

УДК 519.6

АЛГОРИТМЫ ГЛОБАЛЬНОГО ПЕРЕСЧЕТА СЕТОЧНЫХ ВЕЛИЧИН В МЕТОДИКЕ ЛЭГАК-3D

С. М. Бахрах, С. В. Величко, В. Ф. Спиридонов, Т. В. Резвова, А. А. Резяпов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Дано описание реализованных в методике ЛЭГАК-3D двух алгоритмов глобального пересчета величин: растрового и геометрического, а также модификации растрового метода. Описано распараллеливание алгоритмов на ЭВМ с распределенной памятью. Приводятся результаты сравнения времени работы алгоритмов, их точности, а также эффективности распараллеливания.

Введение

Методика ЛЭГАК-3D [1] предназначена для расчета трехмерных нестационарных газодинамических течений многокомпонентной сплошной среды в лагранжево-эйлеровых переменных на регулярной сетке, ячейки которой представляют собой шестигранники. Расчет течений в методике ЛЭГАК-3D проводится в два этапа. На первом этапе производится расчет в переменных Лагранжа — счетная сетка увлекается веществом [2]. На втором этапе выполняется построение новой счетной сетки и пересчет величин на эту сетку [3].

Согласно разработанной в методике ЛЭГАК безавостной технологии [4] счета сложных газодинамических задач контактные границы некоторых оболочек поддерживаются лагранжевыми до определенного момента времени, а затем происходит переход на эйлерову сетку, который может осуществляться двумя способами. Первый способ — итерационный процесс последовательного применения программ корректировки сетки и пересчета величин [3], второй способ — глобальное перестроение счетной сетки без ограничений на смещение внутренних узлов с последующим пересчетом величин со старой сетки на новую.

Проблема глобального пересчета решалась и во многих других методиках, например в методиках РАМЗЕС [5], РАМЗЕС_КП [6], Д [7] и др.

Процедура глобального пересчета состоит из трех этапов:

- 1) построение новой счетной сетки. Новая сетка строится в листах, которые остаются эй-

леровыми, при этом форма счетной области, число строк, столбцов и листов остаются неизменными. Граничные точки могут смещаться только вдоль границы;

- 2) формирование списка пересечений. На этом этапе для каждой ячейки новой сетки составляется список пересекающихся с ней ячеек старой сетки;
- 3) собственно пересчет величин со старой сетки на новую.

Для перестройки сетки в листах при глобальном пересчете используется стандартная программа корректировки сетки [3]. При этом обычно задаются безытерационные типы построения сетки: вдоль строк — равномерно по углу из заданного центра, вдоль столбцов — безытерационно равномерно по расстоянию. Существует возможность глобального пересчета не во всей области. Можно задать нужное *окно* области, в котором будет происходить перестройка сетки и пересчет величин. Параметры окна для перестройки сетки и пересчета газодинамических величин задаются пользователем начальными и конечными номерами строк, столбцов и листов при подготовке задачи к счету.

Алгоритм формирования списка пересечений

Результатом работы этого алгоритма для каждой ячейки новой сетки является список пересекающихся с ней ячеек старой сетки.

Ячейка в ЛЭГАК-3D представляет собой выпуклый шестигранник. Две грани ячейки, лежащие в соседних листах, являются плоскими. Назовем эти грани *основаниями ячейки*, причем грань, лежащая в плоскости s -го листа, — нижнее основание, а грань, лежащая в плоскости $(s+1)$ -го листа, — верхнее основание. Нижние грани ячеек новой и старой сеток, имеющие одинаковый индекс листа s , лежат в одной плоскости листа L_s , так как листы в методике ЛЭГАК-3D являются эйлеровыми. Это же утверждение верно и для верхних граней ячеек, лежащих в плоскости листа L_{s+1} . Ячейка старой сетки может пересекаться только с ячейками новой сетки, имеющими тот же самый индекс по s .

Особенность остальных граней (будем называть их *боковыми гранями* ячейки) заключается в том, что вершины любой из них могут не лежать в одной плоскости. Для определения факта пересечения двух ячеек выбрано разбиение боковых граней на треугольники, представленное на рис. 1.

Исходя из описанных выше особенностей ячеек в ЛЭГАК-3D алгоритм определения пересечения двух ячеек состоит из следующих этапов:

- 1) установления факта пересечения оснований ячеек. Если основания ячеек пересекаются, то дальнейшая проверка не проводится;
- 2) определения пересечения ребер боковых граней одной ячейки с боковыми гранями другой.

При этом:

1. Для установления факта пересечения двух ячеек достаточно определить, что пересекаются их верхние (или нижние) основания.

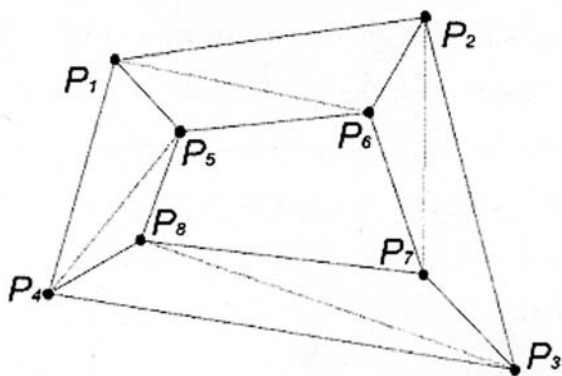


Рис. 1. Геометрия ячейки

2. При определении пересечения оснований задача сводится к установлению факта пересечения двух четырехугольников на плоскости.
3. Определение пересечения боковых ребер одной ячейки с боковыми гранями другой необходимо только в том случае, если основания ячеек не пересекаются.

Поиск списка пресечений для каждой ячейки новой сетки начинается с так называемого *зацепления*. Зацепление — это ячейка старой сетки, пересекающая анализируемую ячейку новой сетки, которая определена до начала подготовки списка пересечений. Зацепление для первой анализируемой ячейки новой сетки ищется путем поиска пересечений этой ячейки со всеми ячейками старой сетки (пока таковая не будет найдена). В дальнейшем зацепление для очередной ячейки новой сетки находится путем перебора ячеек из списка пересечений ближайшей, уже проверенной ячейки новой сетки. Если ни одна ячейка из списка не пересекает ее, то такая ячейка однозначно есть в *окружении пересечения*. Окружение пересечения — это ячейки, которые соседствуют с ячейками из списка пересечений, но не входят в него.

На рис. 2 изображена старая сетка в двумерном случае (для наглядности). Черной жирной линией выделена одна ячейка новой сетки. Темно-серым цветом выделены ячейки из списка пересечений для данной ячейки новой сетки, светло-серым — окружение пересечения.

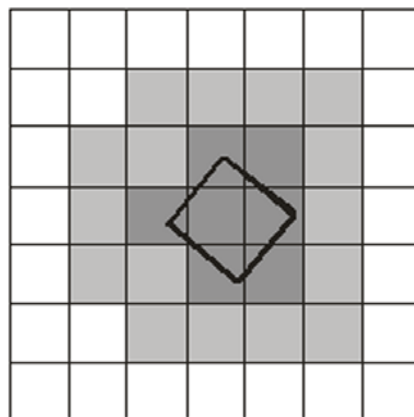


Рис. 2. Пересечение ячеек

Алгоритмы пересчета

Реализовано два алгоритма пересчета величин со старой сетки на новую: растровый и геометрический.

Растровый алгоритм заключается в следующем:

1. Ячейки старой и новой сеток разбиваются на 8 мелких шестигранников — *квадрантов* — отрезками, соединяющими центр ячейки с центрами ее граней. Скорость в каждом квадранте считается равной скорости узла старой сетки, соотношенного с данным квадрантом.
2. Каждый квадрант ячейки старой сетки делится на более мелкие элементы растровой развертки — пиксели. Число пикселей одинаковое вдоль каждой стороны квадранта.
3. С каждым пикселем квадранта старой сетки связываются соответствующие его объему доли массы, энергии и импульса. Каждый пиксель ячейки старой сетки содержит все вещества, находящиеся в этой ячейке. Масса и объем вещества, содержащегося в пикселе, пропорциональны соответственно массовой и объемной концентрации этого вещества в ячейке старой сетки.
4. Каждый обрабатываемый квадрант счетной ячейки новой сетки проверяется на предмет пересечения с квадрантами ячеек старой сетки из списка пересечений. Если какой-либо квадрант старой сетки полностью попадает в квадрант новой сетки, то он не делится на пиксели.
5. В случае попадания *центра* пикселя ячейки старой сетки в квадрант счетной ячейки новой сетки данный пиксель вносит свой вклад в этот квадрант, т. е. к накапливаемым суммам интегральных величин для счетной ячейки новой сетки добавляются интегральные величины пикселя.
6. После перебора всех старых ячеек в новых ячейках будут накоплены суммарные интегральные значения основных сеточных величин.
7. Переход от интегральных величин к удельным осуществляется (если необходимо) стандартным образом.

Стандартно в методике ЛЭГАК-3D каждый квадрант старой сетки разбивается на пиксели, как показано на рис. 3,а. При таком подходе для вычисления объема пикселя необходимо

знать координаты всех его вершин. В методиках РАМЗЕС и РАМЗЕС-КП [6] реализован другой метод разбиения квадрантов на пиксели. Он позволяет сократить календарное время расчета, но при одинаковом числе пикселей является менее точным по сравнению с описанным выше методом.

Поясним суть *модифицированного растрового алгоритма*, реализованного в методике ЛЭГАК. Для простоты ограничимся рассмотрением двумерного случая.

Находятся максимумы и минимумы координат вершин квадранта, по которым строится прямоугольник, покрывающий весь квадрант. Покрывающий прямоугольник равномерно разбивается на пиксели (рис. 3,б). Далее определяются пиксели, попадающие внутрь квадранта старой ячейки (на рис. 3,б обозначены крестиками), а из их числа выбираются те, которые попадают в

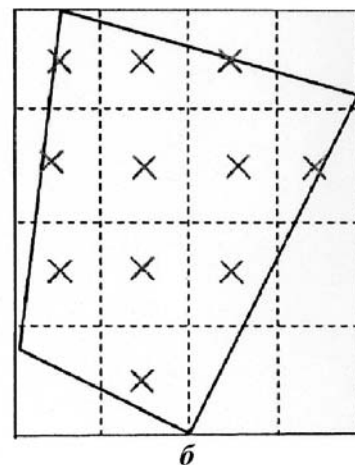
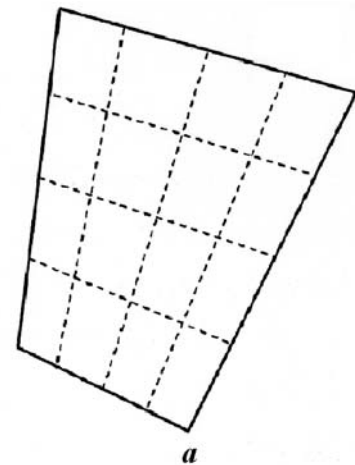


Рис. 3. Разбиение квадранта на пиксели: а — в методике ЛЭГАК-3D; б — в методике РАМЗЕС-КП

рассматриваемый квадрант новой ячейки. При таком разбиении объем всех пикселей одинаков и равен объему покрывающего прямоугольника, деленному на число пикселей.

Таким образом, не надо вычислять координаты вершин пикселей. Кроме того, координаты центров пикселей вычисляются проще.

Альтернативой растровому методу служит метод, основанный на геометрическом подходе, где объем пересечения ячеек вычисляется точно. Для трехмерного случая этот метод реализован, например, в методике Д [7].

Опишем реализацию метода, основанного на геометрическом подходе, в методике ЛЭГАК-3D.

Ячейки счетной сетки в методике ЛЭГАК-3D являются шестигранниками и предполагаются выпуклыми. Верхняя и нижняя грани ячеек плоские, остальные четыре грани в общем случае не являются плоскими и аппроксимируются двумя треугольниками. Каждый квадрант старой и новой сеток разбивается на пять тетраэдров. Список соседства для ячеек новой сетки определяется так же, как для растрового метода пересчета величин. Тетраэдры рассматриваемого квадранта новой сетки пересекаются с тетраэдрами квадрантов ячеек старой сетки из списка соседства. В случае ненулевого объема пересечения квадрант старой сетки вносит свой вклад в интегральные величины квадранта новой сетки пропорционально найденному объему пересечения. Переход от интегральных величин к удельным в ячейках новой сетки выполняется так же, как для растрового метода.

Распараллеливание алгоритмов

Алгоритмы глобального пересчета обладают тем свойством, что они не накладывают ограничений на смещение внутренних узлов счетной сетки (в случае эйлеровых листов нет ограничений на смещение точек в листах). Это создает определенные сложности при распараллеливании алгоритмов, так как новая сетка фрагмента в пространстве на текущем процессе может пересекаться со старой сеткой, которая находится на других процессах.

В методике ЛЭГАК-3D реализована матричная декомпозиция данных по процессам, при которой процессом рассчитывается фрагмент задачи по группам строк и столбцов с полными данными по всем листам [1]. Поэтому необходимо введение в программу дополнительных межпроцессорных обменов в тех процессах, в которых

это необходимо. Все межпроцессорные обмены проводятся в части формирования списка пересечений ячеек новой сетки с ячейками старой сетки.

Координаты старой сетки для данного листа собираются в каждом процессе полностью. На основании этих данных в каждом процессе формируются списки процессов, от которых нужно принять необходимую для пересчета информацию, и списки процессов, которым нужно отправить необходимую для пересчета информацию. Эта процедура происходит в цикле по листам. После завершения обменов в каждом процессе присутствует вся необходимая информация для пересчета величин со старой сетки на новую.

Тестовые расчеты

Целью проведения тестовых расчетов было сравнение точности трех описанных методов пересчета, а также их временных характеристик.

Задача 1. О сходящейся сферической ударной волне. Для тестового расчета используется известная задача о сжатии сферической автомодельной ударной волны и последующем отражении ее от центра [8, 9]. Сфера радиусом $r_0 = 1$ см заполнена идеальным газом с уравнением состояния $P = (\gamma - 1)\rho E$, $\gamma = 5/3$, с плотностью $\rho_0 = 1$ г/см³ и нулевыми значениями скорости и давления. На внешней границе сферы задано давление $P_{гр}(t)$ как функция времени.

Под действием давления на границе $P_{гр}(t)$ в среде формируется ударная волна, сходящаяся к центру. После момента фокусировки образуется отраженная ударная волна, движущаяся от центра. Точные значения моментов фокусировки и выхода отраженной волны на свободную границу составляют соответственно $t_{ф} = 5,958$ мкс, $t_{св} = 7,895$ мкс.

В начальный момент времени расчетная сетка в каждом листе выбиралась равномерной по радиусу и по углу из центра с координатами $(-0,2; 0; 0)$ (рис. 4,а). Число точек по углу — 49, по радиусу — 61. Задача была просчитана на двух листах, угол между ними составлял $3,75^\circ$.

До момента времени $t = 4$ мкс задача считалась в чисто лагранжевой постановке. Состояние расчетной сетки первого листа на этот момент времени приведено на рис. 4,б.

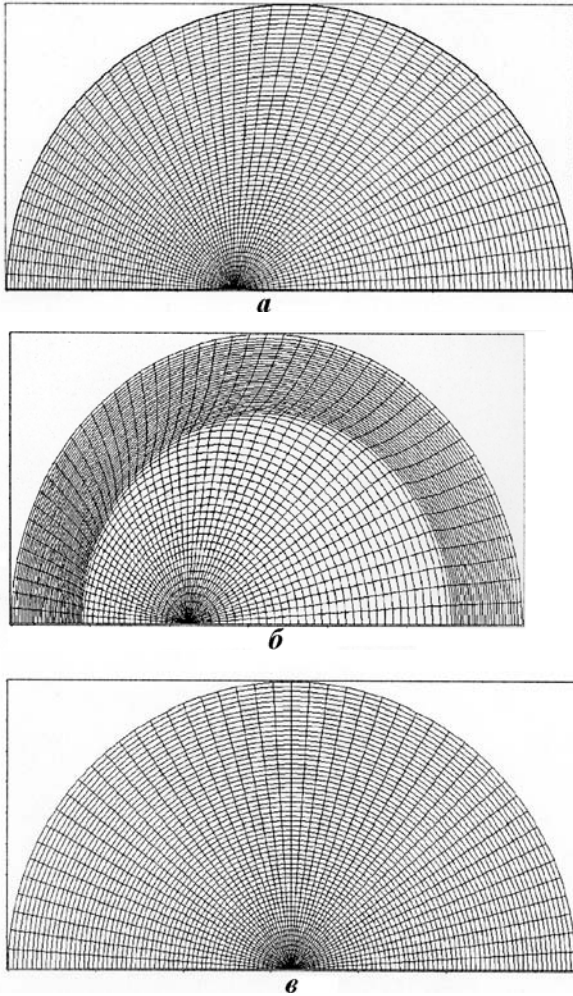


Рис. 4. Сетка первого листа задачи 1: *а* — $t = 0$; *б* — $t = 4$ мкс, до глобального пересчета; *в* — $t = 4$ мкс, после глобального пересчета

В момент времени $t = 4$ мкс проводился глобальный пересчет на новую сетку, изображенную на рис. 4,в. Для построения такой сетки вдоль строк был задан тип интерполяции *равномерно по углу* из центра $(0; 0; 0)$, а вдоль столбцов — *безытерационно равномерно по расстоянию*. Растровый пересчет проводился для различных разбиений. Результаты для разбиения квадрантов вдоль каждого направления на 20 пикселей, а также результаты геометрического метода представлены в табл. 1. Для сравнения приведены результаты расчета по методике ЛЭГАК-2D. Расчеты выполнялись на PC Pentium IV/2,26 GHz.

Как видно из табл. 1, время пересчета с использованием геометрического алгоритма в 23 раза меньше времени пересчета с использованием стандартного растрового алгоритма и

в 16 раз меньше времени пересчета с использованием модифицированного растрового алгоритма.

Так как при глобальной перестройке сетки было скорректировано положение точек внешней границы, появляется дисбаланс массы, который на 3 порядка превышает дисбаланс, имеющий место собственно при делении на пиксели. Таким образом, метод пересчета и число пикселей почти не влияют на результат и дисбаланс.

Эффективность распараллеливания этой задачи, но с числом точек 97 строк \times 81 столбец в листе при счете растровым методом на 16 процессорах (декомпозиция 4 фрагмента по строкам \times 4 фрагмента по столбцам, 1050 точек на процессоре) составила 56%.

Достаточно низкая эффективность объясняется, по-видимому, тем, что в данной задаче имеет место сильно неравномерная загрузка процессов. Причиной этого является неодинаковое число ячеек старой сетки из списка пересечения для каждой ячейки новой сетки. Следует также отметить, что блок построения новой сетки и блок поиска списка пересечений ячеек, в который входят и межпроцессорные обмены, выполняются на порядки быстрее, чем сам пересчет величин со старой сетки на новую. Поэтому накладные расходы, связанные непосредственно с MPI-обменами, не вносят значительного вклада в снижение эффективности.

Задача 2. О разгоне и сжатии сферической оболочки слоем ВВ (при иницировании в одной точке). Эта задача была рассмотрена в [3].

Начальная геометрия задачи показана на рис. 5. В областях $0 < r < 8,14$ см и 15 см $< r < 30$ см находится вакуум. Область $8,14$ см $< r < 8,8$ см — оболочка с уравнением состояния типа Ми—Грюнайзена с параметрами $\rho_{00} = 7,82$ г/см³; $\gamma = 3,5474$; $c_0 = 4,9$ км/с; $n = 3$.

В области $8,8$ см $< r < 15$ см находится ВВ. Уравнение состояния ВВ и продуктов взрыва $P = (\gamma - 1)\rho e$, $\gamma = 3$.

Параметры ВВ: калорийность $Q = 3,61$ кДж/г; скорость детонации $D = 7,6$ км/с.

Начальные условия: $\rho_{\text{обол}} = 7,82$ г/см³; $\rho_{\text{ВВ}} = 1,67$ г/см³; $E_{\text{обол}} = E_{\text{ВВ}} = 0$; $U_{\text{обол}} = U_{\text{ВВ}} = 0$.

Иницирование детонации происходило в точке с координатами $x = 0$, $y = 15,0$ см, $z = 0$ (точка В на рис. 5). Задача считалась до момента максимального сжатия оболочки. В процессе

Результаты расчета задачи 1

| Расчет | Время глобал. пересчета, с | Дисбаланс | | | | t_{ϕ} , мкс | Откло- нение t_{ϕ} , % | $t_{св}$, мкс | Откло- нение $t_{св}$, % |
|--|----------------------------------|-----------|-----------------|---------------|---------|------------------|-----------------------------------|----------------|---------------------------------|
| | | массы, % | $E_{внутр}$, % | $E_{кин}$, % | E , % | | | | |
| Стандартный растровый, 20 пикселей | 2 276 | 0,105 | 0,138 | 0,416 | 0,265 | 5,930 | -0,47 | 7,921 | 0,33 |
| Модифицир. растровый, 20 пикселей | 1 553 | 0,105 | 0,138 | 0,418 | 0,265 | 5,930 | -0,47 | 7,921 | 0,33 |
| Геометр. | 98 | 0,103 | 0,14 | 0,415 | 0,264 | 5,930 | -0,47 | 7,920 | 0,32 |
| Двумерный ЛЭГАК, 20 пикселей | 41 | 0,105 | 0,138 | 0,417 | 0,265 | 5,944 | -0,23 | 7,921 | 0,33 |

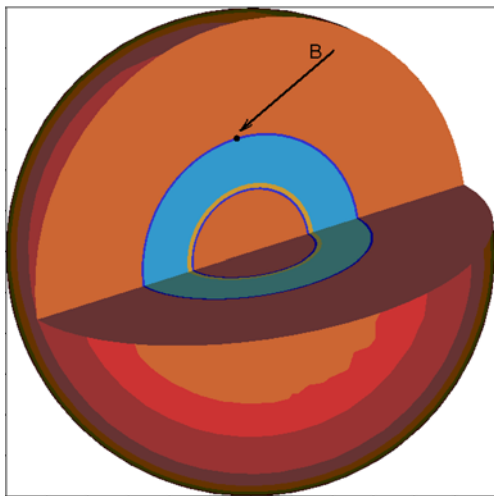


Рис. 5. Начальная геометрия задачи 2

обжата оболочки происходит схлопывание вакуумной полости.

Счетная область разбивалась на 101 строку, 31 столбец, 61 лист. Листы счетной сетки имели общую линию пересечения — ось OX . Сетка в листах: на вакуум и оболочку приходилось 30 интервалов вдоль радиуса, на $ВВ$ и вакуум — 70 интервалов вдоль радиуса равномерно по расстоянию. Типы интерполяции: вдоль строк — *равномерно по углу из заданного центра*, вдоль столбцов — $ВВ$ отделено от оболочки лагранжевой линией, в остальных точках безытерационное равномерное разбиение по расстоянию.

В момент времени $t = 40$ мкс в области в скалярном режиме был сделан глобальный пересчет на равномерную по расстоянию вдоль радиуса сетку (тип интерполяции вдоль столбцов — *безы-*

терационно равномерно по расстоянию). Фрагмент сетки (сечение плоскостью $z = 0$) с полем концентраций до и после итерационного исправления сетки представлен на рис. 6. Счет задачи после глобального пересчета продолжался с перестройкой сетки по такому же закону и пересчетом величин на каждом шаге.

Были также проведены расчеты с удвоенным числом точек по каждому направлению (201 строка \times 61 столбец \times 121 лист). Расчеты проводились на РС Pentium IV/2,26 GHz. Результаты представлены в табл. 2.

Как видно из таблицы, для глобального пересчета задачи, содержащей 190 991 точку (101 строка \times 31 столбец \times 61 лист), стандартным растровым методом с разбиением каждого квадранта старой сетки на 20 пикселей по каждому направлению требуется $\sim 30,5$ часов. Для пересчета той же задачи модифицированным растровым методом требуется ~ 18 часов, однако при этом дисбаланс массы больше на 2 порядка, а дисбаланс внутренней энергии больше на 3 порядка. Для глобального пересчета этой задачи геометрическим методом требуется 1,5 часа, при этом дисбаланс массы несколько больше, чем в первом случае, а дисбаланс внутренней энергии имеет тот же порядок.

При выполнении глобального пересчета этой задачи геометрическим методом в параллельном режиме на 12 процессорах с декомпозицией 6 фрагментов по строкам \times 2 фрагмента по столбцам (1 фрагмент = 17 строк \times 15 столбцов \times 61 лист на процессоре) была получена эффективность распараллеливания 84%, а при пересчете пиксельным методом с той же декомпозицией — 86%.

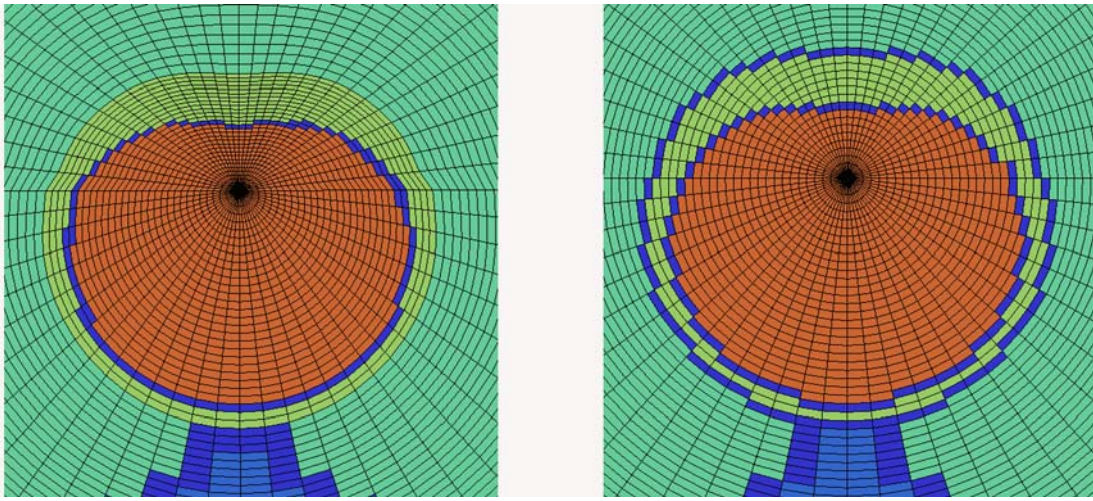


Рис. 6. Сечение плоскостью $z = 0$ задачи 2: *а* — до глобального пересчета; *б* — после глобального пересчета

Таблица 2

Результаты расчета задачи 2

| Расчет | Время пересчета, с | Дисбаланс, % | | | | $T_{\text{макс. сжатия, МКС}}$ | Максимальная средняя плотность, г/см ³ |
|------------------------------------|--------------------|-------------------|--------------------|-------------------|---------------------|--------------------------------|---|
| | | массы | $E_{\text{внутр}}$ | $E_{\text{кин}}$ | E | | |
| Стандартный растровый, 20 пикселей | 110 118 | $4 \cdot 10^{-5}$ | $4 \cdot 10^{-6}$ | 0,1 | $6,6 \cdot 10^{-2}$ | 60,74 | 8,863 |
| Модифицир. растровый, 20 пикселей | 66 100 | $8 \cdot 10^{-3}$ | $6 \cdot 10^{-3}$ | 0,1 | $7,3 \cdot 10^{-2}$ | 60,73 | 8,863 |
| Геометр. | 4 655 | $1 \cdot 10^{-4}$ | $2 \cdot 10^{-6}$ | 0,1 | $7 \cdot 10^{-2}$ | 60,74 | 8,865 |
| Геометр., 121 лист | 35 978 | $8 \cdot 10^{-5}$ | $9 \cdot 10^{-5}$ | $5 \cdot 10^{-2}$ | $4 \cdot 10^{-2}$ | 61,05 | 9,034 |

Очевидно, что число точек около 200 000 не характерно для трехмерных расчетов. Задача с числом точек около 1500 000 (как в расчете с удвоенным числом точек по каждому направлению) стандартным растровым методом с разбиением на 20 пикселей в скалярном режиме пересчитывалась бы приблизительно 244 часа, т. е. 10 суток, а модифицированным растровым методом — около 6 суток. Дополнительной сложностью является то, что глобальный пересчет является непрерывной операцией (в отличие, например, от итерационного пересчета, где необходимое число итераций можно делать за несколько "заходов"), т. е. нельзя на какой-то момент сделать запись, а затем продолжить счет. С использованием же геометрического метода такая задача считается около 10 часов.

По результатам тестовых расчетов можно сделать следующие выводы:

- точность реализованных методов пересчета величин практически совпадает;
- с точки зрения временных затрат предпочтительнее использование геометрического метода;
- эффективность распараллеливания алгоритма составляет 35–75% в зависимости от задачи и декомпозиции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 05–01–00083).

Список литературы

1. Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф. и др. Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцес-

- сорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41–50.
2. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Зайцева М. О. и др. Разностная схема расчета трехмерной лагранжевой газодинамики в комплексе ЛЭГАК-3D // Сб. докладов III науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Саратов, 2004. С. 77–82.
 3. Бахрах С. М., Безрукова И. Ю., Борляев В. В. и др. Корректировка сетки и пересчет величин в комплексе программ ЛЭГАК-3D // Там же. С. 49–54.
 4. Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф. Безавостная технология расчета течений сплошной среды по методике ЛЭГАК на многопроцессорных ЭВМ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2002. Вып. 3. С. 14–21.
 5. Козуб А. Г., Пронина О. А. Глобальная перестройка расчетной сетки и пересчет величин в комплексе программ РАМЗЕС // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 1. С. 55–61.
 6. Софронов И. Д., Воронин Б. Л., Скрыпник С. И. и др. Методика и комплексы программ РАМЗЕС, РАМЗЕС-КП // Там же. 1999. Вып. 4. С. 27–31.
 7. Артемьев А. Ю., Делов В. И., Дмитриева Л. В. Методика расчета нестационарных задач газодинамики в переменных Лагранжа // Там же. 1989. Вып. 1. С. 30–39.
 8. Седов Л. И. Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1981.
 9. Брушлинский К. В., Каждан Я. М. Об автомодельных решениях некоторых задач газовой динамики // УМН. 1963. Т. XVIII. Вып. 2(110). С. 3.

Статья поступила в редакцию 13.03.06.
