

Суперкомпьютерный код на пространственных неструктурированных сетках для задач внешнего обтекания

М.К. Ермаков, И.А. Крюков

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Разработан суперкомпьютерный код для задач дозвукового и сверхзвукового обтекания летательных аппаратов на основе решения уравнений Эйлера и Навье-Стокса на пространственных тетраэдральных сетках. Решение уравнений основано на методе С.К.Годунова 2-го порядка точности. Для распараллеливания использован неинвазивный подход, основанный на управлении вычислениями структурами данными, и средства OpenMP+MPI для языка Фортран. Приводятся примеры построения тетраэдральных сеток и расчетов обтекания летательных аппаратов с числом элементов сеток до 1 млрд. ячеек и с использованием до 128 процессоров СК "Ломоносов".

Ключевые слова: уравнения Эйлера, уравнения Навье-Стокса, суперкомпьютерное моделирование, тетраэдральные сетки, обтекание летательных аппаратов.

1. Введение

Современные развитые исследовательские и промышленные CFD пакеты включают возможности использования параллельных вычислительных систем. Наиболее распространенными зарубежными CFD пакетами являются ANSYS, FLUENT, CFX и CD-Adapco, отечественные пакеты включают FlowVision, Логос, NOISEtte и другие.

В данной работе представлены результаты разработки параллельного CFD пакета на основе последовательных CFD кодов, разработанных авторами ранее в Институте проблем механики им.А.Ю.Ишлинского РАН.

Технологический процесс моделирования обтекания реалистичных летательных аппаратов включает в себя построение пространственной модели объекта, создание области течения вокруг объекта, генерацию пространственной сетки области течения, постановку задачи в виде выбора определяющих уравнений для описания физических процессов, задание граничных условий, проведение вычислений, визуализацию и анализ результатов. В статье описываются научный и технологический инструментарий, используемый для решения данной задачи, включающей в качестве центральной проблемы параллельное моделирование обтекания летательных аппаратов в широком диапазоне чисел Маха на сверхподробных сетках на суперкомпьютере.

2. Постановка задачи и методы решения

Разрабатываемый параллельный CFD код предназначен для моделирования обтекания летательных аппаратов на основе уравнений Эйлера для невязкого газа и уравнений Навье-Стокса для вязкого теплопроводного сжимаемого совершенного газа. Подход к построению расчетных схем основан на использовании метода контрольного объема на неструктурированных сетках, в качестве элементов которых могут быть тетраэдры, призмы и кубоиды.

В качестве входных данных предполагается пространственная модель объекта, созданная одним из стандартных пакетов САПР [1]. Построение пространственной расчетной сетки может осуществляться либо имеющимися доступными генераторами сеток, либо с использованием разработанного в Институте подхода к построению пространственных тетраэдральных сеток на основе методе молекулярной динамики [2], позволяющим потенциально эффективно использовать распараллеливание.

Использование структур данных, включающих связи между контрольными ячейками, позволяют реализовать в коде принцип построения вычислений, известный как «управление данными». Стартуя от последовательного кода, построенного на управлении данными, мы можем,

модифицируя структуры данных, построить исполняемый в параллельном режиме код, ядро которого будет неизменным. Неизменность кода подразумевает использование кода, в которой не вносятся никаких изменений при переходе от последовательной моды исполнения к параллельной моде. На рис. 1 представлена схема такого неинвазивного, т.е. не вызывающего изменений в коде подхода. Слева на рис. 1 представлен последовательный код, который во временном цикле включает вычисления во внутренних и граничных ячейках. Преобразованный неинвазивным подходом в параллельный код (справа) набор операций содержит разделенные на части вычисления во внутренних и граничных для каждой области ячейках. Дополнительно, выделенные красным операции обмена (start send/receive) и ожидания (wait_all), представляют вместе параллельный код. При этом вычисления во внутренних и граничных ячейках идут по тем же самым операторам алгоритмического языка, что и в последовательном коде, но имеющие разные структуры, управляющие вычислениями. Такими структурами являются массивы, описывающие пространственную сетку: грани, соседи, вершины и их координаты.

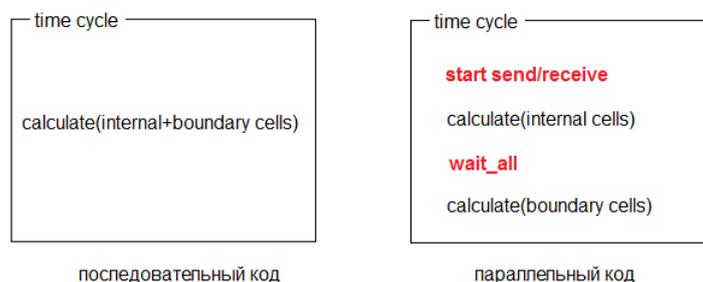


Рис. 1. Схема организации вычислений в последовательном и параллельном вариантах кода.

Построение таких управляющих структур и является подводной частью айсберга организации параллельных вычислений в коде на основе разбиения области.

Одной из целей создания данного параллельного CFD кода является моделирование обтекания гиперзвуковых летательных аппаратов (ГЛА) [3].

Организация операций для сеточных задач для параллельных вычислений представлена в описании программной платформы INMOST[4]. В настоящей работе реализован собственный подход, который не требует перестройки логики работы и структур данных последовательной программы. Для выполнения технологической цепочки проведения работ по обтеканию объектов сложной формы требуется проведение следующих предварительных операций:

- 1) Построение графа связей между расчетными ячейками.
- 2) Разбиение множества расчетных ячеек на подобласти. Данный шаг выполнялся с использованием широко распространенного открытого пакета для задач теории графов METIS.
- 3) Формирование данных, определяющих вычисления для каждой из расчетных областей.

Схема организации работ в последовательном и параллельном вариантах кода представлена на рис. 1. Можно видеть, что в цикле расчета шага по времени изменения сводятся к разбиению вычислений для «внутренних» и для «внешних» групп ячеек, а также к вызову подпрограмм, обеспечивающих запуск асинхронных компактных операций обмена и ожидания окончания операций. Дополнительные операции помечены красным цветом. Для обеспечения универсальности обмена данными между областями используется структуры представления разреженных матриц.

Так как существующие средства создания расчетных сеток ограничены построением сеток объемом в несколько десятков миллионов ячеек, то для получения более подробных сеток используется метод дробления, заключающийся в разбиении каждого контрольного объема на 8 более мелких таким образом, что разбиения соседних объемов согласованы между собой по общей грани.

Использованием дробления каждой из ячеек на восемь более мелких удалось построить вычислительной сетки для ГЛА X-43 размером до 640 млн. ячеек, для ГЛА X-51 до 1 млрд. яче-

ек. Пример используемых тетраэдральных сеток представлен на рис. 2 в виде поверхностной сетки на летательном аппарате и в плоскости симметрии течения.

Пример пространственного разбиения области на 64 части представлен на рис. 3. Разбиение области на части реализуется популярным пакетом для задач теории графов METIS на подготовительной стадии к суперкомпьютерным вычислениям. Потребности оперативной памяти для шага разбиения сетки являются наиболее существенными.

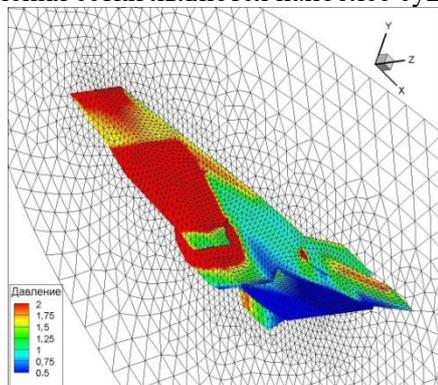


Рис. 2. Пример тетраэдральной неструктурированной сетки в 150 тыс. ячеек на поверхности и в плоскости симметрии ГЛА Х-43.

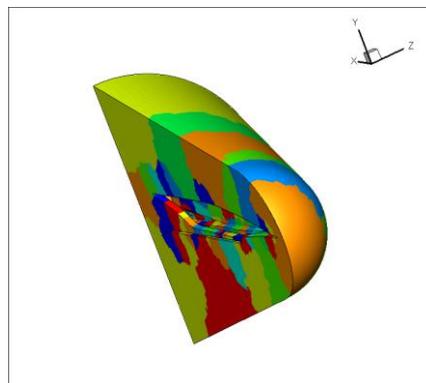


Рис. 3. Разбиение расчетной области на 64 части вокруг ГЛА Х-51.

3. Проведение вычислений на суперкомпьютере

Для переработки в параллельную версию был использован последовательный код `ug3D`, который ранее использовался для решения задач моделирования внутренних и внешних задач аэродинамики. Перерабатываемый код моделирует течения газа на основе уравнений Навье-Стокса и Эйлера для неструктурированных трехмерных сеток на основе обобщенного метода С.К. Годунова со вторым порядком аппроксимации по пространству и времени.

Для организации суперкомпьютерных вычислений использован подход, основанный на MPI+OpenMP. В настоящее время поддерживаются только сетки, содержащие тетраэдры в качестве элементов.

Суперкомпьютерные вычисления проводились на сетках, содержащих до 1 млрд. расчетных ячеек. Примеры расчетов для внешнего обтекания летательных аппаратов на основе уравнений Эйлера невязкого совершенного газа представлены на рис. 4-6. На рис. 4 представлены результаты обтекания ГЛА Х-43 при числе Маха 6 на сетке 640 млн. ячеек. Представленные распределения давления на поверхности аппарата и в плоскости симметрии течения демонстрируют подробное разрешение структуры течения, включающей ударные волны, волны разрежения, характеристики и их взаимодействие. В открытой части двигательной установки видна структура взаимодействия отраженных ударных волн.

На рис. 5 представлены результаты обтекания ГЛА Х-51 при числе Маха 5 на сетке 128 млн. ячеек. Распределения давления представлены на поверхности летательного аппарата, в плоскости симметрии течения и на выходной границе расчетной области. Видно высокое разрешение ударно-волновой структуры и зон разрежения при обтекании летательного аппарата. Максимум давления достигается в зонах торможения потока и внутри двигательного отсека при взаимодействии отраженных ударных волн со стенками и между собой. За гранями поверхности аппарата наблюдаются веера разрежения и значительная область сильного разрежения за аппаратом, связанная с отсутствием процессов горения в двигательной установке.

На рис. 6 представлены результаты обтекания перспективного летательного аппарата. Показано распределение плотности на поверхности аппарата и изолинии плотности в плоскости симметрии течения на сетке 30 млн. ячеек.

Разработанный код был верифицирован на ряде стандартных аэродинамических тестов, а также валидирован на имеющихся экспериментальных данных.

Эффективность распараллеливания на предварительной версии кода составляла более 60

процентов при использовании 128 процессоров. Снижение эффективности распараллеливания при большом числе процессоров связано, по нашему представлению, главным образом, с различным объемом вычислений в областях течений с различными свойствами. Использование модификаций схем с более однородными расчетными характеристиками должно улучшить данный показатель.

Проведение расчетов на используемых сверхточных сетках предъявляет серьезные требования ко всем типам ресурсов, используемых для расчетов. К таким ресурсам, очевидно, относятся, в первую очередь, процессоры, оперативная память узлов суперкомпьютера и внешняя память суперкомпьютера. Не менее важным является наличие большой оперативной памяти на ПК для проведения пре- и постпроцессорной обработки, значительные объемы внешней памяти, а также наличие быстрых каналов обмена для загрузки и выгрузки файлов.

Приведем в качестве примера требуемые ресурсы для расчетов на сверхточной сетке в 1 млрд. ячеек. Объем памяти для поля течения и параметров, описывающих неструктурированную конечно-объемную сетку, составляет 120 Гб. Очевидно, что разбиение данных на собственно решение задачи и сетку позволяет существенно экономить на использовании ресурсов. Для пре- и постпроцессорной обработки данных такой размерности требуется ПК с оперативной памятью в 129 Гб и существенной внешней памятью. Для обработки данных такого объема требуется максимально использовать алгоритмы, требования к памяти и числу операций которых, являются линейными по числу операций. Все файлы являются бинарными, а операции обмена бесформатными. Суперкомпьютерный код и вспомогательные программы реализованы на языке Фортран, что обеспечивает беспрепятственную миграцию в различные операционные системы. Исключением является процедура разбиения сетки, основанная на библиотеке METIS, написанной на языке С.

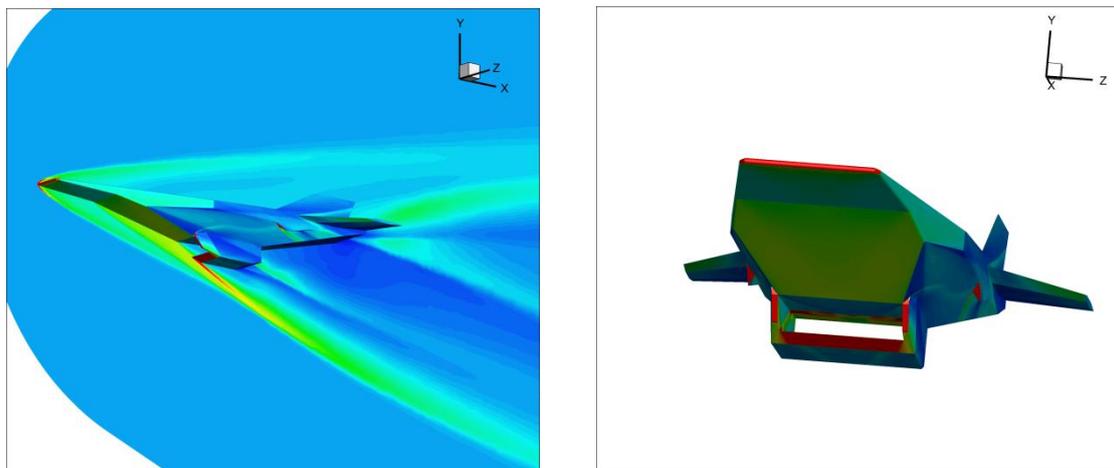


Рис. 4. Распределение давления на поверхности и в плоскости симметрии ГЛА Х-43 при числе Маха 6 на сетке 640 млн. ячеек.

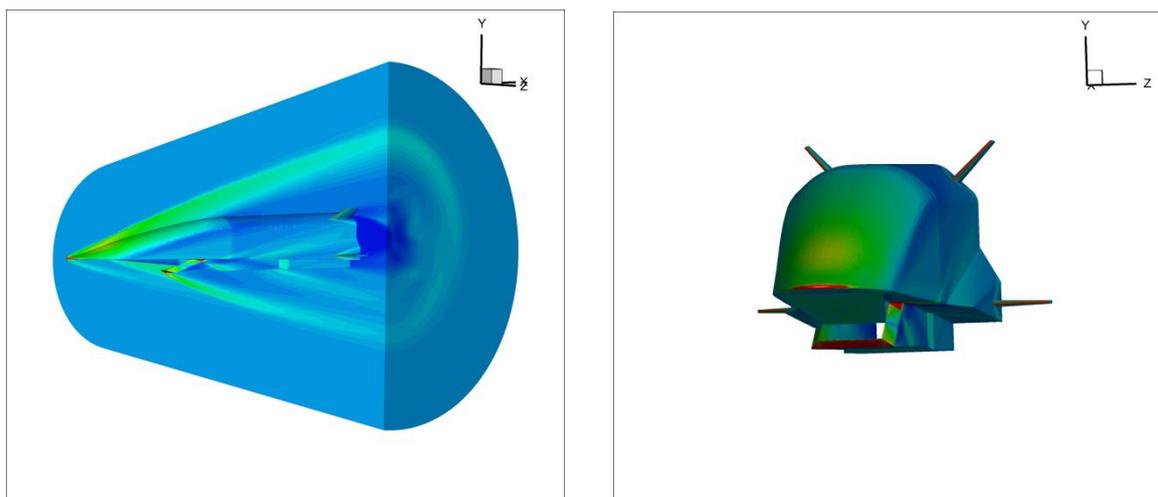


Рис. 5. Распределение давления на поверхности ГЛА X-51, в плоскости симметрии и на выходной границе расчетной области при числе Маха 5 на сетке 128 млн. ячеек.

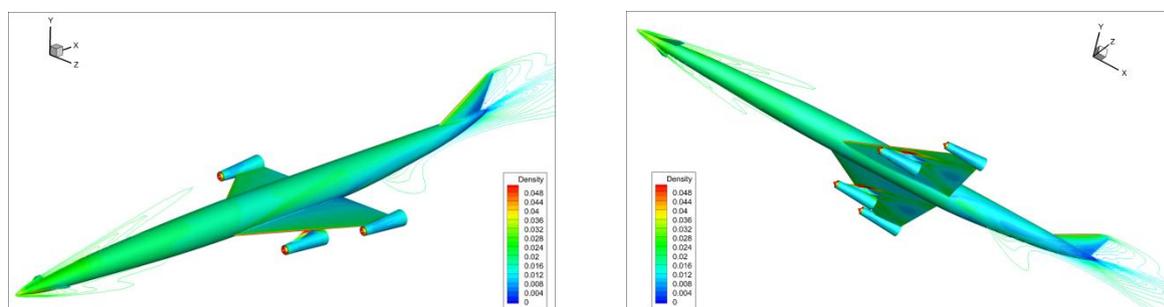


Рис. 6. Распределение плотности на поверхности перспективного летательного аппарата.

5. Выводы

В работе описана реализация программной платформы для распараллеливания вычислительных кодов, которая не требует переделки структур данных и ядра вычислительной части. Подход реализован для распараллеливания на основе MPI+OpenMP кода для уравнений Навье-Стокса и уравнений Эйлера, использующего вычисления на пространственной неструктурированной сетке. Получены пространственные неструктурированные сетки для ГЛА X-43 и X-51 объемом 640 млн. ячеек и 1 млрд. ячеек, соответственно. Параллельный код позволяет проводить расчеты обтекания ЛА в широком диапазоне чисел Маха, в частности, для расчетных сеток до 1 млрд. ячеек и с использованием до 128 процессоров. Использование разработанного параллельного кода позволит проводить вычисления с более высокой степенью детализации в области пограничных слоев и высоких градиентов решения, перейти к сопряженным расчетам обтекания интегральной компоновки и работы двигательной установки, а также использовать элементы оптимизации исследуемых объектов. Разработанный суперкомпьютерный код также является основой для реализации более полных моделей физических моделей обтекания.

Авторы благодарят к.ф.-м.н. А.Л. Железнякову за создание неструктурированных тетраэдральных расчетных сеток для исследуемых летательных аппаратов.

Работа выполнена по теме государственного задания (№ госрегистрации АААА-А17-117021310372-6).

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова [5].

Литература

1. Котов М.А. Моделирование поверхности гиперзвукового летательного аппарата // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2014. – Т. 14. – Вып. 14.
2. Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Построение пространственных неструктурированных сеток для задач аэротермодинамики методом молекулярной динамики // Доклады академии наук. – 2011. – Т. 439. – № 1. – С. 42–47.
3. Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. На пути к созданию модели виртуального ГЛА. I. – М.: ИПМех РАН, 2013. – 160 с.
4. Ю.В. Василевский, И.Н. Коньшин, Г.В. Копылов, К.М. Терехов. INMOST – программная платформа и графическая среда для разработки параллельных численных моделей на сетках общего вида. – М.: Изд-во Московского университета, 2013. – 144 с. – (Серия «Суперкомпьютерное образование»).
5. Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. Практика суперкомпьютера "Ломоносов" // Открытые системы. – М.: Издательский дом "Открытые системы", N 7, 2012. С. 36-39.