

Развитие гибридного расчетного кода NuCFS-R в 2021 году

А.А. Шершнёв



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



Лаборатория вычислительной аэродинамики

Мотивация

- Традиционные для лаборатории задачи высотной аэродинамики
- Выше 80-85 км — метод ПСМ (пакеты семейства SMILE)
- Ниже необходим континуальный подход на основе полных уравнений Навье-Стокса
- CFD код общего назначения для нужд лаборатории и Института

Общая информация I

HyCFS-R (hybrid compressible flow solver + “reactive/real gas effects/whatever”)

Назначение кода: код общего назначения (от прикладных задач высотной аэротермодинамики до «посчитать что-нибудь HC кодом»):

- Внешнее обтекание (КА)
- Течение в соплах и струях двигателей управления КА
- Детонация
- DNS ламинарно-турбулентного перехода

Моделируемые классы течений: сжимаемые течения, в т.ч. с химической и термической неравновесностью

Модели:

- совершенный газ (ламинарный / турбулентный режимы)
- однетемпературная модель с неравновесной химией
- многотемпературная модель с неравновесной химией
- химически реагирующая газовзвесь (твердые частицы в газе) на основе эйлера подхода

Общая информация II

Сетка: Структурированная одно- и многоблочная, в общих криволинейных координатах

Препроцессор и постпроцессор: импорт файлов CHEMKIN, утилиты для вычисления АДХ, извлечения 1D распределений вдоль линии

Формат выходных данных: ряд собственных форматов, экспорт в Tecplot (ASCII/binary) и legacy VTK (.vts)

Целевые ОС: Linux, теоретически все Unix-like

Параллельность: многоуровневая CUDA/OpenMP/MPI

Тестирование: не автоматизировано, общего протокола тоже нет

Степень отчуждаемости: теоретически высокая, но есть вопросы с препроцессингом (подготовка сетки)

Документация: уравнения для матмоделей, описание численных схем, форматы основных данных. Комментарии к декларациям классов и функций для автоматической генерации документации через **Doxygen**

Общая информация III

Язык программирования: C++, CUDA

Средства разработки: без IDE, разработка ведется под GNU/Linux

компиляторы: nvcc, GCC/g++, LLVM/clang++

технологии/библиотеки: OpenMP, openMPI, zlib

сборка: GNU/make + makefiles (Cmake? meson?)

контроль версий: лабораторный svn репозиторий (git?)

отладка/профилирование: gdb/cgdb, valgrind/kcachegrind

Текущий объем кода \approx 48 тысяч строк

- Конвективные члены: **MUSCL TVD1-3**, **minmod** и римановские солверы: **HLLC** / **HLLC** / **AUSM-Van Leer** / **Roe**. Либо **WENO5 (Jiang-Shu)** для калорически совершенного газа.
- Интегрирование по времени: явные схемы **RKTVD1-3** / **RKG4**, полунеявная **ASIRK2c**, неявная параллельная **DPLUR**
- Для аппроксимации диффузионных членов на структурированной сетке используются центральные разности **2** порядка

Новое в 2021 году

- ◆ Новые пользователи, разработчики и другие причастные
- ◆ Добавлена поддержка многоблочных структурированных сеток
- ◆ Реализовано полностью неявное интегрирование по времени для вязкого идеального газа
- ◆ Реализован RANS подход на основе модели Спаларта-Аллмареса
- ◆ Завершили верификацию многотемпературной модели для 5-компонентной воздушной смеси
- ◆ Много мелких изменений: новые граничные условия, HLLC солвер, постепенное улучшение качества кода: вычищение дублирующихся кусков, макросов в пользу шаблонов, сокращение количества кода за счет STL и т.д.

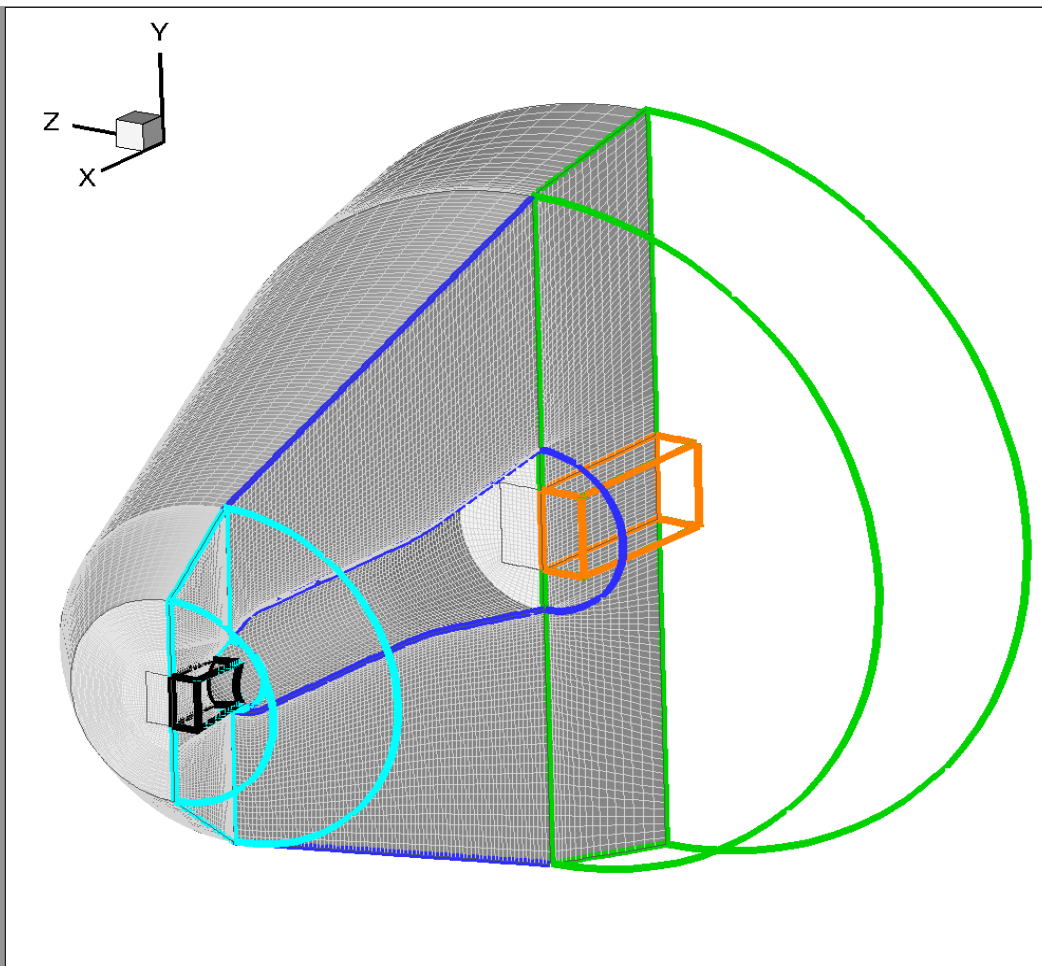
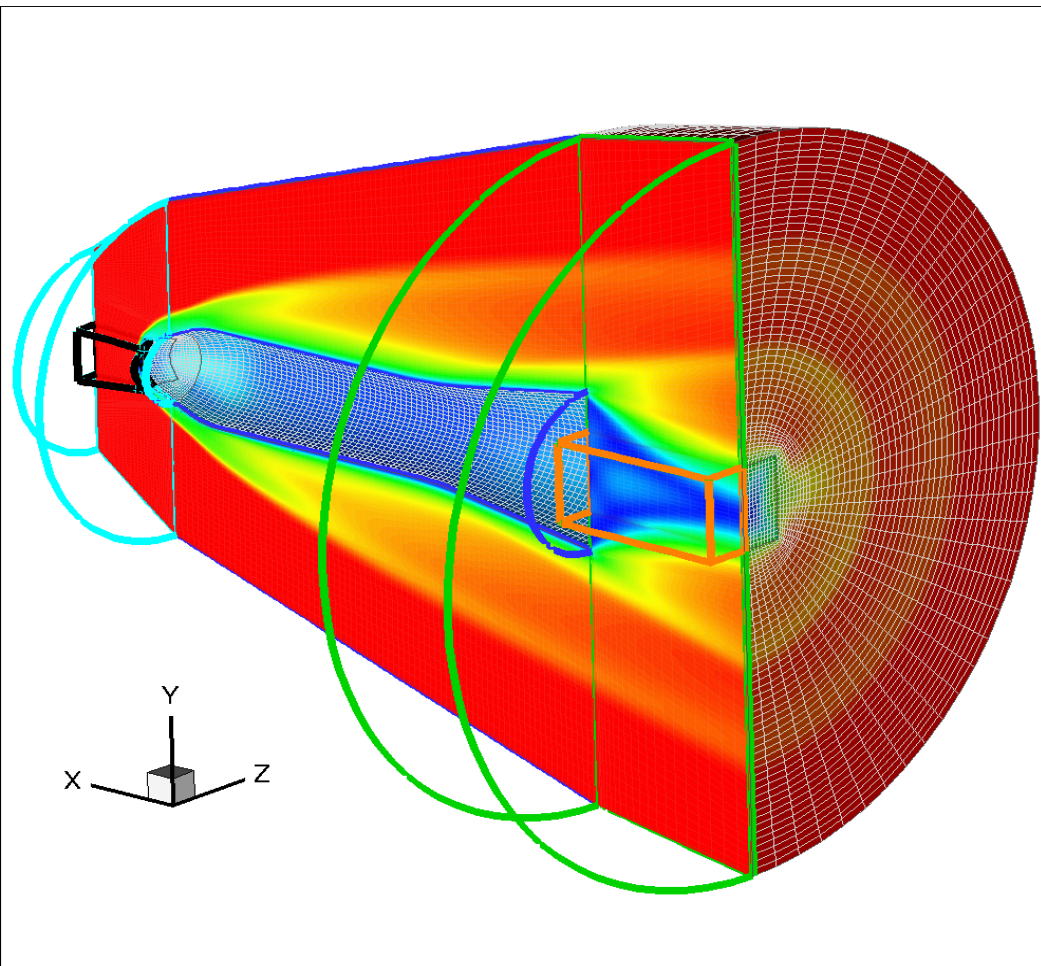
Основные разработчики кода

- ◆ А.Н. Кудрявцев — численные схемы и методы
- ◆ А.В. Кашковский — общая архитектура программы, многоплатформенность, графический интерфейс
- ◆ С.П. Борисов — однотемпературная химия, модели газовой детонации, реализация неявных схем
- ◆ Г.В. Шоев — физико-химические модели, в т.ч. двухтемпературная химия, модели турбулентности
- ◆ Д.П. Полевщиков — реализация многоблочности
- ◆ А.А. Шершнёв — кодирование, интеграция частей в единую систему

Со-разработчики / консультанты / пользователи / тестеры

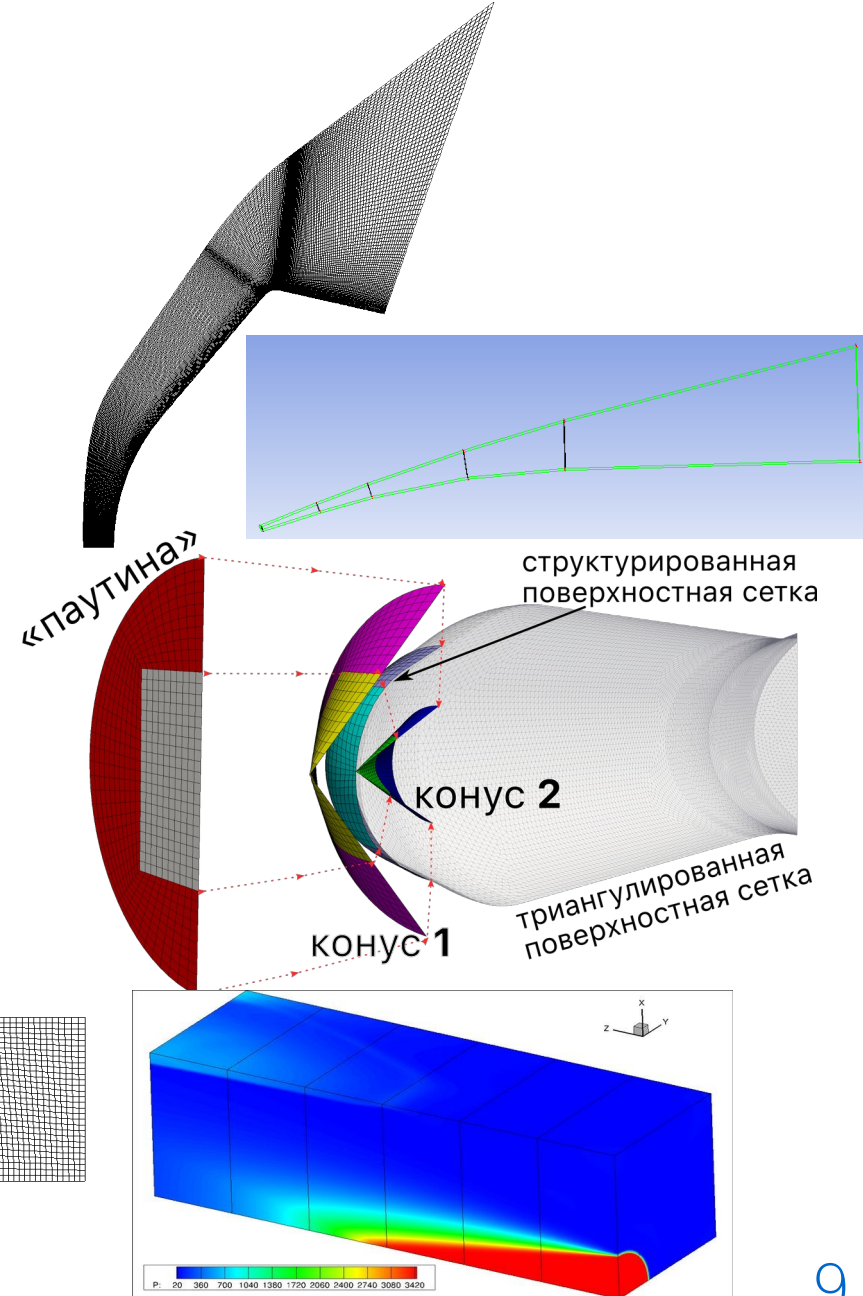
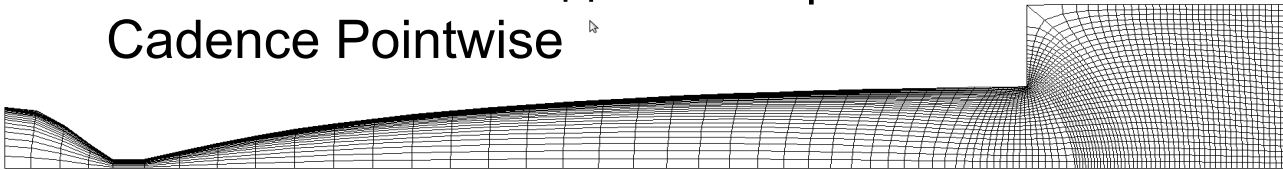
- | | |
|------------------|--------------------|
| ◆ П.В. Ващенко | ◆ Ю.В. Кратова |
| ◆ Т.Ю. Шкредов | ◆ Д.В. Хотяновский |
| ◆ А.В. Зайцев | ◆ А.И. Кутепова |
| ◆ Т.А. Полянский | |

Многоблочная структурированная расчетная сетка



Построение расчетных сеток

- ◆ Самописные утилиты для простых конфигураций: клин, цилиндр/сфера, осесимметричные тела с 2D сеткой
- ◆ Конвертер на Фортране для экспорта из ICEM CFD в формате Flowlogic
- ◆ Утилита для автоматического построения 3D многоблочной структурированной сетки для конфигурации типа самолет/ракета, заданной триангулированной поверхностью
- ◆ Утилита на Питон для экспорта из Cadence Pointwise



Неявное интегрирование

- ◆ Используется DPLUR (Data-Parallel Lower-Upper Relaxation) — неявная схема, основанная на модифицированном методе Гаусса–Зайделя (*Wright, Candler and Prampolini, 1996*)
- ◆ DPLUR заменяет диагональные развертки Гаусса-Зайделя серией точечных шагов релаксации. Все зависимости данных удаляются, а расчет каждого шага релаксации становится идеально параллельным.
- ◆ В настоящий момент используется для задач внешнего обтекания совместно с приближением тонкого сдвигового слоя, когда переменные по координате вдоль тела существенно меньше чем по оставшимся координатам
- ◆ Для ламинарных течений эффективность весьма высокая, CFL вплоть до 1000
- ◆ Для турбулентных течений обычно CFL 1.2÷4. Нужно разбираться как дальше ускорять.

Реализация модели Спаларта-Аллмареса

- ◆ Реализована в основной формулировке из статьи Allmaras, Johnson, Spalart (1996), «SA-standard» в формулировке NASA
- ◆ Есть опции для отключения отдельных членов для согласованности с Ansys:

$$S_{\tilde{\nu}} = G_{\tilde{\nu}} - D_{\tilde{\nu}} + \frac{C_{b2}}{\sigma_{\tilde{\nu}}} \rho \left[\left(\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial z} \right)^2 \right] - \frac{1}{\sigma} (\nu + \tilde{\nu}) \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial y} + \frac{\partial \rho}{\partial z} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial z} \right)$$

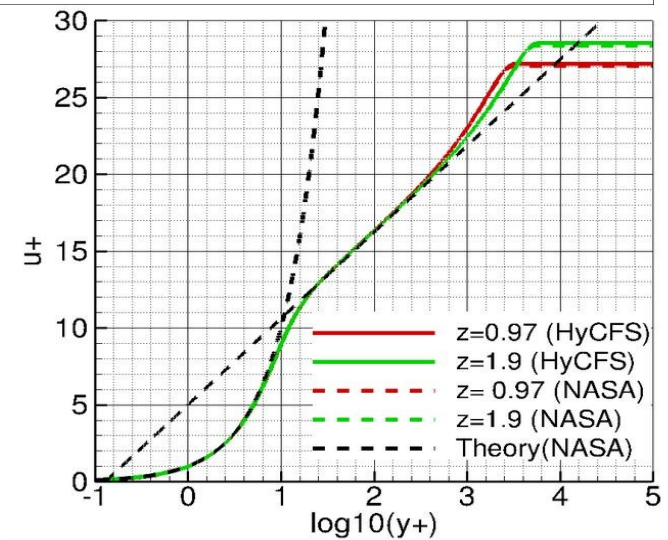
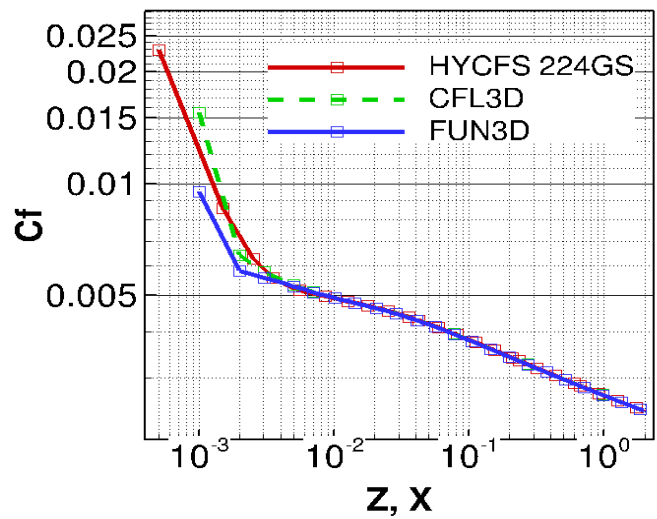
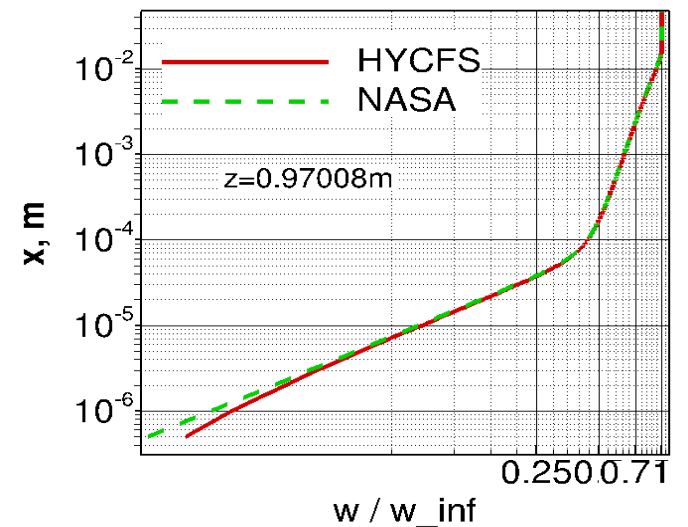
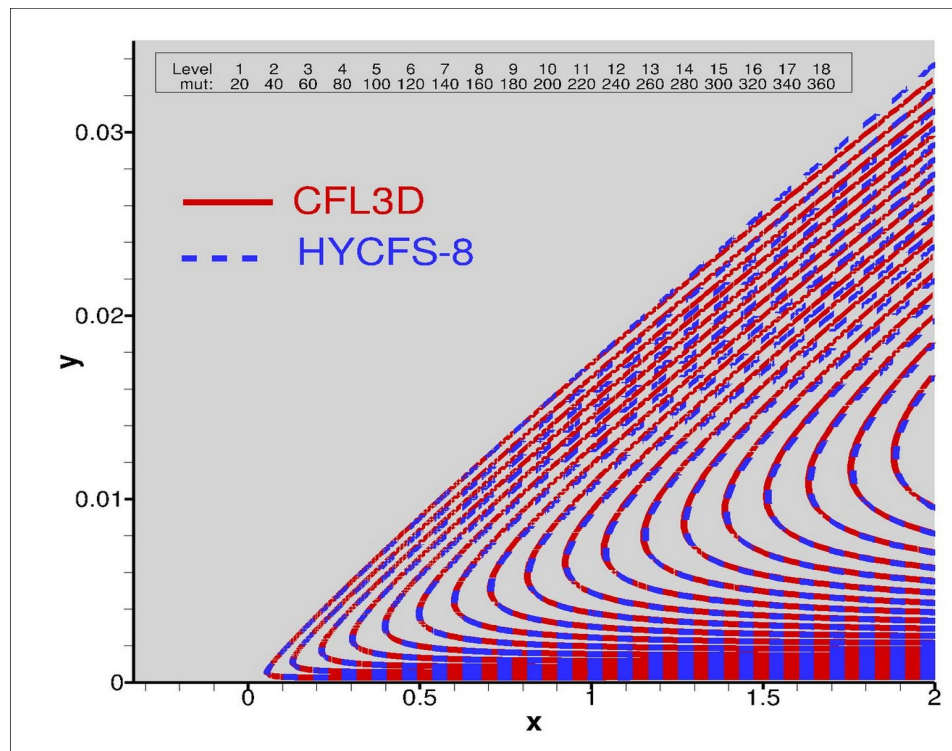
- ◆ Добавлена возможность «отщепить» уравнение: Переменная ν интегрируется отдельно в конце каждого временного слоя и своей схемой.
- ◆ Расстояние до стенки считается просто перебором в лоб (параллельно, через OpenMP). Либо импорт из Ansys.

Дозвуковое турбулентное течение около плоской пластины

Стандартный тест NASA: дозвуковое обтекание плоской пластины, $M = 0.2$, турбулентный режим

Расчетные сетки с сайта NASA

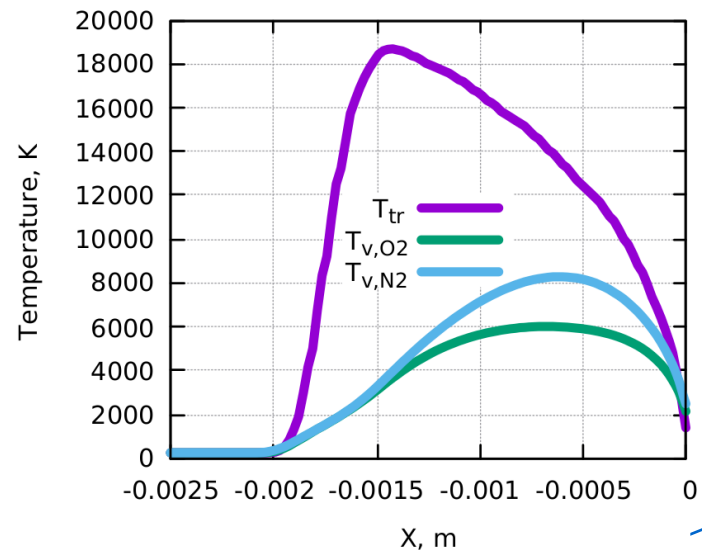
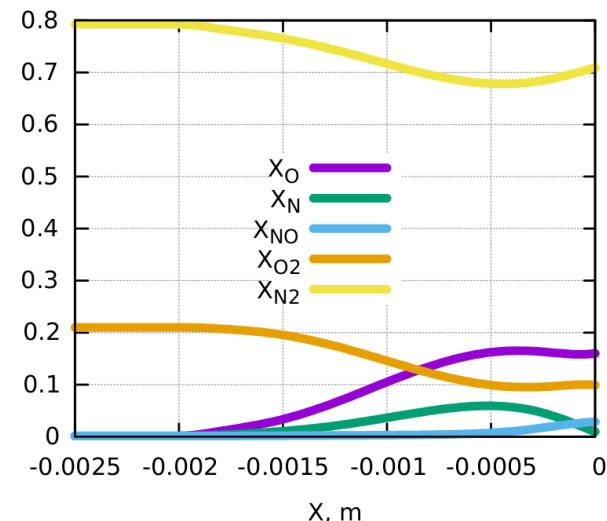
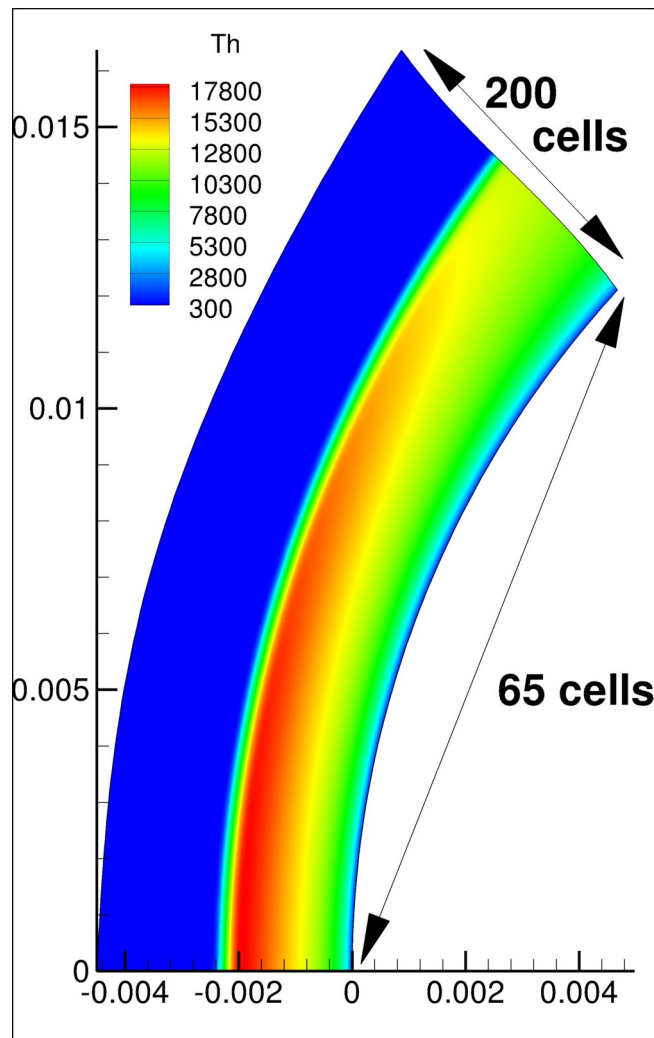
Сравнение с расчетами доступными кодами NASA: *CFL3D* и *FUN3D*.



Многотемпературная модель для 5-компонентной воздушной смеси

Верификация
многотемпературной
модели: обтекание
сегмента сферы

- ◆ $U = 6215$ м/с
- ◆ $H = 60$ км
- ◆ Химическая кинетика:
Парк (1990)
- ◆ Фактор
неравновесности:
модель Парка



Текущие трудности и проблемы

Плохо прогнозируемая эффективность кода в различных ситуациях:

Для тестовой задачи внешнего сверхзвукового обтекания тела НВ-2 на сетке 384×100 код на Фортране (CFS3D) примерно в 2.3 раза быстрее чем OpenMP версия HyCFS-R. Профилирование не показывает проблемных мест.

Простейший тест на скорость доступа:

```
for (i=1; i<N-1; ++i) {  
  for (j=1; j<N-1; ++j) {  
    a[i][j] = (a[i-1][j]+a[i+1][j]+a[i][j-1]+a[i][j+1])/4.;  
  }  
}
```

Возможно, в HyCFS-R коде неоптимальный порядок обхода. Пока нет возможности проверить — нужно переделывать основную структуру хранения данных.

N = 200

Порядок	Fortran	C++
ij-ij	6.36	6.29
ij-ji	1.69	1.67
ji-ji	1.33	2.17
ji-ij	7.84	7.86

```
void grad_v_face(const cContainer& V, int iV, int iD, int face_axis,
                int em, int ep, int m_1m, int p_1m, int m_1p, int p_1p,
                int m_2m, int p_2m, int m_2p, int p_2p,
                Vector3& A, Vector3& B, Vector3& C, Vector3& N,
                double& dVdx, double& dVdy, double& dVdz)
```

(A)

```
void grad_v_face(const Container& V, int iV, int iD, int face_axis,
                const NeighborElementIndex& nei,
                double& dVdx, double& dVdy, double& dVdz)
```

(Б)

```
struct NeighborElementIndex{
    int edge;
    int em;
    int ep;
    int e1;
    int e2;
    int m_1m;
    int p_1m;
    int m_1p;
    int p_1p;
    int m_2m;
    int p_2m;
    int m_2p;
    int p_2p;
    Vector3 A;
    Vector3 B;
    Vector3 C;}
```

Функции для вычисления градиента скаляра на грани.
Вариант Б работает в разы медленнее.
Видимо, базовые арифметические типы оптимизированы лучше?



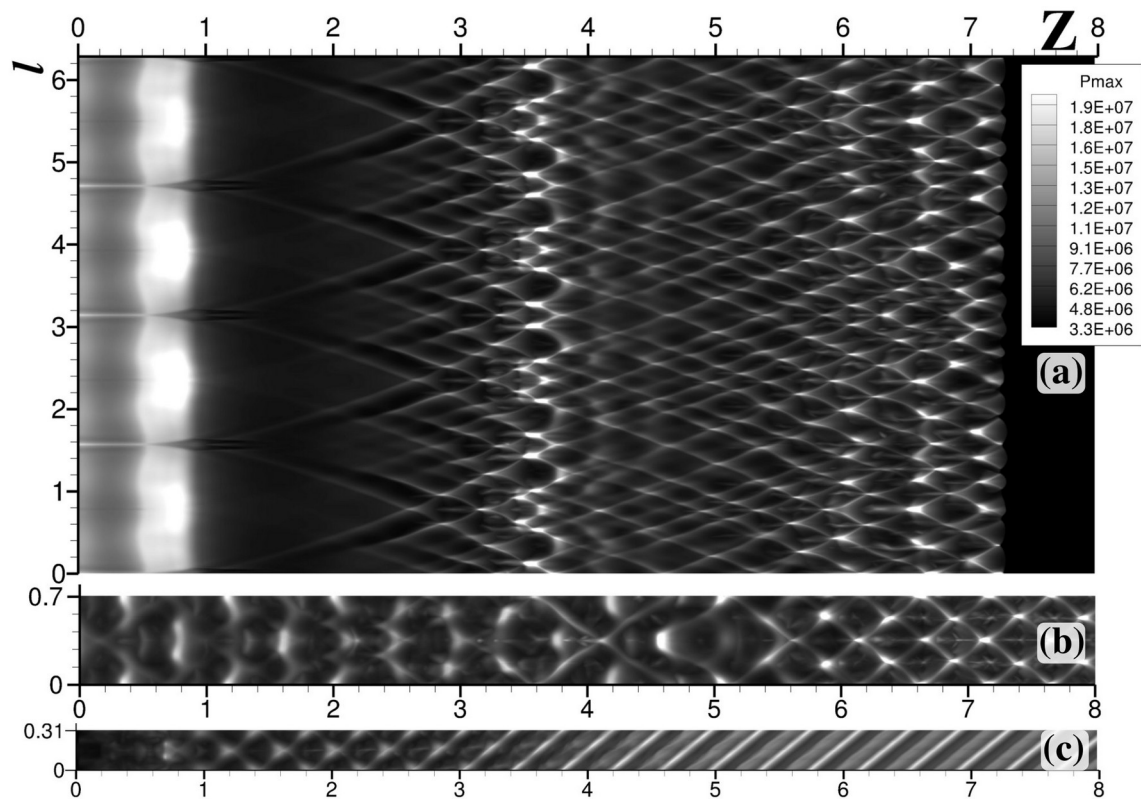
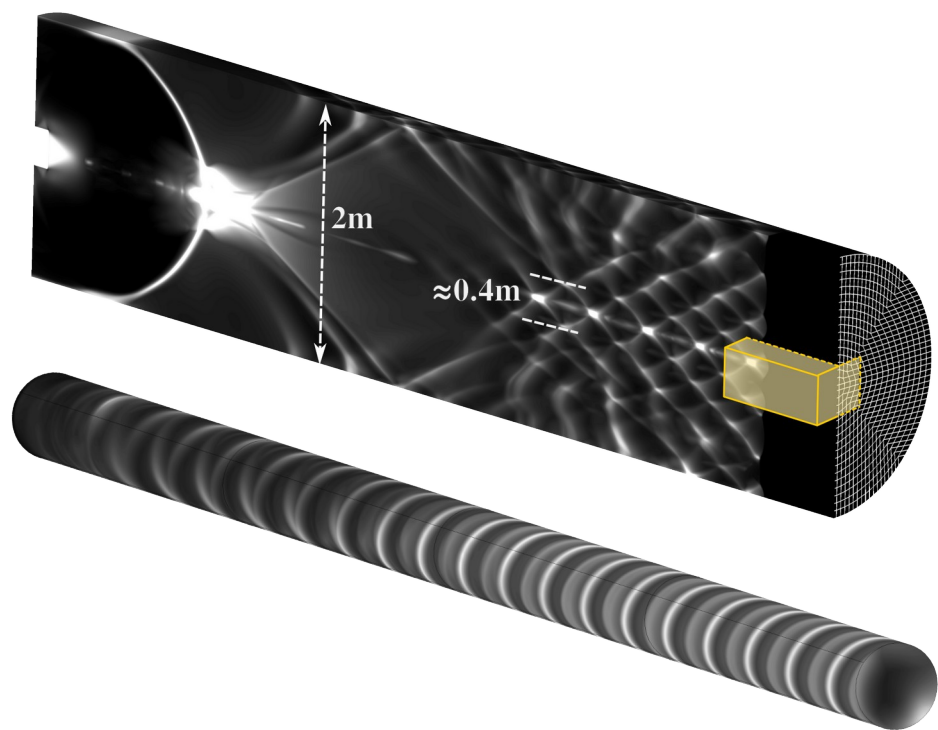
Не хочется копаться в настолько низкоуровневых вещах и жертвовать читаемостью кода

- ◆ **Рефакторинг «ядра»**
- ◆ основной контейнер: инициализация, контейнеры-матрицы, имена переменных произвольной длины, реализация IndexOf()
- ◆ новый ридер конфигов на C++11
- ◆ структуры Flow, Params, Debug и др.
- ◆ полностью индексированные реакции: отдельные индексы для прямых/обратных реакций
- ◆ **Солвер**
- ◆ Римановские солверы Poy и AUSM-PW для общего случая реального газа
- ◆ доделать TVD4 Yamamoto-Daiguji
- ◆ доделать полиномы NASA и кусочно-линейные термодинамические свойства
- ◆ навести порядок в неявном интегрировании: собрать всё в единую схему для любой модели газа
- ◆ осесимметричные члены для CA
- ◆ пристеночные функции для RANS
- ◆ неструктурированная сетка
- ◆ **Пре/со/пост-процессинг**
- ◆ утилиты для импорта/экспорта сетки
- ◆ унифицированное вычисление u^+ , u^+ , t_w и всего прочего
- ◆ Максимально автоматизировать ввод ГУ

- ◆ Сбор доп.данных в расчетах: фронты и т.д.
- ◆ **Модели**
- ◆ Menter SST для турбулентности
- ◆ модель перехода к турбулентности
- ◆ Турбулентное горение
- ◆ современные физ.-хим. модели для высокоэнталийных течений (modified Marrone-Treanor и т.п.)
- ◆ оживить равновесную химию для воздуха
- ◆ Лагранжев подход
- ◆ Излучение газа
- ◆ **Прочее**
- ◆ Документация: описание уравнений, форматов файлов входных данных, описание функций в коде, подготовка примеров с типичными расчетами и т.д.
- ◆ Дальнейшее тестирование кода: аэротермодинамика КА (Аполлон?), DNS перехода на пластине, устойчивость в разреженных газах и пр.

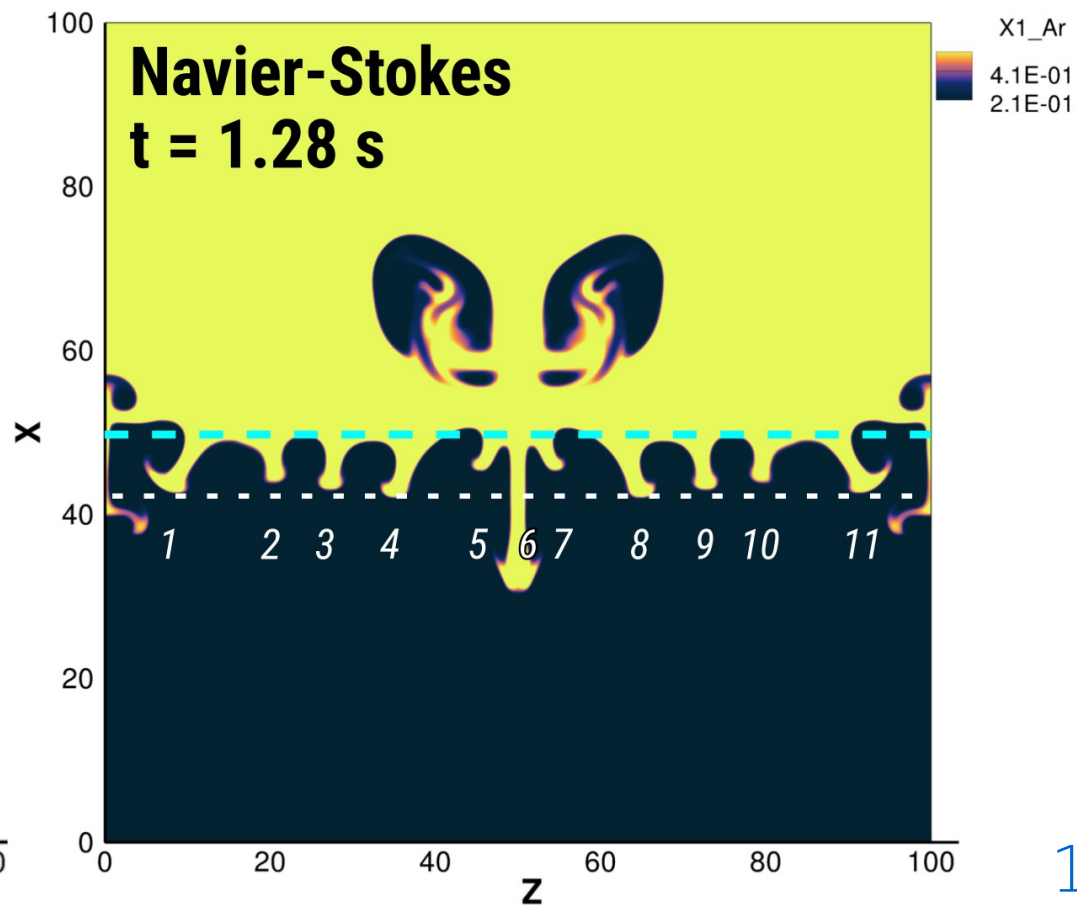
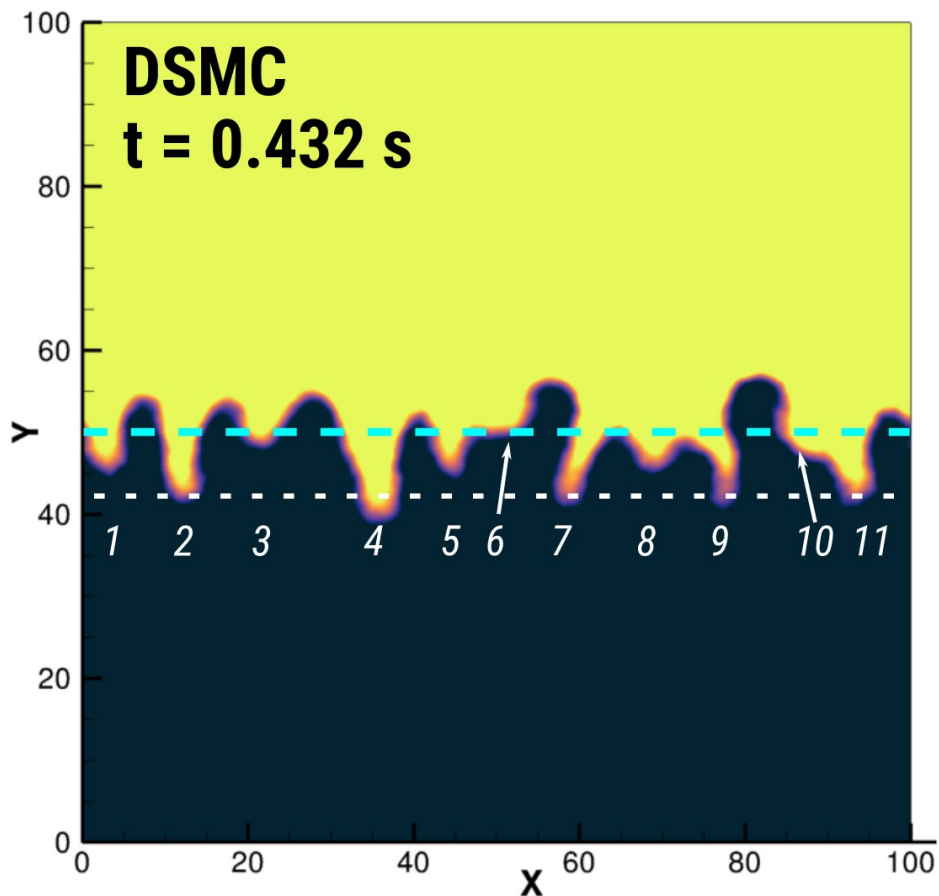
Верификация и применение программного пакета

Гетерогенная детонация



Фундаментальные задачи динамики разреженного газа

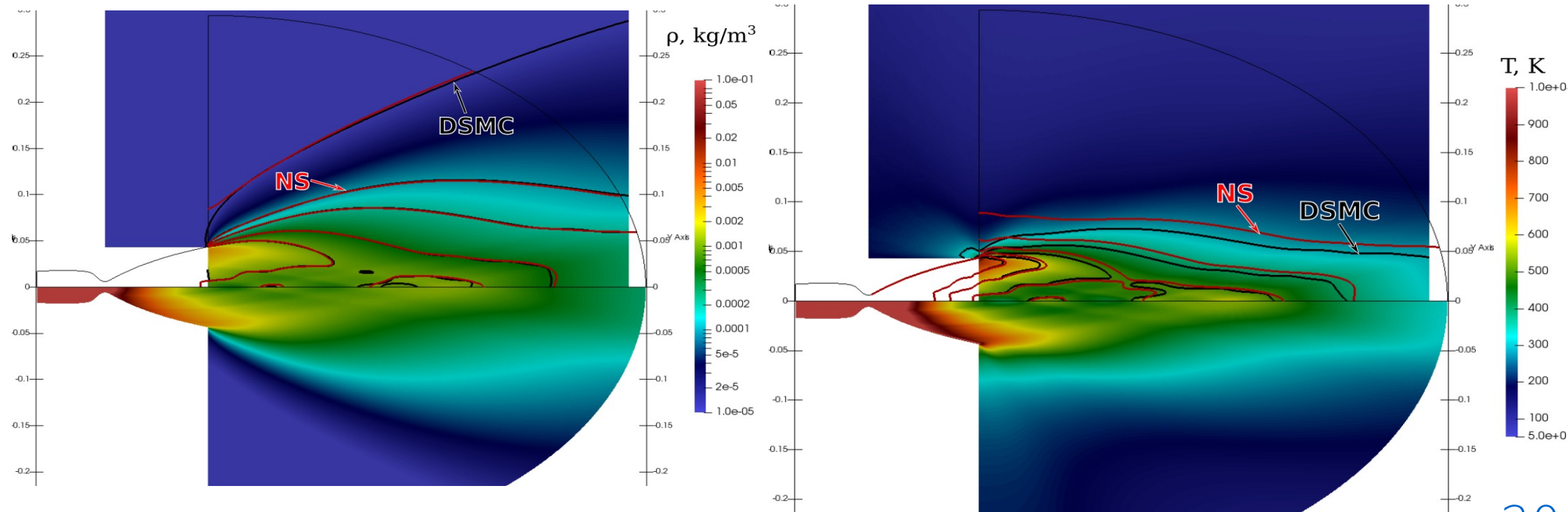
В рамках проекта РНФ 18-11-00246 «Численное исследование возникновения и развития неустойчивостей в течениях разреженных газов» проведены расчеты различных типов гидродинамических неустойчивостей



Расчеты струи из двигателя управления

В рамках построения методики сопряжения НС и ПСМ солверов для использования многозонного подхода А.В. Кашковский провел серию расчетов 130-ти ньютонового трастера с использованием HyCFS-R, SMILE и SMILE-Hybrid.

Внутри сопла и в ближней зоне — **НС**. На основе **НС** от среза сопла — **ПСМ**.
Сравниваются решения в ближней зоне.



**Спасибо за
внимание!**