

ПАКЕТ РАСЧЁТНЫХ ПРОГРАММ HSFLOW для МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ТЕЧЕНИЙ ВЯЗКОГО ГАЗА НА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ СУПЕР-ЭВМ

Егоров И.В., Новиков А.В.
ЦАГИ, МФТИ ФАЛТ

Пакет расчётных программ HSFlow

- HSFlow = High-Speed Flow solver (с) НИО-8 ЦАГИ
- Моделирование течений сжимаемого вязкого газа с помощью численного решения нестационарных уравнений Навье-Стокса и Рейнольдса в двухмерной, осесимметричной и трёхмерной постановках
- Уравнения в консервативной безразмерной форме в криволинейных координатах
- Неявный численный метод конечного объёма второго порядка точности по времени
- Квазимонотонная схема TVD (total variation diminishing) типа Годунова второго порядка аппроксимации по пространству
- Структурированные расчётные сетки

HSFlow: особенности программной реализации

- Язык программирования: C с элементами C++
- Среда распределённых вычислений MPI.
- Кроссплатформенный код, поддержка Windows и Linux.
- Применяется концепция модулей-плагинов. Решаемые уравнения конкретизируются путём подбора плагинов, которые можно подключать/отключать непосредственно в процессе расчётов.

Расчётные сетки. Формат ввода вывода.

- Структурированные многоблочные сетки
- Стыковка между блоками типа *блок-в-блок* и *узел-в-узел*.
- Формат для хранения расчётных сеток и полей течений – международный стандарт CGNS (CFD General Notation System).
 - Разрабатывается международным комитетом «CGNS Steering Committee» (изначально в 1994 году Boeing и NASA)
 - Компактный бинарный файл, доступ к данным посредством набора библиотечных кроссплатформенных процедур
 - Подробная документация, свободные реализации библиотеки, поддержка в большинстве коммерческих приложений (Pointwise, Ansys, TecPlot, etc.)

Метод параллельного решения

- Дискретизация системы в частных производных в каждом блоке независимо

$$\frac{\mathbf{Q}_{i,j,k}^{n+1} - \mathbf{Q}_{i,j,k}^n}{\tau_{i,j,k}} + \frac{\mathbf{E}_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} - \mathbf{E}_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1}}{h_\xi} + \frac{\mathbf{G}_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} - \mathbf{G}_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+1}}{h_\eta} + \frac{\mathbf{F}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathbf{F}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1}}{h_\zeta} = \mathbf{S}_{i,j,k}^{n+1}$$

- Распределённый вектор невязок
нелинейная система сеточных (алгебраических) уравнений: $\mathbf{F}(\mathbf{X}) = 0$
- Нелинейная система решается по методу Ньютона $\mathbf{X}^{[k+1]} = \mathbf{X}^{[k]} - \epsilon_{k+1} \mathbf{D}_{k_0}^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{X}^k)$
 $\mathbf{D}_{k_0} = (\partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{X})_{k_0}$ матрица Якоби по методу конечных приращений вектора невязки по вектору искомых сеточных переменных (параллельно)
- На каждой итерации Ньютона, решается линейная система уравнений методом GMRes $(\partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{X})_{k_0} \Delta \mathbf{X}^{[k]} = -\epsilon_{k+1} \mathbf{F}(\mathbf{X}^{[k]})$

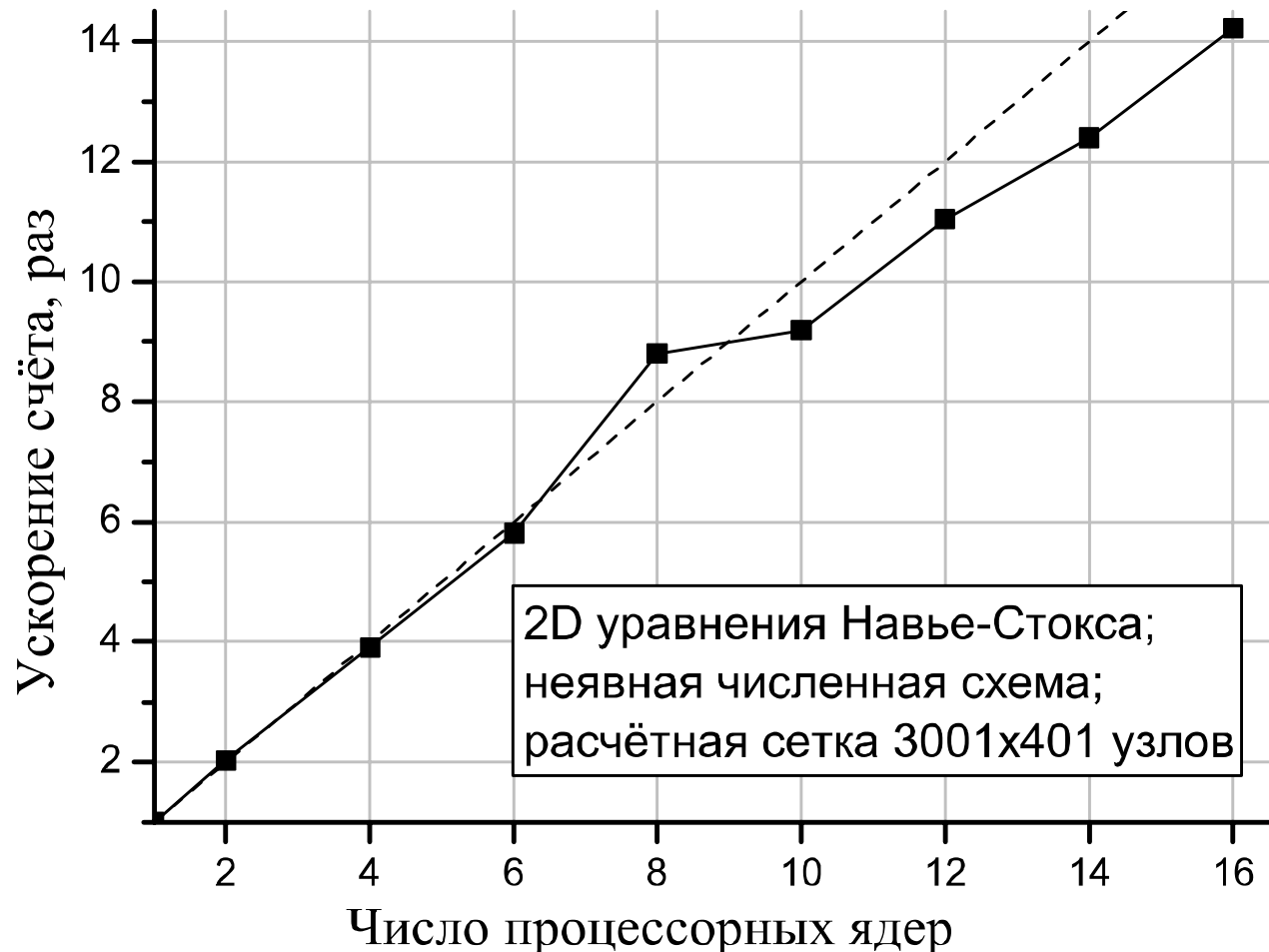
- Решение с помощью **PETSc**:
 - Операции с распределёнными векторами и матрицами
 - Параллельный метод GMRes с предобуславливателем типа блочный Якоби

PETSc: Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation

- Библиотека структур данных и процедур для распределённого (параллельного) решения научных задач, моделируемых уравнениями в частных производных
- Кроссплатформенная (Windows, Linux, etc.)
- Возможно применение в приложениях написанных на C/C++, Fortran, Python
- Использует MPI и BLAS
- Распространение в исходных кодах, свободное использование для любых целей

Ускорение расчёта тестовой задачи при параллельном решении. ~16 CPU

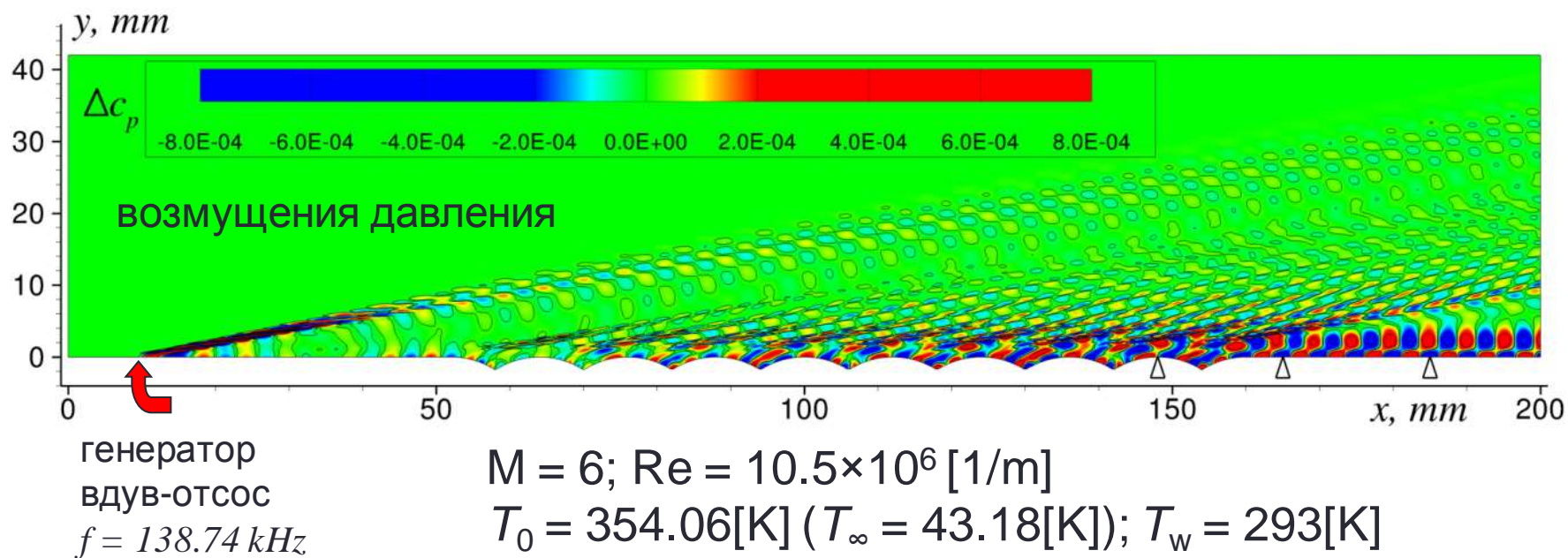
Расчёт на ЭВМ с двумя 8ми-ядерными процессорами Intel Xeon E5-2670 (2.6ГГц) под управлением CentOS (Linux)



Тестирование HSFlow. 2D возмущения над волнообразной пластиной

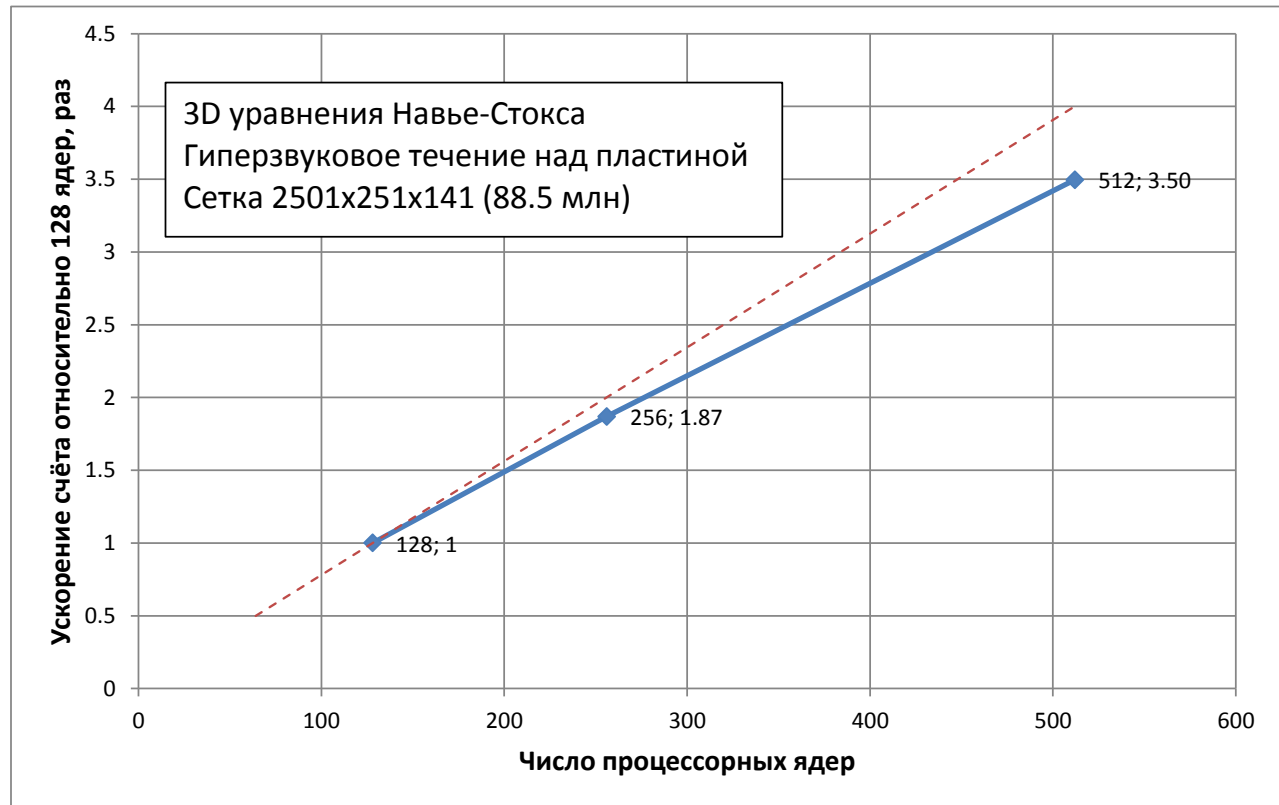
Распространение вынужденных неустойчивых возмущений в серии локальных отрывных зон при гиперзвуковом обтекании волнообразной поверхности

Сетка: 3001x401 (~1.2млн узлов). Расчёт в последовательном варианте – недели. Ускорение на 4х локальных процессорных ядрах в 4.5 раза.



Ускорение расчёта тестовой задачи при параллельном решении. ~512 CPU

- Расчёт на кластере из вычислительных узлов с двумя 12ми-ядерными процессорами *Intel Xeon E5-2697 v2*
- Почти линейная масштабируемость



Применение HSTFlow. 3D пакет возмущений над плоской пластиной

$$M = 6$$

$$Re = 11 \times 10^6 [1/m]$$

$$T_0 = 433[K] \ (T_\infty = 52.8[K])$$

$$T_w = 300[K]$$

$$f = 313.48[kHz]$$

Расчётная область:

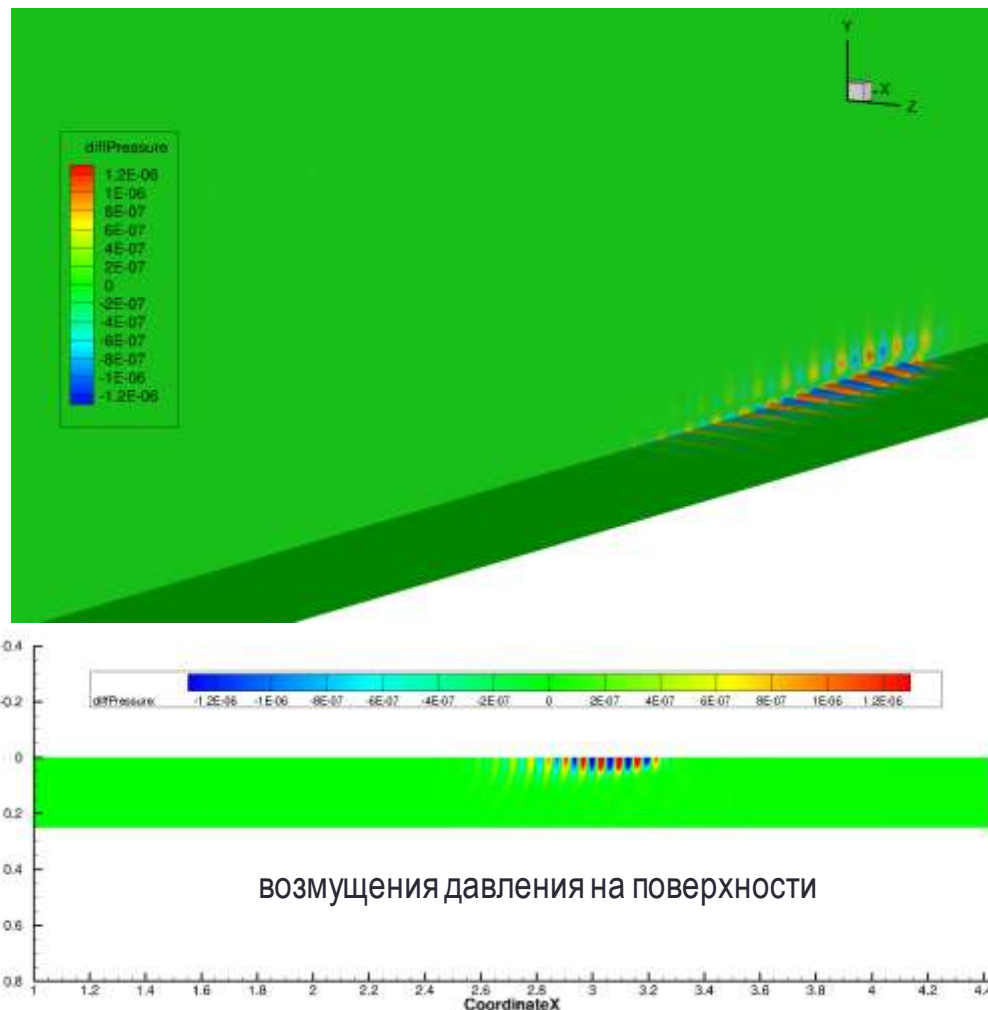
0.72 x 0.123 x 0.0252 [m]

Сетка:

2501x251x141 (~88.5 млн узлов)

Процессорных ядер: **512**

J.Sivasubramanian, H.F.Fasel - Transition Initiated
by a Localized Disturbance in a Hypersonic Flat-
Plate Boundary Layer // AIAA paper 2011-374



Целостный (holistic) подход к моделированию ламинарно-турбулентного перехода

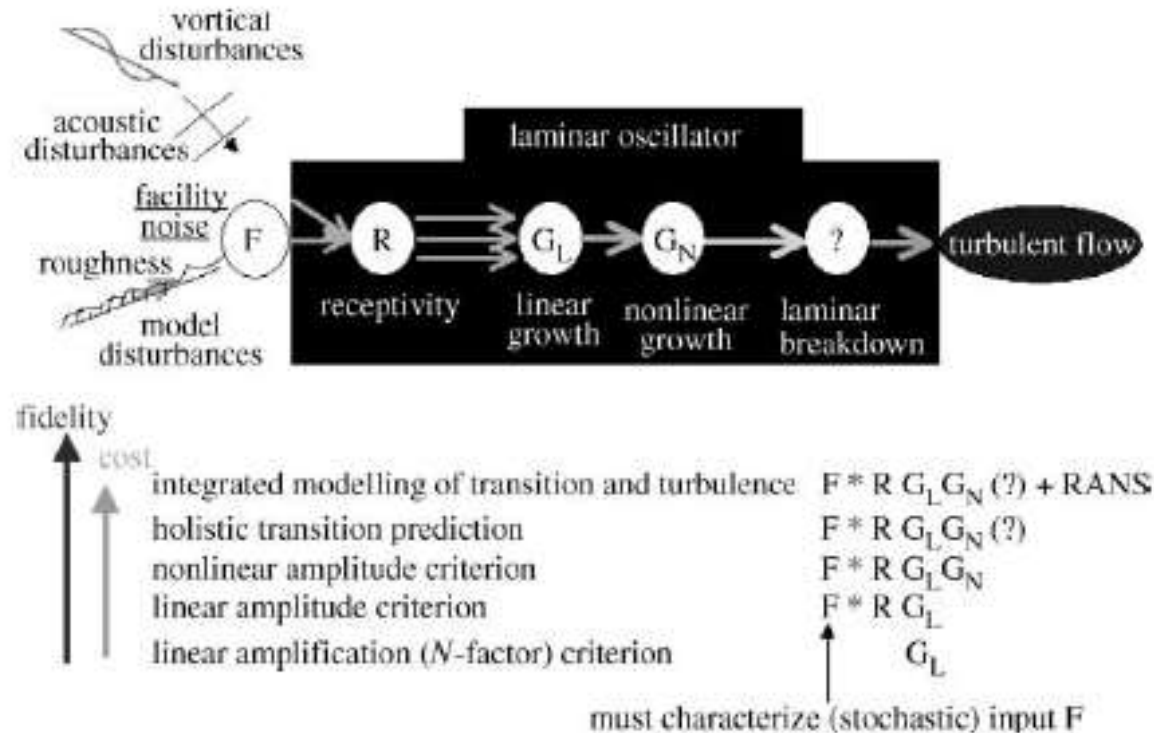


Figure 1. Schematic of hierarchical levels of transition prediction from a systems viewpoint. The holistic prediction approach, based on transition as a forced response of a nonlinear system to stochastic forcing (Reshotko 1976), appears near the top of this hierarchy. The question marks denote the gap between physics-based modelling preceding the laminar breakdown phase and some form of statistical turbulence modelling farther downstream (Rubinstein & Choudhari 2000).

Постановка задачи

Уравнения Навье-Стокса, 3D, вязкий сжимаемый совершенный газ

$$\begin{aligned}M_{\infty} &= 5.35 \\Re_{\infty} &= 14.3e6 \text{ [1/m]} \\T_{\infty} &= 64.3163 \text{ [K]} \\T_w &= 300.0 \text{ [K]} \\\gamma &= 1.4; Pr = 0.71\end{aligned}$$

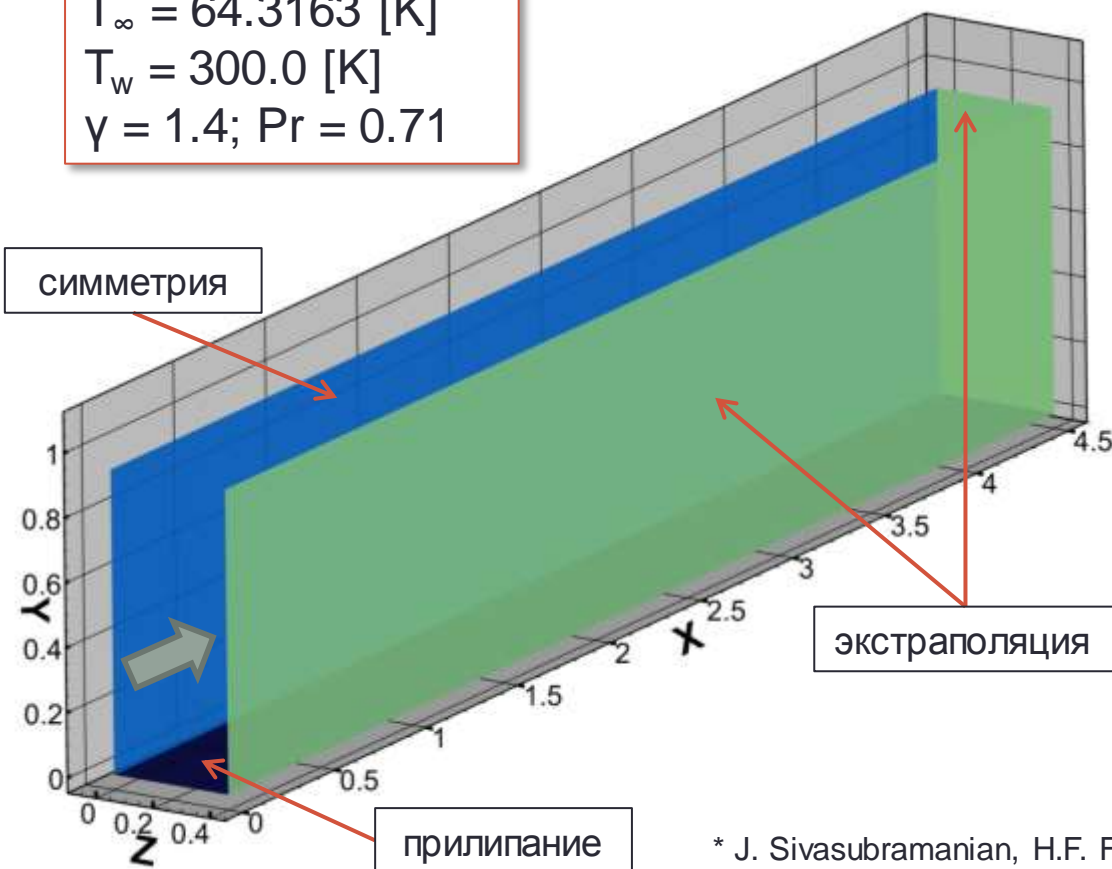
соответствует параметрам на границе пограничного слоя при обтекании конуса $M_{\infty} = 6.0$, $Re_{\infty} = 11.0e6 \text{ [1/m]}$, $T_0 = 433 \text{ [K]}$

Расчётная область:

$$\begin{aligned}L_x &= 0.45 \text{ [m]} \\L_y &= 0.09293 \text{ [m]} \\L_z &= 0.04 \text{ [m]}\end{aligned}$$

Сетка **87.5млн** узлов:

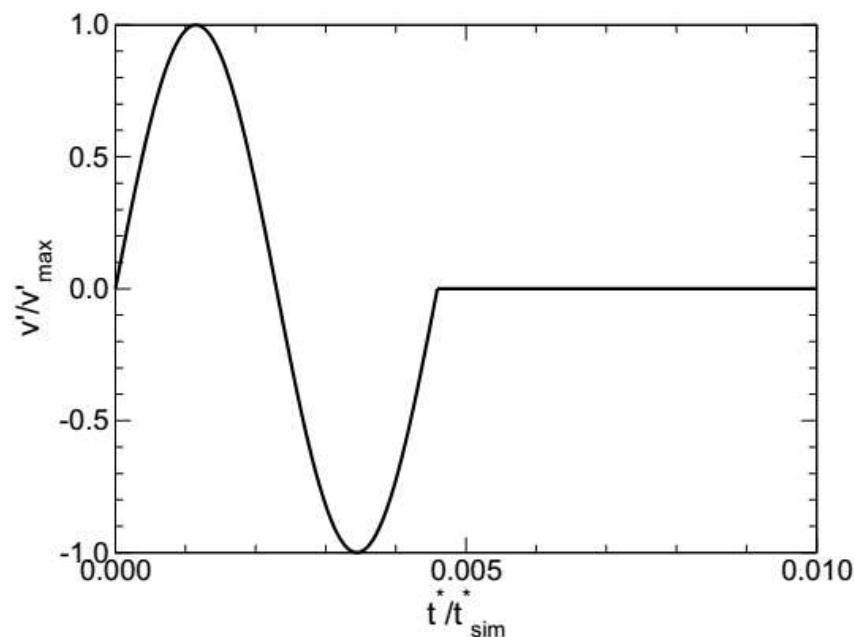
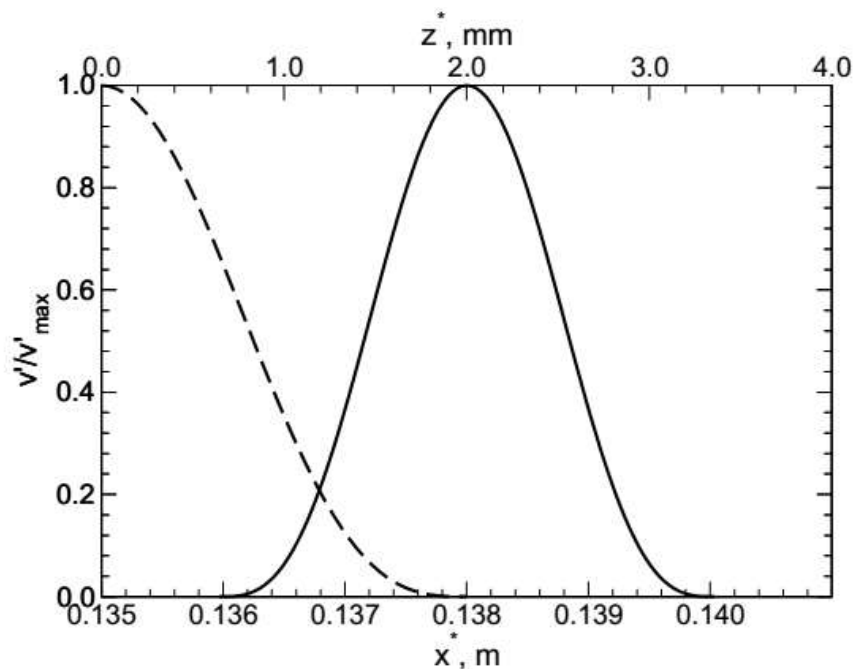
$$\begin{aligned}N_x &= 2501 \\N_y &= 251 \text{ (~120 в погранслое)} \\N_z &= 141\end{aligned}$$



* J. Sivasubramanian, H.F. Fasel - Transition Initiated by a Localized Disturbance in a Hypersonic Flat-Plate Boundary Layer // AIAA paper, No.2011-374

Генератор возмущений

Условие на вертикальную компоненту скорости на поверхности пластины



$$v(x_h, y=0, z_h, t) = \begin{cases} A \cos^3(\pi x_h) \cos^3(\pi z_h) \sin(-\omega t), & t < t_1 \\ 0, & t \geq t_1 \end{cases}$$

$$x_h = \frac{x - 0.5(x_2 + x_1)}{x_2 - x_1}$$

$$\begin{aligned} x_1 &= 0.136 \text{ [m]} \\ x_2 &= 0.140 \text{ [m]} \end{aligned}$$

$$z_h = \frac{z}{z_2 - z_1}$$

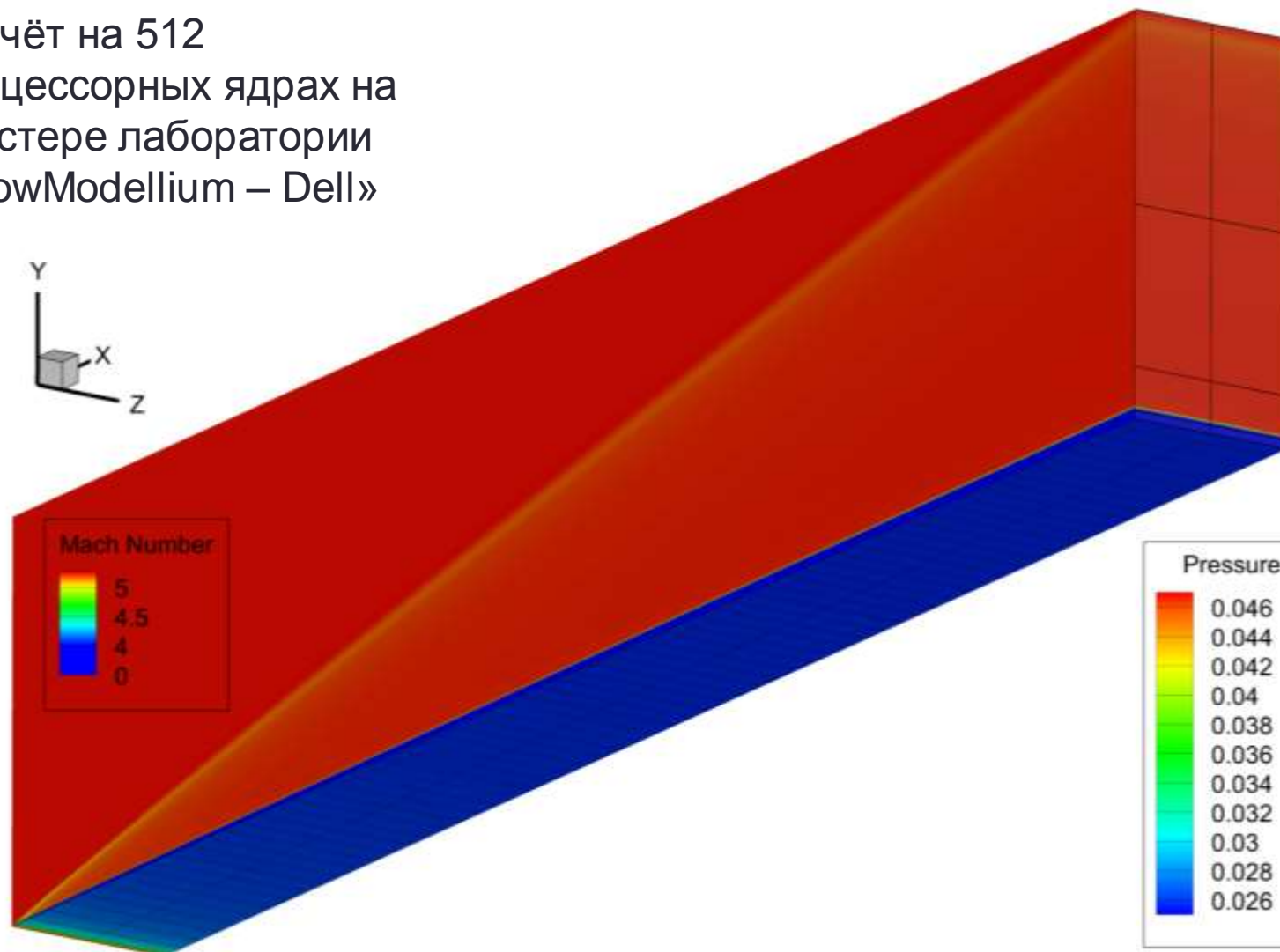
$$\begin{aligned} z_1 &= -0.002 \text{ [m]} \\ z_2 &= 0.002 \text{ [m]} \end{aligned}$$

Метод численного решения

- Солвер **HSFlow** = High-Speed Flow solver (с) НИО-8 ЦАГИ
- Моделирование течения сжимаемого вязкого газа с помощью численного решения нестационарных уравнений Навье-Стокса в трёхмерной постановке
- Уравнения в консервативной безразмерной форме в криволинейных координатах
- Неявный численный метод конечного объёма **2ого** порядка точности по пространству и времени
- Квазимонотонная схема TVD (total variation diminishing) типа Годунова второго порядка аппроксимации по пространству
- Структурированные многоблочные расчётные сетки
- Метод работы [AIAA 2011-374]
 - 4ый порядок по времени
 - Пространственная дискретизация высокого порядка:
 - для вязких членов - центральные разности 6ого порядка в продольном и 4ого порядка в нормальном направлениях
 - для невязких членов - противопоточные разности 9ого порядка
 - спектральный метод в поперечном направлении

Поле стационарного обтекания

Расчёт на 512
процессорных ядрах на
кластере лаборатории
«FlowModellium – Dell»



ЛИНЕЙНЫЙ РЕЖИМ

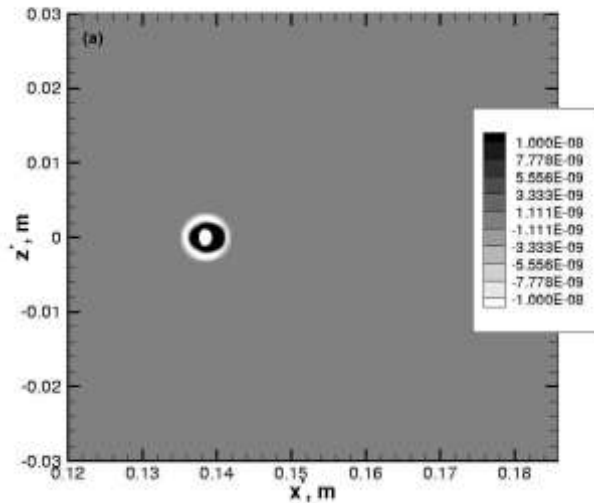
развития возмущений

$$\omega = 229.058$$

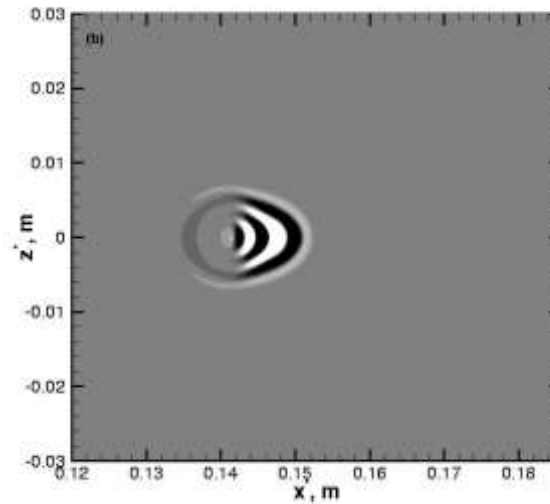
$$A = 0.001 \text{ (0.1\% } V_{\infty})$$

Возмущения давления на поверхности

$t = 0.006$ [ms]

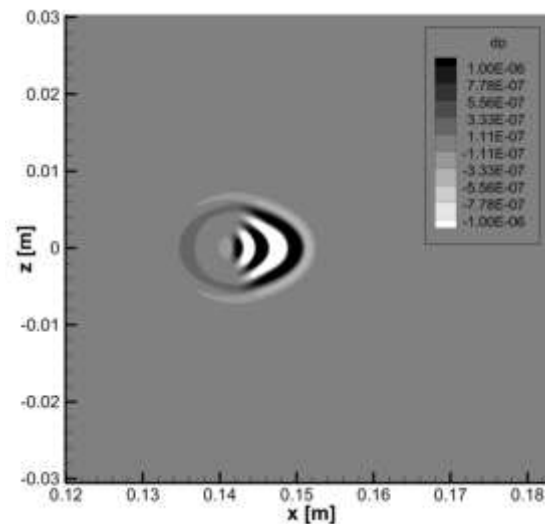
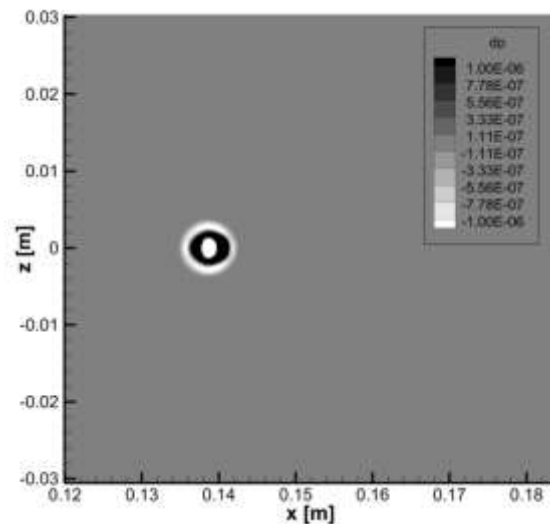


$t = 0.017$ [ms]



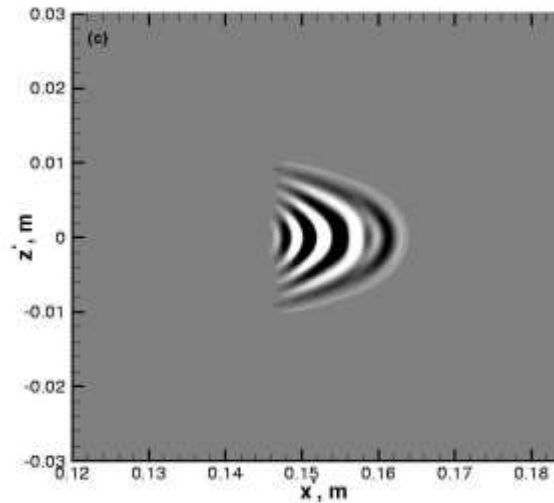
[AIAA 2011-374]

$A = 1.0e-5$
(0.001% V_∞)

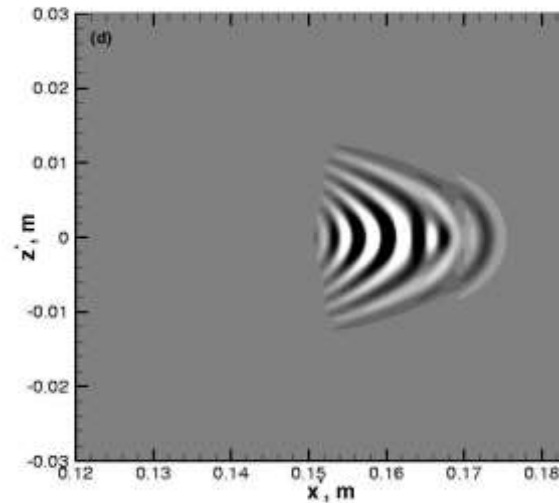


Возмущения давления на поверхности

$t = 0.029$ [ms]

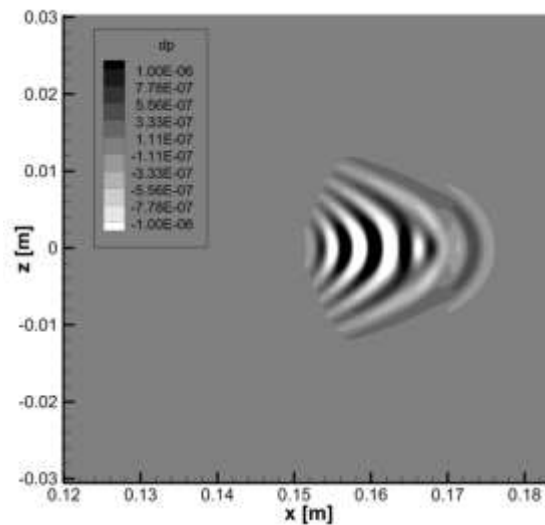
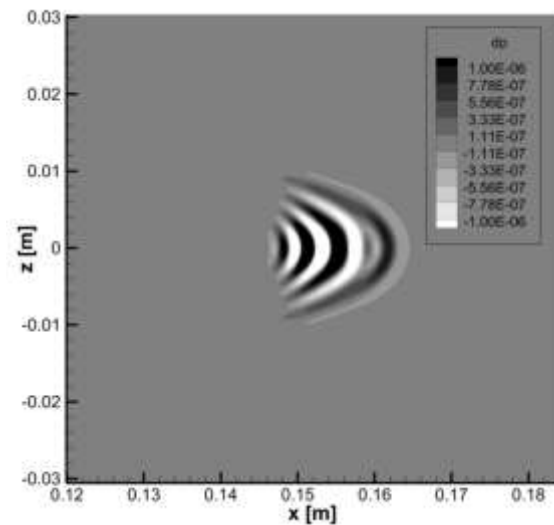


$t = 0.041$ [ms]



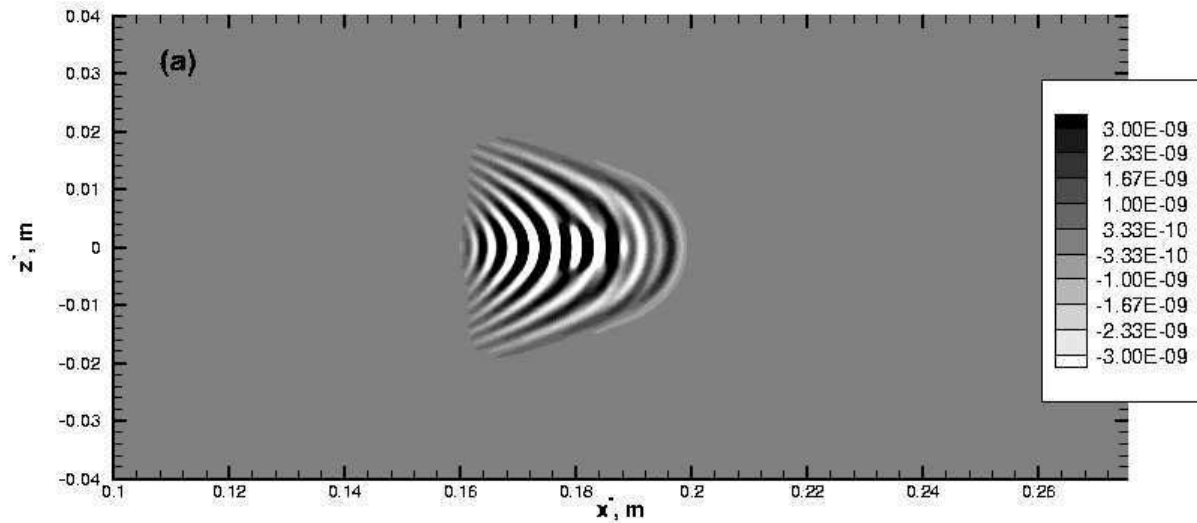
[AIAA 2011-374]

$A = 1.0e-5$
(0.001% V_∞)



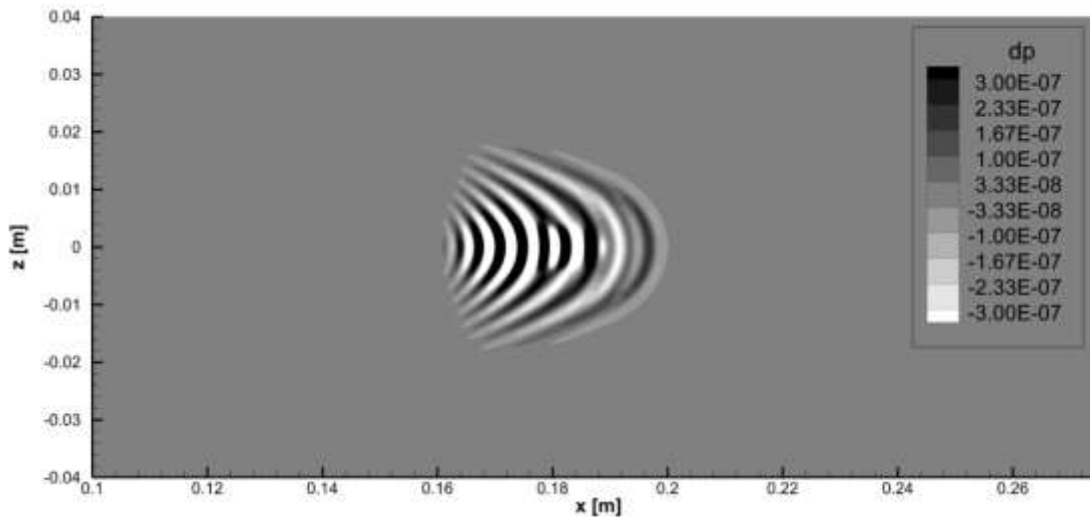
Возмущения давления на поверхности

$t = 0.064$ [ms]

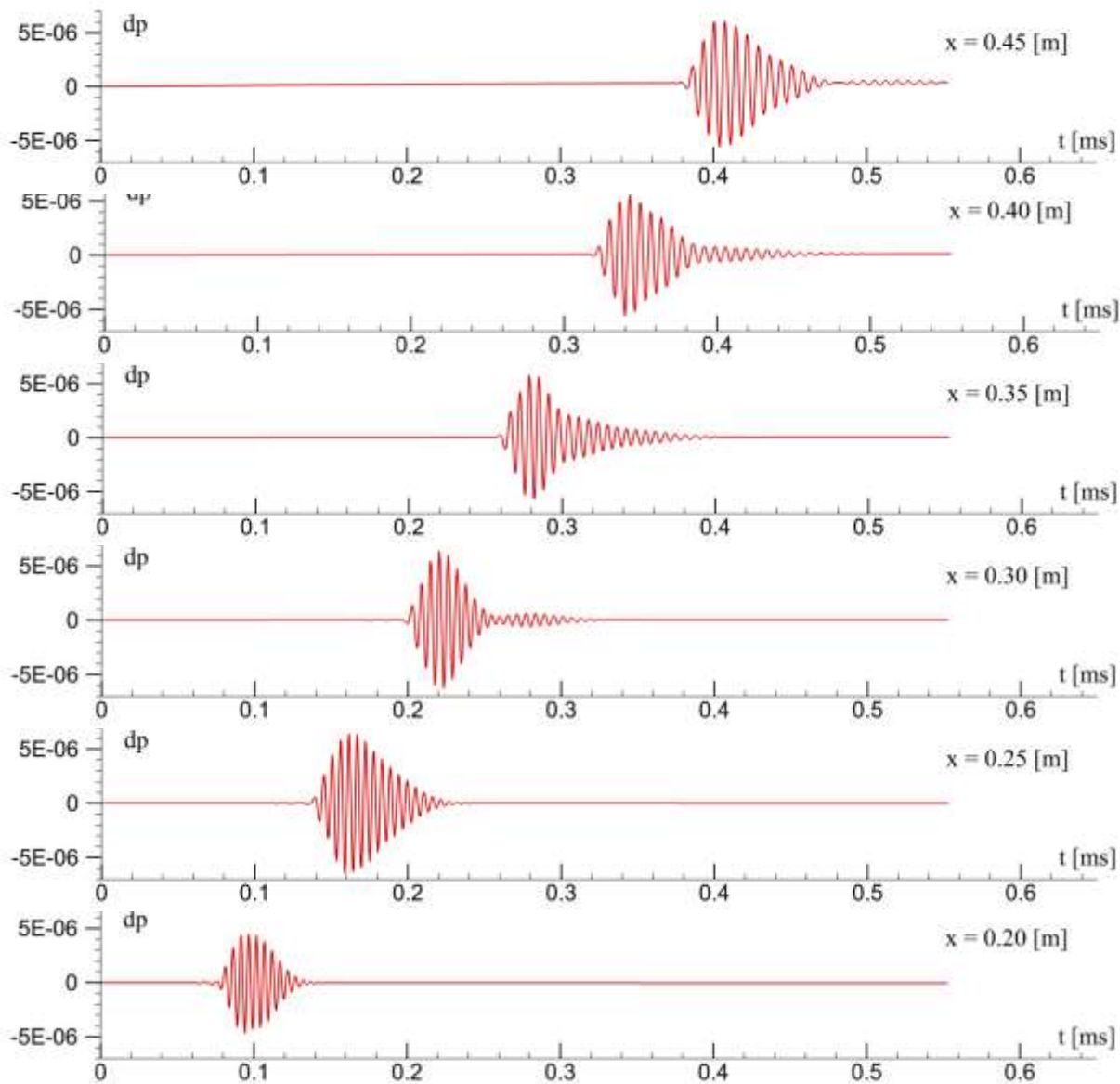


[AIAA 2011-374]

$A = 1.0e-5$
(0.001% V_∞)

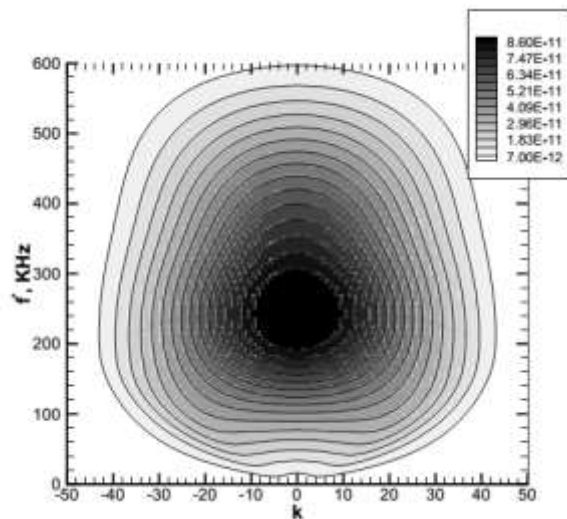


Возмущения вдоль линии $z=0$

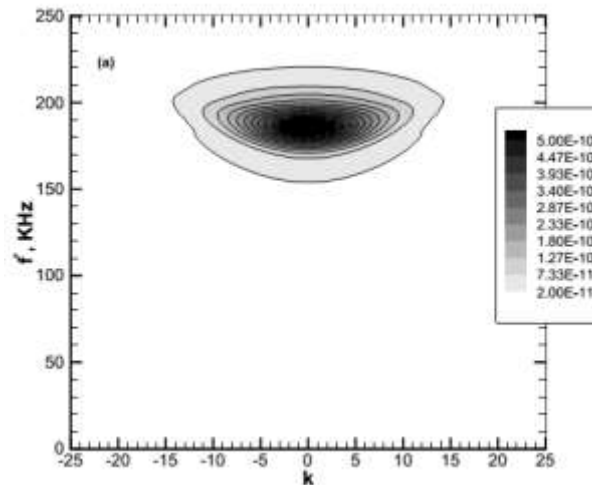


Спектр возмущений на поверхности

$x = 0.138 \text{ [m]}$

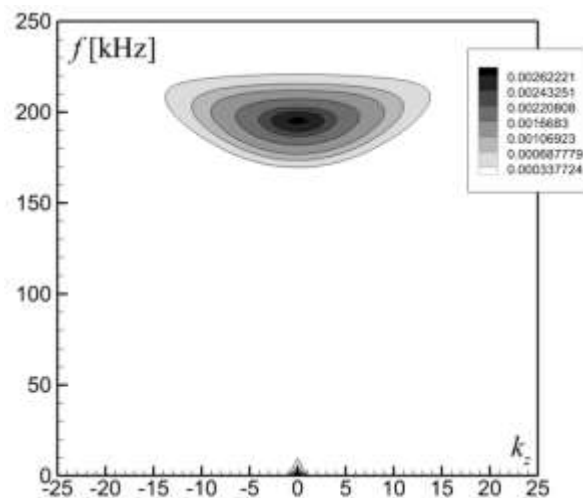
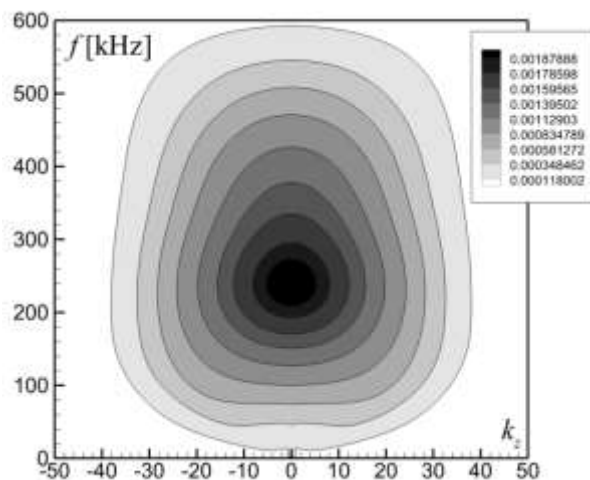


$x = 0.250 \text{ [m]}$



[AIAA 2011-374]

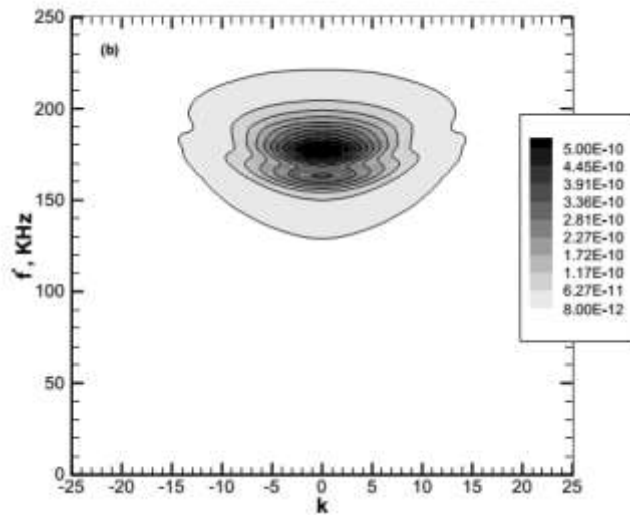
$A = 1.0\text{e-}5$
(0.001% V_∞)



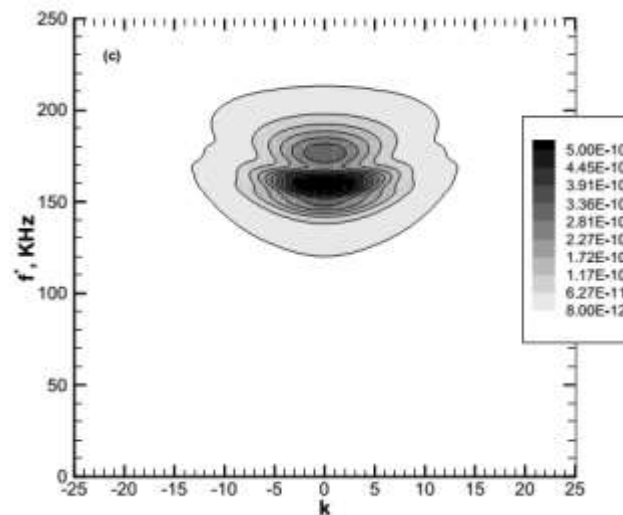
k – номер
дискретного
волнового числа
в поперечном (z)
направлении

Спектр возмущений на поверхности

$x = 0.300$ [m]



$x = 0.350$ [m]



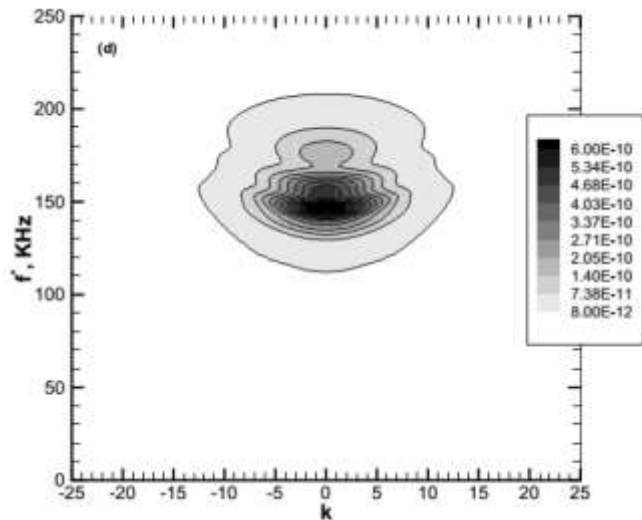
[AIAA 2011-374]

$A = 1.0\text{e-}5$
(0.001% V_∞)

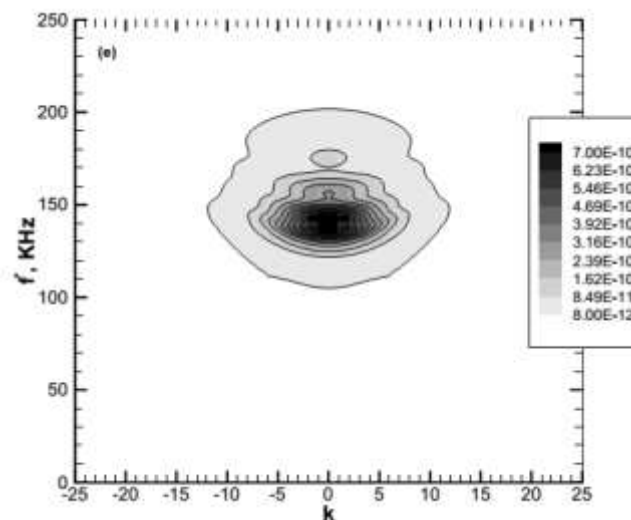
k – номер
дискретного
волнового числа
в поперечном (z)
направлении

Спектр возмущений на поверхности

$x = 0.400$ [m]



$x = 0.450$ [m]



[AIAA 2011-374]

$A = 1.0\text{e-}5$
(0.001% V_∞)

k – номер
дискретного
волнового числа
в поперечном (z)
направлении

НЕЛИНЕЙНЫЙ РЕЖИМ

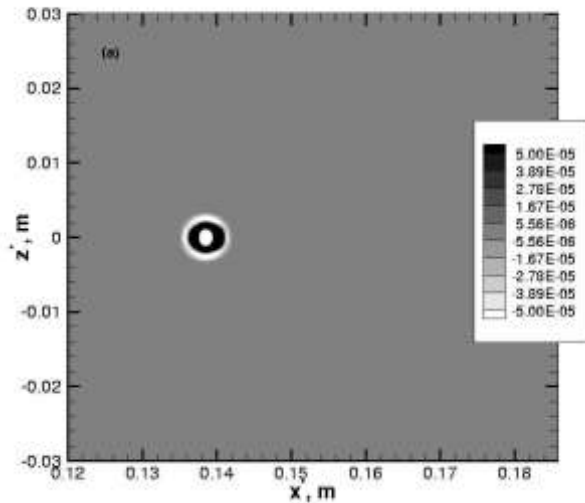
развития возмущений

$$\omega = 229.058$$

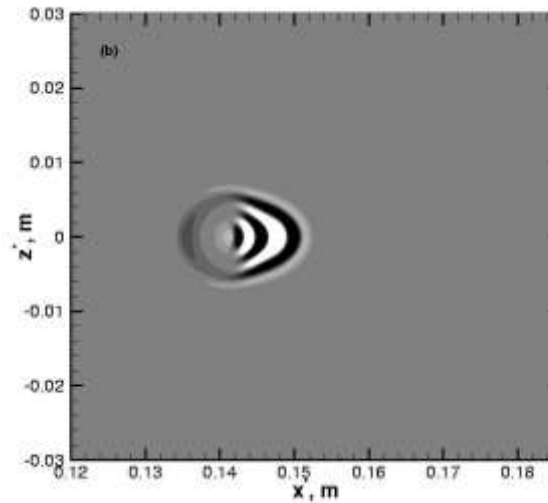
$$A = 0.05 \text{ (5\% } V_{\infty})$$

Возмущения давления на поверхности

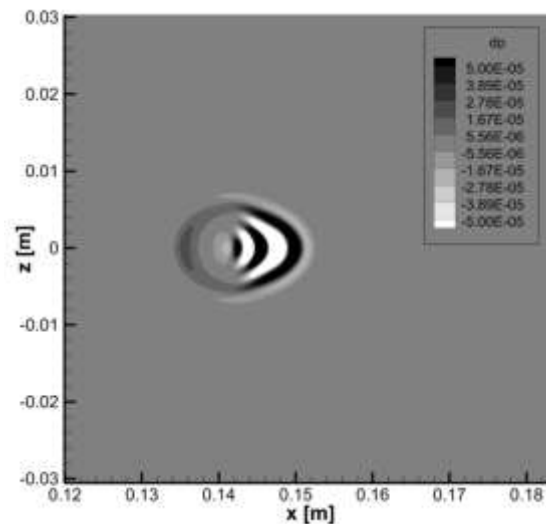
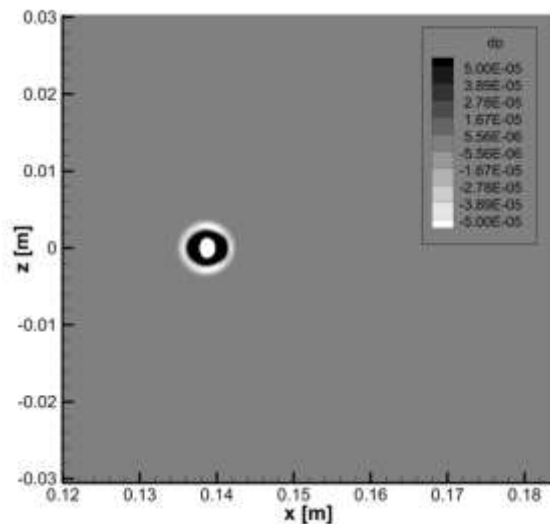
$t = 0.006$ [ms]



$t = 0.017$ [ms]

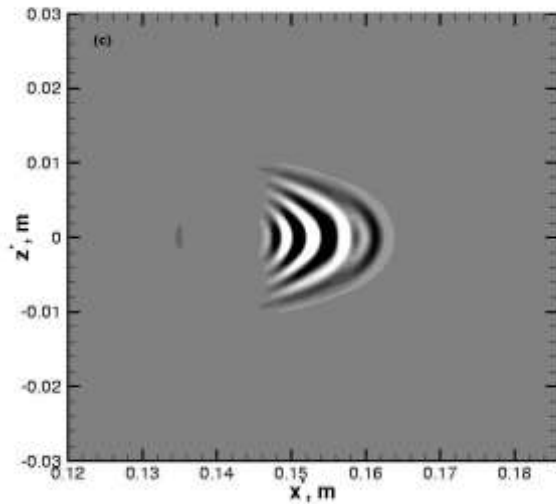


[AIAA 2011-374]

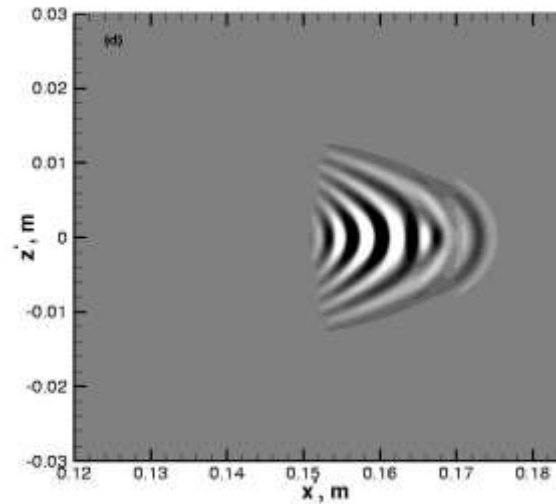


Возмущения давления на поверхности

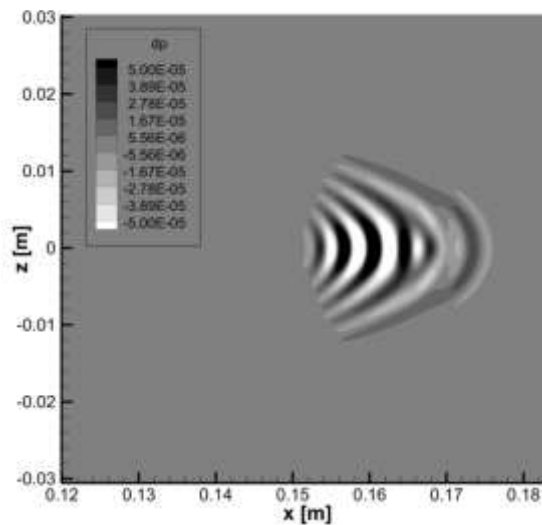
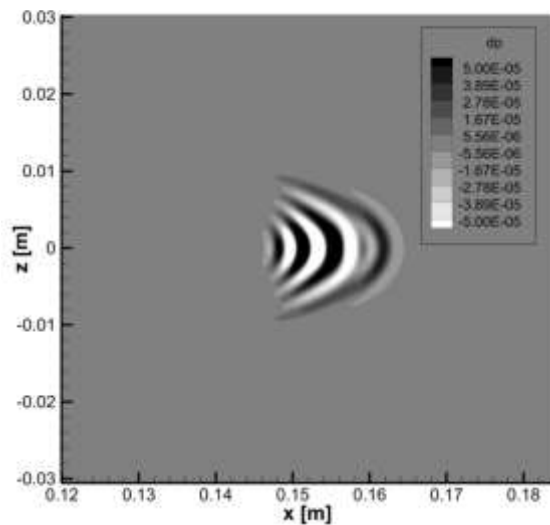
$t = 0.029$ [ms]



$t = 0.041$ [ms]

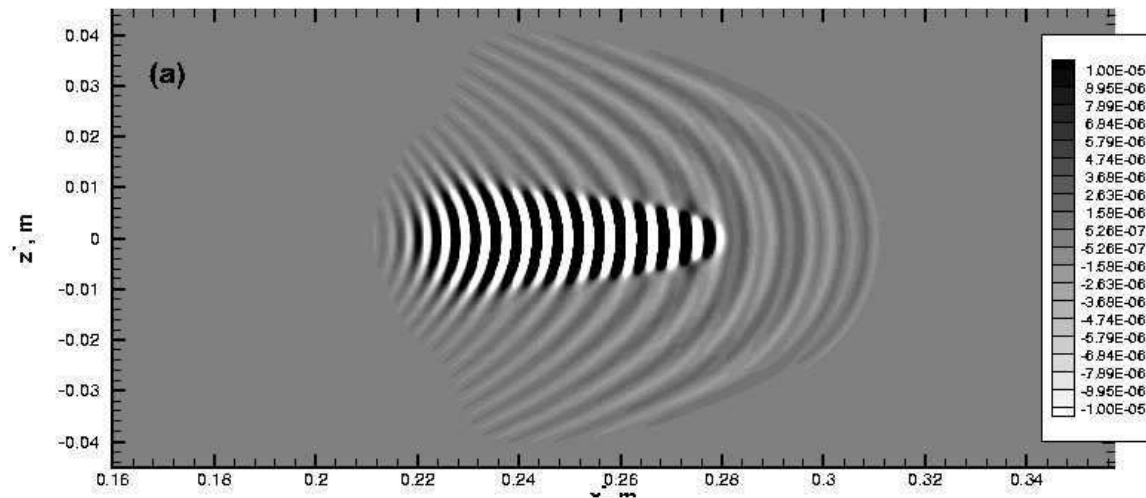


[AIAA 2011-374]

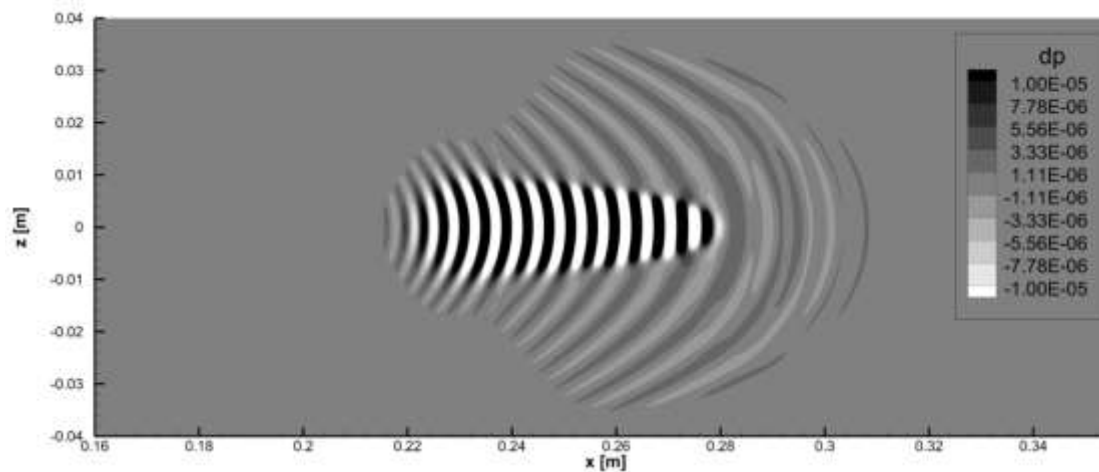


Возмущения давления на поверхности

$t = 0.174$ [ms]

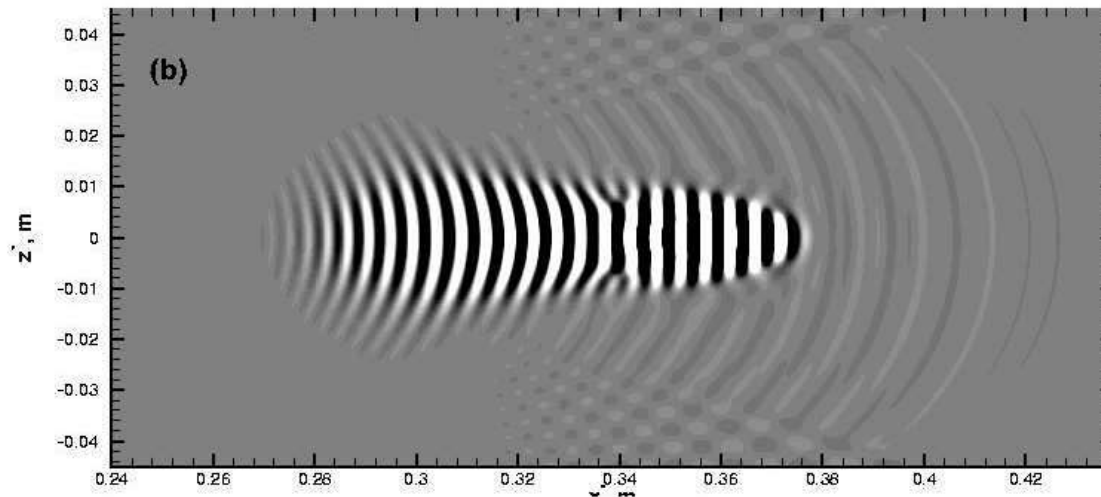


[AIAA 2011-374]

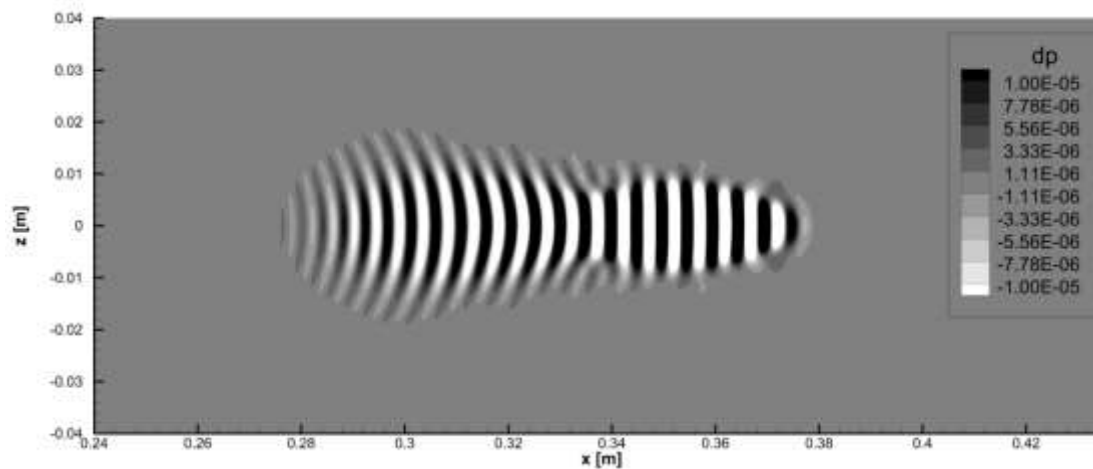


Возмущения давления на поверхности

$t = 0.291$ [ms]

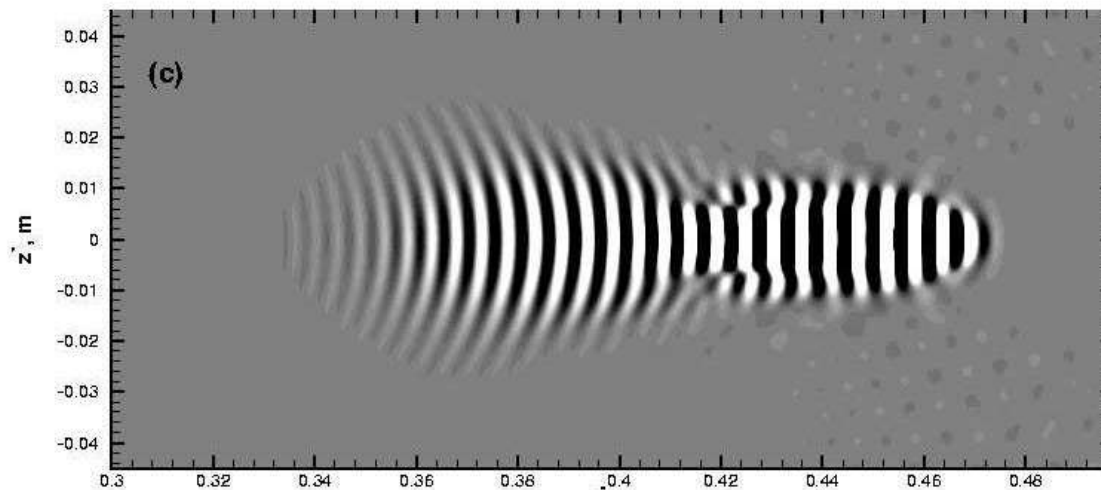


[AIAA 2011-374]

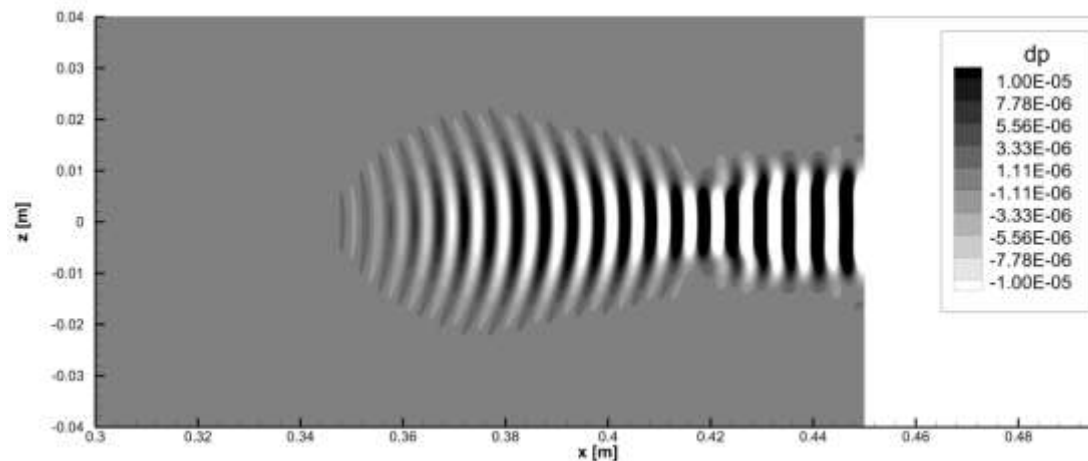


Возмущения давления на поверхности

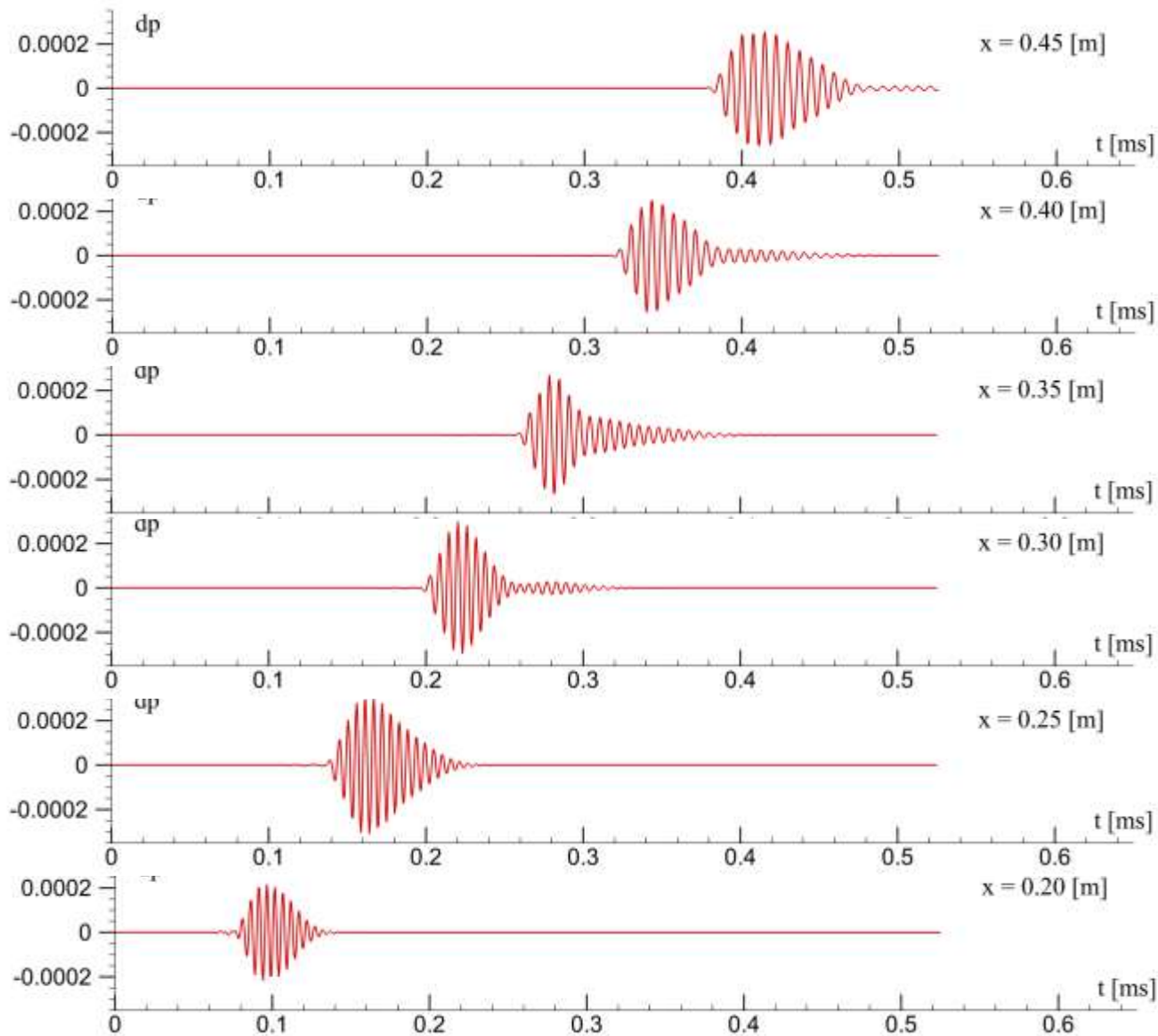
$t = 0.41$ [ms]



[AIAA 2011-374]

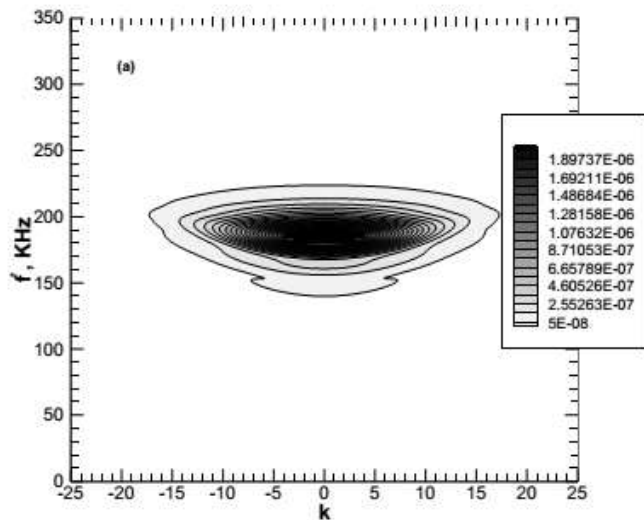


Возмущения влпнх пиныи $7=0$

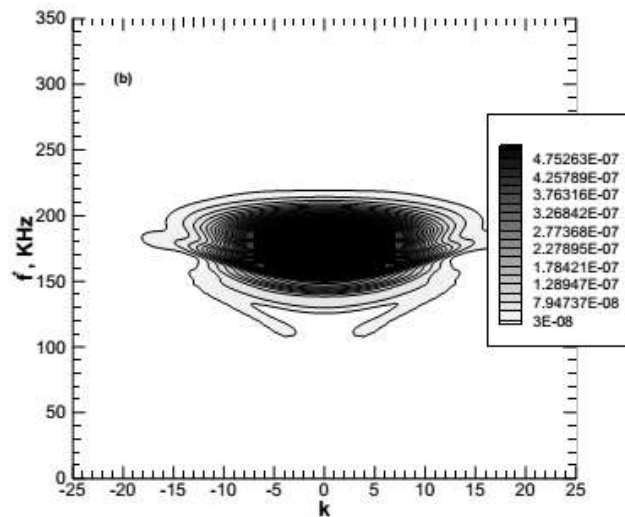


Спектр возмущений на поверхности

$x = 0.250$ [m]

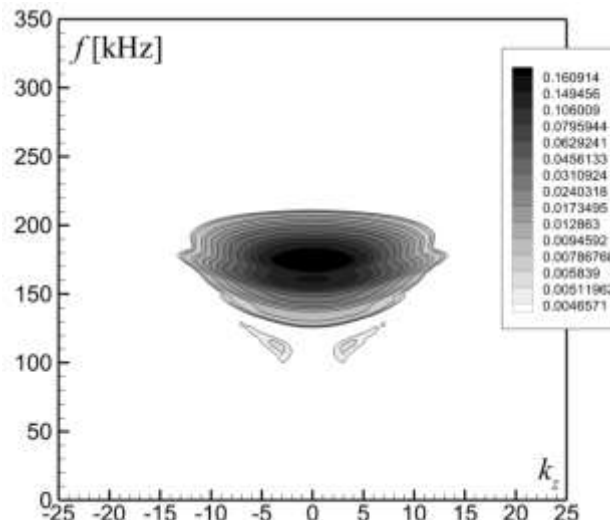
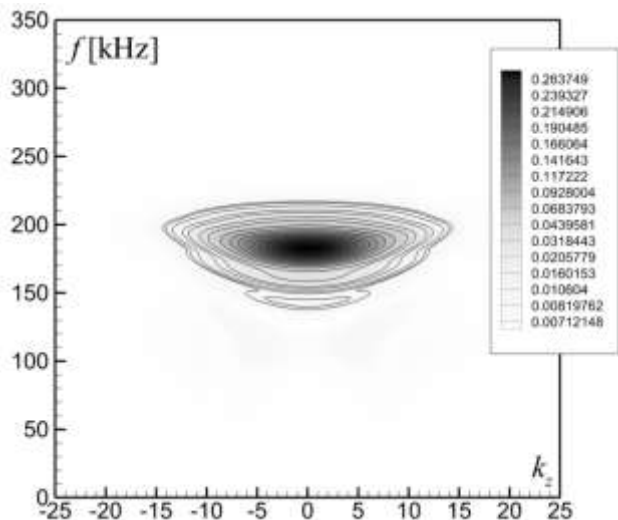


$x = 0.300$ [m]



[AIAA 2011-374]

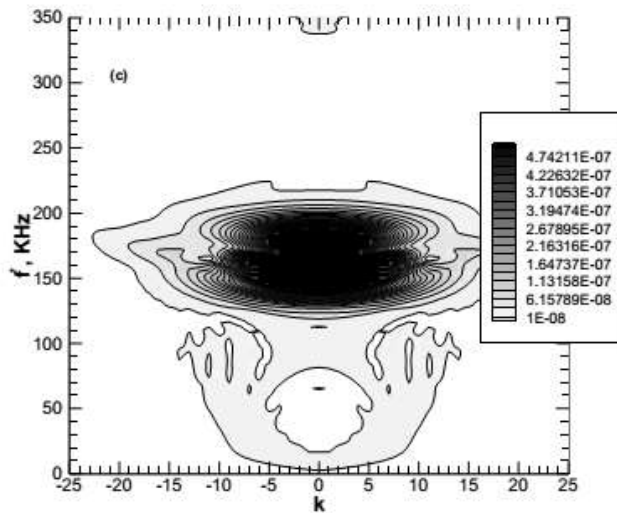
$A = 1.0e-5$
 $(0.001\% V_\infty)$



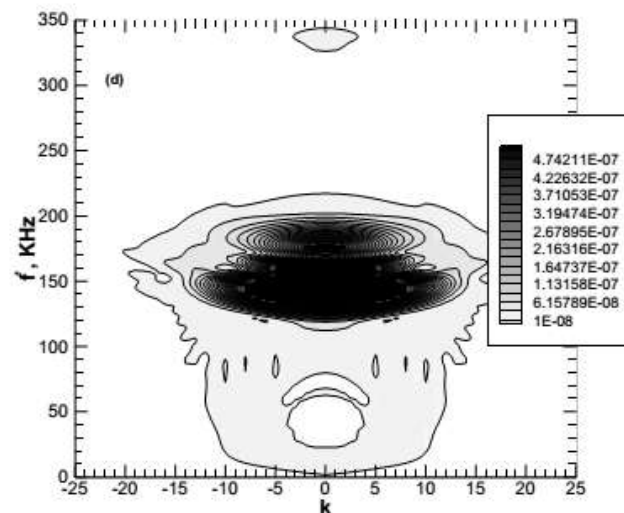
k – номер
 дискретного
 волнового числа
 в поперечном (z)
 направлении

Спектр возмущений на поверхности

$x = 0.350$ [m]

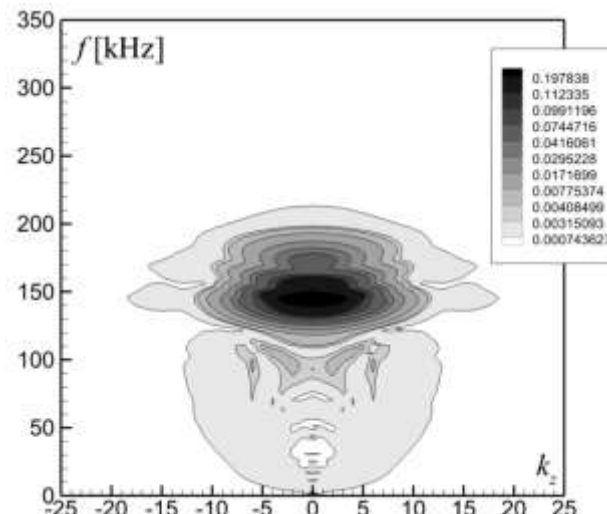
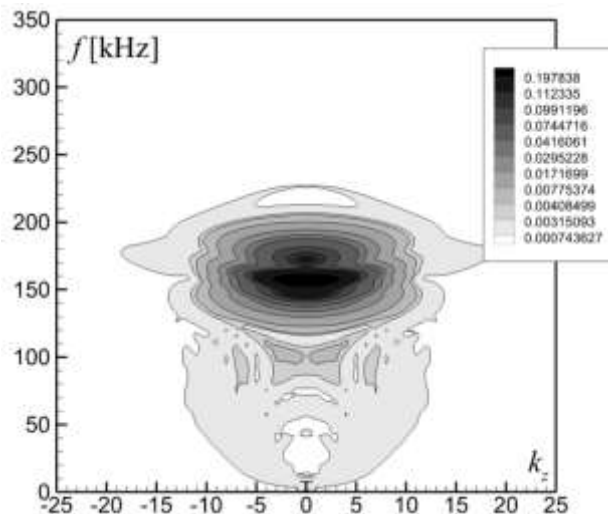


$x = 0.400$ [m]



[AIAA 2011-374]

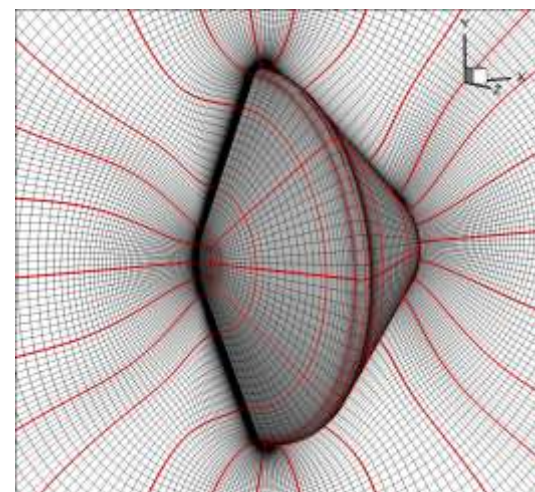
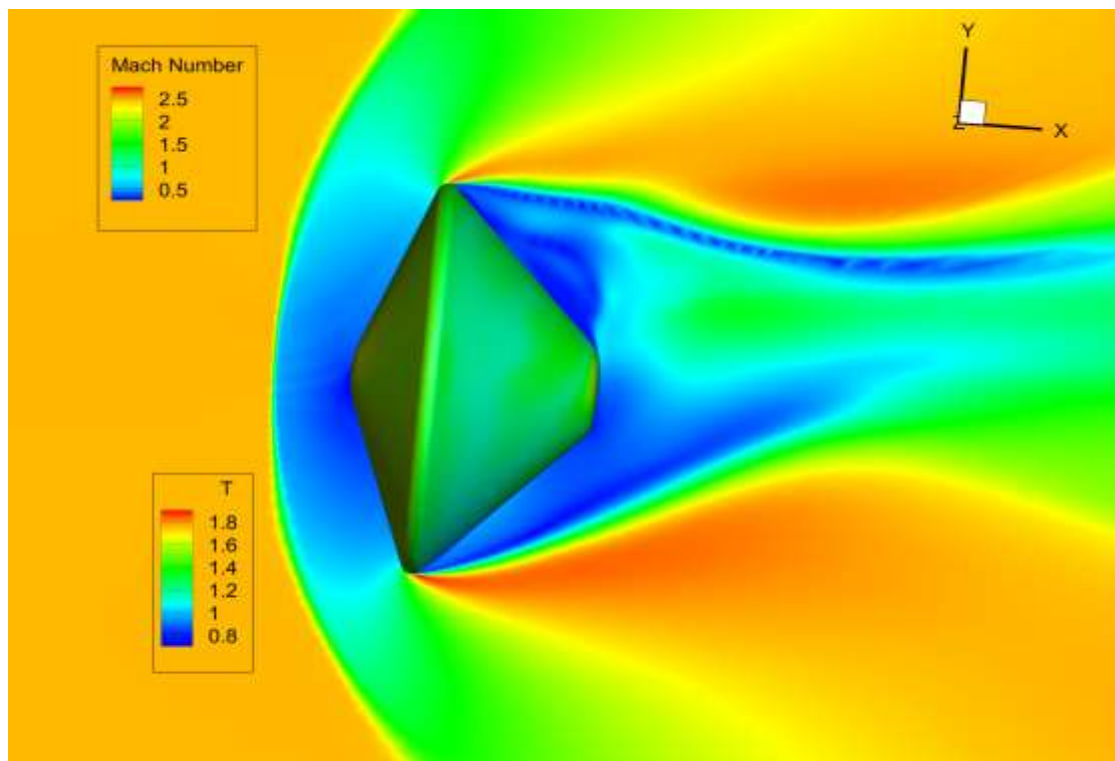
$A = 1.0e-5$
(0.001% V_∞)



k – номер
дискретного
волнового числа
в поперечном (z)
направлении

Применение HSFloW. 3D обтекание спускаемого аппарата

- Аппарат для спуска на Марс из проекта ExoMars-2016
- Сетка 0.38млн узлов, 48 блоков



Поле чисел Маха в плоскости симметрии $z=0$ и поле безразмерной температуры на поверхности при $M_\infty = 2.48$, угол атаки 5° .

Заключение

- Пакет расчётных программ HSFlow реализует полностью неявную численную схему решения уравнений газовой динамики на параллельных супер-ЭВМ.
- HSFlow показывает удовлетворительную масштабируемость при использовании корректно разбитых на блоки расчётных сеток
- HSFlow можно использовать как для промышленных расчётов, так и для исследования фундаментальных явлений с помощью прямого численного моделирования, касающихся в частности ламинарно-турбулентного перехода

Отечественные коды

- Анализ состояния и развития отечественных кодов
- Зарубежные коды (CFX, Fluent и др.)

Развитие отечественных кодов

- Проведение регулярных встреч по верификации и валидации отечественных кодов
- Сравнение с зарубежными кодами (CFX, Fluent и др.)
- Сертификация отечественных кодов
- Поиск моральной и материальной поддержки развития отечественных кодов
- Создание национального комитета по координации работ в области разработки и развития кодов