

Обзор возможностей кода “Несветай” в 2020 году

В.А. Титарев

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

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
29.11.2020

- 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
- Корректное описание течений разреженных газов возможно на основе кинетических подходов [Коган, 1967, Черчиньяни, 1978, Берд, 1981]: уравнения Больцмана, аппроксимирующих кинетических уравнений, метода прямого статистического моделирования, и других. [В.М.Ковтуненко et al., 1977, Ivanov and Gimelshein, 1998].
- Таким образом, развитие численных методов моделирования течений разреженного газа является актуальной задачей математического моделирования.

- 1 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.
- 2 Что моделируется (классы течений)
 - течения одноатомного разреженного газа, включая гиперзвуковые
- 3 Модели
 - модели Крука (БГК) и Е.М. Шахова
- 4 Численные методы
 - Противопоточная ТВД схема на произвольных сетках;
 - Консервативный метод расчета интеграла столкновений
- 5 Интегрирование по времени:
 - явные схемы, неявная схема типа LU-SGS,
- 6 Сетки и сеточные технологии
 - многоблочные гексаэдральные сетки, неструктурированные гибридные сетки
- 7 Препроцессор
 - декомпозиция 6-мерной сетки для параллельных вычислений
- 8 Параллельные вычисления
 - двухуровневая модель OpenMP + MPI , до 61000 ядер
- 9 Языки программирования и API
 - Fortran 2003

Расчетные уравнения в безразмерной форме

- Используется кинетическое уравнение с приближенным интегралом столкновений Е.М. Шахова [Шахов, 1968]

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

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

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

- Макроскопические переменные определяются в виде интегралов по ξ :

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

- Степень разреженности газа определяется т.н. параметром разреженности δ , который обратно пропорционален числу Кнудсена:

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

Здесь λ_* длина пробега при некоторых заданных условиях * (например, в набегающем потоке).

- 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

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

- 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

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

- Трудности, 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
 - При расчете истечения в вакуум возникает проблема $1/n$ как в макропараметрах, так и в модельном интеграле столкновений.
- Авторская вариация метода дискретных скоростей, основные особенности которой перечислены ниже:
 - В зависимости от задачи 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
 - Для стационарных задач используется полностью неявный алгоритм продвижения по времени

Общая структура численного метода

- 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

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

- Интегрирование по ячейке V_i и стандартная аппроксимация интегралов от потоков и правой части приводит к полу-дискретной схеме, состоящей из большого числа линейных уравнений сохранения, связанных через нелинейный жесткий источник:

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

- Для аппроксимации оператора переноса используется весь арсенал современных методов
- Консервативность вычисления интеграла столкновений достигается с помощью итерационного метода расчета макропараметров.
- Для стационарных задач используется неявная matrix-free схема на основе LU-SGS подхода [Yoon and Jameson, 1988, Men'shov and Nakamura, 1995].

Аппроксимация оператора переноса

- Общая формула для вычисления f_{ji} на грани l ячейки i интерполяцией на границу изнутри ячейки

$$f_{ji} = f_i + f_{ji}^{\text{поправка}}$$

- Пространственный метод произвольного порядка:** f_{ji} выражаются с помощью метода наименьших квадратов через средние значения в ячейках шаблона реконструкции V_{m_i} в локальной системе координат [Dumbser et al., 2007, Titarev et al., 2010, Титарев, 2010, Tsoutsanis et al., 2010] по формуле

$$f_{ji}^{\text{поправка}} = \psi_i^{3d} \cdot \left(\sum_{m=0}^M \omega_{iml} f_{m_i} - f_i \right).$$

- Локально-одномерный метод для гексаэдров:** f_{ji} находятся одномерной интерполяцией в направлении нормали к грани:

$$f_{ji}^{\text{поправка}} = \psi_{ji}^{1d} (\mathbf{S}_L, \mathbf{S}_R) \Delta_l,$$

где Δ_l – расстояние от центра ячейки i до центра грани l ; \mathbf{S}_L и \mathbf{S}_R – левая и правая оценки наклона решения.

- В обоих случаях функция ψ – т.н. ограничитель наклонов

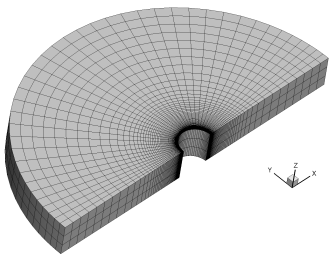
- 1 **Двухуровневая модель параллельных вычислений** OpenMP + MPI для современных multi- и many-core систем:
 - Верхний уровень – MPI-обмены между узлами/процессорами (как правило 1-2 MPI процесса на узел)
 - Нижний уровень – декомпозиция физической сетки каждого MPI-процесса на блоки и использование 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
- 2 Таким образом, на узле суперЭВМ может быть использована произвольная комбинация MPI процессов и OpenMP нитей.
- 3 Для “разумных” сеток скорость сходимости к стационарному решению не ухудшается.
- 4 На задачах высотной аэродинамики показана хорошая масштабируемость кода при использовании до 256 узлов систем Торнадо и Петастрим Питерского Политеха

с момент последнего выступления на CFD weekend:

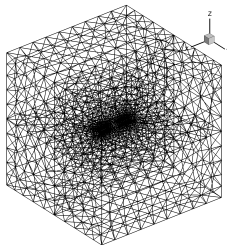
- Предложен алгоритм неоднородной аппроксимации кинетического уравнения, значительно улучшивший сходимость в задачах обтекания тел сложной пространственной формы (на плохих сетках)
- Проведено сравнение с решением точного уравнения Больцмана на задаче обтекания цилиндра с числом Маха набегающего потока $M_\infty = 10$
- Начаты расчеты задачи нестационарного испарения в вакуум; проведено сравнение с УБ и методом ПСМ.
- В рамках этих расчетов разработана утилита построения существенно неструктурированной скоростной сетки с выделением конусом интегрирования в скоростном пространстве, которая позволяет вычислять среднее распределение энергии частиц в заданном угле

Сравнение с решением точного уравнения Больцмана

- Рассматривается задача обтекания круглого цилиндра радиуса 15.24 см для числа Маха $M_\infty = 10$.
- Используется наиболее жесткий закон вязкости $\mu(T) = \mu_\infty \sqrt{T/T_\infty}$ и $\delta = 1.6$ ($Kn = 0.56$).
- Результаты взяты из A.A. Frolova, V.A. Titarev. Recent progress on supercomputer modelling of high-speed rarefied gas flows using kinetic equations // Supercomputing frontiers and innovations, 2018. V. 5, N. 3, pp. 117-121.



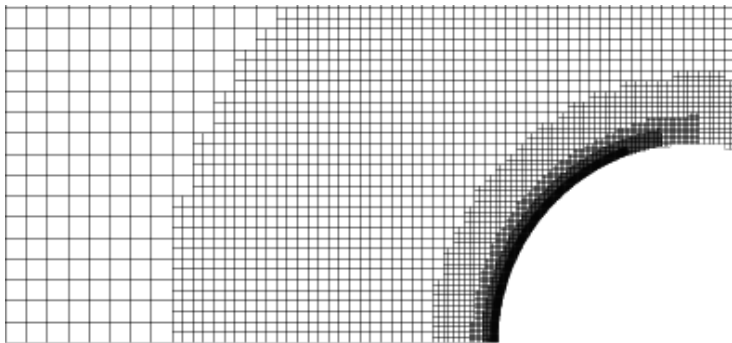
(a) Пространственная сетка



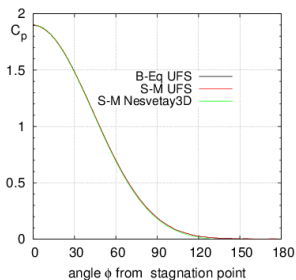
(б) Скоростная сетка

Детали построения решения уравнения Больцмана

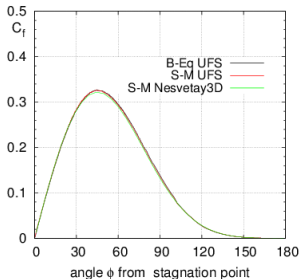
- УБ решается с помощью пакета Unified Flow Solver (UFS) [Kolobov et al., 2007], разработанного совместно CFD Research Corporation (USA) и ВЦ РАН.
- Используется декартовая сетка в физическом пространстве с адаптацией к поверхностью тела.
- Высота первой ячейки вблизи поверхности $h/r_{\text{cyl}} = 3.2 \times 10^{-3}$ гораздо меньше локального числа Кнудсена $\lambda_{\text{local}}/r_{\text{cyl}} = 10^{-2}$.



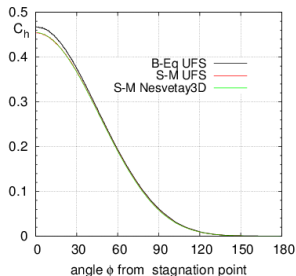
- Получено отличное согласие по всем коэффициентам.
- Таким образом, высокоточные решения модельных кинетических уравнений показывают хорошие перспективы.
- **Двухмерный** код решения УБ на 512 ядер требует 24 часов счета ($\approx 10^5$ ядро-часов).



(a) C_p



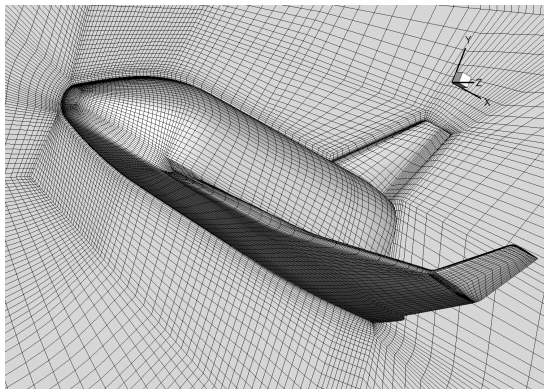
(б) C_f



(в) C_h

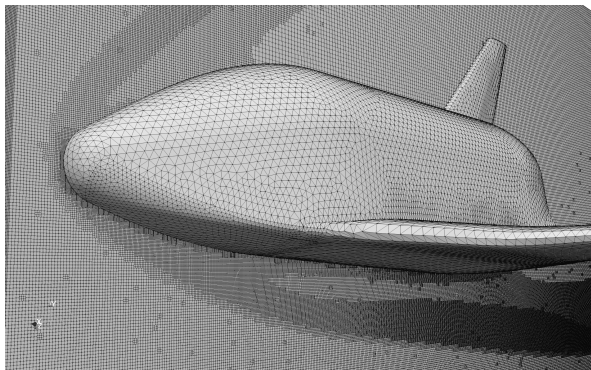
Сравнение с методом ПСМ на сложной задаче

- Воздушно-космический аппарат (ВКА) ЦАГИ является примером модельной геометрии возвращаемого аппарата
- Модель ВКА имеет сложную форму и состоит из фюзеляжа с затупленным носом, двух крыльев, вертикального киля и щитка, длина 10 метров.
- Параметры расчета – высота $H = 90$ км, воздух без учета внутренних степеней свободы, $M_\infty = 10$, угол атаки $\alpha = 25$.

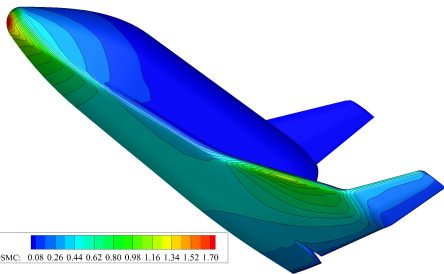


Детали расчета методом ПСМ

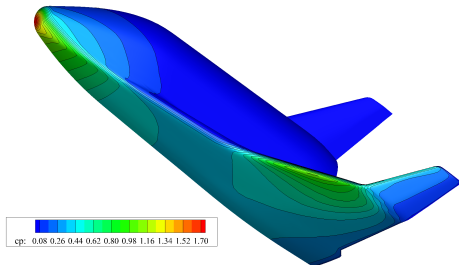
- Использовался код SMILE (Statistical Modeling in Low-Density Environment), разработанный в ИТПМ СО РАН [Ivanov et al., 2006, Ivanov et al., 2010]
- SMILE является одной из лучших в мире реализаций метода прямого статистического моделирования
- Расчеты проводились Е.А. Бондарем, П.В. Ващенко и А.А. Шевыриным (ИТПМ СО РАН)



Сравнение распределений коэффициента давления C_p



(а) код SMILE



(б) Несветай

Полный набор сравнений опубликован в работе V.A. Titarev, A.A. Frolova, V.A. Rykov, P.V. Vashchenkov, A.A. Shevyrin, Ye.A. Bondar. Comparison of the Shakhov kinetic equation and DSMC method as applied to space vehicle aerothermodynamics // J. Comput. & Applied Math., 2020, V 364, P. 1-12.

О расчете течений с $M_\infty > 20$

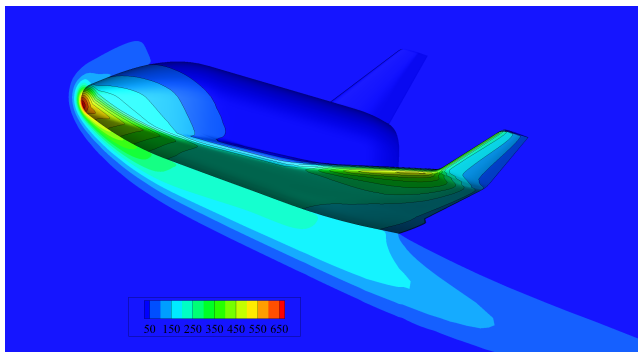
- Как правило, для расчета высокоскоростных задач внешнего обтекания предпочтительными являются структурированные расчетные сетки со сгущением к поверхности.
- Однако для тел сложной формы такие сетки могут содержать небольшое количество ячеек плохого качества, например, сильно скошенных ячеек.
- Опыт проведения расчетов показывает, что наиболее надежной из схем второго порядка является подход TVD3D на основе метода наименьших квадратов, однако его использование может приводить к потере формальной сходимости к стационарному решению.
- Метод TVD1D обеспечивает повышенную точность в наиболее нагруженных областях поверхности тела и обеспечивает формальную сходимость к стационарному решению, однако может приводить к нефизическим значениям макроскопических величин в плохих ячейках сетки.

Неоднородная схема для гиперзвуковых течений

- В настоящей работе предлагается использовать адаптивное переключение между методами TVD1D и TVD3D (неоднородная дискретизация).
- Основным является метод TVD1D. По мере продвижения решения к стационарному режиму программный код “Несветай” создает список проблемных ячеек по критерию падения значения температуры ниже некоторого заранее предписанного малого значения, и переключает реконструкцию в этих ячейках на метод TVD3D.
- В итоге численный метод формально сходится в интегральной норме без появления нефизических значений температуры.
- В целом процедура построения решения состоит из следующих шагов: (1) инициализация (2) решение 1-ым порядком по модели БГК (3) досчет по модели Шахова вторым порядком с помощью неоднородной схемы.
- Описанный алгоритм в сочетании с адаптивной скоростной сеткой позволяет проводить расчеты для произвольно больших чисел Маха набегающего потока.
- Подробное описание в В.А. Титарев. Применение кода Несветай к решению трехмерных задач высотной аэродинамики // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., спец выпуск по случаю 90-летия академика С.К. Годунова. 2020. Т. 60, N. 4. С. 752-764

Пример для $M_\infty = 25$

- Модель БГК, 1 порядок - 6000 ядро часов для уменьшения невязки в L_{max} и L_1 нормах на 7 порядков
- S-модель и 2 порядок точности потребовали 2000 ядро-часов для такого же снижения невязки; при этом температура в 33 ячейках (0.05% сетки) упала до нефизичных значений около закрылка и задней кромке крыла
- Окончательный досчет по неоднородной TVD1D/3D схеме потребовал 500 ядро-часов. Поле течения везде ОК, однако невязка в L_{max} не упала до машинного нуля, колеблясь около небольших значений в проблемных ячейках.

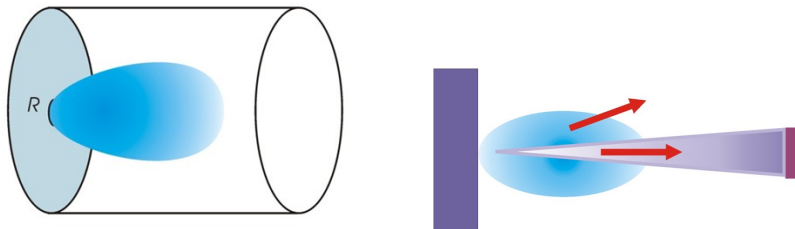


Лазерная абляция и истечение в вакуум

- Данная ветка развития кода мотивирована совместными исследованиями с Алексеем Морозовым из ИТ СО РАН и совместной заявкой РФФИ.
- Лазерная абляция твердых тел наносекундными импульсами умеренной интенсивности широко используется в современных технологиях для осаждения тонких пленок, синтеза наночастиц, элементного анализа, обработки поверхности.
- Анализ динамики разлета лазерного факела важен для контроля и управления газофазными процессами во время лазерной абляции. В частности, анализ разлета лазерного факела в вакууме важен для изучения динамики и механизмов процесса абляции
- Для низкой интенсивности лазерной энергии поглощением лазерного излучения в факеле и ионизацией газа можно пренебречь, поэтому газ может считаться нейтральным.
- Обычно для моделирования разлета нейтрального факела при импульсной лазерной абляции используется метод ПСМ, в том числе код Алексея. В последнее время мы пытаемся использовать для этих же целей кинетическое уравнение.

Общая схема течения

- Алексей меня поправит :-)
- Параметры задачи: радиус пятна R , число монослоев Θ , время импульса τ



- Предполагается, что после начального этапа интенсивного испарения при $t \leq \tau$ и формирования облака дальнейший процесс разлета близок к свободно-молекулярному.
- Основная расчетная характеристика – средняя энергия частиц $E_{\text{axial}}(t, \alpha, \Theta)$, пролетающих через детектор, стоящий на большом расстоянии от поверхности.
- Прямой расчет $E_{\text{axial}}(t, \alpha, \Theta)$ требует больших затрат машинного времени.

Оценка $E_{\text{axial}}(t, \alpha, \Theta)$ в расчетном методе

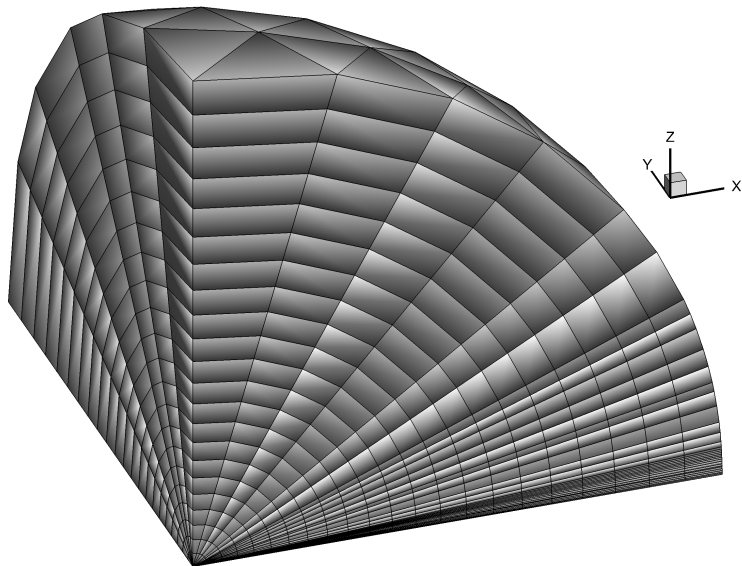
- Требуется интегрирование внутри конуса в скоростном пространстве с заданным (малым) углом раствора α :

$$E_{\text{axial}}(t, \alpha, \Theta) = \frac{E}{E_0},$$
$$E = \frac{\frac{1}{2} m \int_0^{\infty} \int_{\beta \leq \alpha} \xi^2 f d\xi dx}{\int_0^{\infty} \int_{\beta \leq \alpha} f d\xi dx}, \quad E_0 = 2kT_0, \quad \beta = \arcsin \frac{\sqrt{\xi_y^2 + \xi_z^2}}{|\xi|}.$$

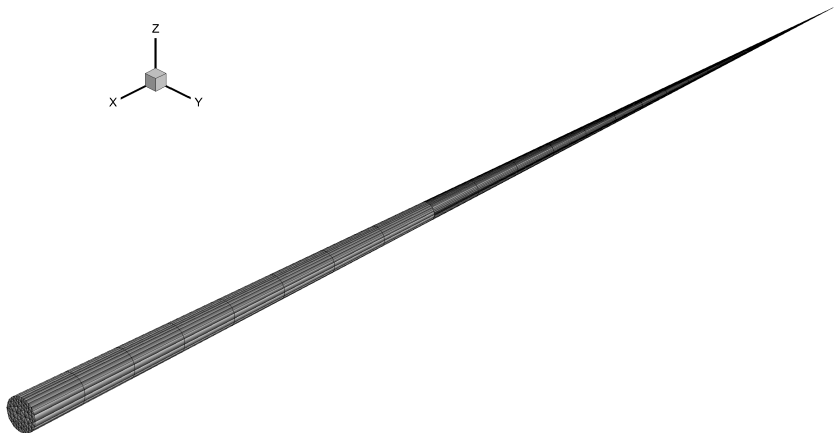
- На практике нужны очень малые значения угла α , например $\alpha = 0.1$
- Однако расчеты показывают, что в общем случае достаточно рассчитать $\alpha = 1$ так как значения средней энергии при малых углах очень близки.
- В методических целях мы считаем и большие углы $\alpha = 2, 3, 5, 10$ и тд.

- Принципиальное отличие этой задачи от других: так как интегрирование ведется только по части скоростного пространства, необходим точный расчет функции распределения.
- В задачах аэродинамики и микроканалах требуется аккуратное интегрирование по ВСЕМУ скоростному пространству, что значительно проще.
- Аналогия: сходимость в L_{max} (в данной задаче) или в L_2 (в других задачах).
- Помимо этого, вычислительная проблема: **необходимо разрешать на скоростной сетке конусы с малым углом раствора.**
- К счастью, “**Несветай**” может использовать произвольные сетки в скоростном пространстве.
- Для построения подходящей скоростной сетки был создан препроцессор, который в рамках одной сетки разрешал все заданные углы, как правило $\alpha = 0.5, 1, 2, 3, 5, 10$.

Детали скоростной сетки при $\xi_x > 0$



Детали скоростной сетки в угле с $\alpha = 1$ и $\xi_x > 0$

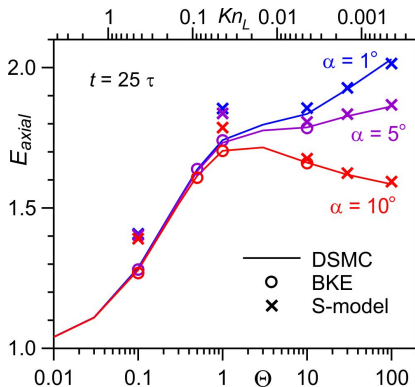


Сравнение для $t/\tau = 25$ в случае плоской задачи

- Титаревым и Фроловой было проведено большое количество расчетов в попытках сравниться с результатами А. Морозова
- После 4 месяцев расчетов было решено сделать шаг назад и попробовать посчитать плоскую (одномерную) задачу, соответствующую испарению со всех поверхности $x = 0$.
- При этом единственным параметром задачи является число монослоев Θ , при этом $\delta_{1d} = 181\Theta$.
- В результате было получено некоторое понимание применимости кинетических моделей и **КОДОВ**.

Сравнение для $t/\tau = 25$ в случае плоской задачи

Метод ПСМ (Морозов) vs точное уравнение Больцмана кодом UFS (Фролова) vs модель Шахова кодом “Несветай” (Титарев)



Точное уравнение Больцмана применимо везде (как и ожидалось), однако при наших ресурсах углы $\alpha < 5$ недоступны.

Ошибка кинетической модели изменяется от 7% в худшем случае до 1% в лучшем случае.

- Необходимо реализовать возможность считать кинетическое уравнение на подвижных сетках, в противном случае для расчетов испарения в вакуум метод ПСМ на подвижной сетке значительно быстрее.
- На **субъективный** взгляд автора доклада полученная точность счета является удовлетворительной с точки зрения приложений.
- Результаты опубликованы в работе А.А. Morozov, А.А. Frolova, V.A. Titarev. On different kinetic approaches for computing planar gas expansion under pulsed evaporation into vacuum // Phys. Fluids. 2020. V. 32, 112005
- Расчет истечения в затопленное пространство - отдельный случай.
- В настоящее время мы возобновили расчеты полной задачи с помощью кода "**Несветай**".

- Развивать базу физических моделей в коде “**Несветай**”, добавив в нее смеси газов и модели многоатомных газов с колебательными степенями свободы.
- Провести сравнение со SMILE на задачах внешней аэродинамики при обтекании потоком воздуха
- Добавить численный метод решения кинетического уравнения на подвижных сетках
- Попробовать добавить векторизацию кода.
- Схемы типа IMEX для сквозного расчета задач с очень малыми числами Кнудсена.

