

Комплекс программ SMILE-GPU

А.В. Кашковский



Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск

630090, Новосибирск, e-mail: sasa@itam.nsc.ru

18-19 декабря 2021

Общая информация I

- **SMILE-GPU** Статистическое моделирование в средах с низкой плотностью на графических процессорных устройствах (ГПУ).
- **Организация** Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск
- **Авторы** А.В. Кашковский, Е.А. Бондарь, А.А. Шершнёв, А.А. Шевырин, П.В. Ващенко, Г.А. Жукова
- **Назначение кода** решение больших прикладных задач
- **Моделируемые классы течений** Разреженные, высокоэнталийные 2D/3D/осесим. течения,
- **Модели**
 - кинетический подход,
 - метод прямого статистического моделирования,
 - температурная неравновесность в потоке,
 - химические реакции диссоциации и обмена,
 - ионизация,

Общая информация II

- каталитичность поверхности,
- равновесная температура поверхности.
- **Сетка**
 - **Расчетная область:** прямоугольная, равномерная, двухуровневая. Второй уровень адаптируется к структуре течения в процессе вычислений.
 - **Поверхность модели:** внутренний формат. Конвертер из STL
- **Препроцессор и постпроцессор** утилиты для конвертирования файлов и обработки результатов, программы визуализации
- **Формат выходных данных** внутренний, tecplot, paraview
- **Целевые ОС** Linux/Unix
- **Параллельность** CUDA (ГПУ), OpenMP, MPI
- **Масштабируемость** Тестировался до 120 ГПУ, отличная.
- **Тестирование кода** периодическое
- **Степень отчуждаемости** высокая

Общая информация III

- **Документация** пользователя (оператора), включающая инструкцию по установке, описание алгоритмов, примеры задач.
- **Средства разработки** Subversion(svn), текущая ревизия 30
- **Язык программирования** C/C++, CUDA
- **Размер исходного текста** 32 тыс. строк, 900 Кб

Свидетельство о регистрации

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2018611564

«Статистическое моделирование в средах с низкой плотностью на графических процессорных устройствах (SMILE-GPU)»

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук (ИТПМ СО РАН) (RU)*

Авторы: *см. на обороте*



Заявка № 2017662527

Дата поступления 04 декабря 2017 г.

Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ 02 февраля 2018 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

 Г.П. Вишнева

Метод ПСМ

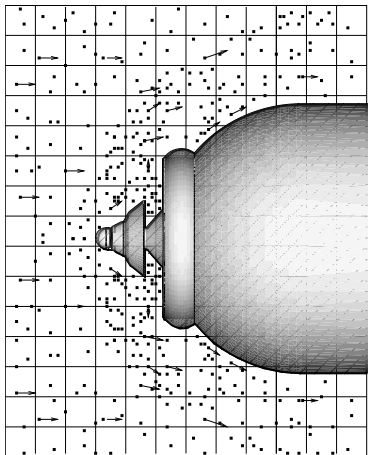
ПСМ — это стохастический численный метод решения нелинейного кинетического уравнения Больцмана.

ПСМ — метод компьютерного моделирования движения большого количества частиц, представляющих газовое течение.

Два основных этапа

- 1) Перенос всех частиц на заданный шаг по времени
- 2) Столкновения частиц между собой.

Сталкиваться могут только частицы, находящиеся в одной ячейке.



- SMILE (~1989-2011)
 - Реализация метода PCM (DSMC) для исследовательских и прикладных задач
 - Модульная структура, база данных, графический интерфейс.
 - Множество решенных задач, мировая известность
- SMILE++ (~2000-н.в.)
 - Цель: упрощение внедрения и тестирования новых алгоритмов, моделей и методов
 - Средства: объектно-ориентированная реализация на C/C++
 - Применение: в основном фундаментальные и научно-исследовательские задачи.
- SMILE-GPU (06.12.2011-н.в.)
 - Цель: добиться максимальной производительности для решения больших прикладных задач
 - Средства: ГПУ, оптимизация моделей и алгоритмов
 - Применение: большие промышленные (прикладные) задачи

Общая схема вычислений

- Архитектура: Кластер с несколькими ГПУ на каждом узле
- Между ГПУ – Domain decomposition
- На одном ГПУ – Data parallelism

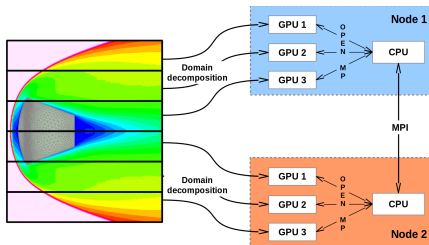
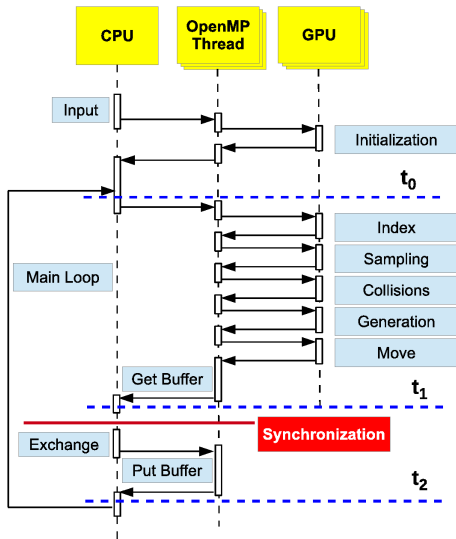


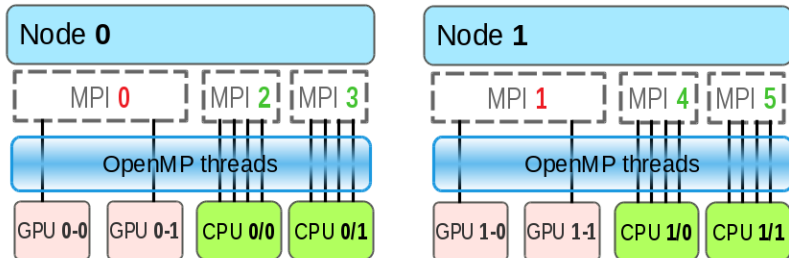
Схема параллелизации



Вычисления на ГПУ

Гибридность

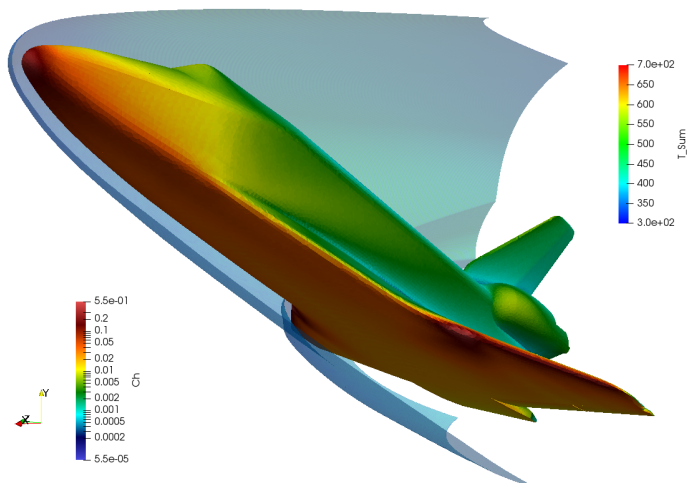
- Хочется объединить все доступные вычислительные устройства для решения большой задачи.
- **Основная идея:** Wrapper CUDA kernel → OpenMP потоки
- **Как:** запуск разноплатформенных кодов с обменом по MPI.



```
mpirun --bind-to none --map-by node --hostfile myhosts \  
-np 2 /home/sasa/Progs/DSMC_H/Bin/dsmc_h_cu : \  
-np 4 /home/sasa/Progs/DSMC_H/Bin/dsmc_h_gpp
```

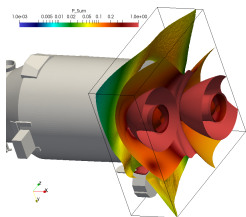
Решаемые задачи: Внешняя аэродинамика

Space Shuttle $L_{ref}=23.79$, $H=90$ км., $Kn=0.0007$, $1.96 \cdot 10^9$ частиц,
 $282 \cdot 10^6$ ячеек, 30 тыс. шагов, 12 V100, 12 часов.

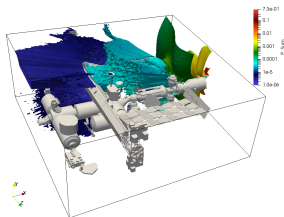


Решаемые задачи: Струйные течения

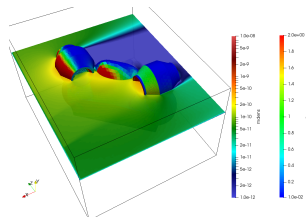
- При работе ДУ на орбите 1-2% потока разворачивается в обратное направление.
- Стало актуальным исследование воздействие обратных потоков на аппаратуру.
- Течение от сплошнородного до свободномолекулярного
- Многозонный подход: результаты 1-й зоны → граничные условия 2-й зоны



Зона 1



Зона 2

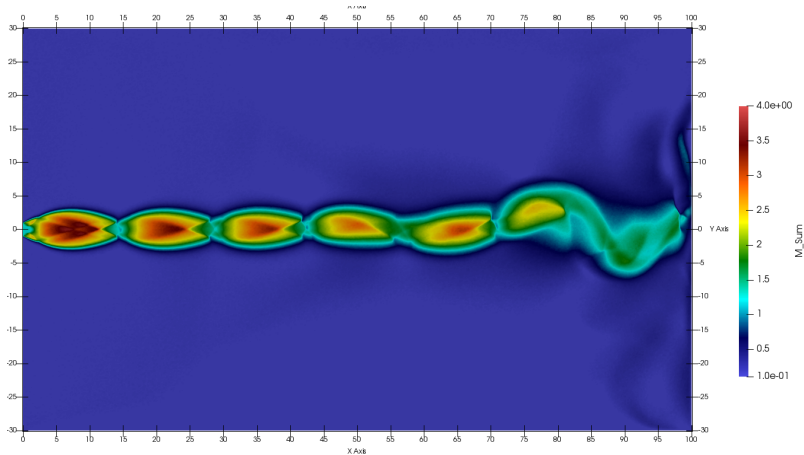


Зона 3

«МКС». Моделирование воздействия ДУ на датчик давления.

Решаемые задачи: Нестационарные течения

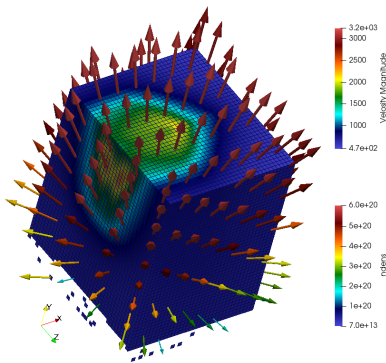
- Исследование неустойчивости течений методом ПСМ
- Нужно много частиц для хорошей статистики



Разрушение 2D недорасширенной струи $n=4$, $M=1.2$

Что сделано в 2021 г.

- Основной упор: моделирование струйных течений
- Осесимметричная версия
- Оптимизация декомпозиции области
- Оптимизация балансировки загрузки
- Второй уровень для макропараметров
- Утилиты для построения стартовых элементов струи
- Утилита контроля стартовых элементов струи
- Обновление документации



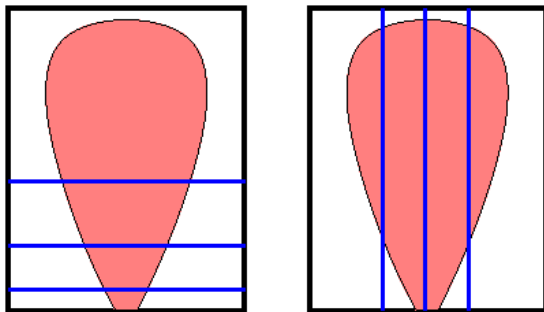
Форма стартовой поверхности, плотность и вектора скорости

Проблемы струйных течений

- Если несколько струй или близко поверхность КА, трудно использовать многозонный подход
- Приходится считать от среза сопла, или даже с сечения внутри сопла.
- В сопле большие давления → нужны большие ресурсы
- В свободной струе давление быстро падает → сложности балансировки загрузки

Оптимизация декомпозиции области

- При разбивке поперек потока, нижней подобласти много столкновений, она много меньше верхней, где практически нет столкновений
- В последней подобласти нехватает памяти для частиц.
- Лучше дробить вдоль течения.

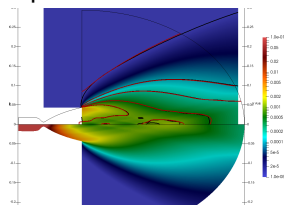


Струи в связке с омплексом HyCFS-R.

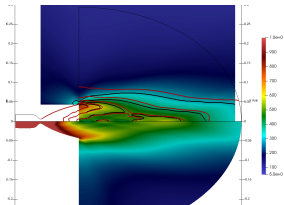
Поиск моделей реального газа, которые дают одинаковые поля течения

HyCFS-R - 5-ти компонентная смесь, переменная γ

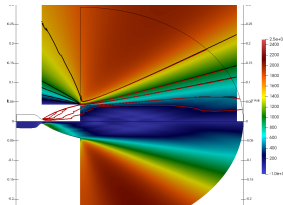
SMILE-GPU - 5-ти компонентная смесь, температурная
неравновесность



Плотность



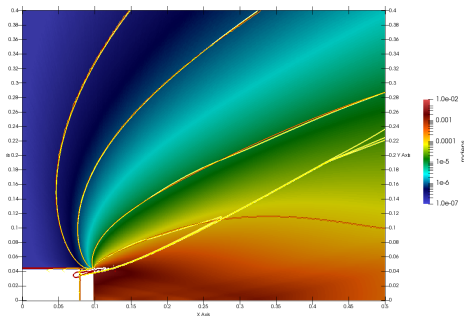
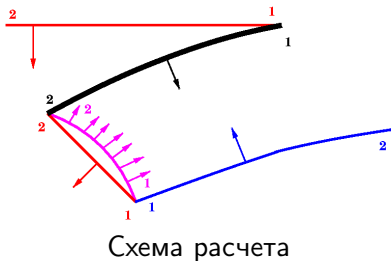
Температура



Осевая скорость

Поиск технологии расчета обратных течений

- Обратные течения формируются из погранслоя в сопле
- Важен разворот на кромке, фактически в вакуум (Н-С не работает)
- Для мощных РД невозможно стартовать внутри сопла
- **Идея:** стартовать только в погранслое, отгородившись от ядра течения зеркальной стенкой по линии тока



Поле плотности, 3 DSMC расчета: от среза, внутри, с линией тока

- Графический пользовательский интерфейс (Salome)
- Радиальные веса в осесимметричной версии
- Рестарт с сохраненных данных
- Мероприятия по экономии памяти
- Оптимизация алгоритмов для OpenMP
- Конфигурация для расчетов на разных кластерах одновременно.

Спасибо за внимание!