Код ZOOM
Нестационарный метод Галёркина с разрывными базисными функциями

С.В. Михайлов, В.Ю. Подаруев, А.И. Трошин

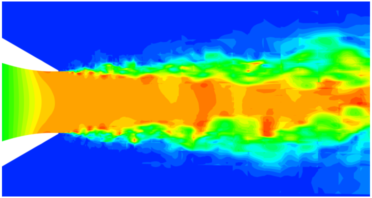
3 декабря 2017 г.

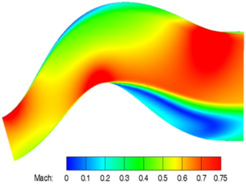
Отделение аэродинамики силовых установок, ЦАГИ, г. Жуковский

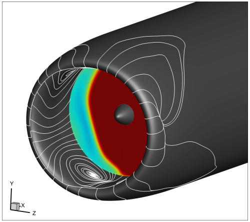
Мотивация к разработке

Цель:

Разработка кода ЦАГИ высокого порядка точности для расчёта турбулентных течений и оценки акустических характеристик, основанного на методе Галёркина с разрывными базисными функциями







Система уравнений

Implicit Large Eddy Simulation (ILES)

- Полная система уравнений Навье–Стокса для сжимаемого газа
- Без модели подсеточных напряжений

Delayed Detached Eddy Simulation (DDES)

- Гибридная система уравнений RANS/LES
- Подсеточная модель (турбулентных) напряжений

  P.R. Spalart, S. Deck, M.L. Shur, K.D. Squires, M.Kh. Strelets, A. Travin. A new version of detached-eddy simulation, resistant to ambiguous grid densities // Theor. Comput. Fluid Dyn. (2006) V. 20, pp. 181–195
- Дополнительное дифф. уравнение для турбулентной вязкости:

$$\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\nu + \tilde{\nu}}{\mathrm{Pr}_t^{\tilde{\nu}}}\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j}\right) = c_{b1}(1 - f_{t2})\tilde{S}\tilde{\nu} - \left(c_{w1} f_w - \frac{c_{b1}}{K^2} f_{t2}\right)\left(\frac{\tilde{\nu}}{d_w}\right)^2 + \\ + \frac{c_{b2}}{Pr_t^{\tilde{\nu}}}\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_k}\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_k}$$

(модель Спаларта–Альмараса, где d_w связано с размером ячейки)

Метод Галёркина с разрывными базисными функциями

Система уравнений:

$$\frac{\partial \mathrm{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathrm{W}$$

Представление решения:

$$\mathrm{U}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{K_f} u_j(t)\varphi_j(\mathbf{x})$$

Результирующая система уравнений:

$$\frac{\mathrm{d}u_j}{\mathrm{d}t} + \int_{\Sigma} \left(\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}\right)\varphi_j \,\mathrm{d}\Sigma - \int_{\Omega} \left(\mathbf{F} \cdot \nabla\varphi_j\right)\mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega} \mathrm{W}\varphi_j \,\mathrm{d}\Omega, \quad j = \overline{1, K_f}$$

- $\{\varphi_j\}$: ортонормированный набор полиномов степени не выше K
- интегрирование: квадратуры, полученные путём тензорного произведения одномерных квадратур Гаусса–Лежандра
- гексаэдральные неструктурированные криволинейные сетки второго порядка
- метод Рунге–Кутты
- конвективные потоки: схема Роу
- диффузионные потоки: аппроксимация Bassi & Rebay 2

Модификации РМГ: консерв. перемен. и ортонорм. базисн. ф-ции

Структура системы уравнений: $\frac{\partial \mathrm{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathrm{U}, \nabla \mathrm{U}) = 0$ (PDE)

Исходный вариант метода [Волков, 2009]

$$\mathrm{Q} = (\rho, u, v, w, p)^T = \sum_{i=1}^{K_f} \mathrm{q}_i(t)\varphi_i(\mathbf{x})$$

$$\varphi_i = x^{\alpha_i} y^{\beta_i} z^{\gamma_i}$$

Внесённые изменения

$$\mathrm{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E)^T = \sum_{i=1}^{K_f} \mathrm{u}_i(t)\varphi_i(\mathbf{x})$$

$$\varphi_i = \sum_{j=1}^{K_f} x^{\alpha_{ij}} y^{\beta_{ij}} z^{\gamma_{ij}} : \int_\Omega \varphi_i \varphi_j \, \mathrm{d}\Omega = \delta_{ij}$$

Подстановка в (PDE):

$$\boxed{\int_\Omega \frac{\partial \mathrm{U}}{\partial \mathrm{Q}} \varphi_i \varphi_j \, \mathrm{d}\Omega} \frac{\mathrm{d}\mathrm{q}_i}{\mathrm{d}t} + \oint_\Sigma (\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) \varphi_j \mathrm{d}\Sigma = \int_\Omega (\mathbf{F} \cdot \nabla \varphi_j) \mathrm{d}\Omega$$

▲ Матрица, требующая точного обращения в каждой ячейке на каждом шаге по времени

Её размеры: $100 \times 100 \, (K = 3)$
$280 \times 280 \, (K = 5)$

$$\frac{\mathrm{d}\mathrm{u}_j}{\mathrm{d}t} + \oint_\Sigma (\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) \varphi_j \, \mathrm{d}\Sigma = \int_\Omega (\mathbf{F} \cdot \nabla \varphi_j) \, \mathrm{d}\Omega$$

▲ В новом варианте на этом месте — единичная матрица

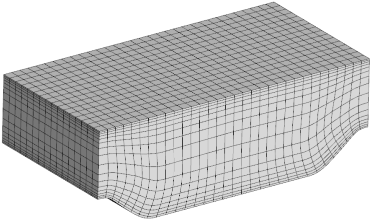
Модификации РМГ: метод Bassi & Rebay 2 для вычисления градиентов

$$\frac{\mathrm{d}u_j}{\mathrm{d}t} + \oint\limits_{\Sigma} \left(\mathbf{F}_{\mathsf{conv}}(\mathrm{U}) + \mathbf{F}_{\mathsf{diff}}(\mathrm{U}_{\mathsf{face}}, \mathbf{G}_{\mathsf{face}})\right) \cdot \mathbf{n}\, \varphi_j \,\mathrm{d}\Sigma = \int\limits_{\Omega} \left(\mathbf{F}_{\mathsf{conv}}(\mathrm{U}) + \mathbf{F}_{\mathsf{diff}}(\mathrm{U}, \mathbf{G})\right) \cdot \nabla\varphi_j \,\mathrm{d}\Omega$$

$$\mathbf{G}_{\mathsf{face}} = \frac{\mathbf{G}_L^E + \mathbf{G}_R^E}{2} + \eta_{\mathsf{face}} \frac{\mathbf{R}_{\mathsf{face},L} + \mathbf{R}_{\mathsf{face},R}}{2} \qquad \mathbf{G} = \mathbf{G}^E + \sum_{\mathsf{faces}} \mathbf{R}_{\mathsf{face}}$$

$\mathbf{G}^E = \sum_i \mathrm{u}_i \nabla\varphi_i$ — «наивные» градиенты $\qquad \mathbf{R}_{\mathsf{face}}$ — поправки на гранях

«штрафной параметр»: $\eta_{\mathsf{face}} = \begin{cases} \eta_{\mathsf{stab}} > 1, & \text{ГУ «прилипание потока»} \\ 1, & \text{на остальных гранях} \end{cases}$



сетка с 16 ячейками по высоте канала

K	η_{stab}
1	16
2	8
3	4
4	3
5	2

Особенности программной реализации

Программа написана на языке C++ с использованием:

- двухуровневой параллельной модели MPI/OpenMP
- библиотеки линейной алгебры Eigen
- встраиваемых модулей на языке Python
- библиотек для форматов JSON и CGNS
- элементов стандарта C++11
- генерации частей кода при помощи пакета символьных вычислений SymPy


РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2016619598

Программа численного моделирования крупномасштабных вихрей на суперкомпьютерах при помощи схемы Галёркина с разрывными базисными функциями высокого порядка точности (zScream)

Правообладатель: *Федеральное государственное унитарное предприятие «Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского» (ФГУП «ЦАГИ») (RU)*

Авторы: *Михайлов Сергей Владимирович (RU), Подаруев Владимир Юрьевич (RU), Трошин Алексей Игоревич (RU)*

Заявка № 2016616919

Дата поступления 29 июня 2016 г.

Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ *24 августа 2016 г.*

Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности

Г.П. Ивлиев

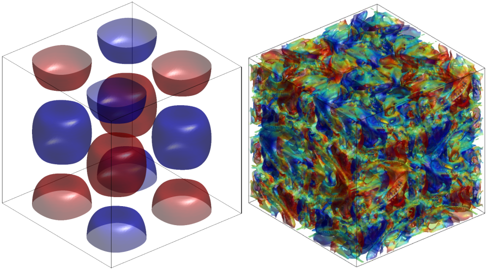
```python
from sympy.integrals.quadrature import gauss_legendre
    x, w = gauss_legendre (n, args.n_digits)
      code = generate_code (list (zip(x, w)))
```

```cpp
QRGaLe_7_4::QRGaLe_7_4 ()
  : QRGaussLegendre {7}
{
  add_symmetrical (0.33998104358485626480266575910324471L, 0.65214515486254614262693605077800061L);
  add_symmetrical (0.86113631159405257522394648889280951L, 0.34785484513745385737306394922199941L);
```

```cpp
// K = 4
BF.push_back ([](QReal x, QReal  , QReal  ) { return pow(x, 4); });
BF.push_back ([](QReal x, QReal y, QReal  ) { return pow(x, 3)*y; });
BF.push_back ([](QReal x, QReal  , QReal z) { return pow(x, 3)*z; });
```

Вихрь Тэйлора–Грина

$$
\begin{aligned}
u &= \quad V_0 \sin\frac{x}{L}\cos\frac{y}{L}\cos\frac{z}{L},\\
v &= -V_0 \cos\frac{x}{L}\sin\frac{y}{L}\cos\frac{z}{L},\\
w &= 0,\\
p &= p_0 + \frac{\rho_0 V_0^2}{16}\left(\cos\frac{2x}{L}+\cos\frac{2y}{L}\right)\left(\cos\frac{2z}{L}+2\right)
\end{aligned}
$$



Taylor G.I., Green A.E. Mechanism of the production of small eddies from larger ones // Proc. Royal Soc. A. – 1937. – Vol. 158, no. 895. – P. 499-521

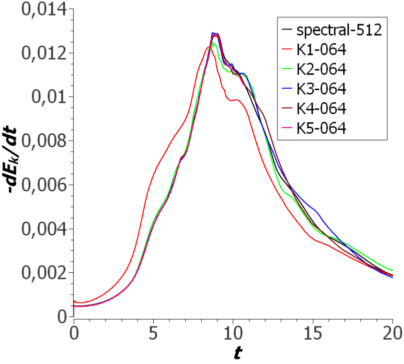
Вихрь Тэйлора–Грина: точность метода, сетка 64^3

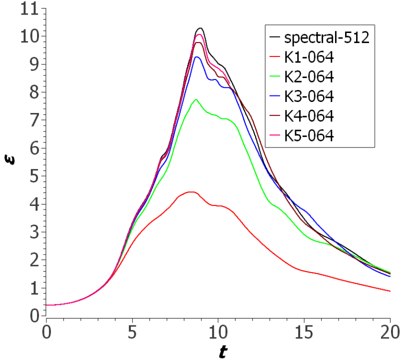
Кинетическая энергия турбулентности

$$E_k = \frac{1}{\rho_0 \Omega} \int_\Omega \rho \frac{\vec{v} \cdot \vec{v}}{2} \, \mathrm{d}\Omega$$

Энстрофия

$$\varepsilon = \frac{1}{\rho_0 \Omega} \int_\Omega \rho \frac{\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}}{2} \, \mathrm{d}\Omega$$





Эталонные кривые получены спектральным методом

W.M. van Rees, A.,Leonard, D.I. Pullin, P. Koumoutsakos. A comparison of vortex and pseudo-spectral methods for the simulation of periodic vortical flows at high Reynolds number // J. Comput. Phys. 230 (2011), pp. 2794–2805

Вихрь Тэйлора–Грина: сходимость и затраты по времени

- NDOF = number of degrees of freedom
- t_{comp} = время выполнения расчёта (16 узлов с 2×8 гипернитевыми ядрами — всего 512)
- error = разница между максимумами энстрофии, полученными в расчёте и в эталонном решении

FV схемы

	64^3	96^3	128^3	192^3	256^3	384^3	512^3
central			2.1×10^6 0.36 h 68%				
WENO5			2.1×10^6 0.49 h 45%				
WENO9	2.6×10^5 0.03 h 63%	8.8×10^5 0.13 h 50%	2.1×10^6 0.56 h 38%	7.1×10^6 2.3 h 23%	1.7×10^7 9.6 h 16%	5.7×10^7 39 h 8.0%	1.3×10^8 153 h 4.7%

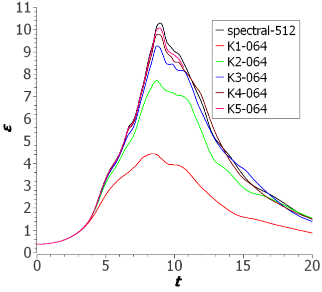
Рассматривается квазиодномерная схема WENO
(2-й порядок точности, схема высокого разрешения)

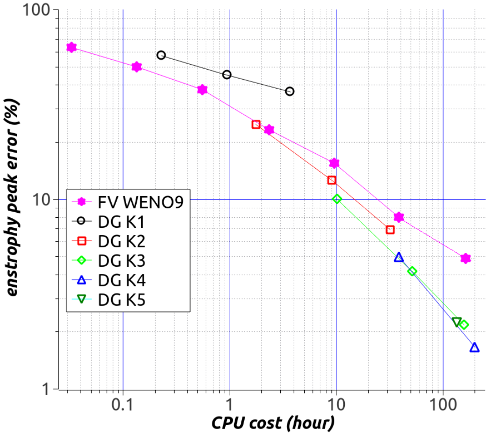
DG схемы

	64^3	96^3	128^3
K = 1	1.0×10^6 0.23 h 60%	3.5×10^6 1.0 h 45%	8.4×10^6 3.7 h 37%
K = 2	2.6×10^6 1.8 h 25%	8.9×10^6 9.1 h 13%	2.1×10^7 32 h 6.9%
K = 3	5.2×10^6 10 h 10%	1.8×10^7 52 h 4.2%	4.2×10^7 159 h 2.2%
K = 4	9.2×10^6 39 h 5.0%	3.1×10^7 198 h 1.7%	7.3×10^7 623 h 0.89%
K = 5	1.5×10^7 136 h 2.2%		

Вихрь Тэйлора–Грина: оценка пика энстрофии

$$\varepsilon = \frac{1}{\rho_0 \Omega} \int_\Omega \rho \frac{\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}}{2} \, d\Omega$$

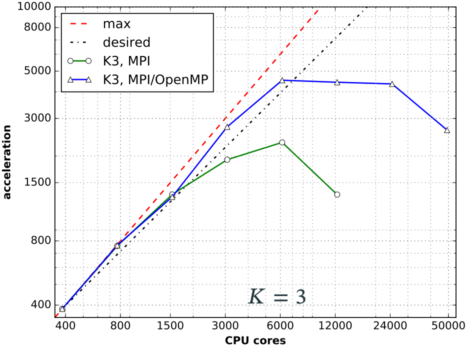




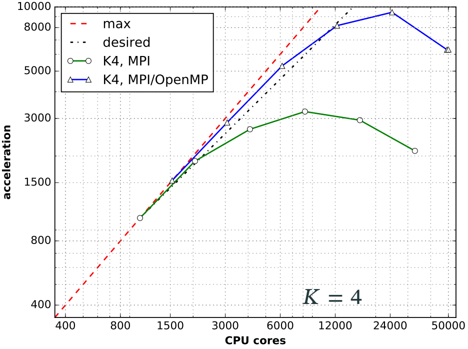
Вихрь Тэйлора–Грина: масштабирумость, до 50 000 ядер

max = CPU cores — максимально возможное ускорение (эффективность 100 %)
desired — ускорение в 1.8 раза при каждом удвоении числа процессоров (90 %)

- сетка $128^3 = 2\,097\,152$ ячеек
- однородная архитектура суперкомпьютера, каждый узел по 2×6 ядер CPU
- с ростом K эффективность параллельной версии программы возрастает



эффективность $\geqslant 90\,\%$ от $\mathbf{7\,000}$ NDOF/core



эффективность $\geqslant 90\,\%$ от $\mathbf{6\,125}$ NDOF/core

⋆ Спасибо Г.П. Семенову, П.Г. Симонову и Г.И. Воронову, ИТМФ ВНИИЭФ, г. Саров

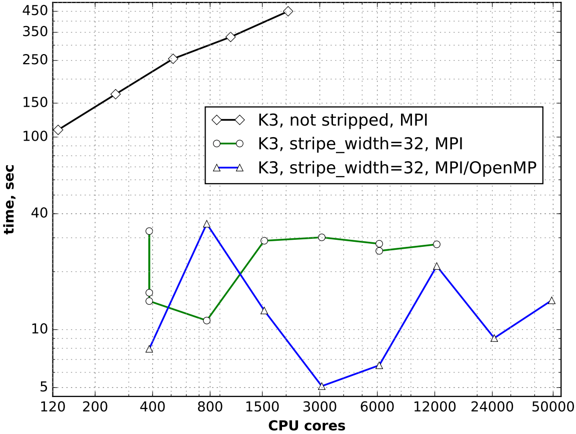
Вихрь Тэйлора–Грина: MPI-IO с использованием Lustre

Проблема

Время записи в файл растёт с увеличением числа процессоров

Решение

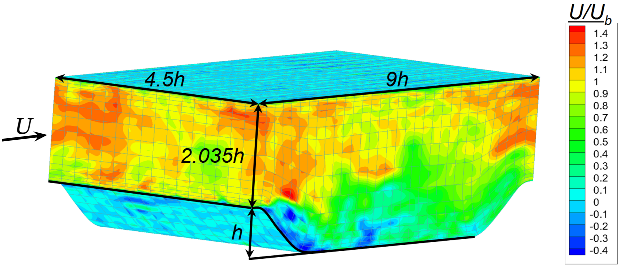
Опции MPI-IO: `striping_factor` или `stripe_width`



⋆ Спасибо П.Г. Симонову и Г.И. Воронову, ИТМФ ВНИИЭФ, г. Саров

Периодические холмы

– ERCOFTAC QNET–CFD тестовый случай UFR 3–30



– течение периодическое в продольном и поперечном направлениях

– для поддержания расхода на течение налагается градиент $\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}$

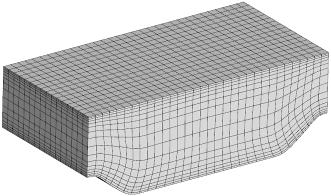
– число Рейнольдса $\mathrm{Re} = 10595$, число Маха $M \approx 0.1$

– однородное начальное поле, начальное состояние «забывается»

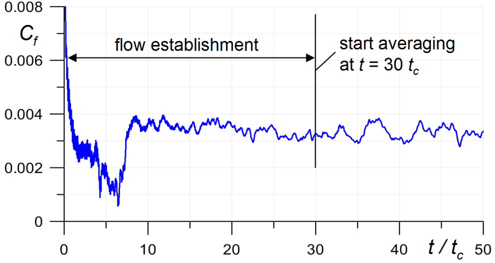
– ILES и DDES на основе DG высокого порядка точности

Периодические холмы: расчётная сетка и осреднение

$32 \times 16 \times 16$ («грубая») и
$64 \times 32 \times 32$ («подробная») сетки



Метод осреднения

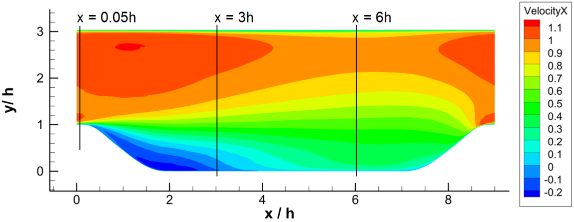


- В процессе расчёта накапливались следующие данные:
  - Поля средней скорости, давления и плотности: $U, V, W, P, \bar{\rho}$
  - Корреляции компонент скорости:

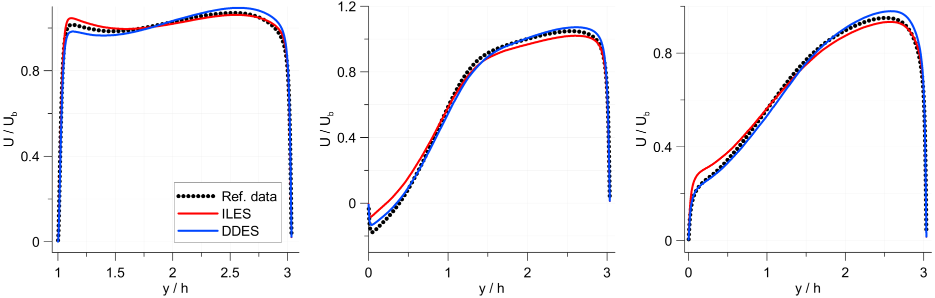
$$\overline{u'^2} = \overline{(u-U)^2},\ \overline{v'^2},\ \overline{w'^2},\ \overline{u'v'},\ \overline{u'w'},\ \overline{v'w'}$$

- Осреднение выполнялось по времени ($100\,t_c$) и по размаху (ось Z)

Периодические холмы: DDES vs. ILES, подробная сетка K3

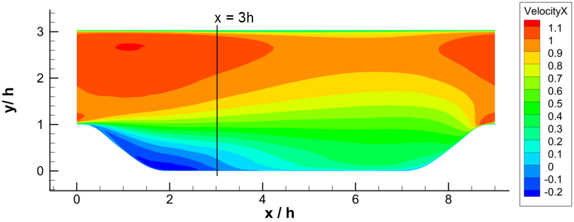


Осреднённая продольная скорость

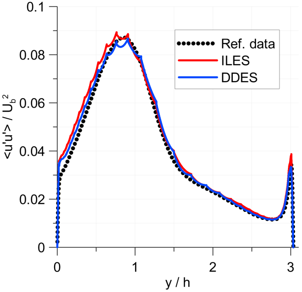


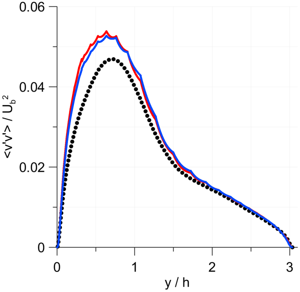
Эталонные данные по LES: M. Breuer, N. Peller, Ch. Rapp, M. Manhart, Comput. Fluids 2009

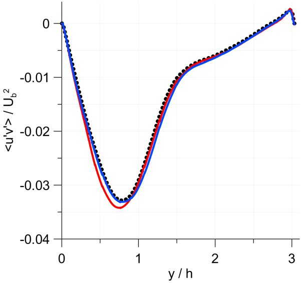
Периодические холмы: DDES vs. ILES, подробная сетка К3



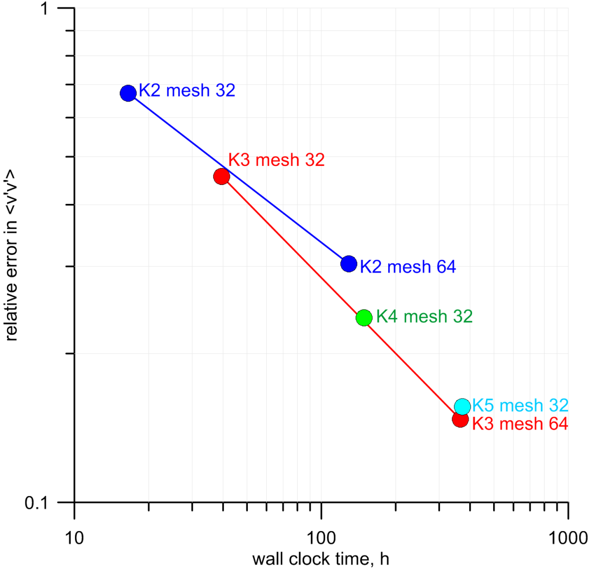
Корреляции компонент скорости ($\overline{u'u'}$, $\overline{v'v'}$) и сдвиговые напряжения ($\overline{u'v'}$)







Периодические холмы: оценка вычислительной эффективности

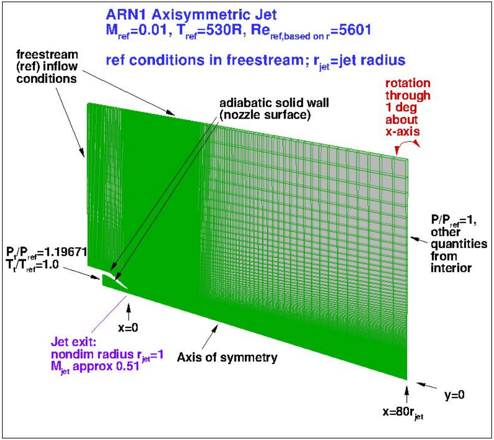


- расчёты по ILES
- на 300 ядрах CPU

- **K3 имеет лучшую точность в расчёте на 1 час вычислений, чем K2**
- **K4 и K5 имеют ту жу точность в расчёте на 1 час вычислений, что и K3**

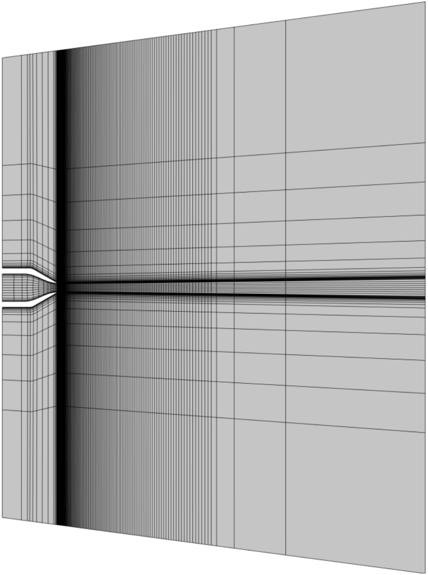
NASA ARN2: режим SP3 — круглая холодная дозвуковая струя

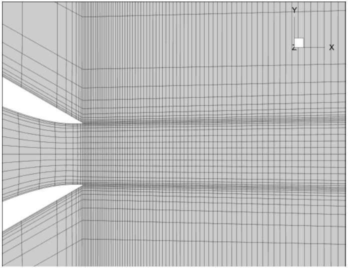
- **тестовый случай NASA** [J. Bridges, M.P. Wernet. Establishing Consensus Turbulence Statistics for Hot Subsonic Jets // AIAA Paper 2010-3751]

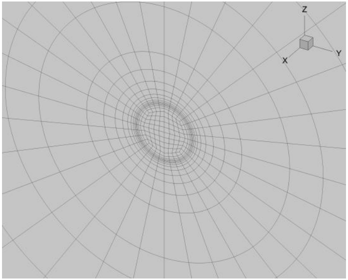


- одноконтурное сопло
- $\pi_c = 1.197$, $M_{jet} = 0.513$, $M_\infty = 0.01$, $T_{jet}/T_\infty = 0.950$

«H-сетка», 3D, ≈ **100 000** ячеек

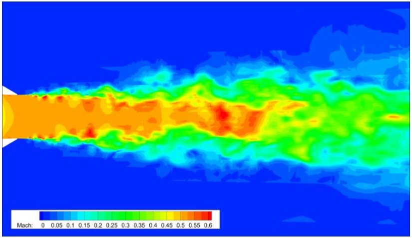




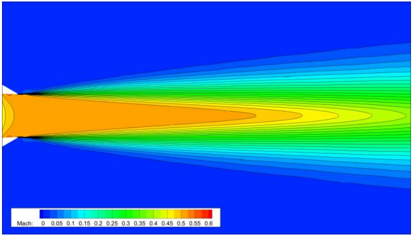


NASA ARN2: ILES, K = 2, 3

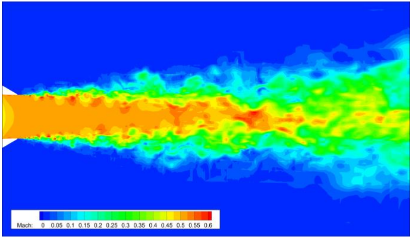
K = 2, мгновенное поле числа Маха



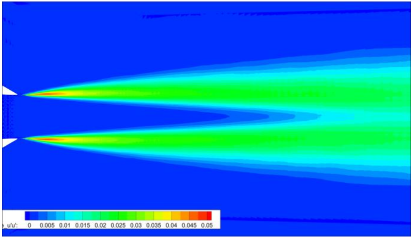
K = 3, осреднённое поле числа Маха



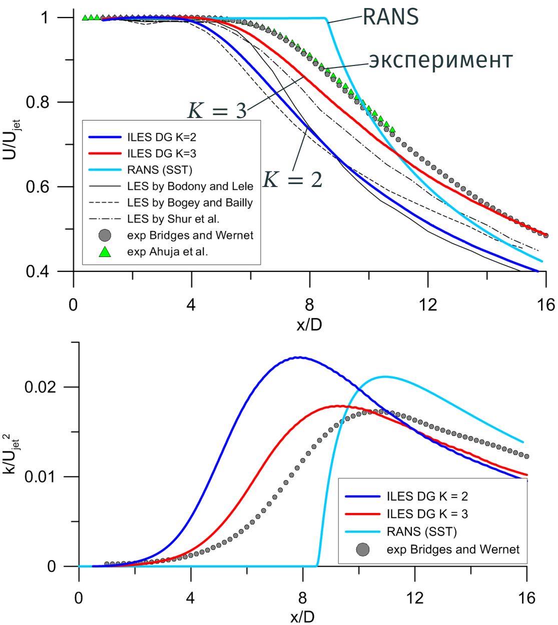
K = 3, мгновенное поле числа Маха



K = 3, поле корреляции $\overline{u'u'}/U_{\text{jet}}^2$



NASA ARN2: ILES K = 2, 3 vs. RANS/SST, осевые распределения



Длина начального участка струи = расстояние от среза сопла до сечения

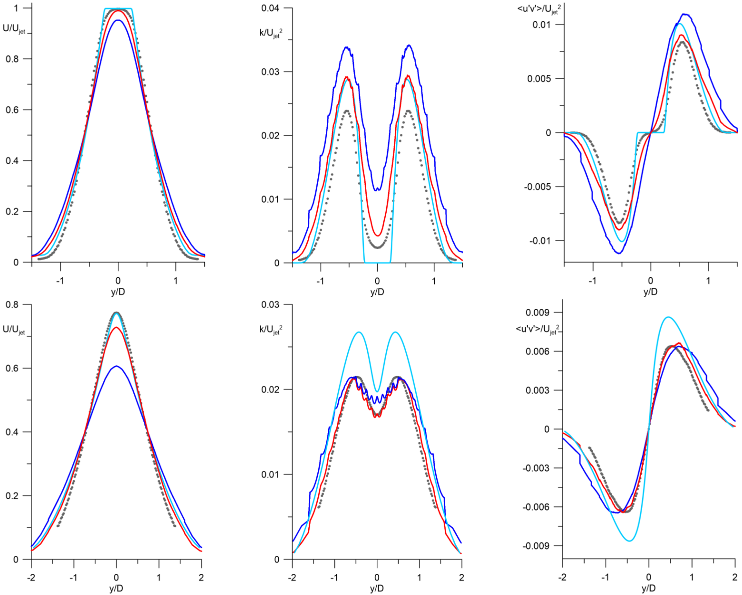
$$U = 0.01U_{\text{jet}}$$

RANS/SST **завышает** длину начального участка струи **на 51 %** и не описывает плавное нарастание пульсаций

ILES с РМГ **занижает** длину начального участка струи при $K = 2$ на 29 % и при $K = 3$ **на 12 %**

NASA ARN2: ILES K = 2, 3 vs. RANS/SST, поперечные распределения

Продольная скорость U, кин. энерг. турб $\overline{k}$ и сдвиговые напряжения $\overline{u'v'}$

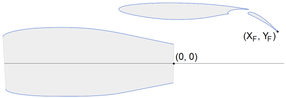


сечение $\frac{x}{D} = 5$

сечение $\frac{x}{D} = 10$

SaM-146: режим максимальной тяги — уход на второй круг

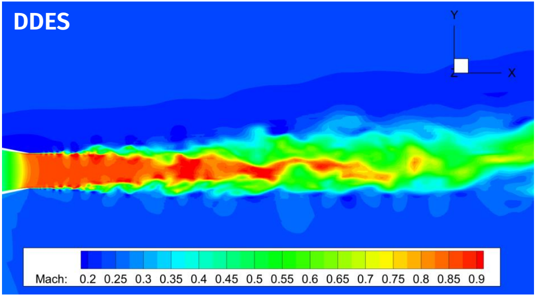
- двухконтурное сопло с внутренним смешением
- $\pi_c = 1.62$, $M_{jet} = 0.815$, $M_\infty = 0.25$, $T_{0\,jet}/T_\infty = 1.55$, $\alpha_\infty = 9°$
- трансзвуковое течение в струе с небольшим спутным потоком
- сетка аналогична тесту с соплом NASA ARN2

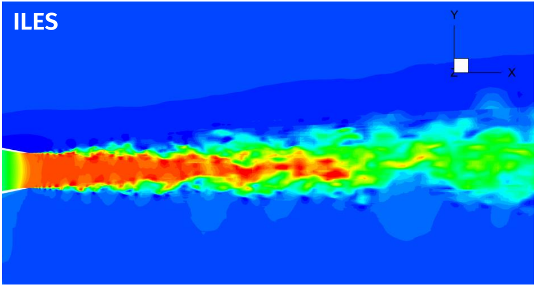


зона влияния струи на механизацию?

Sukhoi SuperJet 100

SaM-146: поле числа Маха, DDES vs. ILES, K = 2



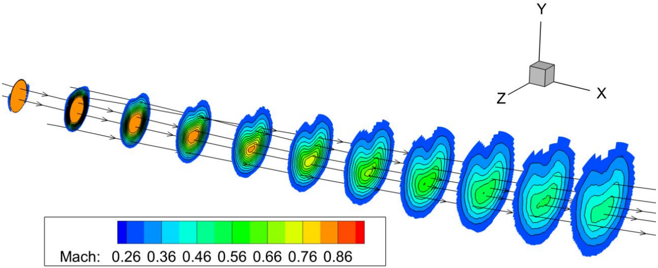


DDES разрешает меньше вихревых структур и требует калибровки модели турбулентности с учётом высокого порядка точности схемы

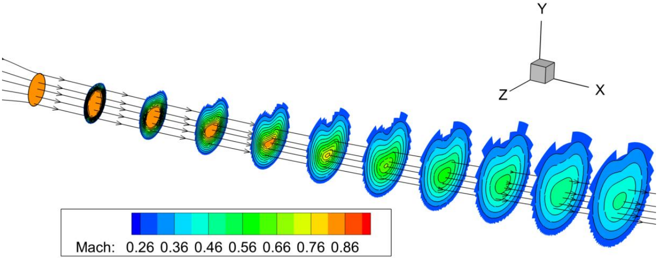
Картины течения по DDES и ILES похожи

Для этой задачи приемлемо использовать ILES

SaM-146: осреднённое поле числа Маха, ILES K = 4 vs. RANS/SST

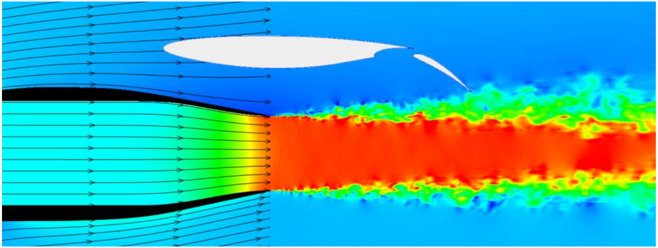


ILES K = 4
100 тыс. ячеек

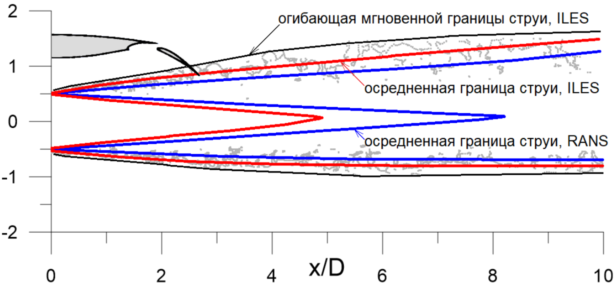


RANS/SST
10 млн. ячеек

SaM-146: определение зоны влияния струи, ILES K = 4 vs. RANS/SST



Использование вихреразрешающих методов позволяет более точно выявить возможную интерференцию струи с элементами планера по сравнению с расчётами на базе уравнений Рейнольдса



Средняя граница струи:

$$q = \sqrt{k} \approx 0.03\, V_j$$

Мгновенная граница струи:

$$T_0(\mathbf{x}) - T_{0\infty} \geqslant 0.03\,(T_{0\,\text{jet}} - T_{0\infty})$$

Итоги и первоочередные планы

Итоги:

1. При построении эффективного метода Галёркина с разрывными базисными функциями (РМГ) высокого порядка точности для нестационарных расчётов необходимо использовать разложение консервативных переменных по ортонормированным базисным полиномам, что позволяет избавиться от обращения матрицы при нестационарном члене системы уравнений

2. При проведении тестов на суперкомпьютере с числом вычислительных ядер до $50\,000$ показано, что разработанная программа обеспечивает параллельную эффективность (масштабируемость) не менее $90\,\%$ при совместном использовании технологий MPI и OpenMP и выполнении условия загрузки не менее 300 ячеек на вычислительное ядро при $K = 3$ и не менее 150 при $K = 4$

3. Показано, что при использовании РМГ оптимальный уровень точности в расчёте на единицу времени вычислений достигается при использовании метода РМГ $K = 3$ и далее с ростом K не возрастает

Первоочередные планы:

1. Реализация монотонизации схемы

2. Обобщение реализации схемы на другие элементы: тетраэдры, призмы, пирамиды

Спасибо за внимание!