



УДК 519.6: 621.793.74

М. Ю. Харламов, канд. техн. наук
Восточноукраинский национальный университет им. В. Даля
(Украина, 91042, Луганск, кв. Молодежный, 20-а,
тел. (0642) 627998, E-mail: mkhar@yandex.ru)

Использование многопроцессорных вычислительных систем при численном моделировании течения электродуговой плазмы

Представлен алгоритм численного решения уравнений, описывающих турбулентное течение электродуговой плазмы в пограничном слое, предназначенный для использования в многопроцессорных вычислительных системах. Проведена серия вычислительных экспериментов и показано, что по сравнению с последовательным алгоритмом время решения задачи сокращается на 20 % и более в зависимости от условий проведения расчетов.

Представлено алгоритм чисельного розв'язку рівнянь, що описують турбулентну течію электродугової плазми у прилежовому шарі, призначений для використання в багато-процесорних обчислювальних системах. Проведено серію обчислювальних експериментів і показано, що у порівнянні з послідовним алгоритмом час розв'язання задачі скорочується на 20 % і більше залежно від умов проведення розрахунків.

К л ю ч е в ы е с л о в а: уравнения пограничного слоя, численное решение, многопроцессорная вычислительная система.

Для проведения научных исследований в современных условиях все чаще требуется привлечение методов компьютерного моделирования [1]. Это объясняется относительной простотой и небольшой стоимостью постановки вычислительного эксперимента, экономией материалов и времени, экологическими аспектами и др. Увеличение вычислительной мощности современной вычислительной техники позволяет даже на персональных компьютерах проводить достаточно сложные научные расчеты, выполнявшиеся ранее на так называемых больших машинах — кластерах и суперкомпьютерах.

Одним из наиболее интересных направлений развития современной вычислительной техники являются многопроцессорные системы, которые в настоящее время интенсивно распространяются и в среде персональных компьютеров. Их использование позволяет повысить эффективность вычислений при одновременном усложнении постановки задачи и учете

большого числа факторов. Это особенно актуально для задач, традиционно требующих использования мощных вычислительных ресурсов, таких, например, как течение газов и жидкостей в пограничных слоях (так называемое приближение погранслоя) [2, 3]. Уравнения погранслоя на практике широко используют при описании струйных течений, течений в каналах, трубах, различных технологических устройствах и др. Например магнитогазодинамические уравнения погранслоя, применяют при описании течения плазмы, генерируемой дугowymi плазмотронами различного технологического назначения [4, 5].

Важность численных исследований электродугового течения плазмы обусловлена активным развитием комплексного научного направления — инженерии поверхности [6], в котором рассматриваются методы и способы модифицирования поверхностных слоев изделий для придания им новых потребительских свойств, в том числе и с помощью плазменных технологий. Поэтому развитие методов решения уравнений пограничного слоя, адаптированных к архитектуре современных многопроцессорных ЭВМ и пригодных для исследования течения электродуговой плазмы, представляет научный и практический интерес.

Решение дифференциальных уравнений в частных производных, являющихся составными частями системы уравнений пограничного слоя, достаточно подробно описано в научной литературе. Поскольку адекватные модели реальных систем и объектов часто описываются уравнениями с существенно нелинейными коэффициентами, что объясняется зависимостью свойств веществ от температуры, давления и другими факторами, а также сложностью постановки краевых условий, большинство задач на практике решаются численными методами [1, 7]. Обычно в таких случаях применяется метод прогонки [3, 7]. Однако вопросы адаптации широко известных численных алгоритмов к вычислениям на многопроцессорных ЭВМ пока недостаточно освещены в литературе. Например, работы [8, 9] посвящены параллельным алгоритмам решения обыкновенных дифференциальных уравнений и дифференциальных уравнений в частных производных.

Относительно использования параллельных вычислений в решении газодинамических задач основная суть предлагаемых методов сводится либо к разбиению расчетной области на отдельные участки, каждый из которых обчисляется выделенным процессором, либо к параллельному решению уравнения Пуассона, применяемого, например, при описании поля давления [10]. Методы параллельного счета уравнений пограничного слоя в литературе практически не рассмотрены.

Предлагаемый алгоритм численного решения уравнений, описывающих турбулентное течение электродуговой плазмы в приближении пограничного

слоя, адаптирован для использования на многопроцессорных вычислительных системах (МВС), что позволяет значительно сократить время решения подобных задач.

Рассмотрим обобщенную форму записи системы уравнений пограничного слоя, представленной в цилиндрической системе координат. Такая форма записи чаще всего используется при описании течения плазмы в дуговых плазмотронах [4, 5]. Система уравнений состоит из уравнения неразрывности и двух или более уравнений сохранения, представленных в форме уравнения переноса [3, 4]:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v) = 0, \quad (1)$$

$$\rho v \frac{\partial \phi_m}{\partial r} + \rho u \frac{\partial \phi_m}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_\phi \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + S_\phi, \quad (2)$$

где ρ — плотность среды; u и v — осевая и радиальная составляющие скорости среды; ϕ_m — обобщенная переменная; λ_ϕ — обобщенный коэффициент диффузии; S_ϕ — источниковый член.

В простейшем случае, когда исследуется ламинарное течение газа или жидкости, или при использовании алгебраических моделей турбулентности обобщенная переменная ϕ_m совпадает со скоростью u для уравнения сохранения движения и энергией $h = C_p T$ (где C_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении, T — температура среды) для уравнения сохранения энергии. Следует заметить, что при турбулентном режиме течения параметры потока изменяются от своих средних значений случайным образом во времени. Поэтому в системе (1), (2) значения ρ, u, v, T будут осредненными по времени.

Использование более сложных моделей турбулентности может потребовать включения в систему (1), (2) дополнительных уравнений сохранения. Для \bar{k} - ε модели [5] таковыми являются уравнения сохранения кинетической энергии турбулентности \bar{k} и уравнения скорости диссипации турбулентности ε . В этом случае $\phi_m = \{u, C_p T, \bar{k}, \varepsilon\}$, $m = 1 \dots 4$. В систему (1), (2) могут входить и дополнительные уравнения сохранения, например уравнение конвективной диффузии при описании течения в многокомпонентной среде.

В системе уравнений пограничного слоя (1), (2) вдоль границ Γ расчетной области Ω должны быть заданы граничные и начальные (входные) условия для всех зависимых переменных ϕ_m , которые в простейшем случае соответствуют граничным условиям 1-го рода:

$$\phi_m(z, r)|_\Gamma = \phi_m^{(0)}(z, r). \quad (3)$$

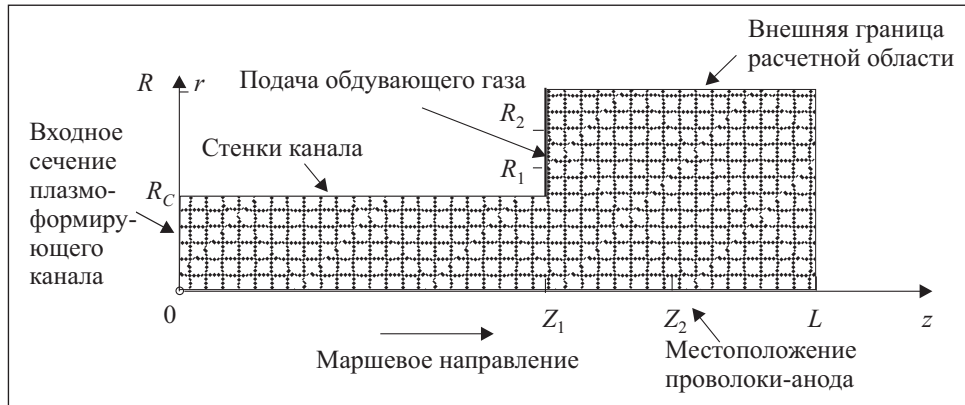


Рис. 1. Расчетная схема плазмoтрона

Кроме граничных условий, система (1), (2) может замыкаться и дополнительными соотношениями. При расчете плазмoтронов таковыми могут быть: условие сохранения полного расхода газа через канал, условие сохранения полного тока дуги и др. [4, 5]. Следует заметить, что при моделировании плазменных потоков коэффициенты уравнений (1), (2) являются нелинейными, зависящими, в общем случае, от температуры T и давления P . В частности таковыми являются теплофизические характеристики ($\rho = \rho(T, P)$, $C_p = C_p(T, P)$), коэффициенты переноса, характеризующие вязкость ($\eta = \eta(T, p)$), теплопроводность ($\chi = \chi(T, p)$) и другие свойства плазмы.

Возможности аналитического решения подобных систем нелинейных дифференциальных уравнений весьма ограничены, поэтому обычно решение поставленной задачи выполняется численно, методом конечных разностей [3, 7]. Важной особенностью численного решения описанной системы уравнений является то, что решение ищут маршево [3] (так как уравнения (2) — параболические), т. е. последовательным движением наружу от поверхности, на которой заданы начальные условия, — обычно в направлении оси z . В качестве примера на рис. 1 показана использованная в работе [5] расчетная схема плазмoтрона с внешней проволокой-анодом, на которой указаны поверхность задания начальных и граничных условий и маршевое направление.

Рассмотрим вычислительную схему численного решения системы уравнений (1), (2). При применении метода конечных разностей осуществляется переход от непрерывной области изменения аргументов r, z к конечно-разностной сетке с множеством точек-узлов r_j, z_i . Для этого могут быть использованы равномерные и неравномерные по одной или двум координатам расчетные сетки $\bar{\omega}$:

$$\bar{\omega}_z = \{z = z_i, i=0, \dots, N_z\}, \quad \bar{\omega}_r = \{r = r_j, j=0, \dots, N_r\}.$$

При этом $\Delta r_j = r_{j+1} - r_j$, $\Delta z_i = z_{i+1} - z_i$. Непосредственно конечно-разностный аналог уравнений (1), (2) может быть построен несколькими явными и неявными методами [3]. При расчете плазменных течений к нелинейному дифференциальному уравнению 2-го порядка (2) часто с успехом применяют неявную двухслойную разностную схему [4], которую можно записать в виде

$$\begin{aligned} \alpha_m a_m^{i+1/2,j} L_j F_m^{i+1} + (1-\alpha_m) a_m^{i+1/2,j} L_j F_m^i + b_m^{i+1/2,j} L_i F_m^j = \\ = \alpha_m \Lambda_j F_m^{i+1} + (1-\alpha_m) \Lambda_j F_m^i + d_m^{i+1/2,j}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $F_m^{i,j}$ — сеточный аналог функции ϕ_m ; $a_m = r\rho v$; $b_m = r\mu$; $c_m = r\lambda_\phi$; $d_m = S_\phi$ — коэффициенты уравнения; α_m — коэффициент смешения слоев; $L_j F_m^i$, $L_i F_m^j$, $\Lambda_j F_m^i$ — разностные операторы, соответственно аппроксимирующие производные 1-го порядка в радиальном и осевом направлениях, а также производную 2-го порядка. Конкретный вид разностных операторов выбирают исходя из порядка точности разностной схемы, а также физических особенностей решаемой задачи. При расчете плазматронов для аппроксимации уравнения (2) обычно используют шеститочечную схему, в которой производные первого порядка в радиальном направлении $L_j F_m^i$ аппроксимируются несимметричными разностями против потока, что обеспечивает лучшую устойчивость разностной схемы [3, 4].

В процессе решения уравнения (4) получаем систему уравнений с трехдиагональной матрицей:

$$A_m^{i,j} F_m^{i+1,j+1} - B_m^{i,j} F_m^{i+1,j} + C_m^{i,j} F_m^{i+1,j-1} + D_m^{i,j} = 0, \quad (5)$$

где $A_m^{i,j}$, $B_m^{i,j}$, $C_m^{i,j}$, $D_m^{i,j}$ — коэффициенты, получаемые при преобразовании конечно-разностного уравнения (4) к трехточечному виду (5). Для решения системы уравнений с трехдиагональной матрицей обычно используется метод прогонки.

Уравнение (1) решается на каждом пространственном слое i совместно с уравнениями (2) системы для определения радиальной компоненты скорости v . Для конечно-разностной аппроксимации уравнения (1) обычно используют явную четырехточечную схему [4].

Пространственное распределение всех искомым функций ϕ_m и v происходит в результате последовательного прохода всех поперечных сечений $i = 1 \dots N_z$. Поскольку конечно-разностные аналоги (1), (2) являются нелинейными алгебраическими уравнениями, коэффициенты которых зависят от искомым функций, для их решения применяют метод итераций [3]. При этом на $i + 1$ слое значения коэффициентов уравнений принимают такими же, как на предыдущем слое, и из решения системы уравнений

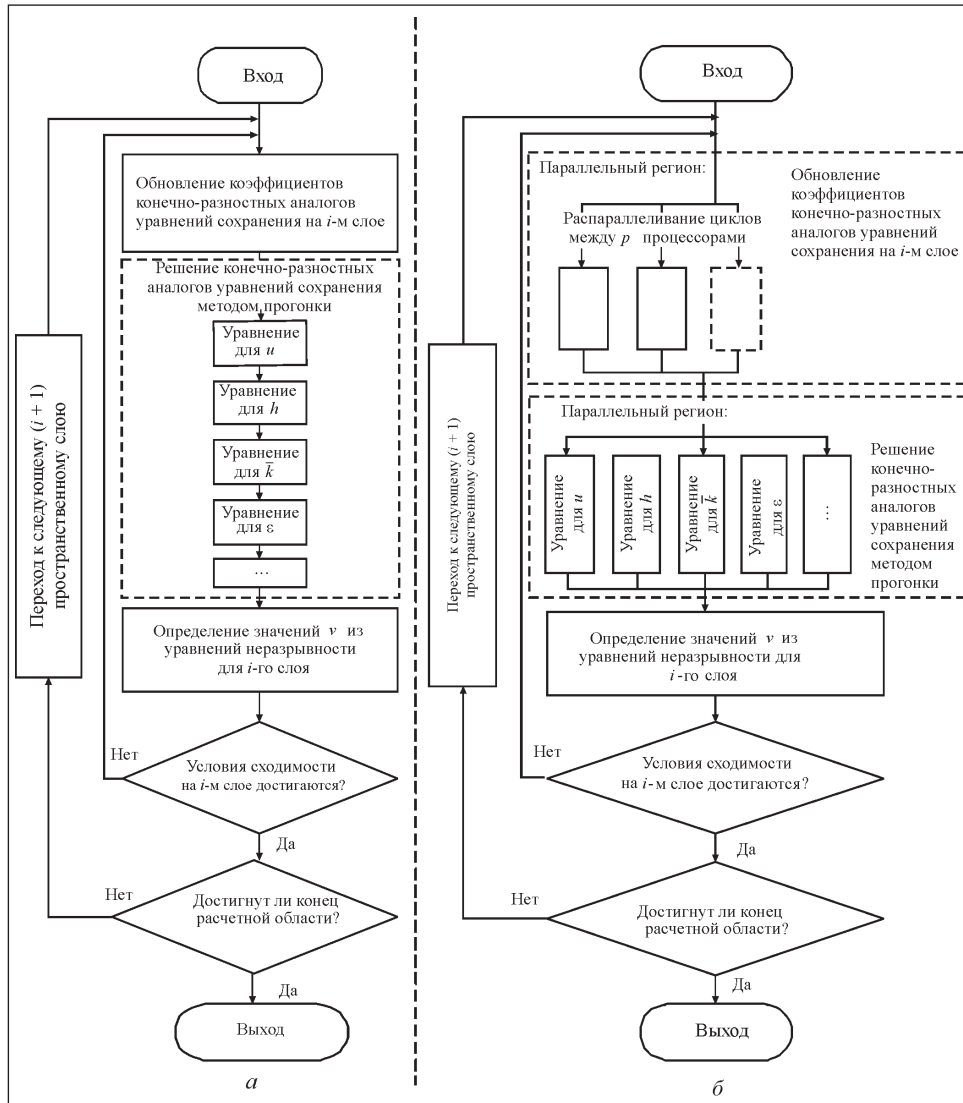


Рис. 2. Последовательный (а) и параллельный (б) алгоритмы решения уравнений пограничного слоя

определяют значения неизвестных ϕ_m и v на $i + 1$ слое. После этого значения коэффициентов обновляются и расчет повторяется итерационно, вплоть до достижения сходимости на $i + 1$ пространственном слое. При моделировании течения плазмы внутри канала плазмотрона в качестве условий сходимости принимают условия сохранения полного тока [4, 5], а также расхода плазмообразующего газа через $i + 1$ сечение плазмотрона.

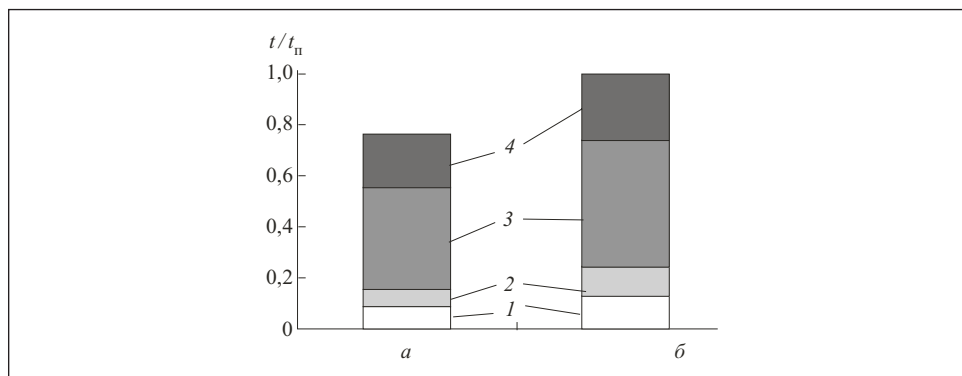


Рис. 3. Относительное время выполнения отдельных функциональных блоков параллельной (а) и последовательной (б) версий программы: 1 — определение теплофизических параметров газа и коэффициентов переноса; 2 — решение разностных уравнений; 3 — выборка данных из базы данных и их интерполяция; 4 — прочие операции

Таким образом, традиционный метод решения системы уравнений пограничного слоя, используемый при численном моделировании электродугового течения плазмы, состоит из ряда однотипных, выполняемых последовательно, операций. Алгоритм численного решения представлен на рис. 2. На каждом слое $i + 1$ итерационно проводится расчет коэффициентов уравнений; последовательно решаются их конечно-разностные аналоги; определяется распределение радиальной компоненты скорости; оценивается условие сходимости и при необходимости снова проводится расчет параметров системы в $i + 1$ слое с обновленными значениями коэффициентов уравнений.

Рассмотрим, каким образом можно повысить эффективность описанного выше алгоритма при использовании МВС с p процессорами. Приведем описание алгоритма для многопроцессорных систем с общей памятью [9, 11]. Такие системы соответствуют современным персональным компьютерам с многоядерными процессорами и наиболее доступны по цене.

В настоящее время процесс построения параллельных программ недостаточно формализован и часто определяется знаниями и опытом разработчика. В МВС с общей памятью работа приложения начинается с единственного (основного) потока. Приложение может содержать параллельные регионы, входя в которые основной поток создает группы потоков, выполняемые одновременно. Поэтому перед процессом распараллеливания программы необходимо провести анализ ее исходной последовательной версии, чтобы выделить потенциальные участки для распараллеливания, каждый из которых впоследствии будет интегрирован в параллельный регион. Эти участки, прежде всего, должны содержать большое число однородных дейст-

вий над однотипными данными, что обуславливает их разделение на слабо-взаимодействующие фрагменты, а также иметь относительно большое время выполнения, чтобы эффект от реализации параллелизма не перекрывался соответствующими накладными расходами: созданием потоков, их синхронизацией, передачей сообщений и др.

В соответствии с изложенным выше последовательным алгоритмом решения системы уравнений пограничного слоя разработана вычислительная программа для моделирования плазменных потоков, реализованная на языке C++. Для приведения данной программы к параллельному виду проведено ее профилирование (сбор характеристик работы) и определен относительный вклад отдельных функциональных блоков программы в длительность ее выполнения $t_{\text{п}}$. Полученные результаты представлены на рис. 3, а из которого видно, что наиболее ресурсоемкими относительно затрачиваемого процессорного времени являются следующие функциональные блоки программы: 1—14,56 %; 2—13,20 %; 3—41,73 %. Оставшееся процессорное время (приблизительно 30 %) использовалось для выполнения других операций.

Проанализируем, какие из упомянутых функциональных блоков программы можно представить в параллельном виде. Следует заметить, что блок определения теплофизических параметров газа и коэффициентов переноса обращается к блоку выборки данных из базы данных (БД) для получения табличных значений коэффициентов уравнений, т. е. эти блоки являются связанными. В то же время, операции обращения к БД, по сути, — унитарны и их достаточно сложно распараллеливать. Поэтому полное распараллеливание блока выборки данных из БД достигнуть не удастся. Однако и в этом случае можно несколько повысить эффективность вычислений на МВС, если использовать так называемые параллельные БД, общая производительность которых при обработке данных оказывается выше традиционных БД в результате использования нескольких процессоров.

Распараллеливание функционального блока программы, отвечающего за определение теплофизических параметров газа и коэффициентов переноса, можно выполнить исходя из следующих соображений. В реализованном варианте алгоритма расчета уравнений пограничного слоя в начале каждой внутренней итерации счета i -го пространственного слоя проводится обновление значений коэффициентов уравнений. Соответствующие вычисления происходят в цикле от 1 до $N_r(i)$, где $N_r(i)$ — число узлов конечно-разностной сетки вдоль оси r в i -м пространственном сечении. Циклы являются самыми распространенными конструкциями, где выполнение кода можно распараллелить. В этом случае в результате равномерного линейного разбиения узлов сетки на связанные подмножества

$\{n_1^{(k)}, \dots, n_2^{(k)}\}$ ($k = 1 \dots p, n_1^{(k)} < n_2^{(k)} \leq N_r(i)$) каждый процессор с номером k будет обрабатывать $(n_2^{(k)} - n_1^{(k)} + 1)$ точек.

Несмотря на то, что система уравнений пограничного слоя (1), (2) является взаимосвязанной, в процессе численного решения выполняется расщепление системы алгебраических уравнений и конечно-разностные аналоги уравнения (2) решаются отдельно. Связь уравнений обеспечивается при вычислении коэффициентов решаемых уравнений в начале каждой внутренней итерации расчета i -го пространственного сечения. Поэтому решение каждого конечно-разностного уравнения (4) можно осуществлять в отдельном потоке параллельного региона, в конце которого выполняется барьерная синхронизация. Пока все потоки не достигнут конца параллельного региона, ни один поток не сможет перейти его границу. После этого продолжается выполнение главного потока вычислительной программы.

Приведем последовательность действий согласно алгоритму решения уравнений пограничного слоя, модифицированному для выполнения на МВС (рис. 3, б).

Каждой внутренней итерации счета на i -м пространственном слое предшествует вычисление коэффициентов конечно-разностных аналогов дифференциальных уравнений сохранения (2), которое проводится в параллельном цикле. Затем методом прогонки решаются уравнения (4). Решение каждого уравнения проводится в отдельном потоке параллельного региона, которые выполняются на МВС одновременно. После этого в основном потоке программы последовательно выполняются остальные операции вычислительного алгоритма: определение значений радиальной компоненты скорости v для i -го сечения из уравнения неразрывности (1), проверку условий сходимости и прочие действия.

Рассмотрим очередной этап, а именно выбор языка и средств программирования. Язык C++, на котором реализована исходная вычислительная программа, наряду с языком Fortran достаточно часто используется в научных расчетах, и в настоящее время существует ряд библиотек, позволяющих писать на нем программы для МВС.

Для суперкомпьютеров с физически и логически распределенной оперативной памятью используется модель распараллеливания, основанная на обмене сообщениями. Здесь ведущим стандартом написания параллельных программ является MPI [9].

Для компьютеров с общим полем памяти целесообразно применять более простые в использовании и эффективные средства. Одним из таких достаточно распространенных средств распараллеливания для систем с общим полем памяти является стандарт OpenMP [12], который и был выбран для реализации многопоточности.

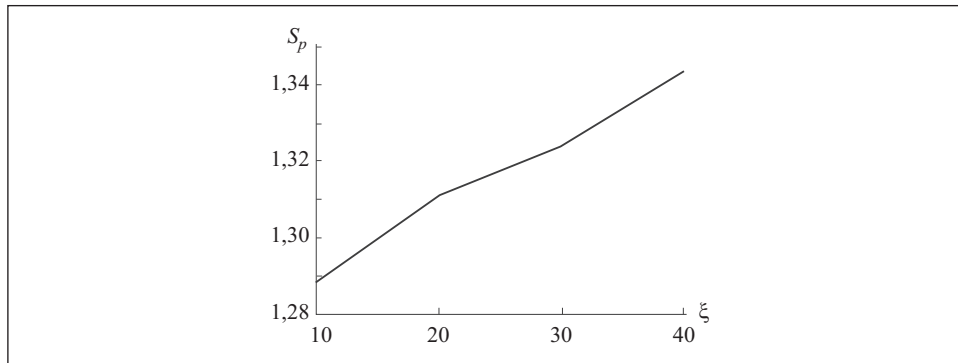


Рис. 4. Зависимость ускорения параллельного алгоритма от степени детализации расчетной области

Эффективность предложенного алгоритма определяется с использованием таких показателей как ускорение параллельного алгоритма S_p и его эффективность E_p [11]:

$$S_p = \frac{t_1}{t_p}, \quad E_p = \frac{S_p}{p} 100\%, \quad (6)$$

где t_1 — время решения исходной задачи на одном процессоре; t_p — время решения исходной задачи по параллельному алгоритму на p процессорах. Оценки (6) получены по результатам серии тестовых расчетов для исходной версии программы и ее многопоточного варианта. Было смоделировано течение турбулентной электродуговой плазмы, генерируемой плазмотроном, расчетная схема которого приведена на рис. 1.

Подробная математическая постановка данной задачи приведена в [5]. В базовом варианте дискретизации расчетной области использована равномерная расчетная сетка с детализацией $\xi = 1\text{мм} / \Delta z = 1\text{мм} / \Delta r = 20$ ячеек на 1 мм. В этом случае число ячеек вдоль координат R и Z принято равным (240×5060). Характерное время счета в исходной версии программы на МВС с двухядерным процессором Intel Core 2 Duo T7100 составляло 120 с. Для многопоточной версии программы характерное время счета при базовом варианте дискретизации равнялось 92 с (на двухпроцессорной системе). В этом случае ускорение параллельного алгоритма составляло 1,31, показатель эффективности — 65,2 %.

Зависимость ускорения предложенного параллельного алгоритма от степени детализации расчетной области приведена на рис. 4, из которого видно, что уменьшение шага сетки $\Delta r, \Delta z$ приводит к увеличению выпол-

няемых процессором операций, вследствие чего ускорение параллельного алгоритма увеличивается практически по линейному закону: от 1,29 для детализации 10 ячеек на 1 мм, до 1,34 при детализации 40 ячеек на 1 мм. Соответственно показатель эффективности предложенного алгоритма изменялся в пределах 64,4...67,2 %.

Выводы. 1. Предложенный модифицированный вариант вычислительного алгоритма решения системы уравнений типа уравнений пограничного слоя применительно к условиям течения электродуговой плазмы и другим, сходным по конфигурации, погранслоиным течениям, предназначен для реализации на многопроцессорных вычислительных системах.

2. Использование даже двухпроцессорной вычислительной системы позволяет добиться ускорения работы параллельного алгоритма в 1,3 и более раз по сравнению с его последовательным аналогом в зависимости от степени детализации расчетной области.

3. Направлением дальнейших исследований является разработка вычислительных алгоритмов для многопроцессорных вычислительных систем, предназначенных для решения полной системы газодинамических уравнений Навье—Стокса.

The numerical solution algorithm for equations, which describe electric arc plasma turbulence flow in boundary layer approximation, has been presented. The algorithm is assigned for multiprocessor computation system. A series of computing experiments was carried out. The problem decision time is decreased by 20 % and above, compared to sequential algorithm, subject to calculation conditions, has been shown.

1. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. — М. : Наука, Физматлит, 1997. — 320 с.
2. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. — М. : Наука, 1973. — 847 с.
3. Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен. Т. 1. — М. : Мир, 1990. — 384 с.
4. Математическое моделирование электрической дуги / В. С. Энгельшт, Д. С. Асанов, В. Ц. Гурович и др. — Фрунзе: Илим, 1983. — 363 с.
5. Харламов М. Ю., Кривцун И. В., Коржик В. Н. и др. Математическая модель дуговой плазмы генерируемой плазматроном с проволокой-анодом // Автоматическая сварка. — 2007. — № 12. — С. 14—20.
6. Інженерія поверхні: Підручник / К. А. Ющенко, Ю. С. Борисов, В. Д. Кузнецов та ін. — К. : Наук. думка, 2007. — 558 с.
7. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. — М. : Наука, 1971. — 552 с.
8. Кудряшова Т. А., Поляков С. В. О некоторых методах решения краевых задач на многопроцессорных вычислительных системах // Тр. четвертой международной конференции по математическому моделированию. 27 июня — 1 июля 2000 г. Т. 2. — М. : Изд-во «СТАНКИН», 2001. — С. 134—145.
9. Шпаковский Г. И., Серикова Н. В. Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI. — Минск : БГУ, 2002. — 323 с.

10. *Chung T. J.* Computational Fluid Dynamics. — Cambridge: Cambridge University Press, 2002. — 1012 p.
11. *Якобовский М. В.* Распределенные системы и сети/ Учеб.пособие. — М: МГТУ «Станкин», 2000. —118 с.
12. *The OpenMP API specification for parallel programming.* — <http://openmp.org>

Поступила 02.12.08;
после доработки 03.06.09

ХАРЛАМОВ Максим Юрьевич, канд. техн. наук, доцент кафедры «Системная инженерия» Восточноукраинского национального университета им. В. Даля, который окончил в 2001 г. Область научных исследований — математическое моделирование физических процессов, сопутствующих сварке и родственным технологиям; разработка интеллектуальных систем управления технологическими процессами.