

УДК 519.6

Комплекс параллельных программ TAPIR для численного моделирования задач газовой динамики*

Суков С. А.

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН

Аннотация: В статье представлено описание функциональных возможностей разрабатываемого в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН комплекса параллельных программ TAPIR. Комплекс программ предназначен для расчета внешнего обтекания тел на конформных и локально адаптивных смешанных сетках с использованием ресурсов высокопроизводительных систем различной архитектуры. Приводится формулировка численного алгоритма, примеры результатов расчетов, характеристики эффективности распараллеливания вычислений и распределенной обработки данных.

Ключевые слова: вычислительная газовая динамика, неструктурированные сетки, параллельные вычисления.

1. Назначение и структура программного комплекса

Программный комплекс TAPIR представляет собой платформу для разработки и тестирования моделей организации параллельных вычислений, средств автоматического распараллеливания алгоритмов и подходов к распределенной обработке сеточных данных большого объема при проведении широкомасштабных вычислительных экспериментов. Ядром комплекса является реализация алгоритма численного моделирования внешнего обтекания тел на смешанных (гибридных) конформных и локально адаптивных сетках для суперкомпьютеров различной архитектуры [1]. Встроенный в вычислительное ядро препроцессор включает библиотеки подпрограмм для сравнительного тестирования производительности многопроцессорных модулей и распределенной обработки топологии смешанных сеток на этапе инициализации данных вычислительных экспериментов. Внешний препроцессор состоит из последовательных модулей генерации подробных неструктурированных сеток с ячейками типа тетраэдр, треугольная призма, четырехугольная пирамида и гексаэдр и локальной адаптации сеток данного типа к особенностям решения.

2. Алгоритм численного моделирования

В качестве математической модели течений вязкого сжимаемого теплопроводного газа рассматривается система уравнений Навье–Стокса. В декартовой системе координат в компактном вектором виде система уравнений записывается как

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla F = 0,$$

где Q – вектор консервативных газодинамических переменных. Вектор потока F равен сумме потоков конвективного F^{Φ} и диффузионного F^D переноса. Численный алгоритм моделирования внешнего обтекания тел построен на основе конечно-объемного метода повышенного порядка точности с полиномиальной реконструкцией переменных.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 19–11–00299.

Расчетная область задачи заполняется смешанной сеткой, которая может состоять из ячеек четырех типов: тетраэдров, треугольных призм, четырехугольных пирамид и гексаэдров. Центр масс многогранной ячейки C_i с границей ∂C_i и объемом $|C_i|$ находится в точке \mathbf{x}_i . Поверхность внутренней ячейки состоит из общих с ячейками из множества I_i плоских граней ∂C_{ij} , $j \in I_i$. Геометрия ∂C_{ij} задается координатами ее центра $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_{ji}$, площадью грани $S_{ij} = S_{ji}$ и направлением единичного вектора внешней нормали $\vec{n}_{ij} = -\vec{n}_{ji}$.

Дискретные значения сеточных функций Q_i относятся к центрам масс расчетных ячеек и равны среднему интегральному значению от непрерывно распределённой величины. При этом поведение функции f в пределах объема C_i описывается линейным полином

$$f_i^P(\mathbf{x}) = a_{0i}^f(x - x_i) + a_{1i}^f(y - y_i) + a_{2i}^f(z - z_i) + f_i.$$

Полиномиальные коэффициенты (компоненты вектора градиента) определяются исходя из дискретного аналога формулы интегрального представления градиента

$$\nabla f_i^P = (a_{0i}^f, a_{1i}^f, a_{2i}^f) = \sum_{j \in I_i} f_{ij} \vec{n}_{ij} S_{ij}.$$

Здесь значение функции в центре грани f_{ij} вычисляется как сумма величин f_i и f_j с весами обратно пропорциональными расстояниям от центров масс соседних ячеек до плоскости общей грани. При расчете сверхзвуковых течений с возможностью возникновения ударных волн и разрывов для корректировки коэффициентов полиномиальной реконструкции применяются функции-лимитеры [2, 3].

В соответствии с методом контрольного объема для ячеек сетки записывается балансовое соотношение

$$\frac{dQ_i}{dt} + \sum_{j \in I_i} (F_{ij}^\Phi + F_{ij}^D) S_{ij} = 0.$$

Конвективный поток вычисляется с использованием одной из базовых схем [4, 5] решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва

$$F_{ij}^\Phi = \Phi(Q_i^P(\mathbf{x}_{ij}), Q_j^P(\mathbf{x}_{ij}), \vec{n}_{ij}).$$

Конкретный выбор той или иной схемы Φ зависит от характеристик моделируемого течения. Диффузионный поток F_{ij}^D вычисляется как полусумма диффузионных потоков от осредненных значений сеточных функций и градиентов реконструкционных полиномов

$$F_{ij}^D = D(Q_i, \nabla Q_i^P, Q_j, \nabla Q_j^P, \vec{n}_{ij}).$$

Для интегрирования временных производных используется явная схема Эйлера первого порядка или метод типа Рунге-Кутты второго порядка точности. В первом случае численный алгоритм определения значений сеточных функций \bar{Q}_i на новом слое по времени $t + \Delta t$ во внутренней сеточной ячейке можно описать формулой

$$\bar{Q}_i = Q_i - \frac{\Delta t}{|C_i|} \sum_{j \in I_i} [\Phi(Q_i^P(\mathbf{x}_{ij}), Q_j^P(\mathbf{x}_{ij}), \vec{n}_{ij}) + D(Q_i, \nabla Q_i^P, Q_j, \nabla Q_j^P, \vec{n}_{ij})] S_{ij}$$

Алгоритм обработки ячеек, у которых одна или несколько граней лежат на границе расчетной области Γ , аналогичен алгоритму обработки внутренних ячеек. Значения функций $f_{i\Gamma}$ и потоки $F_{i\Gamma}$ вычисляются или явно задаются с учетом постановки граничных условий задачи.

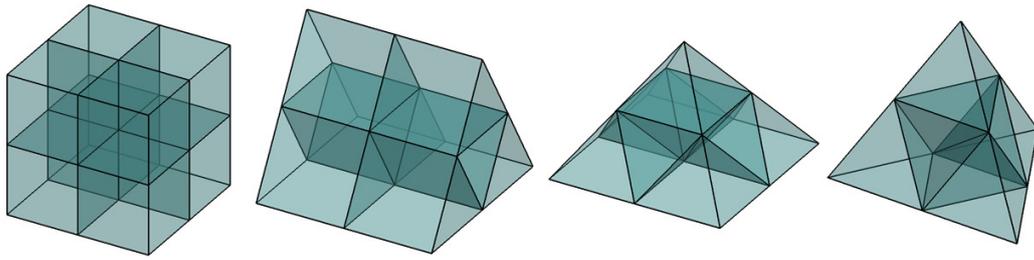


Рис. 1. Изотропная декомпозиция ячеек.

С целью повышения точности результатов численных экспериментов непосредственно в процессе расчета может применяться метод локальной адаптации сетки к особенностям решения. Реализованный в комплексе программ TAPIR подход базируется на иерархическом изотропном дроблении (рис. 1) и обратном объединении элементов [6]. Множество перестраиваемых ячеек составляется по результатам анализа распределения значений критериев адаптации, учитывающих структуру течения. Правило составления множества в общем виде описывается выражением

$$\phi_{\min} < \phi_{cell} < \phi_{\max}.$$

Границы интервала $(\phi_{\min}; \phi_{\max})$ подбираются таким образом, чтобы повысить точность разрешения особенностей течения и одновременно сохранить число расчетных ячеек в заданных пределах. Для определения значений газодинамических переменных в центрах масс дочерних ячеек используется полиномиальная реконструкция на родительском элементе. В случае их обратного слияния значение в центре родительского многогранника вычисляется осреднением по дочерним контрольным объемам.

Численный алгоритм моделирования течений на, так называемых, сетках с висячими узлами отличается методом определения коэффициентов линейной реконструкции. Для вычисления компонент вектора градиента сеточной функции строятся дополнительные фиктивные контрольные объемы. Их вершины находятся в точках пересечения отрезков, соединяющих центры соседних расчетных ячеек, с плоскостями соответствующих общих граней. Поверхность фиктивной ячейки представляет собой триангуляцию выпуклой оболочки ее вершин. Значения переменных в вершинах и центрах граней фиктивной ячейки вычисляются линейной интерполяцией на отрезках и треугольниках. Пример фиктивного контрольного объема для четырехугольной пирамиды, которая граничит с четырьмя элементами (два тетраэдра, гексаэдр и призма) одинакового с ней уровня иерархии и четырьмя тетраэдрами нижнего уровня представлен на рис. 2.

Корректность и возможность использования реализации описанного алгоритма для моделирования газодинамических течений оценивалась путем расчета дозвукового и сверхзвукового обтекания тел различной геометрической формы и сравнения полученных результатов с имеющимися экспериментальными и численными данными. В частности рассматривалась задача моделирования сверхзвукового обтекания сферы ($D = 0.1524$) при различных параметрах набегающего потока. Расчетная область задачи представляет собой объединение сферы с цилиндром, внутрь которого помещается обтекаемое тело (рис. 3а). Построенная внутри области сгущающаяся к поверхности сферы смешанная сетка (рис. 3б) содержит 794634 узла и 994251 элемент (245793 тетраэдра, 7681 четырехугольная пирамида и 740777 гексаэдров).

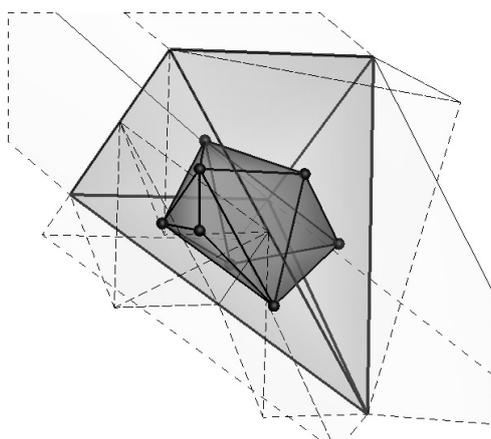
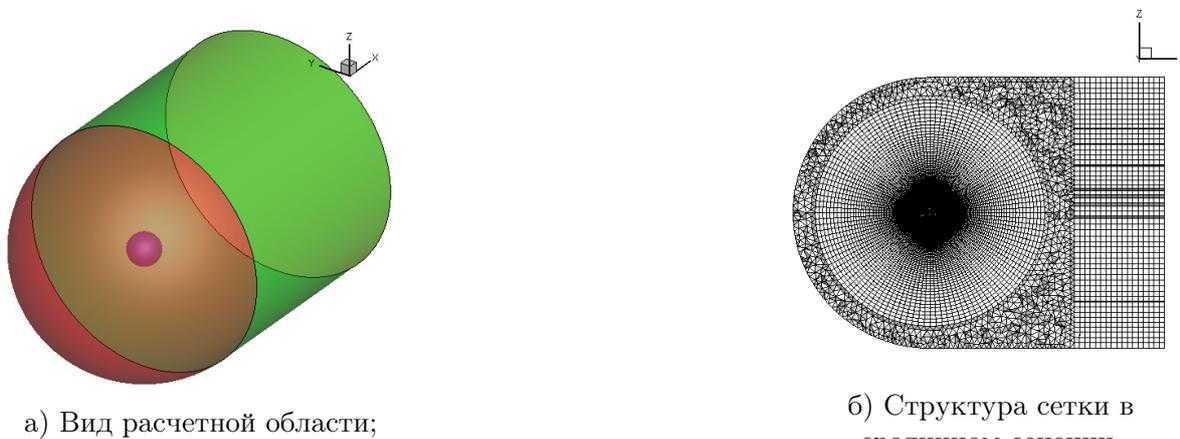


Рис. 2. Фиктивный контрольный объем.



а) Вид расчетной области;

б) Структура сетки в срединном сечении.

Рис. 3. Расчетная область и структура смешанной сетки.

Определенные по результатам проведенных расчетов значения коэффициентов лобового сопротивления приводятся в таблице 1.

Таблица 1. Значения коэффициента лобового сопротивления

Число Маха	Число Рейнольдса	Коэффициент лобового сопротивления
1.5	2.8816E+06	1.047576
2	1.9457E+06	1.03234
3	1.1964E+06	0.966544
4	7.3412E+05	0.926857
6	3.3148E+05	0.896586
8	1.8377E+05	0.888854

Полученные значения хорошо согласуются с данными, опубликованными в [7, 8]. Визуализация картины течения в срединном сечении расчетной области для $M = 2$ и $M = 8$ дана на рис. 4.

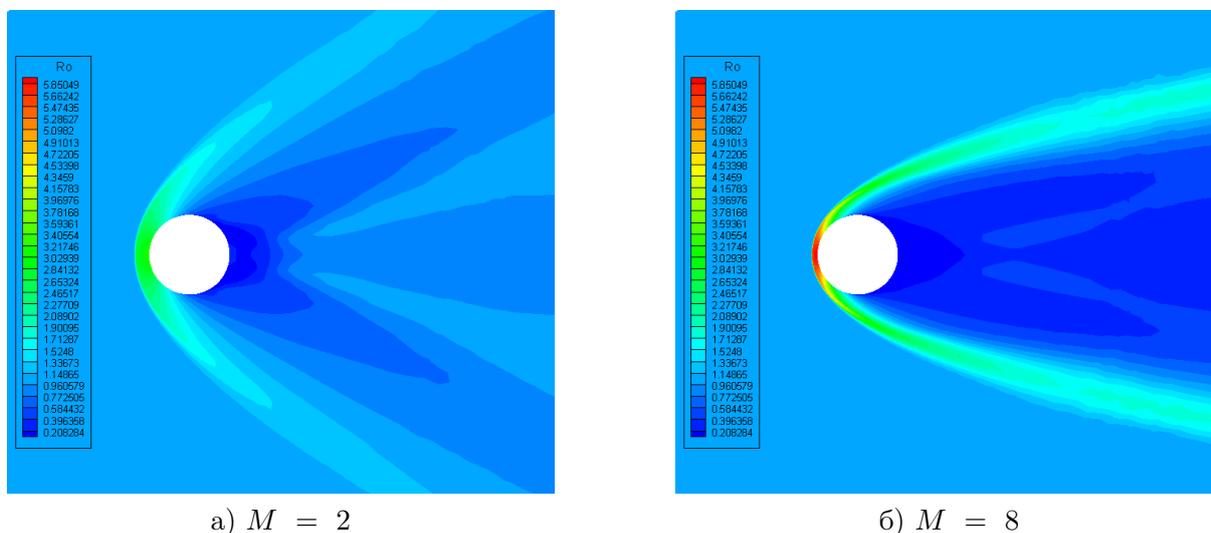


Рис. 4. Распределение плотности в срединном сечении.

Технология локальной адаптации сеток применяется для повышения точности разрешения стационарных особенностей течения. На рис. 5 представлен пример адаптации к отошедшей от носовой части баллистической модели НВ-2 ударной волне. Постановка задачи, геометрия модели и параметры набегающего потока ($M = 3$, $Re = 2.46625E + 07$) взяты из [9]. Исходная конформная сетка состоит из тетраэдров, четырехугольных пирамид и гексаэдров. В общей сложности она содержит 2403438 элементов. Адаптация сетки выполняется на основе критерия $\phi_{cell} = |div(\mathbf{u})| h_{cell}$. Коэффициент h_{cell} равен минимальной высоте элемента. Пороговые значения интервалов для составления множеств перестраиваемых ячеек подобраны исходя из условия соблюдения заданной размерности сетки. Адаптивная сетка содержит 2770980 расчетных ячеек, из которых 18786 являются элементами первого уровня вложенности, 77866 - элементами второго уровня, 274992 ячейки относятся к элементам третьего уровня вложенности.

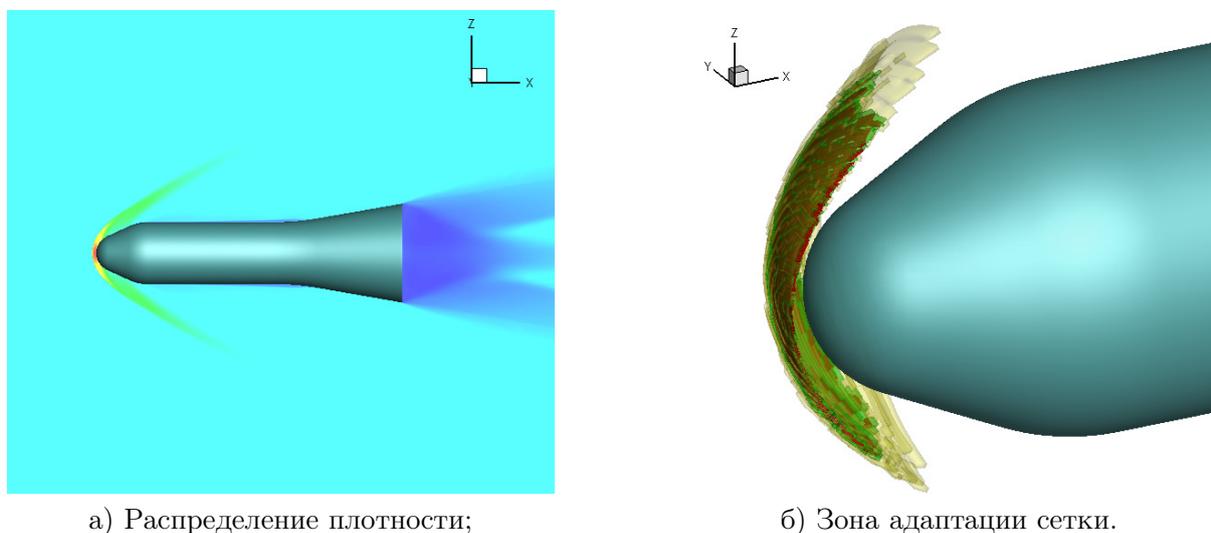


Рис. 5. Обтекание баллистической модели НВ-2.

3. Программная реализация

Распределенная программная реализация вычислительного алгоритма разработана на основе гибридной модели параллелизма по управлению с передачей сообщений и адаптирована к запуску на суперкомпьютерах различной архитектуры, включая гетерогенные системы с графическими ускорителями. В гетерогенной реализации алгоритма для расчетов на конформных сетках используются интерфейс передачи сообщений MPI (модель распределенной памяти), интерфейс разработки прикладных программ OpenMP (модель общей памяти) и программные средства CUDA (поточковая обработка данных на графических ускорителях). Текущая версия вычислительного ядра для расчетов на локально адаптивных сетках предназначена только для систем с многоядерными процессорами (модель выполнения MPI + OpenMP).

Распределенный препроцессор включает процедуры сравнительного тестирования быстродействия многоядерных процессоров общего назначения и массивно-параллельных сопроцессоров и ускорителей. Предварительное тестирование позволяет исключить из конфигурации запуска вычислительного ядра нестабильно работающие устройства с пониженной производительностью. Последующая балансировка загрузки на уровне расчетной группы MPI-процессов, ассоциированных с модулями кластерной системы, и между нитями OpenMP, ассоциированными с процессорными ядрами, сопроцессорами и ускорителями отдельных модулей, выполняется методом геометрического параллелизма. Многоэтапный обмен данными между MPI-процессами и управляющими нитями OpenMP в точках синхронизации вычислений скрыт за обработкой строго внутренних ячеек расчетных подобластей отдельных устройств.

По результатам контрольных запусков программного обеспечения эффективность распараллеливания в гетерогенном режиме составляет от 80% до 95% относительно запуска на минимально возможном числе устройств. Так, например, ускорение вычислений на сетке, содержащей 500 миллионов ячеек, при полной загрузке 640 модулей суперкомпьютера Ломоносов-2 по сравнению с запуском приложения на 40 модулях системы составило 13.67 раза. Параллельная эффективность вычислений на локально адаптивных сетках находится в пределах 70-75%.

Помимо непосредственно численных расчетов задач внешнего обтекания вычислительное ядро комплекса программ TAPIR может быть использовано как платформа для создания приложений численного моделирования широкого круга задач механики сплошной среды [10] и рассматриваться в качестве суперкомпьютерного приложения для оценки производительности новых вычислительных устройств [11] и кластерных систем.

4. Препроцессор обработки данных

Встроенный в вычислительное ядро комплекса препроцессор распределенной обработки данных реализован в виде переносимой библиотеки подпрограмм [12], которая включает в себя стандартные процедуры обработки топологии нерегулярных сеток и графов на этапе инициализации данных широкомасштабных вычислительных экспериментов. В их число входят подпрограммы инициализации дуального графа сеток с элементами четырех типов, выделения расчетных областей MPI-процессов и построения схемы обменов данными.

Быстродействие библиотечных процедур проверялось на примерах обработки смешанных сеток, содержащих от 100 до 500 миллионов ячеек. В таблице 2 приводятся показательные времена работы программных модулей для групп из 168 и 336 MPI-процессов. Расчетная сетка содержит 136 миллионов вершин и 230 миллионов элементов, а описание ее топологии занимает 9.3 ГБ дискового пространства.

Таблица 2. Времена выполнения процедур

Этап обработки	Время выполнения (секунд)	
	168 процессов	336 процессов
Инициализация дуального графа	6	5
Составление списка обрабатываемых элементов	31	26
Инициализация карты обменов данными	5	7
Локализация геометрии расчетных областей	54	62
Общее время	96	100

Внешний препроцессор комплекса программ TAPIR состоит из двух программ генерации смешанных сеток и программы локальной адаптации сеток с элементами четырех типов. Генерация подробных сеток размерностью до 500 миллионов ячеек выполняется путем равномерного изотропного измельчения базовой дискретной модели или через объединение предварительно построенных сеточных блоков с согласованными границами. Равномерное измельчение применяется в основном при создании сеток для отладки и оценки эффективности распределенных алгоритмов. Вариант объединения согласованных подсеток решает проблему ограничения размерности дискретной модели в существующих последовательных приложениях генерации неструктурированных сеток. Последовательная программа адаптации смешанных сеток выполняет локальное измельчение и объединение ячеек конформной или полученной ранее иерархической адаптивной сетки на основе анализа поля газодинамических переменных. В качестве параметров работы программы задаются пороговые значения одного или нескольких из предусмотренных критериев адаптации, флаг нормирования критерия на характерный размер ячейки и ограничение на максимальное число расчетных ячеек сетки на выходе.

Литература

1. Gorobets A., Soukov S., Bogdanov P. Multilevel parallelization for simulating turbulent flows on most kinds of hybrid supercomputers. *Computers and Fluids*. 2018. vol. 173. pp. 171–177. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.03.011>
2. Barth T.J. Numerical Aspects of Computing High-Reynolds Number Flows on Unstructured Meshes. AIAA Paper 91-0721, 1991.
3. Kim S., Caraeni D., Makarov B. A Multidimensional Linear Reconstruction Scheme for Arbitrary Unstructured Grids. Technical report. AIAA 16th Computational Fluid Dynamics Conference, Orlando, Florida American Institute of Aeronautics and Astronautics. June 2003.
4. Toro E.F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg; 2009. doi: 10.1007/b79761.
5. Wada Y., Liou M.S. A flux splitting scheme with high resolution and robustness for discontinuities // AIAA Paper 94-0083.

6. Powell K., Roe P., Quirk J. Adaptive-Mesh Algorithms for Computational Fluid Dynamics. In: Hussaini M.Y., Kumar A., Salas M.D. (eds) Algorithmic Trends in Computational Fluid Dynamics. N.Y.: ICASE/NASA LaRC Series. Springer, 1993.
7. Spearman M.L., Braswell D.O. Aerodynamics of a Sphere and an Oblate Spheroid for Mach Numbers From 0.6 to 10.5 Including Some Effects of Test Conditions. NASA Technical Memorandum 109016, 1993.
8. Hodges A.J. The Drag Coefficient of Very High Velocity Spheres // Journal of Aeronautical Sciences, Vol. 24, No. 10, October 1957, pp. 755–758.
9. Kryuchkova A.S. Numerical simulation of a hypersonic flow over HB-2 model using UST3D programming code // 2019 J. Phys.: Conf. Ser. 1250 012010. DOI: 10.1088/1742-6596/1250/1/012010.
10. Popov I., Sukov S. Modified method of adaptive artificial viscosity for solution of gas dynamics problems on parallel computer systems // EPJ Web of Conferences 173, 03020 (2018). doi: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201817303020>.
11. Gorobets A.V., Soukov S.A., Neiman-Zade M.I., Okunev S.K., Kalyakin A.A. Performance of elbrus-8c processor in supercomputer cfd simulations // Mathematical Models and Computer Simulations. 2019. Vol. 11. No. 6. pp. 914-923.
12. Суков С.А. Библиотека препроцессорной обработки неструктурированных сеток hm4PreprocessorLib // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 108. 20 с. doi:10.20948/prepr-2016-108.

MSC2020 65Y05 35Q30

Parallel program complex TAPIR for CFD simulations

S. A. Soukov

Keldysh Institute of Applied Mathematics ¹

Abstract: The article presents a description of the parallel program complex TAPIR (developed in the Keldysh Institute of Applied Mathematics) functionality. The software is designed for numerical simulation of the external flows around bodies on conformal and locally adaptive mixed meshes using the resources of high-performance systems with various architectures. The formulation of a numerical algorithm, examples of calculation results, characteristics of the efficiency of parallelization of computations and distributed data processing are given.

Keywords: computational fluid dynamics, unstructured meshes, parallel computation.

References

1. Gorobets A., Soukov S., Bogdanov P. Multilevel parallelization for simulating turbulent flows on most kinds of hybrid supercomputers. Computers and Fluids. 2018. vol. 173. pp. 171–177. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.03.011>
2. Barth T.J. Numerical Aspects of Computing High-Reynolds Number Flows on Unstructured Meshes. AIAA Paper 91-0721, 1991.

3. Kim S., Caraeni D., Makarov B. A Multidimensional Linear Reconstruction Scheme for Arbitrary Unstructured Grids. Technical report. AIAA 16th Computational Fluid Dynamics Conference, Orlando, Florida American Institute of Aeronautics and Astronautics. June 2003.
4. Toro E.F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg; 2009. doi: 10.1007/b79761.
5. Wada Y., Liou M.S. A flux splitting scheme with high resolution and robustness for discontinuities. AIAA Paper 94-0083.
6. Powell K., Roe P., Quirk J. Adaptive-Mesh Algorithms for Computational Fluid Dynamics. In: Hussaini M.Y., Kumar A., Salas M.D. (eds) Algorithmic Trends in Computational Fluid Dynamics. N.Y.: ICASE/NASA LaRC Series. Springer, 1993.
7. Spearman M.L., Braswell D.O. Aerodynamics of a Sphere and an Oblate Spheroid for Mach Numbers From 0.6 to 10.5 Including Some Effects of Test Conditions. NASA Technical Memorandum 109016, 1993.
8. Hodges A.J. The Drag Coefficient of Very High Velocity Spheres. Journal of Aeronautical Sciences, Vol. 24, No. 10, October 1957, pp. 755–758.
9. Kryuchkova A.S. Numerical simulation of a hypersonic flow over HB-2 model using UST3D programming code. 2019 J. Phys.: Conf. Ser. 1250 012010. DOI: 10.1088/1742-6596/1250/1/012010.
10. Popov I., Sukov S. Modified method of adaptive artificial viscosity for solution of gas dynamics problems on parallel computer systems. EPJ Web of Conferences 173, 03020 (2018). doi: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201817303020>.
11. Gorobets A.V., Soukov S.A., Neiman-Zade M.I., Okunev S.K., Kalyakin A.A. Performance of elbrus-8c processor in supercomputer cfd simulations. Mathematical Models and Computer Simulations. 2019. Vol. 11. No. 6. pp. 914-923.
12. Soukov S.A. Unstructured mesh preprocessing library hm4PreprocessorLib. Keldysh Institute preprints, 2016. No. 108. 20 pp. (in Russian) doi:10.20948/prepr-2016-108. (In Russian).