

Об одном методе гидродинамики сглаженных частиц для произвольной интенсивно изменяемой свободной поверхности*

И. В. Гугушвили, Н. М. Евстигнеев

Аннотация. Показан алгоритм интегрирования трехмерных нестационарных уравнений динамики несжимаемой жидкости в лагранжевом представлении. Рассмотрен алгоритм получения полностью несжимаемой постановки, в отличие от классического алгоритма гидродинамики сглаженных частиц, обладающего вычислительной нефизической сжимаемостью. Для ускорения расчета применяется технология CUDA для вычислителей компании NVIDIA. Проведено сопоставление результатов моделирования некоторых начально-краевых задач с физическими экспериментами и другими численными методами для решения уравнений Навье—Стокса.

Ключевые слова: гидродинамика сглаженных частиц, свободная поверхность, параллельные вычисления, графические процессоры, CUDA.

Введение

В настоящее время лагранжевские численные методы для моделирования гидродинамических задач со свободной поверхностью распространяются достаточно широко в стратегические технические задачи, например [3]. Это вызвано созданием адекватного метода описания континуальной механики дискретными элементами, а также повышением вычислительной мощности компьютеров. Требуется построение и отладка универсального алгоритма, имеющего широкую область применимости и устойчиво работающего на параллельных платформах.

1. Исходные уравнения и модель

В общем виде рассматриваем уравнения Навье—Стокса для вязкой несжимаемой жидкости, представляющие из себя законы сохранения массы и количества движения в какой-либо области $\Omega \in \mathbb{R}^3$:

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u}) + \mathbf{f}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

где $\mathbf{u} : \Omega \times [0, t] \rightarrow \mathbb{R}^3$ — скорость; $\rho = \text{const}$ — плотность жидкости; $p : \Omega \times [0, t] \rightarrow \mathbb{R}$ — гидроди-

намическое давление жидкости; \mathbf{f} — вектор внешней силы; μ — динамическая вязкость жидкости. Поскольку рассматриваемые уравнения (1) вводятся для эйлеровой сетки, второй закон Ньютона (1) состоит из полного набора сил, действующих на элементарный объем с правой стороны и субстанциональной производной ускорения для левой стороны, которая зависит от положения в пространстве $\mathbf{r}(t)$, зависящего в свою очередь от t :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{u} \left(t, \mathbf{r}(t) \right) &= \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} = \\ &= \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \left(\mathbf{u} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right]^T \right) \mathbf{u} = \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (3)$$

что представляет из себя полную производную по времени для \mathbf{u} при применении эйлеровой системы координат.

В случае если жидкость предполагается сжимаемой, пользуясь тем же выводом что и (3), уравнение (2) переписываем так:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (4)$$

В отличие от эйлерового подхода, лагранжев подход для каждой частицы значительно упрощает уравнение движения. Предполагая изменение количества частиц в Ω только от источникового члена

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 09–07–00078а и 11–07–00126а).

(т. е. «впрыск» жидкости) и предполагая массу частицы постоянной величиной, можно опустить уравнение (2), поскольку оно выполняется автоматически. Движение лагранжевых частиц вместе с жидкостью и их локальные свойства полностью определяют свойства моделируемой среды и эти свойства теперь зависят только от времени t . Таким образом, ускорение для лагранжевой частицы становится обыкновенной производной по времени ее скорости $d\mathbf{V}/dt$. Тогда уравнения движения (1) переписутся как

$$\rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{V} + \mathbf{f}, \quad (5)$$

при этом \mathbf{V} — скорость частицы в \mathbb{R}^3 ; \mathbf{f} — внешние силы, действующие на частицу, не зависящие от взаимного расположения частиц друг относительно друга (например, сила гравитации); остальные члены справа в (5) являются внутренними силами (давление и вязкость), действующими на частицу со стороны других частиц.

Определение внешних сил тривиально и зависит от их природы. Например, сила гравитации определяется как

$$\mathbf{f}_{gr} = \rho \mathbf{g}. \quad (6)$$

Определение внутренних сил зависит от взаимного положения частиц в Ω и уже не является тривиальной процедурой. Следуя [1] и [2], будем рассматривать нахождение внутренних сил в следующем виде: Пусть в Ω есть частица i с координатой \mathbf{x}_i , постоянной массой m_i и некоторым свойством A_i . Тогда, если известны значения этого свойства для частиц j в некоторой окрестности h , то A_i определяется как

$$A(\mathbf{x}_i)_i = \sum_j \left(m_j \frac{A_j}{\rho_j} \cdot W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h) \right), \quad (7)$$

где ρ — плотность частицы; W — некая сглаживающая функция. Сумма ведется по всем частицам j , для которых $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq 2h$. Уравнение (7) является дискретным аналогом интегральной интерполяции вида

$$A(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} A(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}'$$

для произвольной точки \mathbf{r} в Ω . Здесь параметр h , как и в (7), контролирует гладкость интерполяции. В связи с тем, что во внутренние силы в (5) входят первые и вторые производные по координатам (градиент давления и лапласиан скорости), необходимо получить искомые выражения из (7):

$$\begin{aligned} \nabla \left(m_j \frac{A_j}{\rho_j} \cdot W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h) \right) &= \\ &= \nabla \left(m_j \frac{A_j}{\rho_j} \right) W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} + m_j \frac{A_j}{\rho_j} \nabla (W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h)) &\cong 0 \cdot W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h) + \\ &+ m_j \frac{A_j}{\rho_j} \nabla (W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j; h)), \end{aligned} \quad (8)$$

где $\nabla \left(m_j \frac{A_j}{\rho_j} \right) \cong 0$, поскольку значение в точке j слабо зависит от координаты \mathbf{x} и может быть принято постоянной величиной. Если данное условие не выполняется, поскольку можно предположить что справедливо (4), то тогда

$$\rho \nabla A = \nabla(\rho A) - A \nabla \rho, \quad \nabla A = \frac{1}{\rho} (\nabla(\rho A) - A \nabla \rho), \quad (9)$$

или, если в (5) перенести вправо плотность,

$$\begin{aligned} \frac{\nabla A}{\rho} &= \nabla \left(\frac{A}{\rho} \right) + \frac{A}{\rho^2} \nabla \rho, \\ \nabla A &= \rho \left(\nabla \left(\frac{A}{\rho} \right) + \frac{A}{\rho^2} \nabla \rho \right). \end{aligned} \quad (10)$$

И тогда, выражения для (9) и (10) принимают вид

$$\nabla A = \frac{1}{\rho} \sum_j (A_j - A) m_j \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \quad (11)$$

и

$$\nabla A = \rho \sum_j \left(\frac{A_j}{\rho_j^2} + \frac{A}{\rho^2} \right) m_j \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \quad (12)$$

соответственно. Выражение для оператора лапласа записывается как

$$\nabla^2 A = \sum_j A_j \frac{m_j}{\rho_j} \nabla^2 W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h). \quad (13)$$

Выбор формы W во всех операторах интегрирования для A является аналогом выбора схемы интерполяции значений для методов численного решения дифференциальных уравнений на эйлеровой сетке. Основные свойства сглаживающей функции:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} W(\mathbf{r}, h) d\mathbf{r} &= 1, \quad W(\mathbf{r}, h) \geq 0, \\ W(\mathbf{r}, h) &= W(-\mathbf{r}, h), \\ W(\mathbf{r}, h) &= 0 \Leftrightarrow \|\mathbf{r}\| > h. \end{aligned} \quad (14)$$

Если (14) выполняются, то тогда процедура интерполяции для таких выбранных W будет иметь точность $O(h^2)$, или лучше [2].

После того, как были определены способы вычисления каких-либо гидродинамических функций для внутренних сил, уравнение (5) можно переписать для i -й частицы как

$$\frac{dV_i}{dt} = \frac{f_i^{\text{press}} + f_i^{\text{visc}}}{\rho_i} + \frac{f_i^{\text{gr}}}{\rho_i}. \quad (15)$$

Из выведенных соотношений (7), (12) и (13) можно найти внутренние силы взаимодействия, связанные с градиентом давления и диффузией. Для вычисления силы от градиента давления приведем стандартные выражения, следуя [2], которые используют наиболее точное выражение для градиента (12):

$$f_i^{\text{press}} = -\rho_i \sum_{j \neq i} \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) m_j \nabla W^{\text{press}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h). \quad (16)$$

Данное выражение также обладает важным свойством, связанным с симметрией взаимодействия, поскольку стандартное выражение для градиента (1) не симметрично. Для силы вязкости, в предположении линейности связи касательных напряжений от градиента скоростей, можно записать

$$f_i^{\text{visc}} = \mu \sum_{j \neq i} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \frac{m_j}{\rho_j} \nabla^2 W^{\text{visc}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h). \quad (17)$$

Такое выражение получается аналогично (11). Для нахождения решения (15) требуется для всех частиц определить плотность и давление. Плотность определяется как

$$\rho_i = \sum_j m_j W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h), \quad (18)$$

а давление находится из уравнения состояния, например как:

$$p_i = C^2(\rho_i - \rho_0), \quad (19)$$

где ρ_0 — плотность жидкости в равновесном состоянии; C — скорость распространения возмущений в жидкости.

Не останавливаясь на деталях выбора W , запишем их из [4]:

$$W(\mathbf{x}, h) = \frac{315}{64\pi h^9} \begin{cases} (h^2 - \|\mathbf{x}\|^2)^3, & 0 \leq \|\mathbf{x}\| \leq h; \\ 0, & \|\mathbf{x}\| > h; \end{cases} \quad (20)$$

$$W^{\text{press}}(\mathbf{x}, h) = \frac{15}{\pi h^6} \begin{cases} (h - \|\mathbf{x}\|)^3, & 0 \leq \|\mathbf{x}\| \leq h; \\ 0, & \|\mathbf{x}\| > h; \end{cases} \quad (21)$$

$$W^{\text{visc}}(\mathbf{x}, h) = \frac{15}{2\pi h^3} \begin{cases} \frac{\|\mathbf{x}^3\|}{2h^3} + \frac{\|\mathbf{x}^2\|}{h^2} + \frac{h}{2\|\mathbf{x}\|} - 1, & 0 \leq \|\mathbf{x}\| \leq h; \\ 0, & \|\mathbf{x}\| > h. \end{cases} \quad (22)$$

Кроме того, система сил дополняется внешними силами, в зависимости от задачи, такими как: гравитация, сила Кориолиса, сила плавучести, сила поверхностного натяжения и т. д. Здесь подробно на этих силах останавливаться не будем. Для решения начально-краевых задач система уравнений (15) дополняется краевыми и начальными условиями для каждой частицы (например, соударением с твердой поверхностью и начальным положением частиц в Ω).

2. Нефизическая сжимаемость и ее устранение

Показанная выше система уравнений требует вычисления плотности, которая, в случае несжимаемой жидкости, должна быть const. Многие методы [4–6] исходят из условия, что девиация плотности от ρ_0 составляет 1%, а скорость распространения возмущений C в несколько десятков раз меньше реальной скорости распространения возмущений в жидкости. Реальная сжимаемость жидкости, например, воды, составляет не более 0,1–0,2% по плотности [7], и значение сжимаемости в 1% становится достаточным, чтобы получить нефизические результаты при возникновении локальных значительных градиентов давления (порядка 1^9 Па/см).

В классических методах численного решения уравнений Навье—Стокса для учета несжимаемости жидкости (соленоидальности \mathbf{u}) вводят уравнение Пуассона для какой-либо потенциальной функции — чаще всего давления. Такие методы применяются и для моделей уравнений Навье—Стокса в лагранжевой постановке, например [8], но они приводят к необходимости решать СЛАУ большой размерности и при этом теряется вычислительная эффективность лагранжевого метода.

Здесь предлагается заменить вычисление силы градиента давления на вычисление координат смещения, непосредственно связанных с градиентом давления. Тогда, выполнив несколько итераций по всем частицам, давление будет перераспределено и плотность жидкости будет стремиться к ρ_0 . Для этого, после вычисления давления через уравнение состояния (19), сила, вычисляемая от градиента давления по (16), переписывается как смещение координат:

$$\Delta \mathbf{x}_i = \Delta t^2 \frac{f_i^{\text{press}}}{\rho_i}. \quad (23)$$

После вычисления смещения координат, повторяется итерация с момента вычисления плотности. Критерием остановки итерации является условие

$$\max \left| \frac{\rho_i - \rho_0}{\rho_0} \right| < \delta, \quad (24)$$

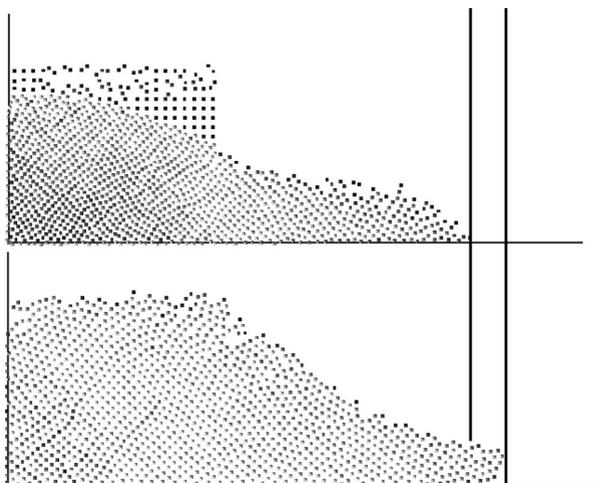


Рис. 1. Пример влияния сжимаемости и ее коррекция на двухмерном примере обрушения столба жидкости

где Δt — шаг интегрирования по времени; δ обычно принимается $1 \cdot 10^{-4}$. Данный подход снимает проблему как искусственной сжимаемости, так и жесткости системы уравнений при реалистичных C . Например, если рассмотреть воду, то $C = 1500$ м/с, и для стандартного метода $\Delta t \approx 1,42 \cdot 10^{-6}$ сек. Для скорректированного метода шаг по времени не имеет ограничений по условию жесткости системы.

На рис 1 показано сравнение применения сжимаемого и скорректированного методов в двухмерной постановке, при условии, что шаг интегрирования по времени одинаковый, $\mathbf{g} = \{0; -9,81\}$. Для наглядности, вертикальными линиями показаны координаты фронта волны в один и тот же момент времени.

3. Реализация алгоритма на графическом процессоре

Все особенности реализации на вычислителях NVIDIA с технологией CUDA для данного алгоритма можно разделить на два, а именно: реализация алгоритма поиска ближайших соседей в радиусе влияния h и оптимальный метод вычисления сил внутреннего взаимодействия.

Учитывая архитектуру графического процессора, можно сказать, что наиболее верным методом реализации поиска соседей является hash-табличный метод, который досконально описан в документации CUDA SDK, приложение particles [9]. Метод заключается в разбиении всей области Ω на ячейки, для которых строится массив соответствия номеров частиц. Таким образом, множеству ячеек соотносится множество частиц в Ω и задача поиска соседа становится простой, поскольку для этого требуется

просмотреть все соседние ячейки разбиения с текущей ячейкой. Реализуется данный метод путем сортировки частиц по их принадлежности к hash-таблице, основываясь на координатах. Для сортировки используется алгоритм радикс обмена, работающий с линейной скоростью, реализованный в библиотеке CUDPP, который выполняет сортировку порядка 1 млрд 32-битных ключей в секунду на архитектуре Fermi вычислителей NVIDIA. После сортировки производится нахождение начала и конца списка в ячейки путем сравнения их координат и принадлежности к ячейке. Сортировка массивов хранения искомым функций улучшает взаимодействие с памятью и ускоряет расчет.

Расчет взаимодействия текущей частицы с соседями выполняется параллельно на вычислителе, проводя суммирование по потокам. Таким образом, перед суммированием необходимые значения переменных записываются в разделяемую память устройства, и, поскольку сортировка данных уже выполнена, то конфликтов доступа к глобальной памяти не возникает.

Численное решение уравнений (15) для каждой частицы выполняется методом Рунге—Кутты третьего порядка точности. Коррекция давления выполняется на каждом промежуточном шаге метода. Шаг по времени, фактически, ограничен только требованием точности получаемых результатов. Тестирование алгоритмов проводилось на вычислителях NVIDIA Tesla C1060, установленной в лаб.№ 11–3. ИСА РАН и Tesla C2050, предоставленной сотрудником компании NVIDIA Антоном Романовичем Джораевым, за что авторы выражают ему огромную признательность.

4. Сопоставление результатов и производительность

Для оценки производительности и сопоставления результатов рассматривается задача обрушения столба жидкости в присутствии центрально расположенного столба, поскольку имеются достаточно точные экспериментальные результаты в литературе [10]. Начально-краевая задача взята из [10]: Область прямоугольная, размеры области 0,75 м в высоту (Z), 0,61 м в ширину (Y) и 1,6 м в длину (X). Столб размером $0,12 \times 0,12 \times 0,75$ м расположен центрально в плоскости YZ на расстоянии 0,9 м от начала координат по X. Столб жидкости имеет высоту 0,58 м (Z) и толщину 0,4 м (X). Результаты моделирования для $N = 112\,588$ показаны на рис 2 и 3. Для вычисления давления на поверхность столба, проводится суммирование по всем элементам твердой поверхности фронтальной плоскости центрального столба.

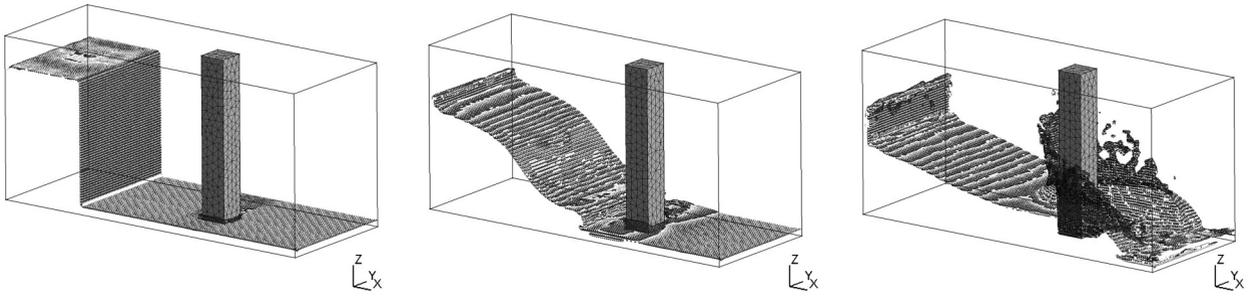


Рис. 2. Задача обрушения столба жидкости; $t = \{0; 0,25; 0,5\}$ с

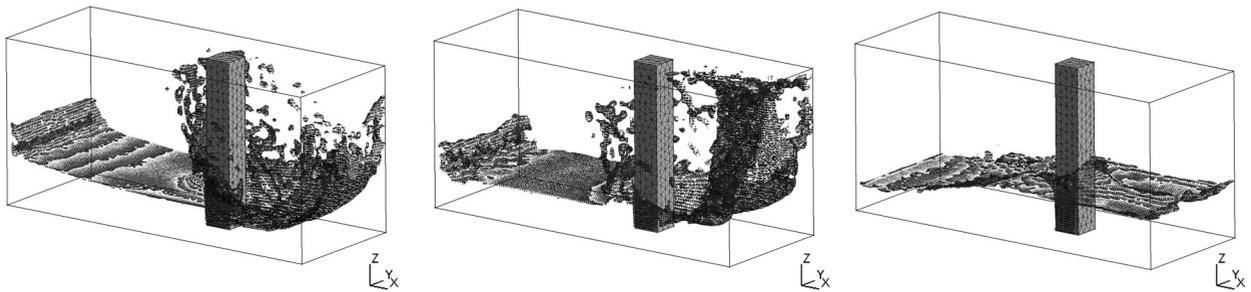


Рис. 3. Задача обрушения столба жидкости; $t = \{1,0; 1,25; 2,25\}$ с

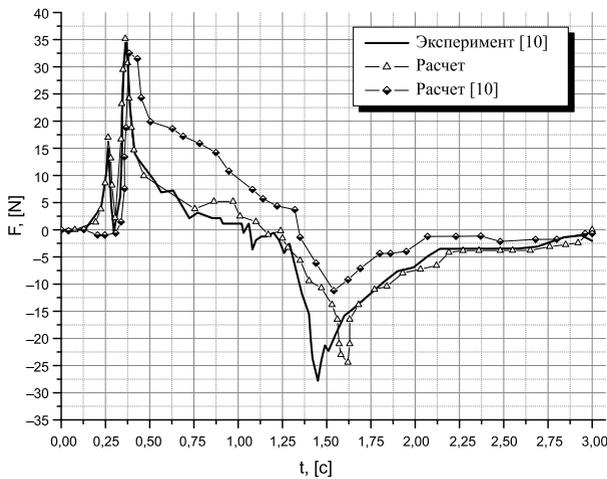


Рис. 4. Сопоставление силы давления на переднюю грань столба с результатами [10]

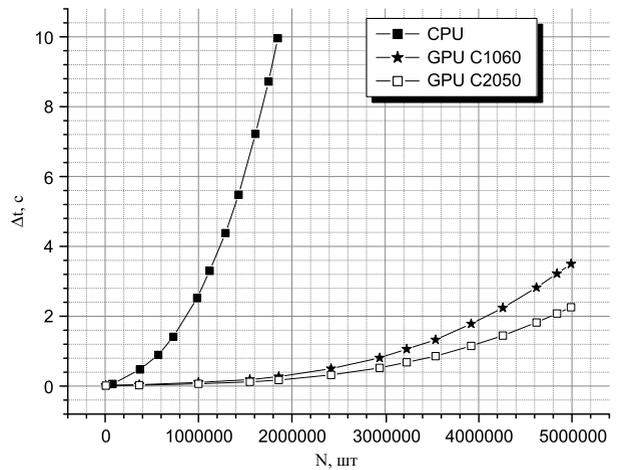


Рис. 5. Время выполнения одного шага во времени в сравнении с CPU Intel Core 2 Duo Conroe-CL

Свободная поверхность строилась как функция расстояния в \mathbb{R}^3 :

$$F(\mathbf{x}_g) = \sqrt{\sum_j \left(1 - \frac{r}{h}\right)^2}, \quad (25)$$

где F — скалярная функция свободной поверхности; $r = |\mathbf{x}_g - \mathbf{x}_j|$ — расстояние от центра эйлеровой сетки с координатой \mathbf{x}_g до координаты j -й частицы \mathbf{x}_j .

Показанные результаты качественно совпадают с результатами эксперимента [10]. Количественное сопоставление показано на рис. 4. Наблюда-

ется хорошее качественное и количественное совпадение результатов. Причем можно оценить повышение точности, которое достигнуто в результате применения метода компенсации сжимаемости. Так, в результатах расчета, приведенных в [10] и показанных на рис. 4 явно видно отсутствие начальной волны соударения, связанной с образованием вторичной опрокидывающейся волны-предвестника. Данная волна «проглатывается» сжимаемостью стандартного метода гидродинамики сглаженных частиц. Поэтому можно сказать, что предложенный метод компенсации сжимаемости не только

позволяет избавиться от жесткости системы уравнений, но и повышает точность результатов при моделировании несжимаемой жидкости.

Сопоставление производительности выполнено с кодом для CPU и для двух GPU в одинарной точности. Результаты показаны на рис. 5. При расчете задачи на CPU использовалось распараллеливание по OpenMP. Максимальное ускорение, полученное на C1060, составило 36,7 раза, а на C2050 — 57,14 раза. Таким образом, вычислители позволяют за обозримое время проводить моделирование сложных задач с очень большой разрешающей способностью (на сегодняшний день, по ограничению на оперативную память вычислителей, до $5 \cdot 10^6$ частиц) на персональном недорогом компьютере.

Заключение

В данной работе показан способ использования GPU для получения значительных ускорений при расчете начально-краевых задач трехмерной гидродинамики со свободной поверхностью в лагранжевой постановке. Метод гидродинамики сглаженных частиц перестроен и избавлен от недостатка искусственной схемной сжимаемости. Специальная процедура оптимизации кода для GPU позволила получить ускорение в 57 раз по сравнению с CPU версией. Проверка тестовой задачи показала точность метода по сравнению с обычным методом решения н. к. з. В данной работе детально не показан способ учета силы поверхностного натяжения и модели турбулентности. Можно сказать, что такой алгоритм позволяет проводить расчеты реальных масштабных

технических задач на относительно дешевых и доступных компьютерах, оснащенных вычислителями NVIDIA.

Литература

1. *Monaghan J. J.* Smoothed Particle Hydrodynamics // Annual Review of Astronomy and Astrophysics. 1992. V. 30. P. 543–574.
2. *Colagrossi A., Landrini M.* Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics // Comput. Phys. 2002. V. 191. P. 448–475.
3. *Воробьев А. П.* Бессеточный метод сглаженных частиц для численного моделирования гидродинамических процессов при тяжелых авариях на ядерных энергетических установках // автореферат дисс. к. ф.-м. н., Обнинск. 2010.
4. *Muller M., Solenthaler B., Keiser R., Gross M.* Particle-Based Fluid-Fluid Interaction // Proceedings of the 2005 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation. 2005. P. 237–244.
5. *Monaghan J. J.* Simulating free surface flows with SPH // Journal of Computational Physics. 1994. V. 110. P. 399–405.
6. *Monaghan J. J.* SPH without a Tensile Instability // Journal of Computational Physics. 2000. V. 159, P. 290–311.
7. *Sears, Zemansky, Young, Freedman.* University Physics. 10th Ed. Addison-Wesley, 2000.
8. *Colin F., Egli R., Lin F. Y.* Computing a null divergence velocity field using smoothed particle hydrodynamics // Journal of Computational Physics. 2006. V. 217. P. 680–692.
9. [Электронный ресурс]
<http://developer.download.nvidia.com/compute/cuda/sdk/website/C/src/particles/doc/particles.pdf>
10. *Capone T.* SPH numerical modelling of impulse water waves generated by landslides // PhD Thesis, Sapienza University of Rome.

Гугушвили Иракли Викторович. М. н. с. ГНУ ВНИИГиМ Россельхозакадемии Окончил Московский Государственный университет Природообустройства в 2005 г. Количество печатных работ: 14. Область научных интересов: гидродинамика волн прорыва.
E-mail: gugushvili_i@mail.ru

Евстигнеев Николай Михайлович. С. н. с. ИСА РАН, к. т. н. Окончил Московский Государственный строительный университет в 2001 г. Количество печатных работ: 63, 1 монография. Область научных интересов: гидродинамика (уравнения Навье—Стокса), аэродинамика, теоретическая механика, механика деформированного твердого тела, численные методы, искусственный интеллект, GPU.
E-mail: evstigneevnm@yandex.ru