

# Комплекс программ DTG для эффективного решения трехмерных задач газовой динамики с ударными волнами на графических ускорителях

Борис Корнеев, Вадим Левченко  
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН  
«Отечественные CFD коды – 2018»

2 декабря 2018 г.

## Целью работы является

- Создание инструмента для эффективного моделирования нестационарных трехмерных процессов газовой динамики в рамках системы уравнений Эйлера или Навье-Стокса на гетерогенных вычислительных системах

Для достижения цели ставятся следующие задачи.

- ❶ Построение *явной численной схемы* решения системы уравнений Навье-Стокса методом RKDG для *трехмерной декартовой сетки*;
- ❷ Разработка *локально-рекурсивного нелокально-асинхронного алгоритма* DiamondTorre реализации численной схемы;
- ❸ Разработка программного комплекса с применением графических ускорителей, его валидация на ряде модельных задач, оценка производительности и эффективности;
- ❹ Применение кода к актуальным проблемам
  - Численное решение задачи о взаимодействии пузырька с ударной волной в полностью трехмерной постановке;
  - Численное решение задачи о взаимодействии потока газа с жидкой каплей;
  - Моделирование газа при плавлении лазером металлической поверхности

# Постановка задачи

- Система уравнений Навье-Стокса представлена в виде

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} = 0,$$

где  $\mathbf{U} = (\rho, \rho u_j, E)$  — «консервативные» переменные состояния жидкости или газа,  $E = \rho(\varepsilon + \frac{1}{2} u^i u_i)$  — полная энергия,

$\mathbf{F}(\mathbf{U})_i = [\rho u_i, \rho u_i u_j + P_{ij}, u_i E + P_{ij} u^j - \kappa \partial T / \partial x^i]$  — потоки,

$P_{ij} = p \delta_{ij} - \mu (\frac{\partial u_j}{\partial x^i} + \frac{\partial u_i}{\partial x^j}) - \partial u_k / \partial x_k (\zeta - \frac{2}{3} \mu) \delta_{ij}$  — тензор давления с учетом вязких членов.  $\mu$  — кинематическая вязкость,  $\zeta$  — «вторая» вязкость,  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности.

- Система замыкается уравнением состояния  $p = p(\rho, \varepsilon)$ .
- Уравнения решаются в области  $G \in \mathbf{R}^3$ ,  $t > 0$  с начальными условиями в  $G$  при  $t = 0$  и граничными условиями в  $\partial G$ ,  $t \geq 0$ .

# Уравнения Эйлера и Навье-Стокса

- Разделим формально потоки на невязкие (Эйлеровы) и чисто вязкие (Навье-Стоксовские) слагаемые.

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i^{Eu}}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{F}_i^{NS}}{\partial x_i} = 0,$$

где  $\mathbf{F}_i^{Eu} = [\rho u_i, \rho u_i u_j + p \delta_{ij}, u_i E]$  — Эйлеровы потоки,

$$\mathbf{F}_i^{NS} = \left[ 0, -\mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \partial u_k / \partial x_k \left( \zeta - \frac{2}{3} \mu \right) \delta_{ij}, \right. \\ \left. -\mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x^j} + \frac{\partial u_j}{\partial x^i} \right) u^j - \partial u_k / \partial x_k \left( \zeta - \frac{2}{3} \mu \right) u_i - \kappa \partial T / \partial x^i \right]$$

— вязкие «потоки».

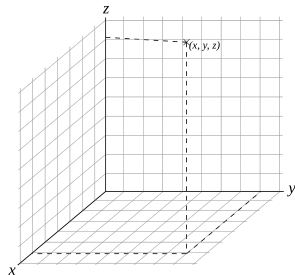
- В пренебрежении вязкостью и теплопроводностью имеем систему уравнений Эйлера

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i^{Eu}}{\partial x_i} = 0,$$

# DG-пространственная аппроксимация.

- Для начала рассмотрим уравнения Эйлера, т.е.  $\mathbf{F}_i^{NS} = 0$ .
- В каждой ячейке  $L$  введем набор базисных функций  $\{\varphi^n\}$ , и решение будем искать в виде разложения по этому базису для каждой компоненты искомого вектора  $\mathbf{U}$
- Базисные коэффициенты суть функции от времени.

$$\mathbf{U}(x, t) = \mathbf{u}_n(t)\varphi^n(x).$$



- Разложение по базису подставляется в исходное уравнение, при этом мы требуем, чтобы получаемая невязка была ортогональна базисным функциям.
- Интеграл по объему ячейки  $L$  с помощью теоремы Гаусса преобразуем так, чтобы получить интеграл по поверхности ячейки  $\partial L$ . Получим

$$\frac{d\mathbf{u}_n(t)}{dt} \int_L \varphi^n \varphi_m dV + \int_{\partial L} \mathbf{F}_i^{Eu} \varphi_m \mathbf{n}^i d\Sigma - \int_L \mathbf{F}_i^{Eu} \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_i} dV = 0.$$

Здесь и далее  $\mathbf{n}^i$  — нормаль к границе ячейки  $\partial L$ .

- В данной работе используется ортонормированный базис, поэтому  $\int_L \varphi^n \varphi_m dV = \delta_m^n$  и

$$\frac{d\mathbf{u}_m(t)}{dt} + \int_{\partial L} \mathbf{F}_i^{Eu} \varphi_m \mathbf{n}^i d\Sigma - \int_L \mathbf{F}_i^{Eu} \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_i} dV = 0.$$

Так строится DG-аппроксимация для уравнения Эйлера

# LDG-аппроксимация уравнения Навье-Стокса

- Введем набор новых переменных для пространственных производных в потоке  $\mathbf{F}_i^{NS}$

$$W = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad S = \frac{\partial T}{\partial x^i}$$

- Так же формально будем искать численное решение для тензоров  $W$  и  $S$  в виде разложения по базису  $\{\varphi^n\}$ .

$$\mathbf{W} = \mathbf{w}_n(t)\varphi^n(x), \quad \mathbf{S} = \mathbf{s}_n(t)\varphi^n(x)$$

- Для невязки так же ставится условие ортогональности базисным функциям, что приводит к следующей алгебраической системе

$$\begin{aligned}\mathbf{w}_m(t) &= \int_{\partial L} u_i \mathbf{n}^j \varphi_m d\Sigma - \int_L u_i \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_j} dV \\ \mathbf{s}_m(t) &= \int_{\partial L} T \mathbf{n}^i \varphi_m d\Sigma - \int_L T \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_i} dV\end{aligned}$$

- Далее строим аппроксимацию для уравнения Навье-Стокса, используя найденные диссипативные члены

$$\frac{d\mathbf{u}_m(t)}{dt} + \int_{\partial L} \mathbf{F}_i^{Eu} \varphi_m \mathbf{n}^i d\Sigma + \int_{\partial L} \mathbf{F}_i^{NS} \varphi_m \mathbf{n}^i d\Sigma - \int_L \mathbf{F}_i \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_i} dV = 0.$$

# Численные потоки

- В членах уравнений, содержащих интегралы по поверхности границы ячейки, необходима аппроксимация подынтегрального выражения, использующая значения в соседствующих ячейках, формирующих грань поверхности.
- Для потока  $\mathbf{F}_i^{Eu}$  используется поток на основе решения задачи Римана.
- Для остальных выражений — полусумма значений (центральный поток).
- Интегралы заменяются квадратурными формулами.

# Метод Рунге-Кутты с ограничителем

- Полученная система ОДУ при ортогональности базиса разрешима относительно вектора первой производной, то есть представима в виде

$$y'(t) = Ly;$$

$$y(0) = y_0;$$

- RKDG метод предполагает её решение явным TVD методом Рунге-Кутты, применяя на каждой итерации специальный ограничитель.

# Ограничители

- Использование ограничителя необходимо для подавления нефизических осцилляций у разрывов.
- Реконструкция коэффициентов зависит от значений только в собственной и граничных ячейках.

# Итоги построения

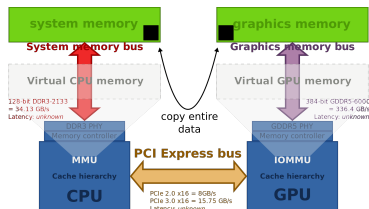
Данная схема обладает следующими важными свойствами:

- Локальность вычислительного алгоритма
- Повышенный порядок аппроксимации
- Отсутствие осцилляций на разрывах

Далее в данной работе применяется равномерная сетка, метод RKDG второго порядка по времени и пространству на кусочно-линейных элементах.

# Актуальность использования LRnLA алгоритмов

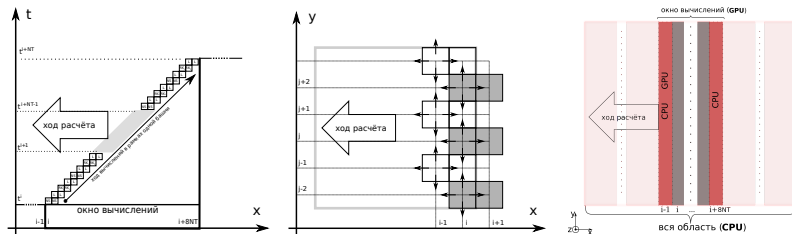
- Построение алгоритма реализации с экономичным использованием памяти ЭВМ
- Ускорение обмена между различными уровнями иерархии памяти
- Параллелизация алгоритма с учетом массивной параллельности GPU
- Возможность (теоретическая) решать как можно бОльшие по размеру задачи
- Ускорение счета — реальная возможность решать такие задачи



В коде используются *локально-рекурсивные нелокально-асинхронные алгоритмы*

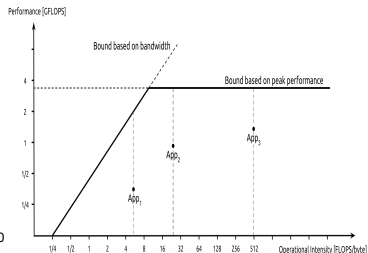
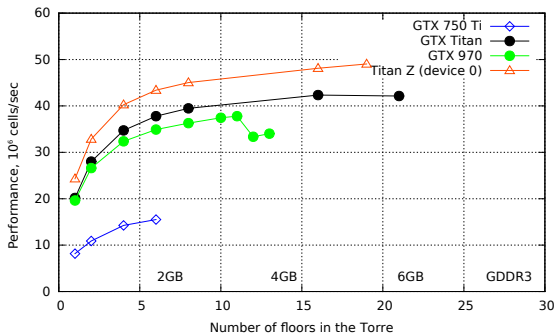
- Уход от традиционного алгоритма послойной синхронизации;
- Максимизация интенсивности вычислений данных на низком уровне (*локальная рекурсивность*)
- Выделение асинхронных процедур, не требующих синхронизации, на высоком уровне (*нелокальная асинхронность*)

# Обход вычислительной области с помощью алгоритма DiamondTorre



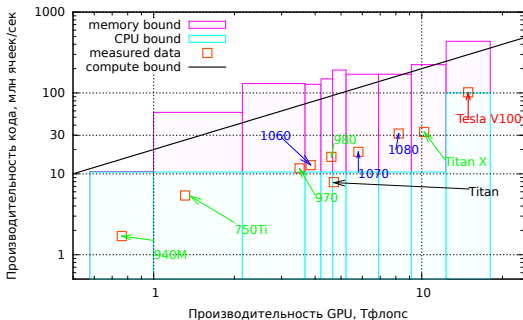
- Башни векторизованы по  $z$  (CUDA-threads)
- Каждую башню исполняет отдельный CUDA-block;
- Вычисления «в окне» оперативной памяти CPU.

# Параметрические свойства алгоритма



- Производительность растет с ростом  $NT$ ,
- рост башни ограничен памятью GPU,
- размер области вычислений — памятью компьютера

# Оптимизация и оценка производительности алгоритма



- Максимальная производительность, достигаемая на Tesla V100, составляет более  $10^8$  ячеек в секунду
- Размеры задачи не ограничены памятью видеокарты, так, при доступных 96GB CPU DDR возможен расчёт области размером  $\geq 10^9$  ячеек.

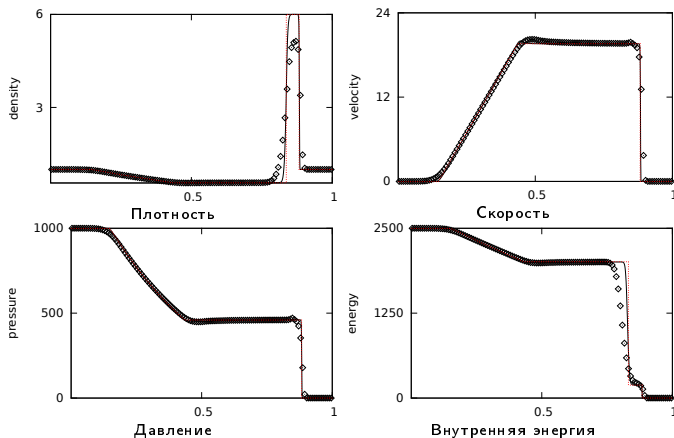
## Краткое описание программы

- Программа написана на языке CUDA C++ с использованием объектно-ориентированного стиля, но без излишнего усложнения кода для понимания и высокой производительности
- Используется библиотека *aiwlib* для работы с трехмерными результатами моделирования
- Для 3D визуализации используется пакет *im3D*

## Одномерные тесты.

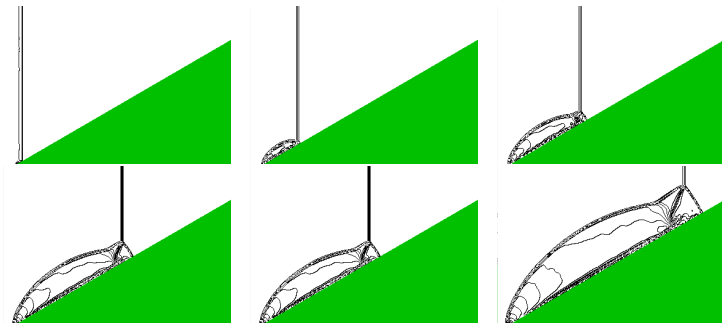
$\rho_L$	$u_L$	$p_L$	$\rho_R$	$u_R$	$p_R$
1.0	0.0	1000.0	1.0	0.0	0.01

Момент времени  $t = 0.012$ ,  $x_0 = 0.6$ .



## 2D тест о распространении ударной волны в канале клиновидной формы

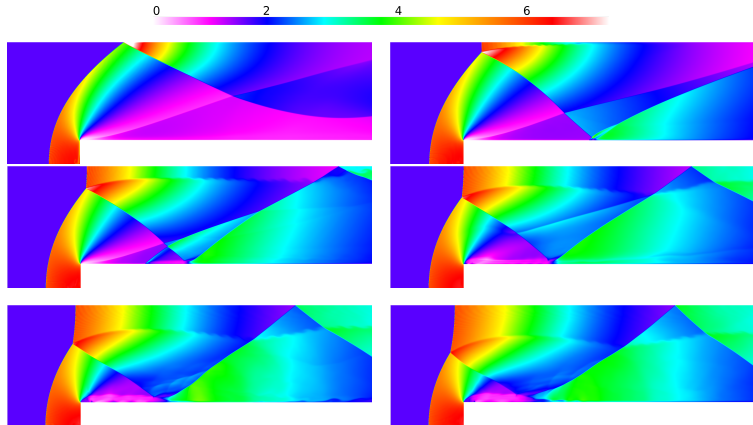
Область  $(x, y) \in [0, 3.2] \times [0, 2.2]$ , клин  $\varphi = 30^\circ$ . Граничные условия: на правой границе — условие свободного вытекания; на нижней и верхней и обтекаемой поверхности — условие непротекания.



Линии уровня плотности. Моменты времени  $t = 0.0$ ,  $t = 0.05$ ,  $\dots$ ,  $t = 0.25$ . Сетка  $320 \times 220$  ячеек.

## 2D тест о течении в канале со ступенькой

В начальном условии задано горизонтальное течение с  $M = 3$



Поле плотности,  $t = 1.0, t = 2.0 \dots t = 6.0$ . Сетка  $600 \times 200$  ячеек.

## 3D тесты

Задача Сода в сферических координатах

$\rho_{in}$	$u_{in}$	$p_{in}$	$\rho_{out}$	$u_{out}$	$p_{out}$
1.0	0.0	1	0.125	0.0	0.1

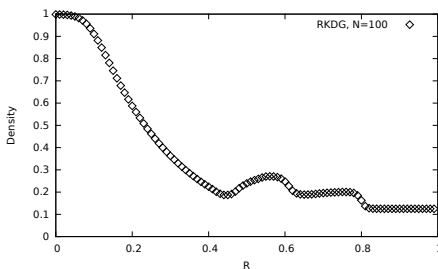
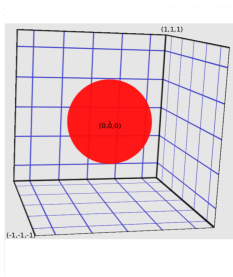
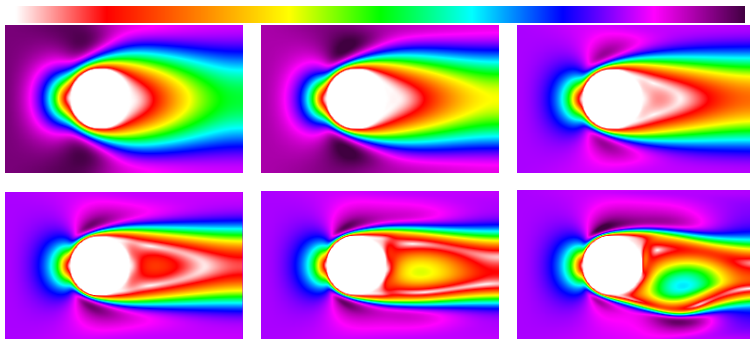
Область  $[-1, 1]^3$ , радиус шара  $R = 0.2$ .

Иллюстрация постановки и плотность в диагональном сечении в момент времени  $t = 0.25$

# 3D тесты

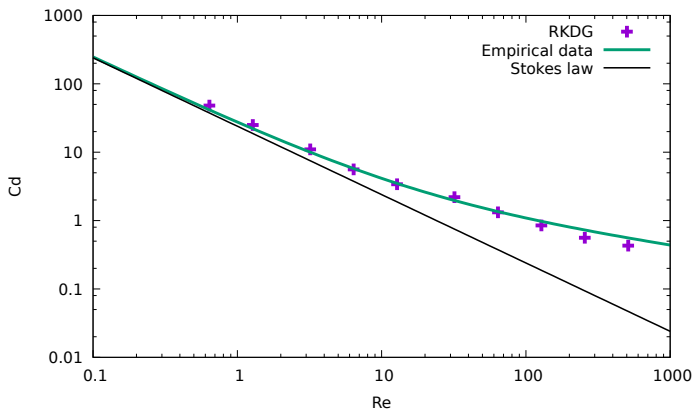
Обтекание шара,  $M \ll 1$

Рассмотрим обтекание шара диаметра  $D$  при различных  $Re = \frac{\rho u D}{\mu}$  для обтекания при низких  $M = u/c$ .



Поле скорости для  $Re = 16$ ,  $Re = 32 \dots Re = 512$ .

Сравнение коэффициента сопротивления  $C_d = \frac{F_d/S}{\rho u^2/2}$  от  $Re$ .

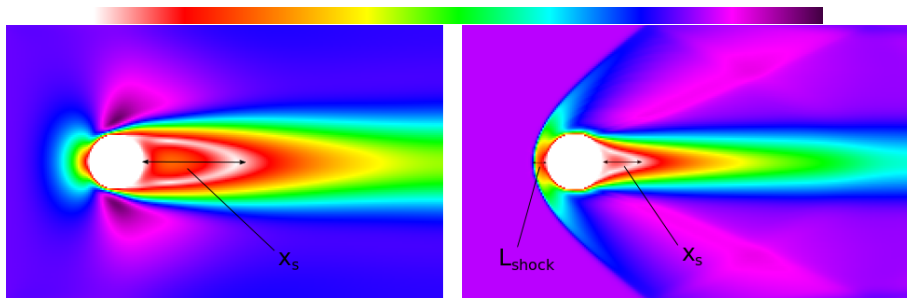


Результаты согласуются с известными данными.

# 3D тесты

Обтекание шара,  $M \approx 1$

Обтекание при околосвуковых и сверхзвуковых  $M$  для различных  $Re$ .

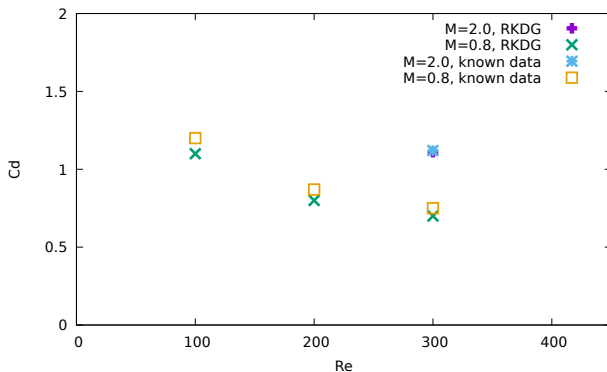


Поле скорости при обтекании  $M = 0.8$ ,  $Re = 100$  (слева),  
 $M = 2.0$ ,  $Re = 300$  (справа).

Количественное сравнение расстояния отхода головной ударной волны  $L_{shock}$  и длины зоны рециркуляции  $x_s$

(M, Re)	Источник	$L_{shock}/D$	$x_s/D$
(0.8, 100)	эта работа	–	1.8
(0.8, 100)	литературные данные	–	1.8
(2.0, 300)	эта работа	0.2	0.8
(2.0, 300)	литературные данные	0.2	0.75

Сравнение коэффициента сопротивления  $C_d$



# Пузырек с низкой плотностью

- Система единиц

$$x = R_0 \tilde{x}, \quad y = R_0 \tilde{y}, \quad z = R_0 \tilde{z};$$

$$u = a_0 \tilde{u}, \quad v = a_0 \tilde{v}, \quad w = a_0 \tilde{w};$$

$$t = \tilde{t} R_0 / a_0;$$

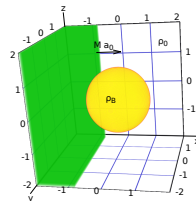
$$\rho = \rho_0 \tilde{\rho};$$

$$p = \rho_0 a_0^2 \tilde{p} = \tilde{p} p_0 / \gamma.$$

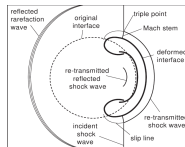
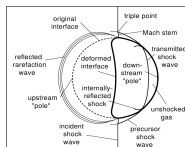
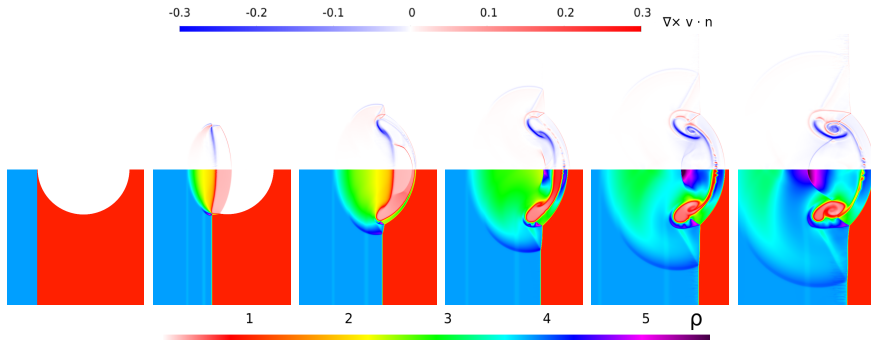
- $At = \frac{\rho_B - \rho_0}{\rho_B + \rho_0} = -0.757,$   
 $\rho_B = 0.138$

- Скорость фронта ударной волны  $M = 3$

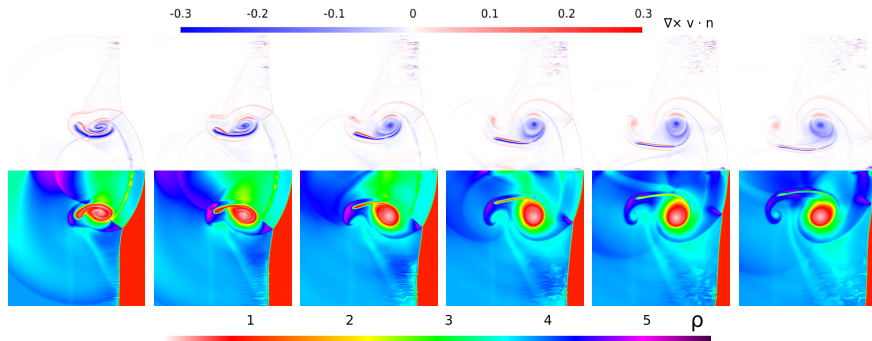
- Размер сетки  $512 \times 512 \times 1024$  ячеек



Фильм.

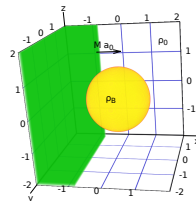


# Развитие процесса, квазистационарный режим

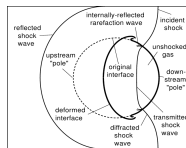
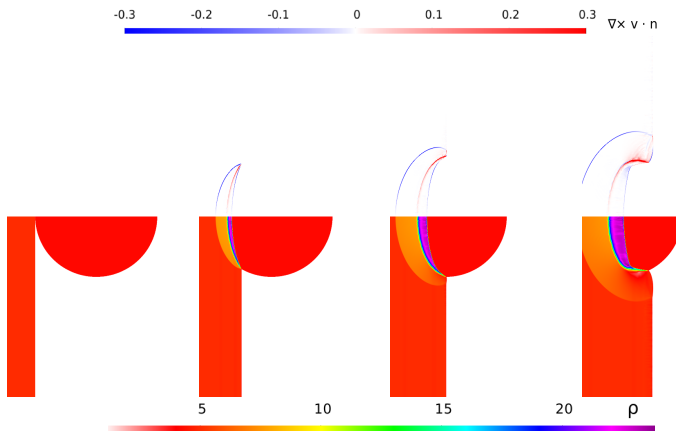


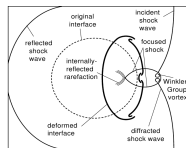
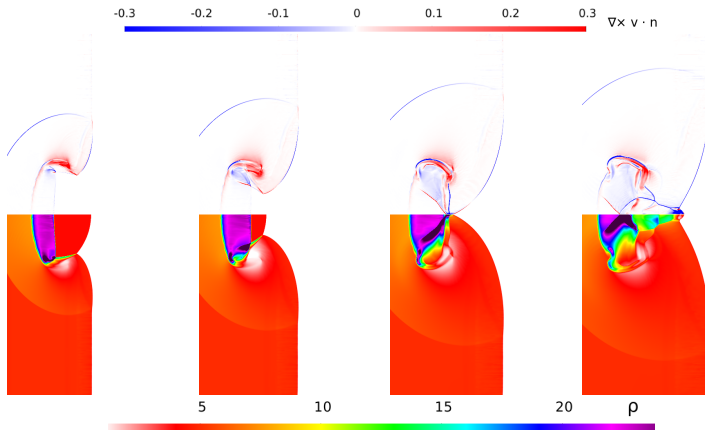
# Высокоплотный пузырек

- $At = 0.613$ ,  $\rho_B = 4.167$
- Скорость фронта ударной волны  $M = 5$
- Размер сетки  $448 \times 448 \times 896$  ячеек

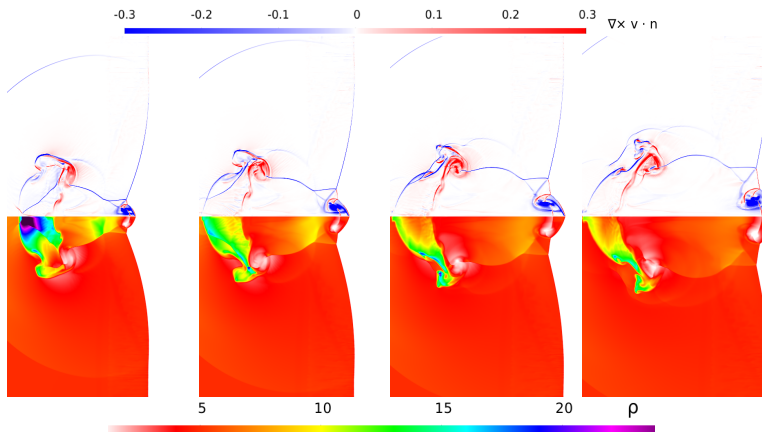


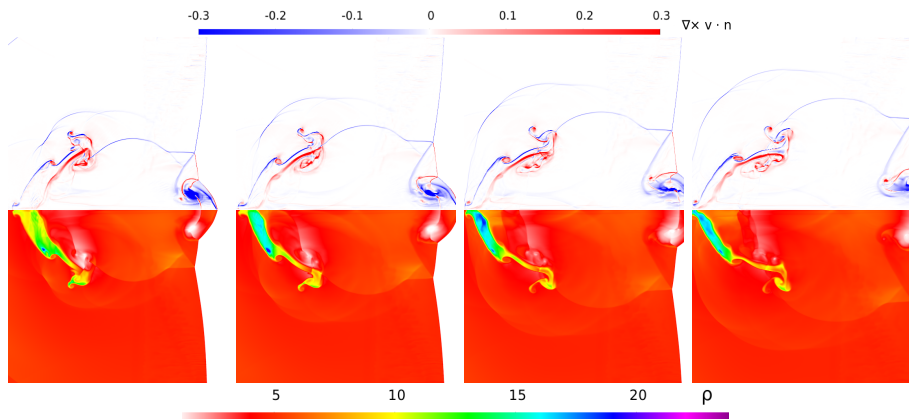
Фильм.

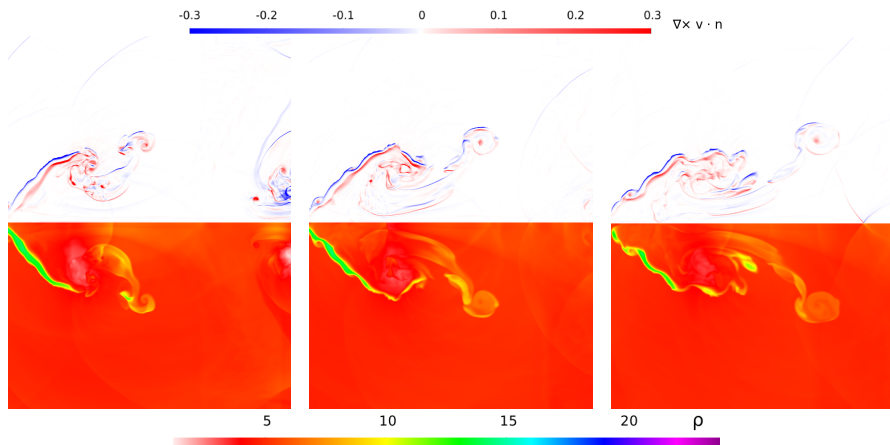


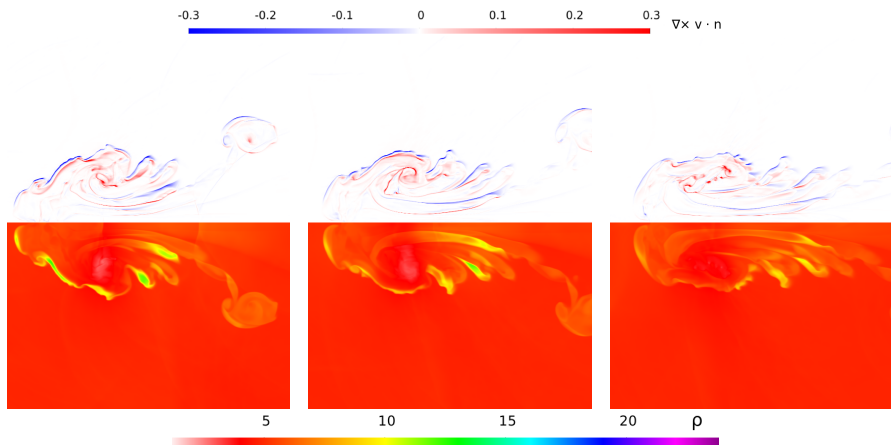


# Развитие процесса, турбулентное течение





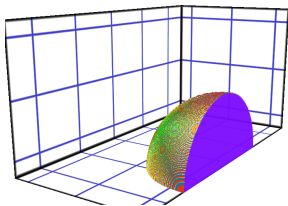




# Ввод начальной пертурбации

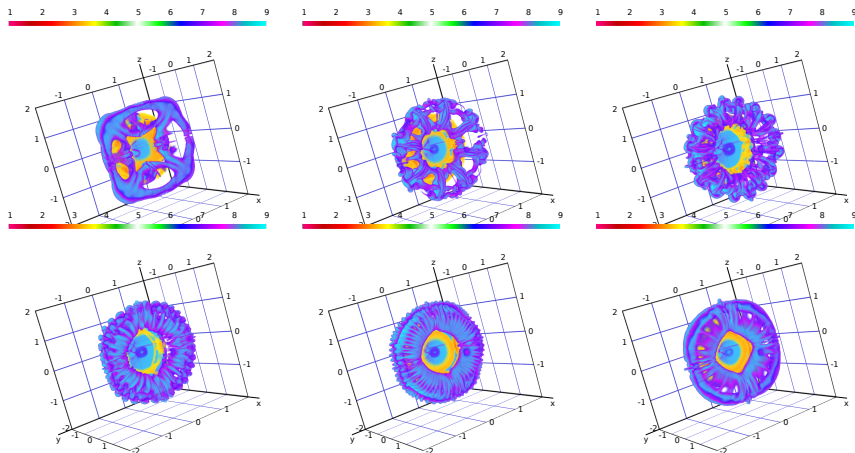
- Возмущение сферической поверхности пузырька задается формулой

$$Y_m^m(\varphi, \theta) = \alpha \sin(m\varphi) \sin^m(\theta), \quad \alpha \ll 1, \quad m = 3 \dots 128$$



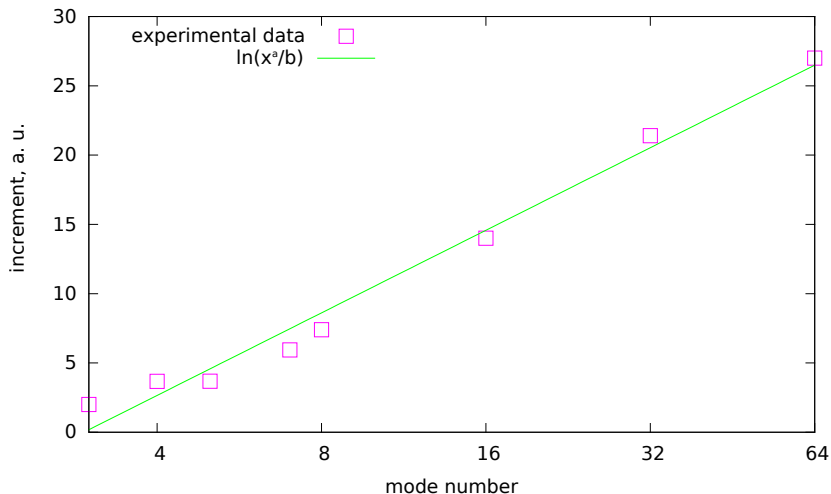
- $N_x \times N_y \times N_z = 512 \times 256 \times 256$  cells,
- Time is  $0 \leq t \leq 2.4$  ( $2 \cdot 10^4$  time steps)
- Время численного эксперимента около 3 часов на K100

# Форма пузырька после прохождения ударной волны ( $t = 1.8$ )



Начальная мода  $m = 4, 8, 16$  (верх),  $m = 32, 64, 128$  (низ)

# Высокие моды растут быстрее



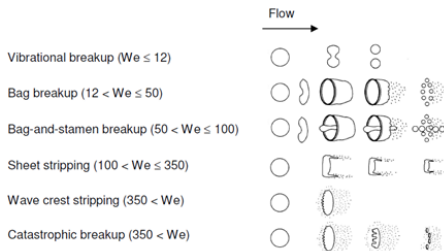
$$a = 8.60, \quad b = e^{9.26}$$

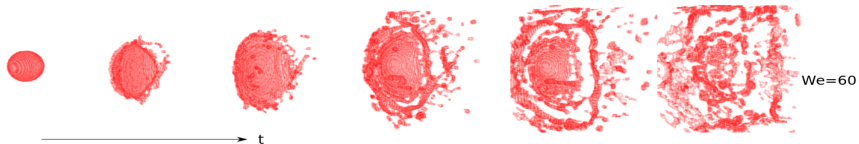
# Распад капли жидкости в потоке газа

- Обтекание капли дозвуковым потоком с  $M = 0.3$
- Деформация капли — динамика несжимаемой жидкости со свободной поверхностью (внешний модуль)
- Число Вебера

$$We = \frac{\rho_g u_g^2 D}{\sigma}$$

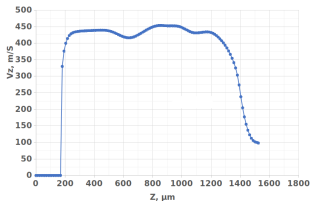
определяет возможность и тип распада капли





# Динамика окружающего газа при плавлении металлической пластинки пучком энергии

- Граничные условия Анисимова на поверхности испаряющегося металла
- Высокоскоростной  $M \approx 1$  поток газа вблизи центра пятна



Фильм.

Распределение  $z$  компоненты скорости над  
пучком энергии

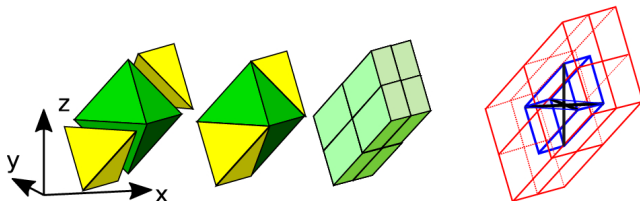
# Результаты исследования

- 1 Для численной схемы решения уравнений Эйлера методом RKDG для трехмерной декартовой сетки и ее обобщения для уравнений Навье-Стокса разработан LRnLA алгоритм GPU реализации DiamondTorre;
- 2 Разработан программный комплекс с использованием технологии CUDA на языке C++ с возможностью трехмерных результатов моделирования, имеющий производительность свыше  $10^8$  ячеек в секунду для задач до  $10^9$  ячеек на ПК
- 3 Программа валидирована на серии 1D, 2D и 3D тестовых постановок;

- 5 Получены результаты моделирования процесса взаимодействия пузырька с ударной волной в трехмерной постановке, численно изучена потеря осесимметричности пузырька в процессе взаимодействия, получены зависимости декремента роста неустойчивости от начальной пертурбации;
- 6 Средствами программного комплекса проведено моделирование задачи обтекания шара газом в рамках системы уравнений Навье–Стокса для до- около- и сверхзвуковой скорости обтекания при различных числах Рейнольдса;
- 7 Показано применение солвера для решения комплексных инженерно-исследовательских задач распада капель в потоке газа и динамики газа в камере плавления металла сфокусированным пучком энергии.

## Модернизация и повышение универсальности кода

- Новые модели (реагирование смесей, излучение и тд)
- Численные методы (RKDG более высокого порядка, WENO и др. схемы)
- Сетки
  - неструктурированные сетки
  - AMR
  - граничные условия для структурированных сеток (immersed b.c. и др.)
- Новые алгоритмы



Алгоритм DiamondCandy