма расчетной области изменяется в процессе расчета, при использовании сеточных методов с сеткой, связанной с телом, достаточно существенными становятся вычислительные затраты на перестроение сетки. Однако, существуют сеточные методы, в которых сетка не связана с границей тела и не изменяется на протяжении всего расчета, несмотря на движение обтекаемого тела. Такие методы относятся к классу методов погруженных границ [1]. Данные методы предполагают использование прямоугольных сеток. При пересечении прямоугольных ячеек сетки с границей области течения образуются ячейки неправильной формы, называемые усеченными. При использовании методов погруженных границ важно обеспечить высокую точность решения задачи именно в усеченных ячейках, поскольку на них задаются граничные условия, и, кроме того, решение вблизи границы обтекаемого тела (погруженной границы) может иметь большие градиенты.

К наиболее эффективным методам этого класса относят метод LS-STAG [2]. LS-STAG-сетка состоит из трех разнесенных сеток, ячейки которых представляют собой контрольные объемы для скоростей и давления. Для представления погруженной границы используется аппарат функций уровня [3], а LS-STAG-дискретизация производится по одним и тем же формулам, как в прямоугольных ячейках, так и в усеченных, причем шаблон дискретизации имеет в двумерном случае пятиточечную структуру. Все это позволяет значительно снизить затраты машинного времени на обработку усеченных ячеек. В работе [2] построена LS-STAG-дискретизация двумерных уравнений Навье – Стокса для вязкой несжимаемой среды. Автором настоящей статьи разработаны модификации метода LS-STAG, позволяющие использовать модели турбулентности Смагоринского, Спаларта – Аллмараса, $k-\varepsilon$, $k-\omega$ и $k-\omega$ SST в рамках RANS, LES и DES подходов [4, 5], а также модификации метода LS-STAG для решения сопряженных задач гидроупругости [6]. Как и многие «нестандартные» высокоточные методы, метод погруженных границ LS-STAG не реализован в широко распространенных пакетах вычислительной гидродинамики, поэтому весьма актуальной задачей является разработка эффективной программной реализации метода LS-STAG и его модификаций.

Автором разработан программный комплекс «LS-STAG_turb» для моделирования движения профилей в потоке вязкой несжимаемой среды [7]. Программа написана на языке C++ и имеет объектно-ориентированную легко расширяемую структуру. Комплекс позволяет моделировать обтекание

движущихся профилей произвольной формы, например вращение роторов ветроэнергетических установок. Кроме того, возможно моделирование обтекания систем, состоящих из любого числа подвижных профилей, имеющих одну или две степени свободы. Результаты верификации комплекса демонстрируют высокую точность метода LS-STAG и разработанных модификаций: удается качественно и количественно верно моделировать достаточно сложные и «тонкие» гидродинамические эффекты, например, эффект стабилизации следа за круговым профилем, совершающим высокочастотные вращательные колебания, известный как эффект Танеды [8, 9]. При этом для получения точных количественных результатов в случае моделирования явлений, отличающихся высокими скоростями движения профилей, и, соответственно, высокими значениями местного числа Рейнольдса, которые характерны, например, для ветрового резонанса профиля или системы профилей, необходимо сильное измельчение сетки, что приводит к резкому росту затрат вычислительных ресурсов. Для решения этой проблемы необходимо разработать параллельную версию программного комплекса «LS-STAG_turb».

Для распараллеливания вычислений при решении задач вычислительной механики часто используют методы декомпозиции области [10]. Идея методов декомпозиции заключается в том, что расчетная область разбивается на пересекающиеся или непересекающие подобласти и исходная задача представляется в виде совокупности вспомогательных краевых задач в этих подобластях. При этом на границах подобластей, совпадающих с границами исходной расчетной области, ставятся граничные условия из исходной задачи, а на остальных границах подобластей, называемых внутренними, ставятся условия сопряжения, которые записываются в виде граничных условий третьего рода. Решение вспомогательных задач может осуществляться параллельно, при этом эффективность полученного алгоритма зависит от многих факторов [11]: наличия и величины пересечения смежных подобластей, топологии декомпозиции области, типов граничных условий на внутренних границах подобластей, организации итерационных процессов, эффективности распараллеливания вычислений при решении вспомогательной задачи в подобласти. На LS-STAG-сетке дополнительные сложности также возникают из-за наличия твердых и усеченных ячеек и изменения их местоположения при перемещении подвижной погруженной границы. Таким образом, разработка параллельного алгоритма решения задачи методом LS-STAG, основанного на декомпозиции расчетной области, представляет собой предмет отдельного исследования. В рамках данной работы рассматриваются только вопросы оптимизации и распараллеливания вычислений при решении одной задачи в расчетной области без подобластей. Разработанные алгоритмы впоследствии также можно будет применять для эффективного решения вспомогательнх задач в подобластях.

2. Программный комплекс «LS-STAG_turb»

Общая схема работы программного комплекса «LS-STAG_turb» представлена на рис. 1. В блоке Б1 происходит заполнение полей структуры описания задачи из файла с постановкой, инициализация сервисной информации (текущее время, номер итерации, пути к папкам с результатами), открытие лог-файла, инициализация экземпляров структур, реализующих работу с решениями, LS-STAG-сеткой и разностыми аналогами решаемых уравнений. Затем запускается процесс моделирования: до выполнения заданного числа шагов по времени выполняются блоки Б2–Б7.

Рис. 1. Блок-схема работы программного комплекса «LS-STAG_turb»
Fig. 1. Block diagram of the «LS-STAG_turb» software system

При моделировании движения погруженных границ в блоке Б2 происходит пересчет функции уровня и зависящих от нее характеристик сетки. В комплексе «LS-STAG_turb» реализован алгоритм построения функции уровня для профиля произвольной формы при помощи аппроксимации границы кривой Безье [12], что позволяет моделировать обтекание профилей сложной формы и их систем (рис. 2).

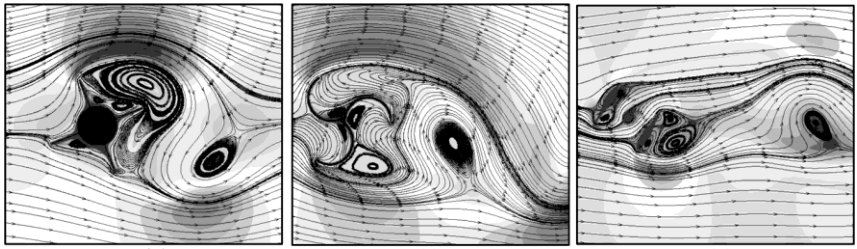


Рис. 2. Авторотация профилей различных форм, смоделированная в программном комплексе «LS-STAG_turb»: (а) пропеллер с четырьмя лопастями; (б) ротор Савониуса с тремя лопастями; (в) ротор Дарье с двумя лопастями в форме симметричного крылового профиля ЦАГИ серии В с относительной толщиной 20 %
Fig. 2. Autorotation of profiles of differbent shapes, modeled in the «LS-STAG_turb» software package: (a) propeller with four blades; (б) Savonius rotor with three lobes; (в) Darrieus rotor with two blades in the form of a symmetrical airfoil TsAGI of B Series with a relative thickness of 20%

При моделировании движения погруженных границ перед пересчетом правых частей решаемых систем линейных алгебраических уравнений в блоке Б3 также происходит решение разностных аналогов уравнений движения обтекаемого профиля или системы профилей и пересчет матриц разностных аналогов операторов и предобуславливателей. Все эти операции выполняются в методе `solve()` базовой структуры `DiscreteEquationInterface`, реализующей работу с разностными аналогами уравнений, перед решением систем линейных алгебраических уравнений (блок Б4). На каждом шаге по времени происходит решение двух разностных аналогов уравнения Гельмгольца для прогнозов скоростей и одного разностного аналога уравнения Пуассона для поправки давления. Значения скоростей и давления на текущем шаге по времени получаются после коррекции полученных прогнозов и поправок в блоке Б5. Помимо этого при использовании моделей турбулентности в блоке Б5 происходит решение разностных аналогов уравнений из используемой модели турбулентности и расчет рейнольдсовых или подсеточных напряжений, которые учитываются при пересчете правых частей систем для прогнозов скоростей на следующем шаге по времени. В зависимости от информации из структуры с описанием постановки задачи после этого может быть произведен расчет действующих на погруженные границы со стороны потока сил (блок Б6) или осуществлено сохранение в файл результатов моделирования и текущего состояния расчета (блок Б7). По окончании процесса моделирования происходит запись в лог-файл данных о времени завершения расчета и его продолжительности.

Для верификации разработанного программного комплекса «LS-STAG_turb» использовались тестовые задачи о моделировании обтекания неподвижных и движущихся профилей различных форм. В частности, смоделирован

наблюдавшийся в эксперименте [8] эффект стабилизации следа за профилем, совершающим высокочастотные вращательные колебания, известный как эффект Танеды и редко воспроизводимый численно (рис. 3). Все результаты верификационных расчетов хорошо согласуются с известными в литературе экспериментальными и расчетными данными.

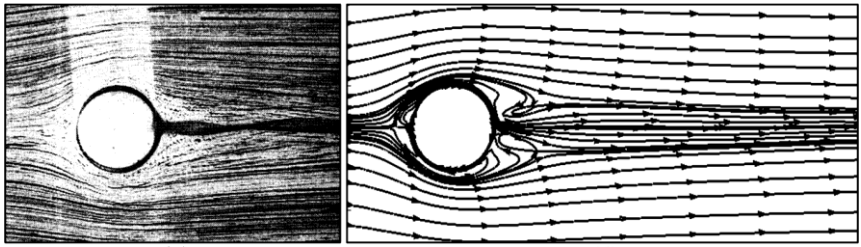


Рис. 3. Стабилизация следа за круговым профилем, совершающим высокочастотные вращательные колебания при $\mathrm{Re} = 111$*: (а) эксперимент [8]; (б) расчет методом LS-STAG*

Fig. 3. Track stabilization of circular profile committing high-frequency rotational oscillations at: (A) experiment [8]; (B) calculation with method LS-STAG

Помимо моделирования течений вязкой несжимаемой среды, описываемых уравнениями Навье – Стокса, программный комплекс «LS-STAG_turb» позволяет проводить расчеты с использованием моделей турбулентности Смагоринского, Спаларта – Аллмараса, $k-\varepsilon$, $k-\omega$ и $k-\omega$ SST в рамках RANS, LES и DES подходов к моделированию турбулентности. Пример такого расчета представлен на рис. 4. Также имеется возможность моделирования обтекания профилей и их систем, имеющих 1 или 2 степени свободы (рис. 5). Как было отмечено выше, для получения точных количественных результатов в задачах такого плана необходимо сильное измельчение сетки, приводящее к резкому росту вычислительных затрат. Решением данной проблемы может служить распараллеливание вычислений.

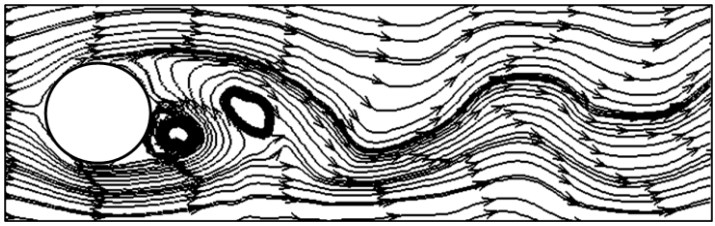


Рис. 4. Обтекание кругового профиля при $\mathrm{Re} = 3900$*, смоделированное в программном комплексе «LS-STAG_turb» с использованием модели турбулентности Спаларта – Аллмараса в рамках подхода RANS*

Fig. 4. Flow around a circular profile with Re = 3900 modeled in the software package «LS-STAG_turb» using Spalart--Allmaras turbulence model with approach RANS

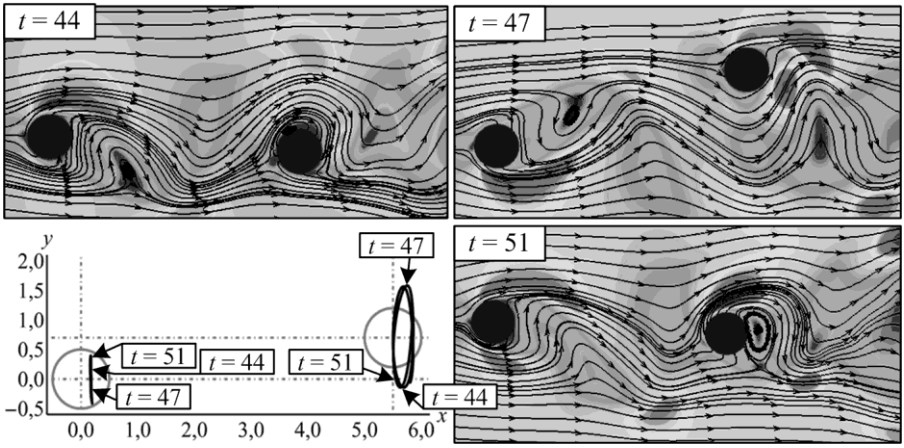


Рис. 5. Ветровой резонанс системы из двух круговых профилей, расположенных под углом выноса и имеющих 2 степени свободы, при $\mathrm{Re} = 100$*, смоделированный в программном комплексе «LS-STAG_turb»: траектории движения центров профилей и линии тока в моменты времени* $t = 44$, $t = 47$ *и* $t = 51$

Fig. 5. Wind resonance of a system of two circular profiles placed at an angle of carrying out and having two degrees of freedom, when modeled in the software package «LS-STAG_turb»: trajectory profiles centers and line of flow at times t = 44, t = 47, and t = 51

3. Постановка тестовой задачи и используемые аппаратно-программные средства

В качестве задачи для тестирования эффективности разрабатываемых параллельных алгоритмов рассмотрим задачу о моделировании обтекания кругового профиля диаметра D, совершающего в невозмущенном потоке вынужденные поперечные колебания по закону

$$\begin{cases} X_{\mathrm{C}} = X_C^0, \\ Y_{\mathrm{C}} = Y_C^0 + \begin{cases} A, & t < 10D/V_\infty, \\ A\cos(2\pi S_e[tV_\infty - 10D]/D), & t \geq 10D/V_\infty, \end{cases} \end{cases}$$

где A – амплитуда колебаний кругового профиля, S_e – кинематическое число Струхаля, (X_C^0, Y_C^0) – координаты центра профиля в среднем положении, (X_C, Y_C) – координаты центра профиля в текущий момент времени, V_∞ – скорость набегающего горизонтального потока, t – безразмерное время. При тестировании модификаций программного комплекса и параллельных алгоритмов будем моделировать 30 единиц безразмерного времени на

неравномерной сетке 240×296 (линейный размер ячейки сетки вблизи границы профиля $h = 0{,}03125$) с шагом по времени $\Delta t = 0{,}005$ при $A = 0{,}2D$, $D = 1{,}0$, $V_\infty = 1{,}0$, $\mathrm{Re} = 185$, $S_e/\mathrm{Sh} = 1{,}2$, где Re – число Рейнольдса, $\mathrm{Sh} \approx 0{,}201$ – число Струхаля (безразмерная частота схода вихрей), вычисленное при данном значении числа Рейнольдса для неподвижного профиля. Далее эту тестовую задачу будем обозначать VerOscTest.

Тестирование проводилось на рабочей станции, построенной на платформе Intel H81 с использованием двухъядерного процессора Intel Core i3-4350T (Haswell) с поддержкой HyperThreading (4 логических ядра), работающего на частоте 3100 МГц. Рабочая станция оснащена 8 ГБайт оперативной памяти DDR3-1333, SSD-накопителем Crucial объемом 128 ГБайт и жестким диском Seagate объемом 1 ТБайт. Внешние графические карты в рабочей станции не использовались. Далее эту рабочую станцию будем обозначать PC1.

Для исследования масштабируемости алгоритмов помимо PC1 также использовалась рабочая станция, построенная на платформе Intel Z97 с использованием 4-ядерного процессора Intel Core i7-4790K (Devil's Canyon) с поддержкой технологии HyperThreading (8 логических ядер), работающего на частоте 4400 МГц. Рабочая станция оснащена 16 ГБайт оперативной памяти DDR3-1600 и двумя SSD-накопителями Crucial объемом 256 ГБайт и 1 ТБайт. Внешние графические карты в рабочей станции не использовались. Данную рабочую станцию будем обозначать PC2.

Время решения тестовой задачи последовательным программным комплексом «LS-STAG_turb», при разработке которого использовался компилятор Microsoft Visual Studio 2010, на PC1 составляет 4666 с. Использование вместо этого компилятора оптимизирующего компилятора Intel C++ 15.0 позволяет без модификаций исходного кода уменьшить время счета на 0,5 %. Включение опции компилятора /MT предписывает приложению использовать многопоточную статическую версию библиотеки времени выполнения и разрешает дополнительные оптимизации компилятора, использующие многопоточность. После включения этой опции время решения тестовой задачи VerOscTest на PC1 составило 3968 с. Таким образом, время проведения расчета удалось сократить на 15 %. При проведении дальнейших экспериментов по оптимизации программы и распараллеливанию вычислений будем использовать компилятор Intel C++ 15.0 с опцией /MT.

4. Оценка эффективности распараллеливания вычислений

Определим, какие вычисления имеет смысл распараллелить в первую очередь. Для этого необходимо выделить участки программы, на выполнение которых расходуется наибольшее количество времени. Полная структура временны́х затрат при решении тестовой задачи VerOscTest (рис. 6) была определена с помощью профилировщика AMD CodeAnalyst [13]: 48,0 % времени работы программы занимает выполнение умножения разреженной матрицы на вектор

(операция 1), а 34,5 % – решение систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональными матрицами методом прогонки при выполнении сглаживания в многосеточном предобуславливателе (операция 2). Решение систем линейных алгебраических уравнений методом BiCGStab без учета затрат времени на работу предобуславливателей (операция 3) занимает 16,5 % времени выполнения расчета, прочие операции – 1 %.

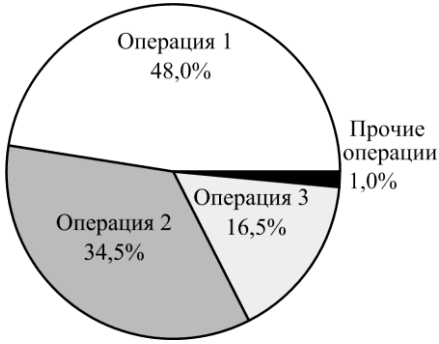


Рис. 6. Структура временны́х затрат при решении тестовой задачи VerOscTest
Fig. 6. Structure of time spent in solving test problem VerOscTest

Поскольку внутри операции 3 выполняются различные операции над векторами (вычисление скалярного произведения, нормы вектора и т.д.), сначала сосредоточимся на распараллеливании операций 1 и 2. Оценим максимальное ускорение, которое можно получить при распараллеливании только операции 1 или операций 1 и 2, при помощи закона Амдала [14], который гласит, что для системы из S вычислительных ялер максимально возможное ускорение программы с долей P параллельного кода и $(1-P)$ последовательного кода равно $\alpha = 1/((1-P)+P/S)$. Полученные оценки приведены в табл. 1. Они соответствуют случаю идеального (линейного) распараллеливания, при котором параллельный код на вычислительной системе с S ядрами выполняется в S раз быстрее. Реальное ускорение будет ниже, поскольку при переходе от последовательной программы к параллельной добавятся накладные расходы на поддержку многопоточных вычислений: расходы на создание задач и потоков, расходы на работу планировщика потоков, расходы на запуск и синхронизацию потоков, коммуникационные издержки на передачу информации между потоками, издержки в виде дисбаланса загрузки ядер из-за точек синхронизации или конфликтов в конвейере процессора и планировщике операционной системы. Далее для распараллеливания вычислений будем использовать такие технологии параллельного программирования, как Intel® Cilk™ Plus [15], Intel® TBB [16], OpenMP (реализация из Intel® Parallel Studio XE 2015,

стандарт 4.0). Эти технологии предполагают, что пользователь при помощи ключевых слов лишь обозначает задачи, выполняемые параллельно, а организация управления потоками и работы с ними определяются самой технологией. Таким образом, вышеперечисленные накладные расходы на поддержку многопоточности, а, значит, и реальное ускорение, зависят от используемой технологии параллельного программирования.

Табл. 1. Максимально возможное ускорение при распараллеливании операций 1 и 2
Table. 1. The maximum possible acceleration when parallelizing operations 1 and 2

Распараллеливаемые операции	*P*	Максимальное ускорение, раз		
		2 ядра	4 ядра	8 ядер
1	0,480	1,316	1,563	1,724
1, 2	0,825	1,702	2,623	3,596

Получить оценки ожидаемого ускорения в зависимости от используемой технологии параллельного программирования позволяет инструмент Intel® Advisor [17]. Для этого необходимо подключить заголовочный файл `advisor-annotate.h` и выделить содержимое операции при помощи команд `ANNOTATE_SITE_BEGIN()` и `ANNOTATE_SITE_END()`. Для операции 1 таким образом было получено, что наибольшее ускорение при использовании любой из трех рассматриваемых технологий прогнозируется при расчете на системе с четырьмя ядрами. Согласно прогнозу, использование OpenMP и Intel® TBB приведет к замедлению работы программы, а Intel® Cilk™ Plus – к незначительному ускорению (на 20 %). Тем не менее, поскольку оценки Intel® Advisor являются приблизительными, представляется целесообразной поддержка в разрабатываемом приложении всех перечисленных технологий параллельного программирования и переключение между ними при помощи директив препроцессора по определениям `LS_STAG_USE_CILK`, `LS_STAG_USE_OMP` и `LS_STAG_USE_TBB`.

5. Оптимизация и распараллеливание вычислений

Произведем преобразование последовательного кода в параллельный при помощи рассматриваемых технологий параллельного программирования на примере операции 1 – умножения разреженной матрицы на вектор, хранящийся в массиве `multiplier`, с сохранением результата в массив `Vector`. Разреженная матрица хранится в формате CSR [18]: элементы матрицы хранятся в массиве `m_Cell`, портрет – в массиве `m_Portrait`, а индексы элементов, с которых начинаются строки матрицы – в массиве `m_Num`. Последовательная реализация метода имеет следующий вид:

```
for(int i = 0; i < size; i++)
```

```
{ double aux = 0.0;
  for(int j = m_Num[i]; j < m_Num[i+1]; j++)
      aux += m_Cell[j] * multiplier[m_Portrait[j]];
  Vector[i] = aux;
};
```

Итерации внешнего цикла являются независимыми, поэтому для распараллеливания вычислений достаточно при использовании технологии Intel® Cilk™ Plus вместо `for` написать `cilk_for`, а при использовании OpenMP – перед `for` поставить `#pragma omp parallel for`. При использовании технологии Intel® TBB код параллельной версии данного метода получается более громоздким, но при помощи лямбда-выражений из стандарта C++11 его можно записать следующим образом:

```
tbb::parallel_for(tbb::blocked_range<int>(0,size),
  [=](const tbb::blocked_range<int>& r)
     { for(int i = r.begin(); i < r.end(); i++)
       { double aux = 0.0;
         for(int j = m_Num[i]; j < m_Num[i+1]; j++)
           aux += m_Cell[j] * multiplier[m_Portrait[j]];
         Vector[i] = aux;
       }
     }            )
```

Количество ядер для Intel® Cilk™ Plus и OpenMP задается при помощи `__cilkrts_set_param` и `omp_set_num_threads` соответственно, а для Intel® TBB указывается при создании планировщика – экземпляра класса `tbb::task_scheduler_init`.

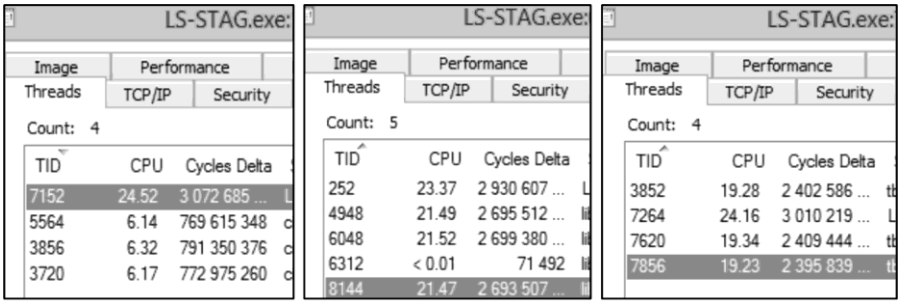
Поскольку Intel® Advisor показал, что оптимальным является использование вычислительной системы из четырех ядер, тестовая задача VerOscTest была решена на PC1 с использованием четырех логических ядер при помощи программы с распараллеленной операцией 1. Время счета и достигнутое ускорение представлено в табл. 2. Наибольшее ускорение, достаточно близкое к полученной по закону Амдала оценке (в 1,563 раза), достигнуто при использовании Intel® Cilk™ Plus. При этом для всех трех технологий полученные ускорения достаточно сильно превышают оценки Intel® Advisor. Также не подтвердился прогноз Intel® Advisor о том, что технология Intel® TBB позволит получить бóльшее ускорение, чем OpenMP. Это свидетельствует о целесообразности предусмотренной в разработанном программном комплексе возможности задания используемой технологии параллельного программирования при помощи определений препроцессора.

Табл. 2. Время счета на PC1 с использованием 4 логических ядер и ускорение при распараллеливании операции 1

Table. 2. Time of calculatiion on PC1 with 4 logical cores and acceleration when parallelizing operations 1

Технология	Intel® Cilk™ Plus	OpenMP	Intel® TBB
Время счета, с	2548	2713	2870
Ускорение, раз	1,557	1,463	1,383

Сравним также работу планировщиков (диспетчеров) потоков рассматриваемых технологий параллельного программирования. Для этого используем программу ProcessExplorer [19], предназначенную для мониторинга процессов в системе. Информация о потоках приложения при расчете на четырех логических ядрах представлена на рис. 7.



(а) *(б)* *(в)*

Рис. 7. Информация о потоках приложения при расчете на четырех логических ядрах с использованием: (а) Intel® Cilk™ Plus; (б) OpenMP; (в) Intel® TBB
Fig. 7. Information about the application threads based on four logical cores using: (а) Intel® Cilk ™ Plus; (б) OpenMP; (в) Intel® TBB

При использовании рассматриваемых технологий потоки создаются один раз, поскольку их идентификаторы (TID) не изменяются на протяжении всего расчета. При этом диспетчеры потоков работают в основном потоке приложения, однако диспетчер потоков OpenMP создает дополнительный дочерний поток (на рис. 7, *б* это поток с TID, равным 6312), который занимается мониторированием рабочих потоков (судя по низкой загрузке потока – обслуживанием конфликтов). В результате на основной диспетчер потоков OpenMP ложатся дополнительные накладные расходы по обслуживанию этого мониторирующего потока, что, по-видимому, приводит к увеличению времени проведения расчета и к меньшему по сравнению с Intel® Cilk™ Plus ускорению (табл. 2). Тем не менее, время счета при использовании OpenMP оказалось меньше, чем при использовании Intel® TBB. Это свидетельствует о том, что основной диспетчер потоков OpenMP из Intel Parallel Studio 2015 реализован достаточно эффективно. Также необходимо отметить, что при использовании технологии Intel® Cilk™ Plus время проведения расчета оказалось наименьшим, хотя загрузка ядер рабочими дочерними потоками приложения была примерно в 3 раза ниже, чем при

использовании OpenMP и Intel® TBB. Из этого можно сделать вывод, что диспетчер потоков Intel® Cilk™ Plus эффективно управляет средствами конвейеризации и кеширования процессора, снижая нагрузку на ядра, а также берет на себя бóльшую часть затрат по управлению критическими секциями, семафорами и другими средствами синхронизации потоков, в то время как планировщики потоков OpenMP и Intel® TBB часть функций синхронизации перекладывают на рабочие дочерние потоки, отрывая их от основной работы и создавая бóльшую загрузку ядер при меньшей эффективности.

Перейдем к распараллеливанию операции 2 – сглаживающих итераций многосеточного решателя. В качестве сглаживателя используется метод ADLJ – Alternating Damped Line Jacobi [20]. Данный метод предполагает решение систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональными матрицами, сформированными из матрицы исходной системы. Для полученных матриц хранится LU-разложение в массивах `L`, `D` и `U` (нижняя, главная и верхняя диагонали соответственно). Алгоритм вычисления решения `sol` системы с построенной трехдиагональной матрицей и правой частью `right_side` имеет следующий вид:

```
sol[0] = right_side[0] / D[0];
for(int i = 1, r = 0; i < NM; i++, r++)
    sol[i] = (right_side[i] - L[r] * sol[r]) / D[i];
for(int i = NM - 2; i > -1; i--)
    sol[i] -= U[i] * sol[i+1];
```

В таком виде алгоритм не может быть распараллелен, поскольку итерации циклов являются зависимыми: при вычислении значения элемента `sol[i]` используются значения `sol[r]` и `sol[i+1]`, полученные на предыдущих итерациях. Однако, поскольку исходная матрица была получена при дискретизации с пятиточечной структурой шаблона на прямоугольной сетке $N \times M$, сформированная из нее трехдиагональная матрица распадается на M независимых блоков размера $N \times N$, и алгоритм может быть переписан следующим образом:

```
for(int j = 0; j < M; j++) // блоки
{ int q = j * N; // номер первой строки блока
  sol[q] = right_side[q] / D[q];
  for(int r = q, i = r + 1; i < r + N; i++, r++)
      sol[i] = (right_side[i] - L[r] * sol[r]) / D[i];
  for(int q2 = q - 1, i = q2 + N - 1; i > q2; i--)
      sol[i] -= U[i] * sol[i+1];
}
```

Теперь итерации внешнего цикла являются независимыми, и его можно распараллелить аналогично циклу из операции 1. В табл. 3 представлены значения времени счета и достигнутых ускорений при решении задачи

VerOscTest на PC1 при помощи программы с распараллеленными операциями 1 и 2. Наибольшее ускорение, достаточно близкое к оценке по закону Амдала (в 2,623 раза), как и в случае распараллеливания операции 1, достигнуто при использовании технологии Intel® Cilk™ Plus.

Табл. 3. Время счета на PC1 с использованием четырех логических ядер и ускорение при распараллеливании операции 1 и 2
Table. 2. Time of calculatiion on PC1 with 4 logical cores and acceleration when parallelizing operations 1 and 2

Технология	Intel® Cilk™ Plus	OpenMP	Intel® TBB
Время счета, с	1547	1698	1774
Ускорение, раз	2,565	2,337	2,237

После распараллелиливания двух наиболее трудоемких операций было произведено распараллеливание ряда операций с векторами, на которые приходится бóльшая часть времени выполнения операции 3, и перестроение некоторых разреженных матриц и сеточных функций, происходящее при движении погруженной границы. Помимо продемонстрированного на примере операции 1 распараллеливания цикла `for` с независимыми итерациями, использовались приемы распараллеливания циклов с редукцией. Покажем различия в распараллеливании циклов такого типа при использовании различных технологий параллельного программирования на примере распараллеливания расчета евклидовой нормы вектора, элементы которого хранятся в массиве `Vector`:

```
double getNorm()
{ ElemType aux = 0;
  for(int i = 0; i < size; i++)
  { ElemType cur = Vector[i]; aux += cur * cur; }
  return sqrt((double)aux);
}
```

При использовании OpenMP перед ключевым словом `for` необходимо добавить директиву `#pragma omp parallel for reduction(+:aux)`. При использовании технологии Intel® Cilk™ Plus алгоритм принимает следующий вид:

```
double getNorm()
{ cilk::reducer<cilk::op_add<ElemType>> aux(0);
  cilk_for(int i = 0; i < size; i++)
  { ElemType cur = Vector[i]; *aux += cur * cur; }
  return sqrt((double)aux.get_value());
}
```

При использовании технологии Intel® TBB код получается более громоздким, но может быть записан при помощи лямбда-выражений:

```
double getNorm()
{ ElemType res =
  tbb::parallel_reduce(tbb::blocked_range<int>(0,size),
     ElemType(0), [=](const tbb::blocked_range<int>& r,
                                 ElemType aux)->ElemType
       {
         for(int i = r.begin(); i < r.end(); i++)
         { ElemType cur = Vector[i]; aux += cur * cur; }
         return aux;
       }, [](ElemType x, ElemType y)->ElemType
                                    { return x + y; } );
  return sqrt((double)res);
}
```

Кроме того, была проведена оптимизация кода. После этого время выполнения расчетов значительно уменьшилось даже при использовании одного ядра (табл. 4). Поскольку диспетчеры потоков Intel® Cilk™ Plus, OpenMP и Intel® TBB не отключаются при работе приложения на одном ядре, особенности их работы, рассмотренные выше, напрямую сказываются на быстродействии даже в однопоточной версии. Таким образом, представленные в табл. 4 данные подтверждают предположение о том, что диспетчер потоков Intel® Cilk™ Plus реализован эффективнее планировщиков потоков OpenMP и Intel® TBB.

Табл. 4. Время счета на PC1 с использованием одного ядра и полученное в результате оптимизации кода ускорение

Table. 4. Ttime of calculation on PC1 using a single core and the acceleration with code optimization

Технология	Intel® Cilk™ Plus	OpenMP	Intel® TBB
Время счета, с	1958	2207	2318
Ускорение, раз	2,027	1,798	1,712

Для исследования масштабируемости комплекса была проведена серия вычислительных экспериментов (рис. 8). Наименьшее время проведения расчета независимо от технологии параллельного программирования и на PC1, и на PC2 получается при использовании четырех логических ядер. На PC2, так же как и на PC1, при расчете на одном ядре быстродействие приложения, использующего Intel® Cilk™ Plus, оказывается выше чем у приложения, использующего OpenMP, а дольше всего решение тестовой задачи VerOscTest идет при использовании Intel® TBB. Однако приложение с Intel® Cilk™ Plus на

обеих рабочих станциях масштабируется хуже приложения, в котором используется OpenMP, а оно, в свою очередь, – хуже приложения с Intel® TBB. Из-за этого при проведении расчета с использованием четырех логических ядер на PC1 получаем, что приложение с Intel® TBB опережает приложение с OpenMP (при этом наименьшее время счета получается по-прежнему при использовании Intel® Cilk™ Plus), а на PC2 приложение, использующее OpenMP, по быстродействию опережает приложение с Intel® Cilk™ Plus, уступающее и приложению с Intel® TBB. Таким образом, подтверждается необходимость поддержки программным комплексом всех рассматриваемых технологий параллельного программирования и возможности выбора пользователем используемой технологии.

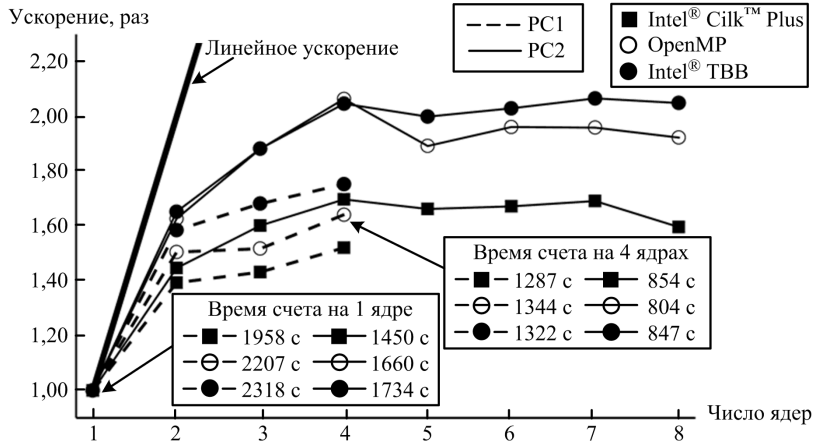


Рис. 8. Масштабируемость программного комплекса «LS-STAG_turb» после оптимизации кода и распараллеливания операций
Fig. 8. Scalability of the «LS-STAG_turb» software complex after the code optimization and parallelization of operations

6. Выбор решателя и исследование эффективности его реализации

Также возможно уменьшение продолжительности расчета за счет модификаций решателя. В описанных выше экспериментах для решения систем линейных алгебраических уравнений использовался метод BiCGStab [20] (метод бисопряженных градиентов со стабилизацией) с предобуславливанием. Для разностного аналога уравнения Гельмгольца использовалось ILU-предобуславливание [18], а для разностного аналога уравнения Пуассона – многосеточное предобуславливание [20]. При этом на задаче VerOscTest решение разностных аналогов уравнения Гельмгольца (70744 и 70800 уравнений) с точностью $\varepsilon = 10^{-6}$ получается за 2 итерации,

а решение разностного аналога уравнения Пуассона (70744 и 70800 уравнений) с той же точностью – за 7–20 итераций.

Заменим метод BiCGStab на метод FGMRES (гибкий метод обобщенных невязок) без изменения предобуславливателей. Метод FGMRES, как и метод BiCGStab, относится к методам крыловского типа [20]. Основное различие между этими двумя методами заключается в способе построения базиса в подпространстве Крылова: в методе BiCGStab для этого используется биортогонализация Ланцоша, а в FGMRES – ортогонализация Арнольди [20]. После оптимизации и реализации алгоритма метода FGMRES [20] была проведена серия вычислительных экспериментов для исследования масштабируемости алгоритма (рис. 9, черные линии). Использование разработанной реализации метода FGMRES позволило получить ускорение по сравнению с решением систем методом BiCGStab на одном ядре в среднем в 2,235 раза, а на четырех логических ядрах – в 1,829 раза, поскольку программа с новым решателем несколько хуже масштабируется. При этом решение разностного аналога уравнения Гельмгольца при использовании как метода BiCGStab, так и метода FGMRES получается за 2 итерации, в то время как решение разностного аналога уравнения Пуассона при использовании метода FGMRES получается за 4–7 итераций, что говорит о более быстрой сходимости метода FGMRES по сравнению с методом BiCGStab.

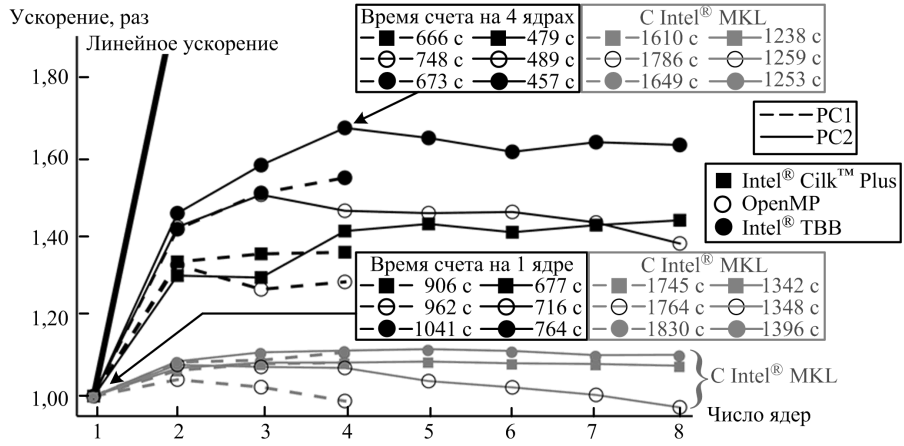


Рис. 9. Масштабируемость комплекса «LS-STAG_turb» при решении тестовой задачи VerOscTest (черные линии) и сравнение с решателем из Intel® MKL (серые линии)
Fig. 9. Scalability of the «LS-STAG_turb» complex in solving the test problem VerOscTest (black lines) and the comparison with the solver from the Intel® MKL (gray lines)

Наилучшее быстродействие при расчетах на одном ядре демонстрируют приложения, использующие технологию Intel® Cilk™ Plus, однако при расчете на PC2 с четырьмя ядрами благодаря хорошей масштабируемости наименьшая

продолжительность расчета получается при использовании Intel® TBB. Отметим, что по сравнению с исходным последовательным кодом время проведения расчета уменьшилось примерно в 5 раз при использовании одного ядра и в 7 раз при использовании четырех ядер.

Сравним эффективность разработанного решателя с аналогом из библиотеки Intel® Math Kernel Library (MKL) 11.2 [21], содержащей реализацию метода FGMRES. Эта библиотека оптимизирована для работы с разными процессорами Intel и обеспечивает использование их расширенных возможностей. Из предобуславливателей Intel® MKL содержит только ILU-предобуславливание, поэтому используем его для решения не только разностного аналога уравнения Гельмгольца, но и для решения разностного аналога уравнения Пуассона. При этом число итераций, совершаемых при решении разностного аналога уравнения Пуассона, возрастает до 25–140. Масштабируемость полученного алгоритма оказывается очень низкой (рис. 9, серые линии), поэтому на четырех ядрах он значительно уступает разработанному решателю. Использование собственной реализации метода FGMRES позволило получить ускорение по сравнению с решателем из Intel® MKL на одном ядре в среднем в 1,869 раза, а на четырех ядрах – в 2,526 раза.

7. Заключение

Разработан параллельный программный комплекс «LS-STAG_turb» для моделирования движения профилей в потоке вязкой несжимаемой среды. В данном комплексе реализован высокоточный метод погруженных границ LS-STAG и разработанные модификации данного метода для и решения сопряженных задач гидроупругости с использованием моделей турбулентности Смагоринского, Спаларта – Аллмараса, $k-\varepsilon$, $k-\omega$ и $k-\omega$ SST в рамках RANS, LES и DES подходов к моделированию турбулентности. Разработанный программный комплекс поддерживает использование таких технологий параллельного программирования, как Intel® Cilk™ Plus, Intel® TBB и OpenMP. Использование метода FGMRES для решения систем линейных алгебраических уравнений позволило достичь существенного сокращения времени проведения расчета (примерно в 2 раза) по сравнению с методом BiCGStab. Кроме того, разработанная программная реализация метода FGMRES оказалась эффективнее аналогичного решателя из библиотеки Intel® MKL, как при проведении расчетов на одном ядре, так и при использовании нескольких ядер.

Главным направлением дальнейшего развития параллельного программного комплекса «LS-STAG_turb» является разработка параллельного алгоритма решения задачи методом LS-STAG, основанного на декомпозиции расчетной области. При этом для эффективного решения вспомогательнх задач в подобластях будет использоваться представленная параллельная реализация решателя. Также планируется разработать препроцессор для подготовки

файлов с исходными данными. Кроме того, в перспективе планируется разработка и реализация метода LS-STAG для решения трехмерных задач.

Список литературы

[1]. Mittal R., Iaccarino G. Immersed boundary methods. Annu. Rev. Fluid Mech. 2005. № 37. P. 239–261.

[2]. Cheny Y., Botella O. The LS-STAG method: A new immersed boundary/level-set method for the computation of incompressible viscous flows in complex moving geometries with good conservation properties. J.Comp. Phys.2010. №229. P.1043-1076.

[3]. Osher S., Fedkiw R.P. Level set methods and dynamic implicit surfaces. N. Y.: Springer, 2003. 273 p.

[4]. Puzikova V.V., Marchevsky I.K. Extension of the LS-STAG immersed boundary method for RANS-based turbulence models and its application for numerical simulation in coupled hydroelastic problems. Proc. VI International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering. Venice. 2015. P. 532–543.

[5]. Puzikova V.V. On generalization of the LS-STAG immersed boundary method for Large Eddy Simulation and Detached Eddy Simulation. Proc. Advanced Problems in Mechanics International Summer School-Conference. St.-Petersburg. 2015. P. 411-417.

[6]. Marchevsky I., Puzikova V. Application of the LS-STAG Immersed Boundary Method for Numerical Simulation in Coupled Aeroelastic Problems. Proc. 11th World Congress on Computational Mechanics, 5th European Conference on Computational Mechanics, 6th European Conference on Computational Fluid Dyn. Barcelona. 2014. P.1995-2006.

[7]. Пузикова В.В. Архитектура программного комплекса для численного моделирования движения профилей в потоке вязкой несжимаемой среды методом LS-STAG. Молодежный научно-технический вестник. 2014. № 7. С. 11.

[8]. Taneda S. Visual observation of the flow past a circular cylinder performing a rotary oscillation. J. Phys. Soc. Japan. 1978. Vol. 45, № 3. P. 1038–1043.

[9]. Марчевский И.К., Пузикова В.В. Моделирование обтекания кругового профиля, совершающего вращательные колебания, методом LS-STAG. Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. 2014. № 3. С. 93–107.

[10]. Quarteroni A., Valli A. Domain decomposition methods for partial differential equations. Oxford: Clarendon Press, 1999. 360 p.

[11]. Ильин В.П., Кныш Д.В. Параллельные методы декомпозиции в пространствах следов. Вычислительные методы и программирование. 2011. Т. 12. С. 110–119.

[12]. Пузикова В.В. Построение функции уровня для профиля произвольной формы при моделировании его обтекания методом LS-STAG. Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. № 4. С. 8.

[13]. CodeAnalyst Performance Analyzer. URL: http://developer.amd.com/tools-and-sdks/archive/amd-codeanalyst-performance-analyzer/ (accessed: 25.10.2015).

[14]. Гергель В.П. Высокопроизводительные вычисления для многопроцессорных многоядерных систем. М.: Изд-во Моск. ун-та, 2010. 544 с.

[15]. Intel® Cilk™ Plus. URL: https://software.intel.com/ru-ru/node/522579 (accessed: 25.10.2015).

[16]. Reinders J. Intel Threading Building Blocks: Outfitting C++ for Multi-Core Processor Parallelism. Sebastopol: O'Reilly, 2007. 336 p.

[17]. Intel® Advisor Tutorials. URL: https://software.intel.com/en-us/articles/advisorxe-tutorials (accessed: 25.10.2015).

[18]. Баландин М.Ю., Шурина Э.П. Методы решения СЛАУ большой размерности. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. 70 с.
[19]. Process Explorer v16.05. URL: https://technet.microsoft.com/ru-ru/sysinternals/bb896653.aspx (accessed: 25.10.2015).
[20]. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. N.Y.: PWS Publ., 1996. 547 p.
[21]. Intel® Math Kernel Library – Documentation . URL: https://software.intel.com/en-us/articles/intel-math-kernel-library-documentation (accessed: 25.10.2015).

Realization of parallel computations in the software package «LS-STAG_turb» for viscous incompressible flow simulation on systems with shared memory

V. Puzikova <valeria.puzikova@gmail.com>
BMSTU, 5 2nd Baumanskaya st., Moscow, 105005, Russian Federation

Abstract. Immersed boundary methods have become popular in Computational Fluid Dynamics over recent years for simulating flows through complex solid geometries and in coupled hydroelasctic problems. The advantage of these methods over a method with a body-fitted mesh is their computational efficiency: they do not require regridding when domain shape changes in the simulation process due to hydroelastic body motion. The LS-STAG method for viscous incompressible flows simulation combines the advantages of immersed boundary methods, the marker and cells (MAC) method and level-set method. The LS-STAG method and its modifications for numerical simulation in coupled hydroelastic problems and for turbulence simulation by using RANS, LES and DES approaches are implemented in the software package «LS-STAG_turb». This software allows to simulate viscous incompressible flows around a moving airfoil of arbitrary shape or airfoils system with one or two degrees of freedom. For example, it allows to simulate rotors autorotation and airfoils system wind resonance. These phenomena are characterized by high velocities of airfoils and high values of local Reynolds number. So, extremely small space and time steps are required to obtain accurate quantitative results. It leads to significant increase in computational cost. To decrease it, the «LS-STAG_turb» parallel version is developed. Intel® Cilk™ Plus, Intel® TBB and OpenMP parallel programming technologies are used. Also, serial code sections are optimized. The FGMRES method usage for linear algebraic equations systems solving allows to achieve 2-fold computation time reduction in comparison with the BiCGStab method. In addition, the developed software implementation of the FGMRES method is more efficient than the similar solver implemented in Intel® MKL library both for single-core and multi-core computations.

Keywords: OpenMP technology; Intel® Cilk™ Plus technology; Intel® Threading Building Blocks technology; viscous incompressible flow; immersed boundary method.

DOI: 10.15514/ISPRAS-2016-28(1)-13

For citation: Puzikova V. Realization of parallel computations in the software package «LS-STAG_turb» for viscous incompressible flow simulation on systems with shared memory. Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS, 2016, vol. 28, issue 1, pp. 221-242 (in Russian). DOI: 10.15514/ISPRAS-2016-28(1)-13

References

[1]. Mittal R., Iaccarino G. Immersed boundary methods. *Annu. Rev. Fluid Mech*. 2005. no. 37. P. 239–261.

[2]. Cheny Y., Botella O. The LS-STAG method: A new immersed boundary/level-set method for the computation of incompressible viscous flows in complex moving geometries with good conservation properties. *J.Comp.Phys.*2010. no.229. P.1043-1076.

[3]. Osher S., Fedkiw R.P. Level set methods and dynamic implicit surfaces. *N. Y.: Springer*, 2003. 273 p.

[4]. Puzikova V.V., Marchevsky I.K. Extension of the LS-STAG immersed boundary method for RANS-based turbulence models and its application for numerical simulation in coupled hydroelastic problems. *Proc. VI International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering*. Venice. 2015. P. 532–543.

[5]. Puzikova V.V. On generalization of the LS-STAG immersed boundary method for Large Eddy Simulation and Detached Eddy Simulation. *Proc. Advanced Problems in Mechanics International Summer School-Conference*. St.-Petersburg. 2015. P. 411-417.

[6]. Marchevsky I., Puzikova V. Application of the LS-STAG Immersed Boundary Method for Numerical Simulation in Coupled Aeroelastic Problems. *Proc. 11th World Congress on Computational Mechanics, 5th European Conference on Computational Mechanics, 6th European Conference on Computational Fluid Dyn.* Barcelona. 2014. P.1995-2006.

[7]. Puzikova V.V. Arkhitektura programmnogo kompleksa dlya chislennogo modelirovaniya dvizheniya profilei v potoke vyazkoi neszhimaemoi sredy metodom LS-STAG [Architecture of software package for numerical simulation of the motion airfoiles in the viscous incompressible flow by using the LS-STAG method]. *Molodezhnyi nauchno-tekhnicheskii vestnik* [*Youth Science and Technology Herald*]. 2014. no. 7. P. 11. (in Russian)

[8]. Taneda S. Visual observation of the flow past a circular cylinder performing a rotary oscillation. *J. Phys. Soc. Japan*. 1978. Vol. 45, no. 3. P. 1038–1043.

[9]. Marchevskii I.K., Puzikova V.V. Modelirovanie obtekaniya krugovogo profilya, sovershayushchego vrashchatel'nye kolebaniya, metodom LS-STAG [Flow-around simulation of circular cylinder performing rotary oscillations by LS-STAG method]. *Vestnik MGTU im. N.É. Baumana. Estestvennye nauki* [*Herald of the Bauman Moscow State technical University. Series "Natural Sciences"*]. 2014. no. 3. P. 93–107. (in Russian)

[10]. Quarteroni A., Valli A. Domain decomposition methods for partial differential equations. *Oxford: Clarendon Press*, 1999. 360 p.

[11]. Il'in V.P., Knysh D.V. Parallel'nye metody dekompozitsii v prostranstvakh sledov [Parallel decomposition methods in traces spaces]. *Vychislitel'nye metody i programmirovanie* [*Computational methods and programming*]. 2011. Vol. 12. P. 110–119. (in Russian)

[12]. Puzikova V.V. Postroenie funktsii urovnya dlya profilya proizvol'noi formy pri modelirovanii ego obtekaniya metodom LS-STAG [Construction of level-set function for an airfoil of arbitrary topology whem modelimg a flow past it using the LS-STAG method]. *Inzhenernyi zhurnal: nauka i innovatsii* [*Engineering Journal: science and innovation*]. 2013. no. 4. P. 8. (in Russian)

[13]. CodeAnalyst Performance Analyzer. URL: http://developer.amd.com/tools-and-sdks/archive/amd-codeanalyst-performance-analyzer/ (accessed: 25.10.2015).

[14]. Gergel' V.P. Vysokoproizvoditel'nye vychisleniya dlya mnogoprotsessornykh mnogoyadernykh sistem [High-performance computing for multi-core systems]. *Moscow: Moscow University Publ.*, 2010. 544 p. (in Russian)
[15]. Intel® Cilk™ Plus. URL: https://software.intel.com/ru-ru/node/522579 (accessed: 25.10.2015).
[16]. Reinders J. Intel Threading Building Blocks: Outfitting C++ for Multi-Core Processor Parallelism. *Sebastopol: O'Reilly*, 2007. 336 p.
[17]. Intel® Advisor Tutorials. URL: https://software.intel.com/en-us/articles/advisorxe-tutorials (accessed: 25.10.2015).
[18]. Balandin V. Yu., Shurina E.P. Metody resheniya SLAU bol'shoi razmernosti [Methods for solving linear systems of large dimension]. *Novosibirsk: Novosibirsk State Technical University Publ.*, 2000. 70 p. (in Russian)
[19]. Process Explorer v16.05. URL: https://technet.microsoft.com/ru-ru/sysinternals/bb896653.aspx (accessed: 25.10.2015).
[20]. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. *N.Y.: PWS Publ*., 1996. 547 p.
[21]. Intel® Math Kernel Library – Documentation . URL: https://software.intel.com/en-us/articles/intel-math-kernel-library-documentation (accessed: 25.10.2015).