

Комплекс программ “FlowModellium” для моделирования высокоскоростных течений газа на суперЭВМ

М.Н. Петров, В.А. Титарев, А.В. Чикиткин, С.В. Утюжников

МФТИ/ФИЦ ИУ РАН/University of Manchester

ИПМ им. М.В. Келдыша, 29 ноября 2015.



- В лаборатории “Математического моделирования нелинейных процессов в газовых средах” МФТИ ведется разработка численных методов и комплекса программ “FlowModellium” численного моделирования внешних высокоскоростных течений сжимаемого газа в широком диапазоне параметров набегающего потока.
- Комплекс программ состоит из
 - Сеткопостроителей Smesher/Sotm/Qi3d_poly (А.И. Белокрыс-Федотов, В.А. Гаранжа, Л.Н. Кудрявцева. “Программный комплекс для построения тетраэдральных сеток” , Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ 2014619168.)
 - модульной программы-решателя уравнений движения сжимаемого газа с учетом различных физических свойств среды (В.А. Титарев and С.В. Утюжников, “Программный комплекс для расчета гиперзвуковых течений воздуха” , Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ 2013619670)
 - программы визуализации OnReader (Гаранжа В.А. с со-авторами).
- В настоящем докладе приводится обзор возможностей аэродинамического решателя “FlowModellium” .

- ❶ Общие цели и задачи кода
 - Разработка новых численных методов, включая методы декомпозиции области
 - Решение фундаментальных научных и прикладных задач,
 - Разработка параллельных алгоритмов для multi & many-core систем.
- ❷ Что моделируется (классы течений)
 - Сжимаемые течения, включая гиперзвуковые
- ❸ Возможность доп. физики
 - равновесная и неравновесная химия
- ❹ Модели
 - уравнения Навье-Стокса, Эйлера, модели RANS.
- ❺ Есть ли собственный генератор сеток?
 - Да, группа В.А. Гаранжи
- ❻ Численные методы
 - Конечно-объемные;
 - Метод наименьших квадратов на произвольных сетках + локально-одномерные схемы на гексах;
 - Порядок аппроксимации конвективных потоков до 5-го
- ❼ Интегрирование по времени:
 - явные схемы, неявные схемы,
- ❽ Используемые солверы для решения систем линейных уравнений:
 - LU-SGS

Расчетные уравнения сплошной среды

- Предполагаем, что среда подчиняется уравнению состояния идеального газа

$$p = \rho \frac{R_u}{M} T,$$

где R_u - универсальная газовая постоянная, M - молярная масса. Энергия единицы объема газовой смеси выражается через энергию единицы массы e , плотность и скорость газа по формуле

$$E = \rho(e + u_\alpha u_\alpha / 2)$$

- В размерной векторной форме расчетные уравнения имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \nabla(\mathbf{F} - \mathbf{F}^v) = \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad \mathbf{F} = (F_1, F_2, F_3), \quad \mathbf{F}^v = (F_1^v, F_2^v, F_3^v).$$

- Здесь \mathbf{U} - вектор консервативных переменных, \mathbf{F} , \mathbf{F}^v - тензоры конвективных и вязких потоков по координатным направлениям, \mathbf{S} - источниковый член. Конкретный вид данных векторов зависит от используемой физической модели. Описание реализованных в пакете программ моделей приводится ниже.

Модель совершенного газа

- Векторы \mathbf{U} , \mathbf{F}_k , \mathbf{F}_k^v задаются формулами

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho u_k \\ \rho u_1 u_k + \delta_{1k} p \\ \rho u_2 u_k + \delta_{2k} p \\ \rho u_3 u_k + \delta_{3k} p \\ (E + p) u_k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k^v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{1k} \\ \tau_{2k} \\ \tau_{3k} \\ u_\alpha \tau_{\alpha k} - q_k \end{pmatrix}$$

- Уравнение состояния $e = \frac{RT}{\gamma-1}$, $R = \frac{R_u}{M}$, показатель адиабаты γ и молярная масса M для воздуха $M = \text{const} \approx 28.98 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, $\gamma = 7/5$.

Для компонент тензора вязких напряжений τ_{ij} и потока тепла q_k имеем:

$$\tau_{ik} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \text{div} \mathbf{u} \right), \quad q_k = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k}$$

- Для совершенного газа коэффициенты вязкости μ и теплопроводности λ связаны соотношением $\lambda = \frac{c_p \mu}{\text{Pr}}$, $c_p = \frac{\gamma R}{\gamma - 1}$, где $\text{Pr} = 0.75$ - число Прандтля.

Модель идеального газа (равновесная химия)

- Модуль уравнения состояния и коэффициентов переноса для равновесной химии предоставлен **Васильевским Сергеем Александровичем** (Институт проблем механики РАН).
- Вычисление параметров и коэффициентов переноса производится линейной интерполяцией по предварительно рассчитанной таблице, построенной исходя из рабочего диапазона давлений 0.01 - 100 атм, рабочего диапазона температур 300 - 20000 К. Используемые табличные данные построены с помощью пакета программ SoVA (Соколова И.А., Васильевский С.А., Андриатис А.В.).
- Основные условия, в которых рассчитывается таблица, это условия химического равновесия (уравнения Гильдберга-Вааге) и ионизационного равновесия (уравнения Саха). Таблица, используемая в настоящем программном комплексе, составлена для 22-компонентной газоплазменной смеси. Данная таблица была составлена исходя из предположения, что набегающий поток в задаче - воздух.
- Тем не менее таблица может быть расширена для учета иных компонентов (например, для случая абляции) или заменена другой таблицей, если молярные концентрации набегающего потока отличаются от случая "воздух".

Модель неравновесной химии

- В случае, если условие применимости модели равновесных химических реакций не выполняется, необходимо использовать неравновесную модель.
- В данной работе используется однотемпературная модель, с 5, 7, 9 и 11 компонентами газа.
- Модуль неравновесной химии предоставлен **Сахаровым Владимиром Игоревичем**.
- Газовая среда рассматривается как идеальная квазинейтральная смесь совершенных газов из N компонентов, между которыми протекают неравновесные химические реакции и ионизация. Молярная масса смеси M и внутренняя энергия газа e , определяются формулами

$$\frac{1}{M} = \sum_{j=1}^N \gamma_j, \quad e = h - R_u T \sum_{j=1}^N \gamma_j, \quad h = \sum_{j=1}^N \gamma_j h_j.$$

Здесь $\gamma_j = c_j/m_j$ — молярно-массовые концентрации компонентов (c_j — массовые концентрации), h — энтальпия единицы массы газовой смеси; e_j , h_j — молярная внутренняя энергия и энтальпия j -го компонента.

- Например, в 11-компонентной модели присутствуют следующие компоненты: O , N , O_2 , N_2 , NO , O^+ , N^+ , NO^+ , O_2^+ , N_2^+ , e .

Модель неравновесной химии (ii)

- Для однотемпературной (1ТМ) модели имеем

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho\gamma_1 \\ \vdots \\ \rho\gamma_N \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_N \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho u_k \gamma_1 \\ \vdots \\ \rho u_k \gamma_N \\ \rho u_1 u_k + \delta_{1k} p \\ \rho u_2 u_k + \delta_{2k} p \\ \rho u_3 u_k + \delta_{3k} p \\ (E + p) u_k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k^v = \begin{pmatrix} K_{1k} \\ \vdots \\ K_{Nk} \\ \tau_{xk} \\ \tau_{yk} \\ \tau_{zk} \\ z_k \end{pmatrix}$$

- Здесь ω_j – источниковые члены вследствие неравновесных химических реакций; $z_k = u_\alpha \tau_{\alpha k} - q_k$.
- Диффузионные потоки K_j для j -ой компоненты и тепловой поток q определяются выражением

$$K_{jk} = d_j \frac{\partial \gamma_j}{\partial x_k}, \quad q_k = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k} + \sum_{j=1}^N K_{jk} h_j.$$

- Для вычисления коэффициентов вязкости и теплопроводности газовой смеси используются приближенные формулы Уилке-Васильевой; τ_{ij} – обычные компоненты тензора вязких напряжений.

Переход к безразмерным переменным

- Переход к безразмерным переменным задается выбором масштабов координаты L_* , давления p_* , плотности ρ_* , скорости v_* , температуры T_* , молярной массы M_* и вязкости μ_* .
- По умолчанию масштаб длины $L_* = 1$ метр, но может быть задан в конфигурационном файле программы. Во всех случаях масштаб коэффициента теплопроводности $\lambda_* = \mu_* v_*^2 / T_*$.
- Для выбора остальных масштабов возможны различные варианты, в зависимости от используемой физической модели и скорости набегающего потока
- В безразмерных переменных расчетные уравнения переписываются в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \nabla(\mathbf{F} - \frac{1}{\text{Re}_*} \mathbf{F}^v) = \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad \text{Re}_* = \frac{\rho_* v_* L_*}{\mu_*}.$$

- Здесь число Рейнольдса Re_* формально получается при переходе к безразмерным переменным и может не совпадать с реальным числом Рейнольдса задачи. Стационарное решение системы (9) строится методом установления по времени с помощью конечно-объемной схемы типа Годунова второго порядка аппроксимации.

Общий вид разностной схемы

- Неявная конечно-объемная схема для расчета стационарных течений на произвольной неструктурированной сетке имеет вид:

$$\frac{\Delta \mathbf{U}_i}{\Delta t} = \mathbf{R}_i^{n+1}, \quad \Delta \mathbf{U}_i = \mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n,$$
$$\mathbf{R}_i^{n+1} = -\frac{1}{|V_i|} \sum_l \Phi_{li}^{n+1} + \mathbf{S}(\mathbf{U}_i^{n+1}), \quad \Phi_{li} = \int_{a_{li}} (n_x \mathbf{F}_1 + n_y \mathbf{F}_2 + n_z \mathbf{F}_3) da.$$

- Используемые методы решения задачи о распаде разрыва: HLL, HLLC, Osher, Roe, точный распад.
- Линеаризация разностной схемы:

$$\frac{\Delta \mathbf{U}_i}{\Delta t} = \mathbf{R}_i^n + \frac{\partial \mathbf{R}_i^n}{\partial \mathbf{U}} \Delta \mathbf{U}_i.$$

- После линеаризации приращение решения в ячейке i связано с приращением решения в соседних ячейках по следующей формуле:

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i + \frac{\Delta t}{2|V_i|} \sum_l \mathbf{G}(\mathbf{U}_{\sigma_l(i)}, \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)}) |a_{li}| = \Delta t \mathbf{R}_i^n$$

Решение уравнений для приращений

- Полученная разреженная система уравнений решается с помощью приближенной LU-SGS факторизации (Меньшов & Накамура, 1996 год):

- Обратный ход: для $i = N, N - 1, \dots, 1$

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i^* = -\frac{1}{2|V_i|} \sum_{l: \sigma_l(i) < i} \mathbf{G}(\mathbf{U}_{\sigma_l(i)}, \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)}^*) |a_{li}| + \mathbf{R}_i^n$$

- Прямой ход для $i = 1, 2, \dots, N$.

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i = \Delta \mathbf{U}_i^* - \frac{1}{2|V_i|} \sum_{l: \sigma_l(i) > i} \mathbf{G}(\mathbf{U}_{\sigma_l(i)}, \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)}) |a_{li}|$$

Структура пакета “FlowModellium”

Препроцессор

- Разбиение сетки для MPI расчетов
- Перенумерация вершин, граней и ячеек в каждом блоке, вывод в файл

Вычислительное ядро

- Чтение сеток в форматах Neutral & StarCD, построение связности сеток
- ТВД/WENO реконструкция функций на произвольных неструктурированных сетках
- Алгоритмы ускорения счета с помощью технологий OpenMP и MPI
- Вывод пространственных и поверхностных данных

Аэродинамическое ядро

- Описание класса “Задача”
- Указатели на функции, описывающие физическую модель
- Общая структура схемы типа LU-SGS
- Алгоритм реконструкции решения, распады разрыва HLL, Рusanов, Osher-type, Roe
- Вычисление вязких потоков, аппроксимация граничных условий

Подключаемые физические модели

Совершенный газ

- Точный разрыва, HLLC

Равновесная химия

- 22-компонентная смесь
- Таблица данных

Неравновесная химия

- 5, 7, 9 и 11-компонент
- Библиотека химических реакций
- Точный разрыва, HLLC

Модели RANS

- SA
- q-w
- v2f

Реализация параллельных вычислений

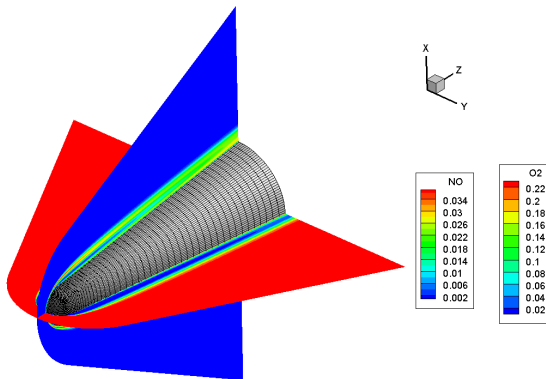
- ❶ В расчетах используются сетки с большим числом ячеек, что требует использование многопроцессорных ЭВМ
- ❷ Применяется **двухуровневое распараллеливание** с целью максимально эффективного использования современных процессоров
- ❸ Верхний уровень – MPI распараллеливание с помощью декомпозиции расчетной сетки:
 - Декомпозиция расчетной сетки в **физическом** пространстве с помощью внешней программы (например Metis или модуль **И. Капорина** (ВЦ РАН)).
 - подготовка многоблочной сетки в препроцессоре
 - для обмена данными в фиктивных ячейках используются обычные средства обмена MPI
- ❹ Нижний уровень – разбиение физической сетки каждого MPI процесса на блоки и использование технологии OpenMP.
- ❺ При необходимости на узле может быть использована (практически) произвольная комбинация MPI процессов и OpenMP нитей.

Нижний уровень: OpenMP распараллеливание

- Типичный современный процессор - 12-18 физических ядер (до 24-36 OpenMP нитей на узел кластера).
- Ускоритель Intel Xeon Phi 5110p – 60 физических ядер, 240 логических ядер. Как правило, на узле стоит два ускорителя Xeon Phi.
- С помощью внешней программы MPI подобласти разбиваются на подобласти 2-го уровня с помощью процедуры И. Капорина (ВЦ РАН), число областей совпадает с числом OpenMP нитей.
- Для нахождения потоков и источника используется обычный `parallel do` с правильно подобранным размером блока
- В проходе неявного метода LU-SGS приращение решения находится отдельно для каждой подобласти.

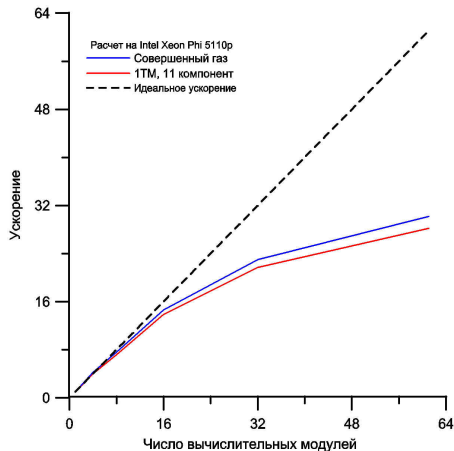
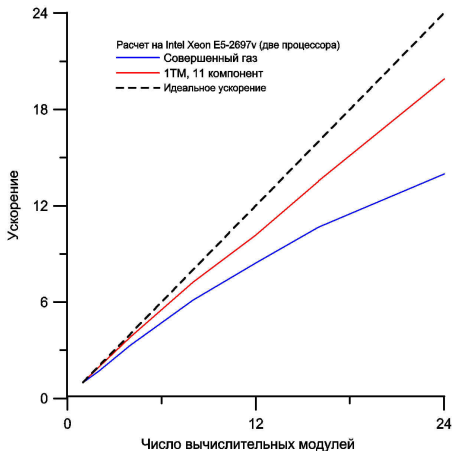
Тестирование реализации OpenMP

- Тестовая задача - обтекание тела RAM-C гиперзвуковым потоком газа;
- Сетка 600 тысяч гексаэдров. Вычисления проводились на
 - Сервере с 2 процессорами Intel Xeon E5-2697v (12 ядер, частота 2.7 гигагерца)
 - Сервере с сопроцессором Intel Xeon Phi 5110p (61 вычислительный модуль, 244 гиперпотока)
- На картинке - обтекание с $M_\infty = 27$.

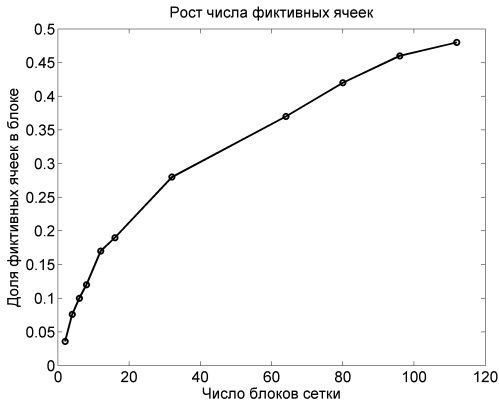
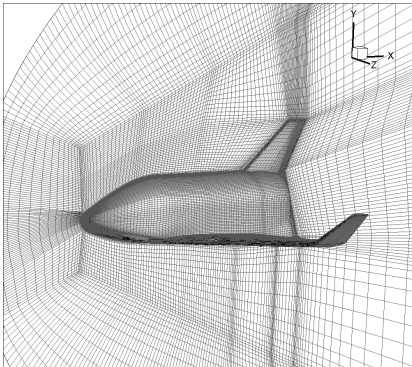


Тестирование реализации OpenMP (2)

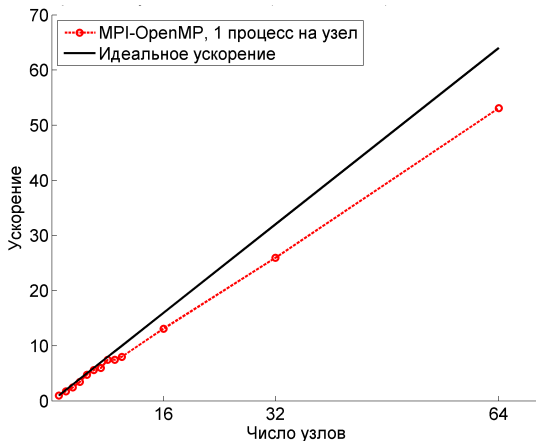
- Слева расчет на Intel Xeon E5-2697v, справа - на Intel Xeon Phi 5110p
- 61 модуль соответствует 244 гиперпоток на Intel Xeon Phi 5110p



- Обтекание ВКА ЦАГИ, сетка 1.4 миллиона ячеек
- Неструктурированная гекса сетка с сильным сгущением в пограничном слое
- Обмен данными между блоками сетки сильно увеличивается с ростом числа блоков



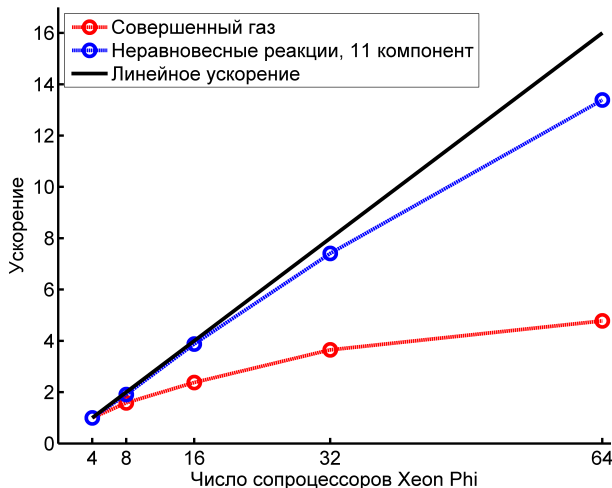
MPI + OpenMP, Intel Xeon



- Используются 8-ядерные Intel Xeon E5-2690 на кластере МВС-10П; 64 узла дают 1024 ядра.
- Применяется модель совершенного газа (самый сложный случай с точки зрения ускорения вычислений).

MPI + OpenMP, 976 – 15616 гиперпотоков

- Компиляция с флагом `-no-vec`, иначе ошибка компилятора Ifort 2013.



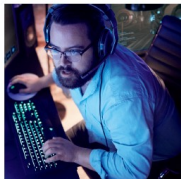
- Один Intel Xeon Phi 7110X \approx два 8-ядерных Xeon E5-2690 того же кластера.

CASE STUDY



Rocketing the Development of Hypersonic Vehicles

Intel® Parallel Studio XE Cluster Edition, Intel® MPI Library
High-Performance Computing



Moscow Institute of Physics and Technology Creates Faster and More Accurate Computational Fluid Dynamics Software

The field of computational fluid dynamics (CFD) is a large branch of modern scientific computing that has four key elements:

- A real-life problem to be solved
- A set of partial differential equations (mathematical model) to represent the problem
- A numerical method
- A computer

The use of CFD complements both physical experiments and theoretical analysis and is often referred to as computational experiment. The theoretical results are inevitably limited to very simple problems. In practice, experimental studies have been the main approach. But these are time consuming and exceedingly costly. Also, many flow problems (e.g., weather predictions or space craft movements at high altitudes) cannot be studied experimentally.

Although CFD simulation cannot eliminate the need for physical measurements, it can significantly reduce the amount and overall cost of experimentation. In some cases—for instance, when analyzing a storm surge or chemical spill—computer simulation may be the only practical way to analyze the flows with predictive insights. CFD is also important in fundamental studies of flow phenomena, such as turbulence flows.

Выводы и планы на будущее

- В ближайшем будущем планируется сравнительный анализ методов перенумерации пространственных ячеек с целью ускорить работу версии для узла с общей памятью
- Анализ возможностей векторизации кода с помощью Intel Parallel Studio XE Cluster Edition 16
- Работа поддержана
 - Грантом Правительства РФ по постановлению N 220 по договору N 11.G34.31.0072, заключенного между Министерством образования и науки РФ, ведущим ученым и МФТИ
 - Проектом РФФИ 15-07-02986
 - Консультациями Российского отделения Интел (Дмитрий Сивков)

Спасибо за внимание!