

Программный комплекс “Несветай-3Д”: моделирование пространственных течений разреженного газа с использованием суперЭВМ

В.А. Титарев

Вычислительный центр им. А.А. Дородницына
ФИЦ “Информатика и Управление” РАН

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

03.12.2017

- Корректное описание движений разреженного газа возможно на основе кинетических подходов [Коган, 1967, Черчиньяни, 1978, Берд, 1981]: уравнения Больцмана, аппроксимирующих кинетических уравнений, метода прямого статистического моделирования, и других.
- Важной прикладной областью применения теории разреженных газов является исследование медленных течений в различных микроэлектромеханических устройствах (MEMS).
[Ho and Tai, 1998], таких как микронасосы и микротурбины, микросопла, системы охлаждения электронных компонентов.
- Другим традиционным приложением уравнений механики разреженного газа является моделирование аэродинамики и теплообмена космических аппаратов, движущихся в верхних слоях атмосферы. При входе аппарата в атмосферу с большой скоростью определяющими являются эффекты разреженности и сильной неравновесности течения, см. например [В.М.Ковтуненко et al., 1977, Ivanov and Gimelshein, 1998].
- Таким образом, развитие численных методов моделирования течений разреженного газа является актуальной задачей математического моделирования.

- ❶ Общие цели и задачи кода
 - Разработка новых численных методов решения кинетических уравнений
 - Решение фундаментальных научных и прикладных задач,
 - Разработка параллельных алгоритмов для multi & many-core систем.
- ❷ Что моделируется (классы течений)
 - течения одноатомного разреженного газа, включая гиперзвуковые
- ❸ Модели
 - модели Крука (БГК) и Е.М. Шахова
- ❹ Численные методы
 - Противопоточная ТВД схема на произвольных сетках;
 - Консервативный метод расчета интеграла столкновений
- ❺ Интегрирование по времени:
 - явные схемы, неявная схема типа LU-SGS,
- ❻ Сетки и сеточные технологии
 - многоблочные гексаэдральные сетки, неструктурированные гибридные сетки
- ❼ Препроцессор
 - декомпозиция 6-мерной сетки для параллельных вычислений
- ❽ Параллельные вычисления
 - двухуровневая модель OpenMP + MPI , до 61000 ядер
- ❾ Языки программирования и API
 - Fortran 2003

Расчетные уравнения в безразмерной форме

- Состояние газа описывается функцией распределения молекул по скоростям $f = f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$, где (ξ_1, ξ_2, ξ_3) компоненты вектора молекулярной скорости по направлениям $(x_1, x_{2,3})$ соответственно.
- S-модельное кинетическое уравнение имеет вид [Шахов, 1968]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = J, \quad J = \nu(f^{(S)} - f), \quad \nu = \frac{nT}{\mu}\delta,$$

$$f^{(S)} = f_M \left(1 + \frac{4}{5}(1 - \text{Pr})\text{Sc}(c^2 - \frac{5}{2}) \right), \quad \mu = \mu(T) = T^\omega,$$

$$f_M = \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp(-c^2), \quad \mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{T}}, \quad \mathbf{v} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}, \quad \mathbf{S} = \frac{2\mathbf{q}}{nT^{3/2}}.$$

- Макроскопические переменные определяются в виде интегралов по $\boldsymbol{\xi}$:

$$\left(n, n\mathbf{u}, \frac{3}{2}nT + n\mathbf{u}^2, \mathbf{q} \right) = \int \left(1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \frac{1}{2}\mathbf{v}v^2 \right) f d\boldsymbol{\xi}, \quad p = nT$$

- Параметр разреженности δ (λ_* :

$$\delta = \frac{l_* p_*}{\mu_* \sqrt{2R_g T_*}} = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{\text{Kn}} \approx \frac{0.9}{\text{Kn}}, \quad \text{Kn} = \frac{\lambda_*}{l_*}.$$

Граничные и начальные условия

- На границах задаем f для молекул, вектор скорости которых направлен внутрь расчетной области ($\xi_n > 0$):

- для зеркального отражения от плоскости симметрии имеем

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1), \quad \boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\xi} - 2\xi_n \mathbf{n}$$

- на поверхности тела с заданной температурой

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{n_w(t, \mathbf{x})}{(\pi T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right), \quad n_w = 2 \frac{\sqrt{\pi}}{T_w} N_i, \quad N_i = - \int_{\xi_n < 0} \xi_n f d\boldsymbol{\xi}$$

- На входной границе в задачах внешней аэродинамики ($n_\infty = T_\infty \equiv 1$)

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = (\pi)^{-3/2} \exp(-\mathbf{c}_\infty^2)$$

- На выходной границе ставится локально-максвелловская функция

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f_M(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{n(t, \mathbf{x})}{(\pi T(t, \mathbf{x}))^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}(t, \mathbf{x}))^2}{T(t, \mathbf{x})}\right)$$

- Начальное условие - локально-максвелловская функция

$$f(t = 0, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f_M(t = 0, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$$

Обзор численного метода решения

- Сложности, возникающие при численном решении кинетического уравнения
 - Большая размерность задачи: шестимерное фазовое пространство + время
 - Решение уравнения (функция распределения) содержит разрывы даже для гладких граничных и начальных условий
 - Уравнение становится жестким в областях течения с малым локальным числом Кнудсена Kn
- В работе предлагается оригинальный вариант метода дискретных скоростей, который имеет следующие преимущества по сравнению с известными в литературе методами
 - Могут использоваться многоблочные структурированные, либо произвольные неструктурированные сетки независимо как в физическом, так и в скоростном пространствах
 - Численный метод консервативен по интегралу столкновений для любого приближенного интеграла столкновений (БГК, Шахова, Рыкова, ...)
 - Применяется неоднородная дискретизация оператора переноса
 - Используется полностью неявный алгоритм продвижения по времени
- Разработанный метод решения кинетического уравнения **впервые применим** для решения не только академических, но и промышленных задач со сложной геометрией.

Общая структура численного метода

- Вводим ограниченную расчетную область и неструктурированную сетку из ячеек V_i в физическом пространстве и узлов ξ_j в скоростном
- Функции f , $f^{(S)}$ будем задавать в центрах ячеек скоростной и физической сеток, интерпретируя их для каждой ячейки V_i физического пространства как векторы длины N_ξ с компонентами

$$f_{ij} = f(t, \mathbf{x}_i, \xi_j), \quad f_{ij}^{(S)} = f^{(S)}(t, \mathbf{x}_i, \xi_j), \quad \xi_j = (\xi_{1j}, \xi_{2j}, \xi_{3j})$$

- Интегрирование по ячейке V_i и стандартная аппроксимация интегралов от потоков и правой части приводит к полу-дискретной схеме

$$\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial t} = \mathbf{R}_i = -\frac{1}{|V_i|} \sum_{l=1} \Phi_{li} + \mathbf{J}_i, \quad \Phi_{li} = \int_{A_{li}} (\xi_{nli} \circ \mathbf{f}) dS,$$

$$\Xi_k = (\xi_{k1}, \xi_{k2}, \xi_{k3}, \dots, \xi_{kN_\xi})^T, \quad \xi_{nli} = n_{1l}\Xi_1 + n_{2l}\Xi_2 + n_{3l}\Xi_3.$$

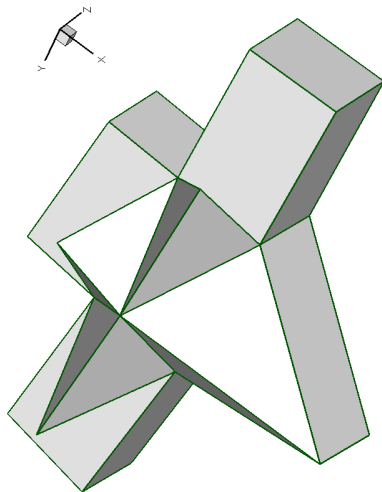
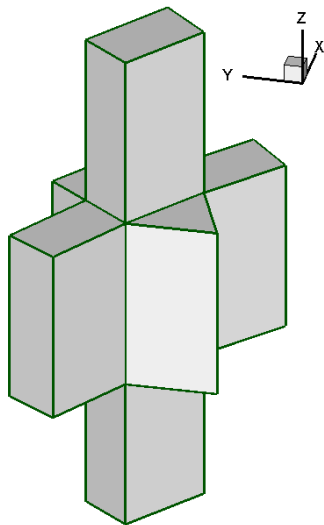
- Через \circ обозначена операция покомпонентного умножения двух векторов: $c = a \circ b$ – вектор с компонентами $c_i = a_i b_i$.
- Получившийся метод можно интерпретировать как полудискретную схему решения системы большого числа линейных уравнений сохранения, связанных через нелинейный жесткий источник.

- **Аппроксимация оператора переноса** с помощью ТВД схемы
 - метод наименьших квадраты для произвольных сеток
 - локально-одномерных аппроксимации для гексаэдров
- **Консервативная аппроксимации интеграла столкновений**: находим макропараметры $\mathbf{W} = (n, u_1, u_2, u_3, T, q_1, q_2, q_3)^T$ из условий вывода приближенного интеграла столкновений

$$\mathbf{H}(\mathbf{W}) = \sum_{j=1}^{N_\xi} \begin{pmatrix} 1 \\ \xi_j \\ \xi_j^2 \\ \mathbf{v}_j v_j^2 \end{pmatrix} (f_j^{(S)} - f_j) \omega_j + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ 2 \text{Pr} \mathbf{q} \end{pmatrix} = \mathbf{0}.$$

- Используется консервативная аппроксимация граничных условий диффузного отражения молекул
- **Продвижение по времени**:
 - неявный метод Эйлера с приближенной линеаризацией численных потоков и интеграла столкновений;
 - получающаяся система решается с помощью LU-SGS подхода, предложенного в [Yoon and Jameson, 1988, Men'shov and Nakamura, 1995] для уравнений Эйлера

Шаблоны реконструкции на произвольных сетках



- На основе предложенного численного метода был разработан программный комплекс “**Несветай-3Д**” для решения плоских, осесимметричных и трехмерных задач
- Состоит из вычислительного ядра (базовой библиотеки), непосредственно кинетического решателя и двух препроцессоров.
- 20000 строк на Фортран 2003/2008 с элементами ООП.
- Поддерживаются одноуровневые (MPI, OpenMP) и двухуровневая OpenMP + MPI модели параллельных вычислений
- Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2017616295 от 06.06.2017

Состав “Несветай-3Д”

Препроцессор пространственной сетки (4 модуля)

- Разбиение сетки на блоки
- Перенумеровка вершин, граней и ячеек
- Специальный формат сеток

Препроцессор скоростной сетки (3 модуля)

- Чтение сетки в форматах Neutral и StarCD 3.2.0
- Учет плоскостей симметрии
- Вывод сетки и квадратурных весов

Вычислительное ядро (11 модулей)

- Чтение сетки в форматах Neutral и StarCD 3.2.0
- Структуры вершина, ячейка, грань, сетка, поверхностная сетка
- Чтение сетки в форматах Neutral & StarCD, построение графов связности
- Процедуры реконструкции функций
- Процедуры для использования MPI и OpenMP

Кинетический решатель (21 модуль)

- Модели Крука и Шахова для одноатомного газа
- Дискретизация по времени методом LU-SGS
- Интегрирование по молекулярной скорости с консервативными коррекциями
- Решатели для конкретных классов течений: микроканал, внешнее обтекание, испарение
- Параллельный ввод/вывод с использованием MPI 2.0
- Процедуры обработки данных

Реализация параллельных вычислений в “Несветай-3Д”

- ❶ Одноуровневая модель [Titarev, 2012, Titarev et al., 2014] - MPI-обмены между узлами и декомпозиция сетки одним из двух способов:
 - В пространстве скоростей препроцессором комплекса “Несветай-3Д” с учетом граничных условий зеркального отражения.
 - В физическом пространстве с помощью внешней программы (например Metis) и подготовка блоков препроцессором комплекса “Несветай-3Д”
- ❷ Двухуровневая модель параллельных вычислений OpenMP + MPI [Титарев, 2015, Титарев et al., 2016] для современных multi- и many-core систем:
 - Верхний уровень – MPI-обмены между узлами
 - Нижний уровень – декомпозиция физической сетки каждого MPI-процесса на блоки и использование технологии OpenMP для всех этапов численного алгоритма.
 - В многопоточной реализации метода LU-SGS каждая нить работает для своей части пространственной сетки; при этом для “фиктивных” ячеек используется приближение Якоби $\Delta \mathbf{f}_i = \mathbf{R}_i / d_i$, где d_i - диагональный элемент матрицы неявного метода
- ❸ Важно подчеркнуть, что OpenMP + MPI подход реализован для **неявного** метода дискретизации по времени.

Задачи внешней гиперзвуковой аэродинамики

При численном моделировании гиперзвуковых течений на основе модельных кинетических уравнений существует 2 фундаментальные проблемы:

1 Применимость модельного интеграла столкновений (валидация)

- Как известно, построение модельного интеграла столкновений нацелено на правильный выход на режим сплошной среды в пределе $Kn \rightarrow 0$ ($\delta \rightarrow \infty$).
- Реальная точность моделирования при $Kn \approx 1$ может оцениваться путем сравнения с результатами, полученными по точному уравнению Больцмана или решению ПСМ
- Систематических сравнений для $M_\infty \gg 1$ не приводилось

2 Быстрый рост вычислительных затрат при $M_\infty \gg 1$

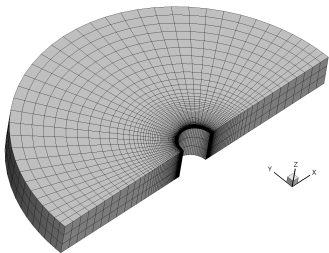
- При использовании традиционной прямоугольной сетки в скоростном пространстве число узлов растет как $M_\infty^3 \Rightarrow$ расчет пространственных течений при $M_\infty > 20$ становится невозможным
- В литературе предлагается использовать сетку типа восьмеричного дерева, см. например [Arslanbekov et al., 2013, Baranger et al., 2014].

Основные достижения за 2017 год

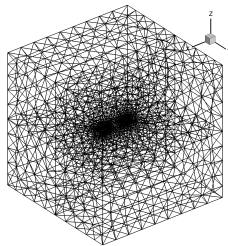
- 1 Прямом сравнением с DSMC расчетами удалось показать применимость модельных кинетических уравнения для расчета гиперзвуковых течений разреженного газа ($10 \leq M_\infty \leq 25$)
- 2 Впервые построено численное решение задачи обтекания реалистичных 3х-мерных моделей спускаемых аппаратов на основе решения кинетического уравнения
- 3 Для $M_\infty = 10$ проведено сравнение с DSMC пакетом SMILE (ИТПМ СО РАН) на задаче обтекания ВКА ЦАГИ
- 4 Проведены рекордные расчеты: до 256 узлов кластера РСК Петастрим на сетках до 18 миллиардов ячеек

Валидация модели и верификация кода

- Рассматривается задача обтекания круглого цилиндра радиуса 6 дюймов (15.24 см) для чисел Маха $M_\infty = 10, 25$
- Результаты сравниваются с расчетами по DSMC коду “Monaco” [Dietrich and Boyd, 1996], приведенными в [Lofthouse, 2008].
- Представлены результаты использованием наиболее подробной сетки из 115×40 ячеек в плоскости x-y и скоростной сетки из 35720 узлов.



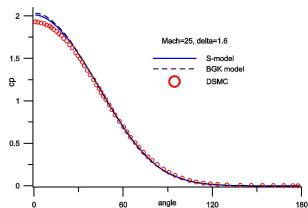
(а) Пространственная сетка



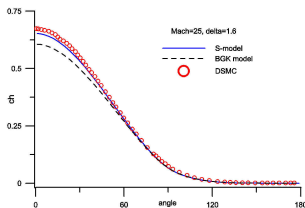
(б) Скоростная сетка

Обтекание потоком аргона, $M_\infty = 25$, $\mu = T^{0.734}$

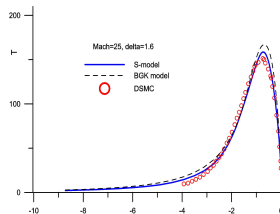
$\delta = 1.6$ ($Kn \approx 0.56$)



(а) коэф. давления c_p

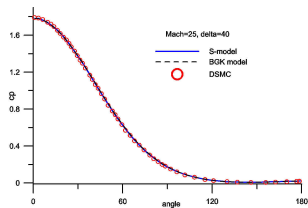


(б) коэф. теплоотдачи c_h

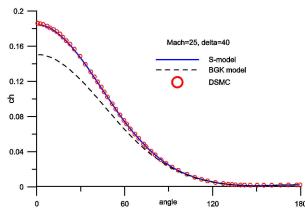


(в) температура T

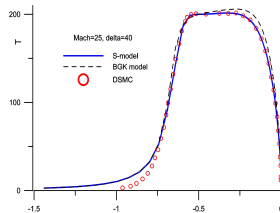
$\delta = 40$ ($Kn \approx 0.0225$)



(а) коэф. давления c_p



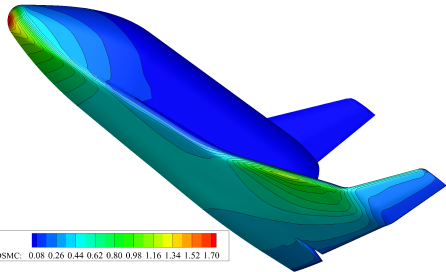
(б) коэф. теплоотдачи c_h



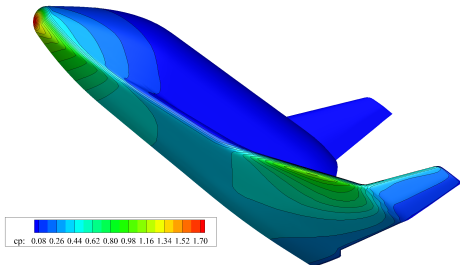
(в) температура T

Верификация на модели ВКА ЦАГИ

- Сравнение с результатами метода ПСМ, код SMILE [Ivanov et al., 2007]
- Расчеты кодом SMILE проводились сотрудниками ИТПМ СО РАН Е.А. Бондарем, П.В. Ващенковым и А.А. Шевыриным в рамках проекта РФФИ 15-07-02986
- Высота $H = 90$ км, одноатомный газ, $\delta = 38/\text{м}$, $\mu = T^{0.734}$
- Число Маха набегающего потока $M_\infty = 10$, угол атаки $\alpha = 25$
- Представлены линии уровня коэффициента давления c_p



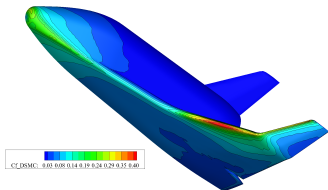
(а) код SMILE



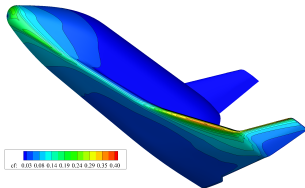
(б) Несветай-3Д

Верификация на модели ВКА ЦАГИ (2)

Сравнение распределений коэффициента трения c_f :

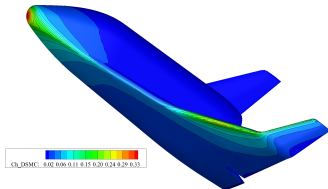


(а) код SMILE

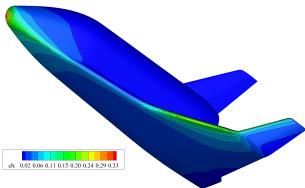


(б) Несветай-3Д

Сравнение распределений коэффициента теплоотдачи c_h :



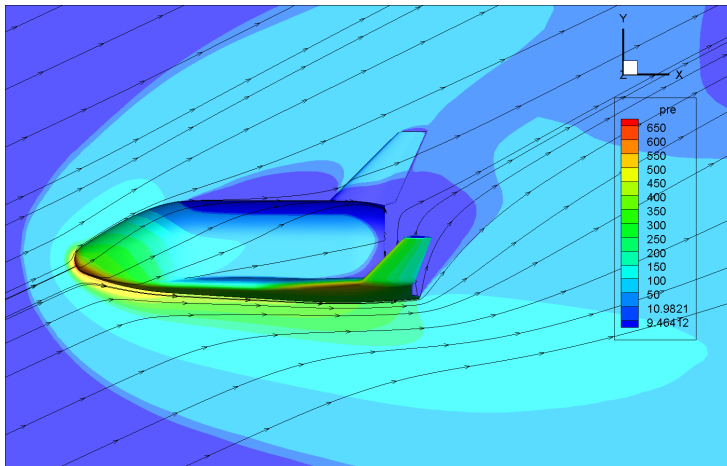
(а) код SMILE



(б) Несветай-3Д

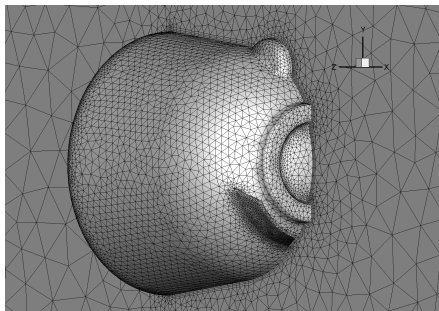
Оценочный расчет для первой космической скорости

- Высота 100 км, газ – воздух, $\delta = 0.71/\text{м}$, $U_\infty = 7900 \text{ м/с}$, $\alpha = 25$
- Полное число ячеек в 6-мерном пространстве – **19,7 миллиардов!**

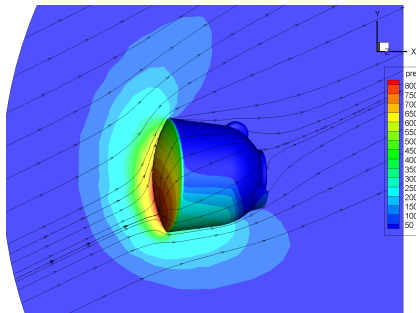


Обтекание сегментально-затупленного тела

- Трехмерное тело сложной формы с надстройками
- Параметры задачи такие же, как и в расчете обтекания ВКА:
 - высота полета 100 км
 - скорость набегающего потока 7900 м/с, угол атаки $\alpha = 25^\circ$.
- Сетка в физическом пространстве - типа тетра-призм, 326 тысяч ячеек.
- Полное число ячеек в 6-мерной сетке - 14,7 миллиардов.



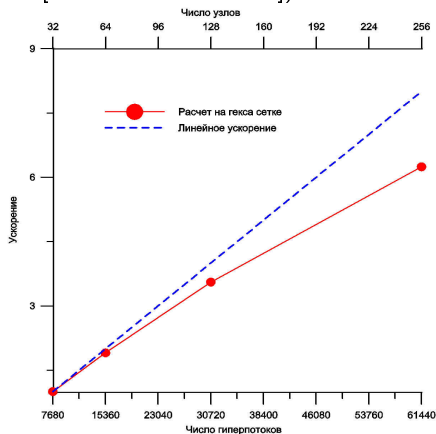
(а) Расчетная сетка



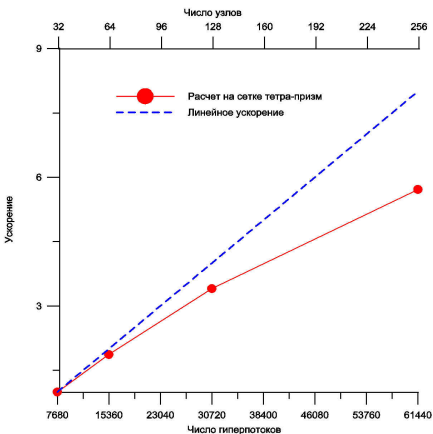
(б) Давление и линии тока

Масштабируемость кода

- Используется РСК Петастрим, СП6ПУ Петра Великого, $U_{\infty} = 1500$ м/с, высота 100 км
- Эффективность около 75% – на уровне лучших примеров (код NOISEtte, [Абалакин et al., 2012]).



(а) гексы, 9.5 миллиарда узлов



(б) тетра-призм, 8.7 миллиарда узлов

Выводы и будущие планы

Результаты:

- Создан комплекс параллельных программ “**Несветай-3Д**”, позволивший эффективно построить решение трехмерного кинетического уравнения на современных суперЭВМ с использованием рекордного числа процессоров / гиперпотоков (более 60000).
- Впервые проведена количественная оценка точности моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа на основе численного решения модельного кинетического уравнения.
- Впервые построено решение кинетического уравнения для задачи обтекания реалистичных моделей спускаемого аппарата для режима обтекания, соответствующего входу спускаемого аппарата в атмосферу с первой космической скоростью.

На 2018 год запланированы следующие работы:

- Интеграция в код модели Рыкова для двухатомного газа
- Проведение тестовых расчетов обтекания с учетом внутренних степеней свободы

