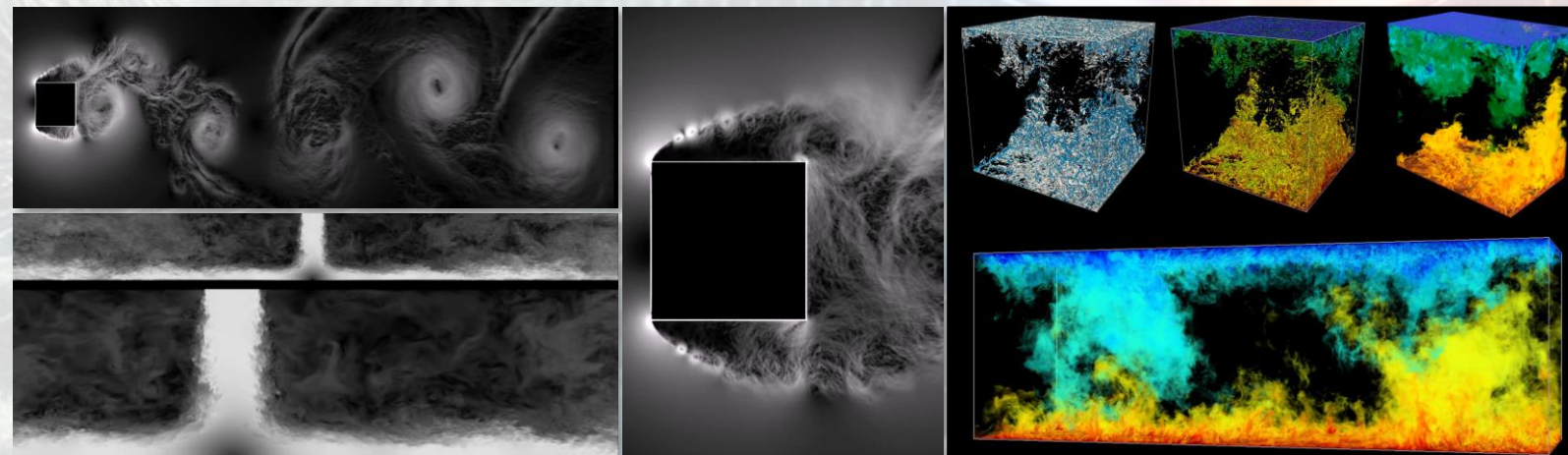


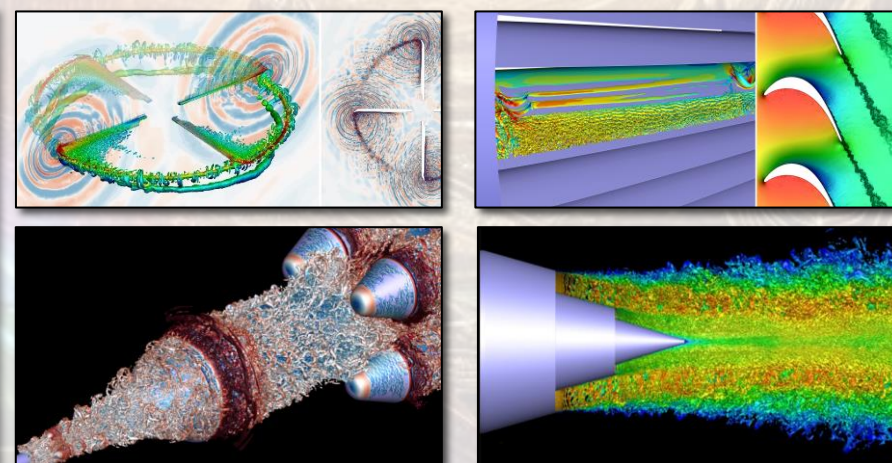
GPU реализация компонентов методики высокоточного суперкомпьютерного моделирования турбулентных течений

А. В. Горобец, А. П. Дубень, В. А. Сапожников

DNS – LES – DES – RANS



Hi-Fi SRS CFD



ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

<http://noisette.imamod.ru/>

Вычислительная методика

Уравнения Навье – Стокса для вязкого сжимаемого газа

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}(Q) = \nabla \cdot \mathcal{F}^V(Q, \nabla Q) \quad Q = (\rho, \rho \mathbf{u}, E)^T$$



Пространство: неструктурированные смешанно-элементные сетки

Конвекция: реконструкция: схемы семейства EBR(+TVD,WENO)

распад разрыва: Roe, HLLE, HLLC, L-F, AUSM, Годунов...

Вязкость: метод локальных разбиений AES



Время: неявные схемы BDF1, BDF2



Турбулентность: современные модели и подходы **RANS, LES, DES, SGS, STG, ...**

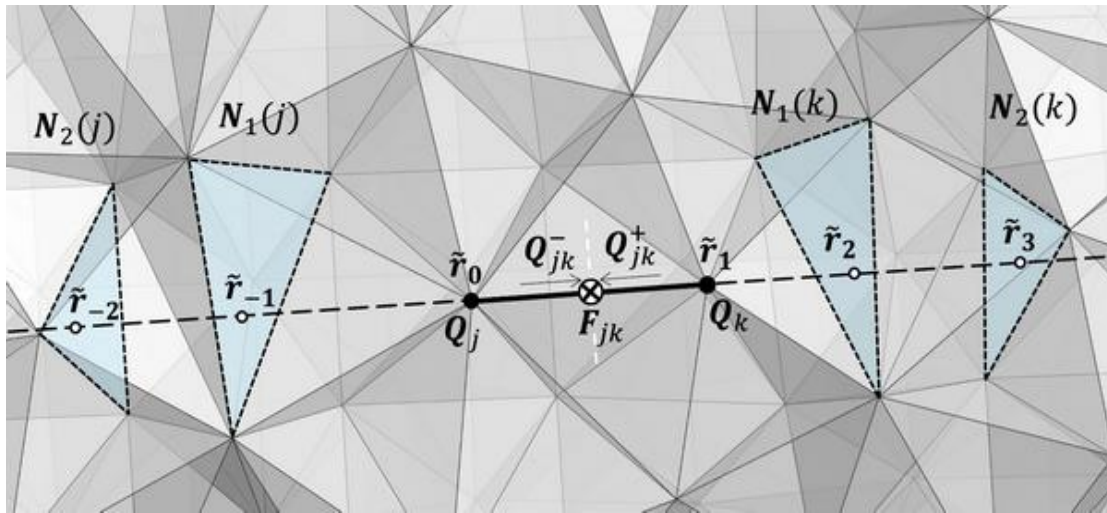
RANS: SA, SST, SST-LT, ... LES: Smag, S3, Sigma, Wale, ...

SGS: SLA, LSQ, Omega, ... DES: DES, DDES, IDDES, ...

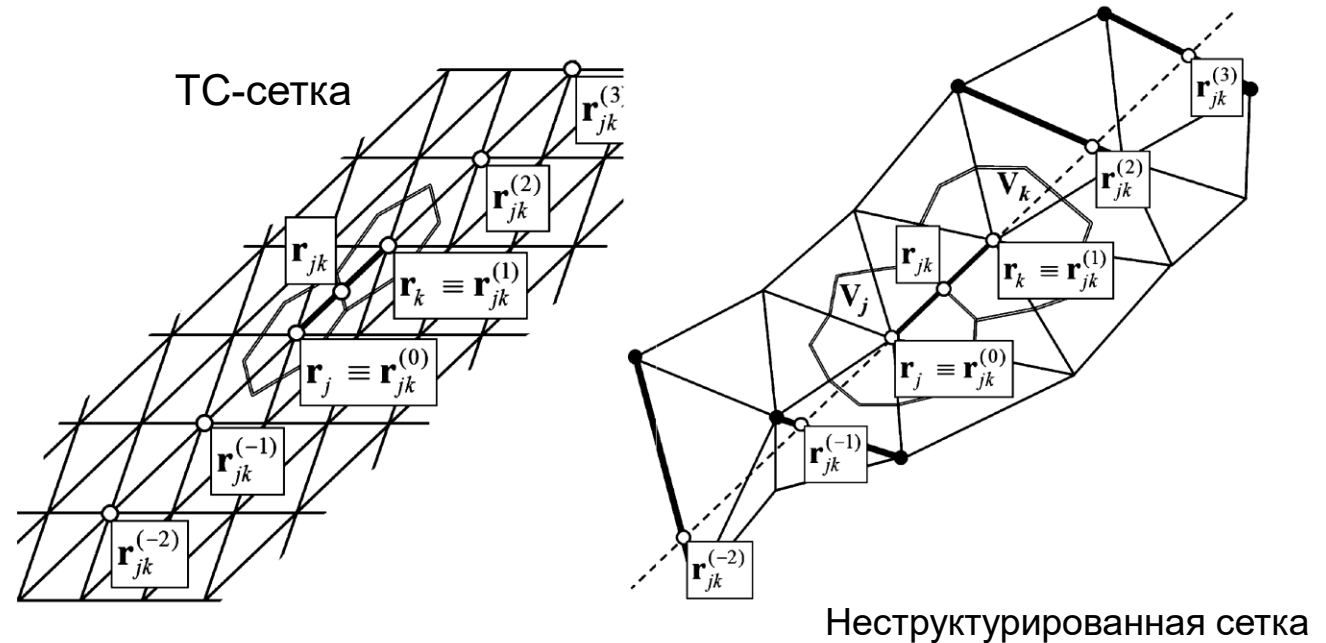
Схемы семейства EBR

Основные особенности:

- Сверхспособности на ТС-сетках – до 5 порядка точности
- Экономичность по памяти, вычислениям, обменам: 24В на ИК EBR3
- Упрощенный якобиан в неявной схеме



Интерполяционная конструкция

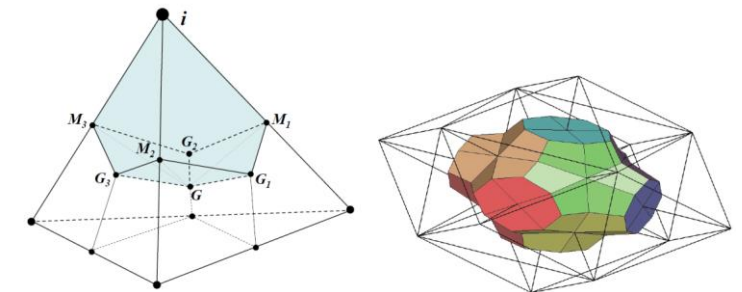


Неструктурированная сетка

Bakhvalov P. et al. IJNMF 81(6) (2016) 331–356 EBR schemes
базовая версия схемы для симплицальных сеток и гладких решений

Bakhvalov P. et al. CAF 157 (2017) 312–324 EBR-WENO/TVD
схема для разрывных решений на основе реконструкции WENO и TVD

Bakhvalov P. et al. CAF 239 (2022) 105352 EBR curvilinear reconstructions
адаптация схемы для анизотропной призматической зоны погранслоя



Контрольные объемы

Метод локальных разбиений AES

Вязкость: метод локальных разбиений AES – П. А. Бахвалов et al.

- линейный, совпадает с P1 Галёркиным на тетраэдрах
- на декартовых сетках для лапласиана 7-точечная схема вместо 27
- совместим с упрощенным якобианом, в котором только смежность по ребрам
- записывается в виде операции по ребрам сетки

Bakhvalov P., Surnachev M. Method of averaged element splittings for diffusion terms discretization in vertex-centered framework // JCP 450 (2022) 110819

Упрощенная дискретизация вязкости

- кратное снижение потребления памяти
- внедрение смешанной точности FP32-FP64

A. Gorobets, Bakhvalov P. et al. Acceleration of NOISEtte Code for Scale-resolving Supercomputer Simulations of Turbulent Flows. LJM 41(8) 2020 pp. 1463–1474

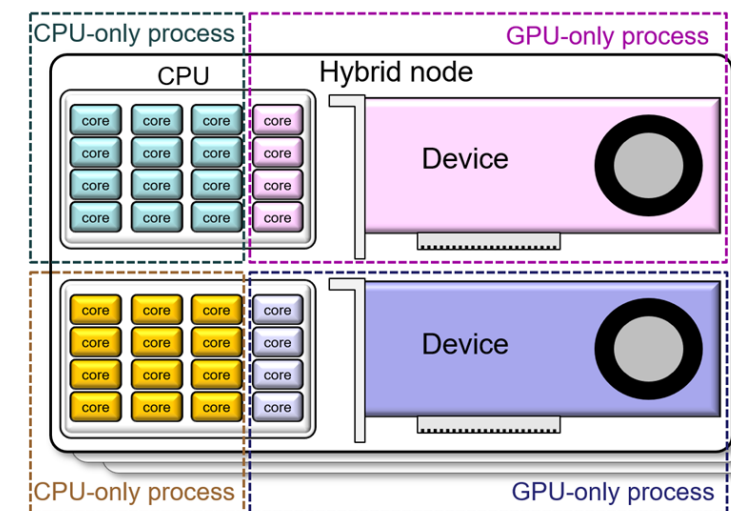
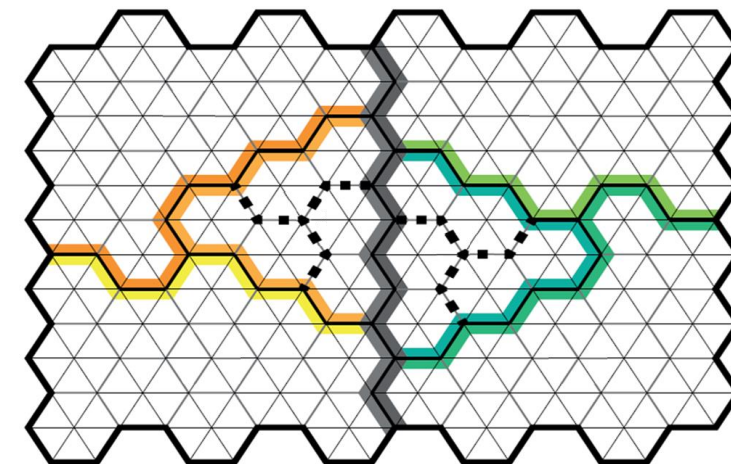
Сокращение потребления памяти = возможность вычислений на GPU

Многоуровневое распараллеливание MPI+OpenMP+OpenCL

- MPI: декомпозиция по узлам кластера и устройствам гибридного узла
- OpenMP: декомпозиция по ядрам CPU, поддержка сотен потоков
- OpenCL: реализация для графических процессоров

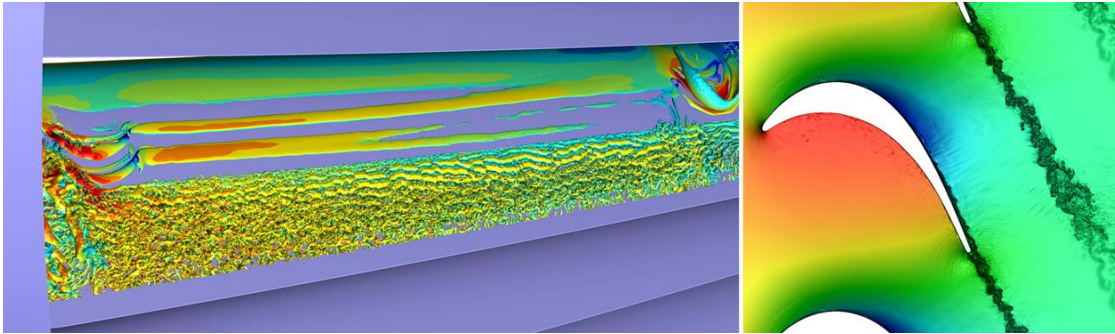
EBR3-WENO, Roe, неявная BDF1, RANS, сетка 3М узлов
Матчасть: 2 x CPU Intel Xeon 6326, 8xDDR4-3200

MPI	OpenMP	Время, с	Ускорение
1	1	32	1
1	64	1.43	22
2	32	1.27	25
32	2	1.18	27



Параллельная эффективность и производительность

EBR5, BDF2 (BiCGSTAB), IDDES, FP64/32, сетка 80M



K60-GPU:

2 x 16C CPU

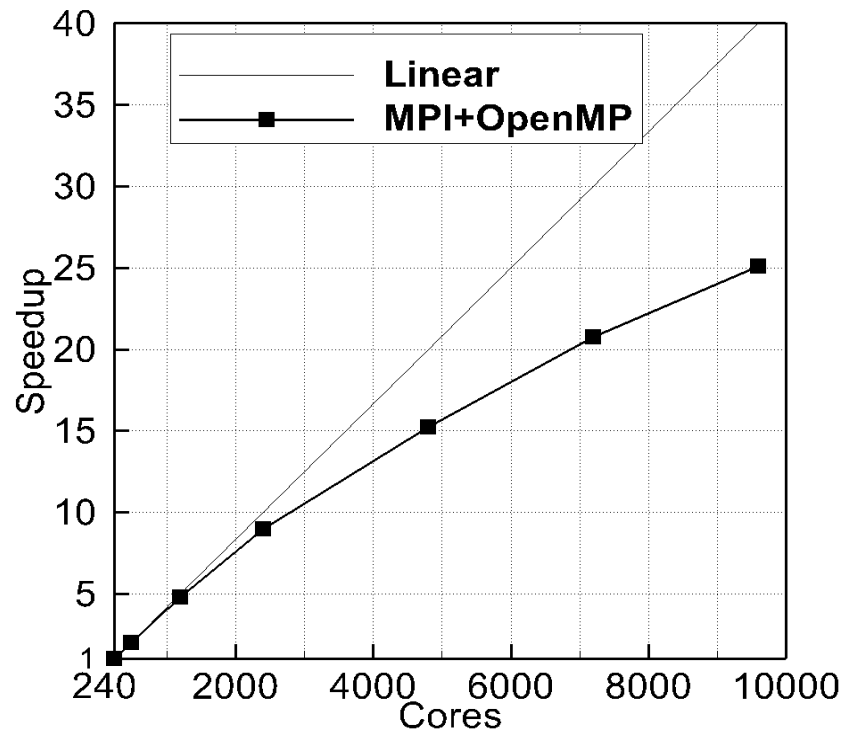
Intel Xeon **Gold 6142** (120 GB/s)

4 x GPU

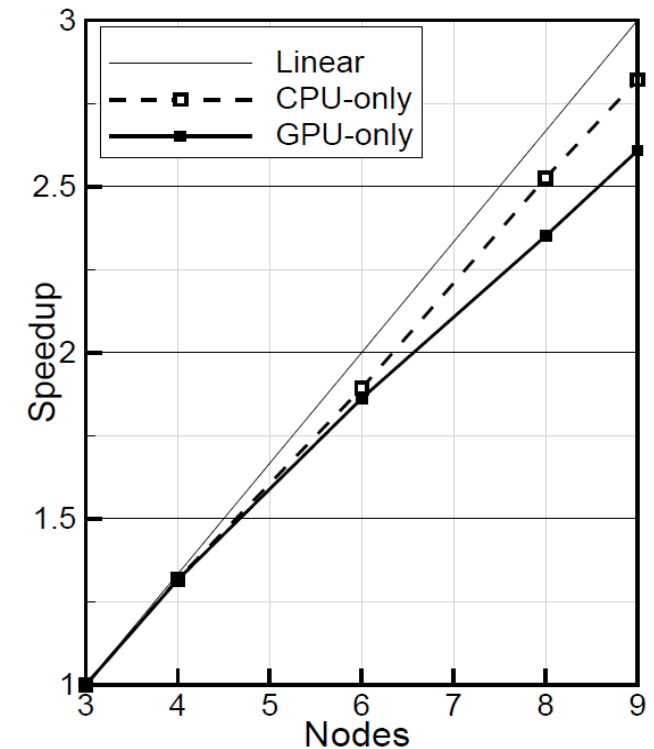
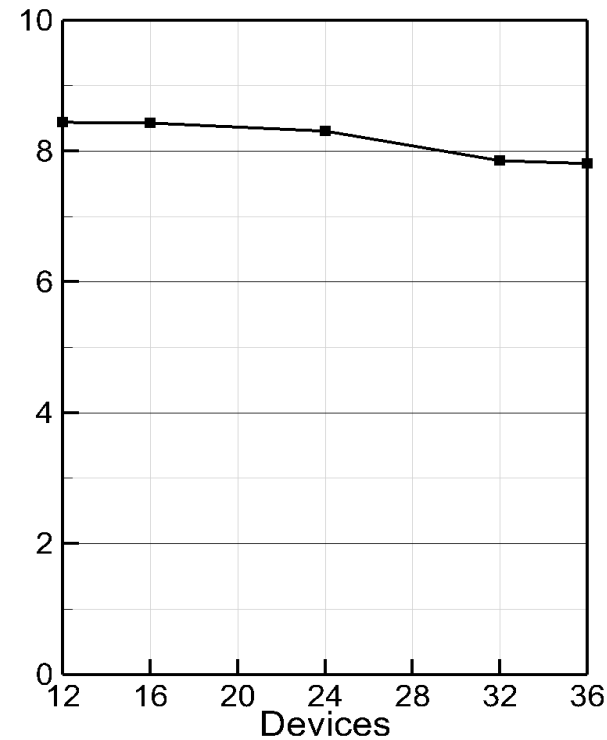
NVIDIA **V100** (32 GB, 900GB/s)



CPU: 2xCPU 24C Intel Xeon 8160

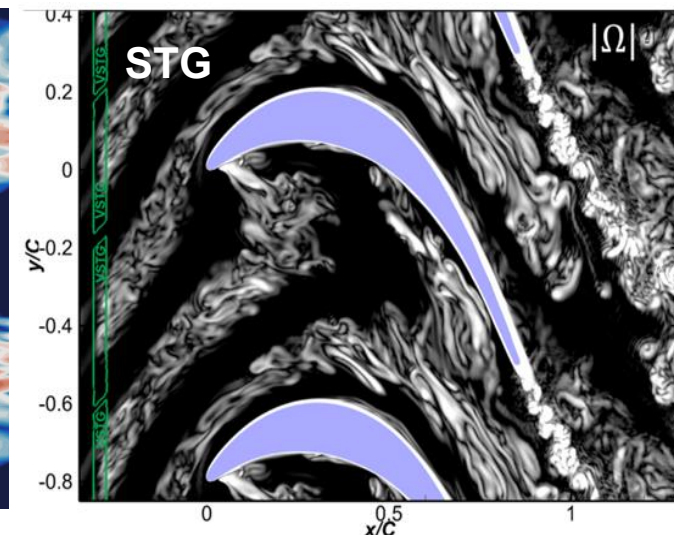
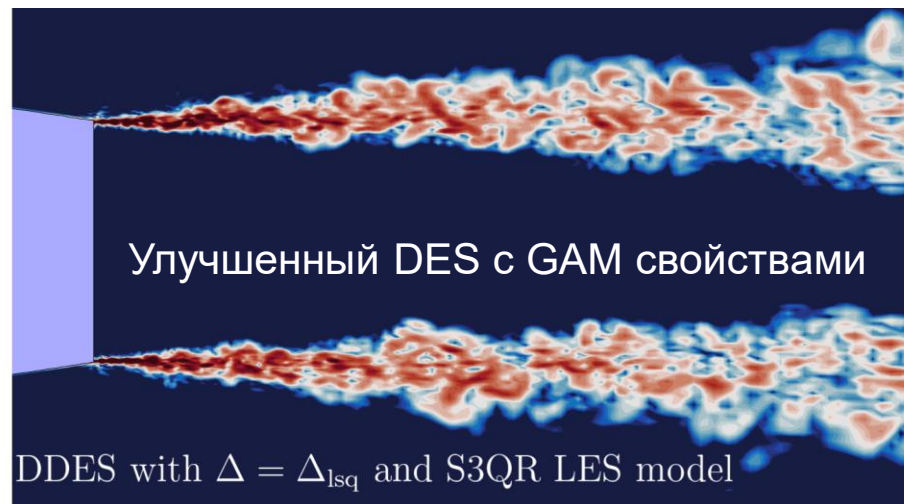
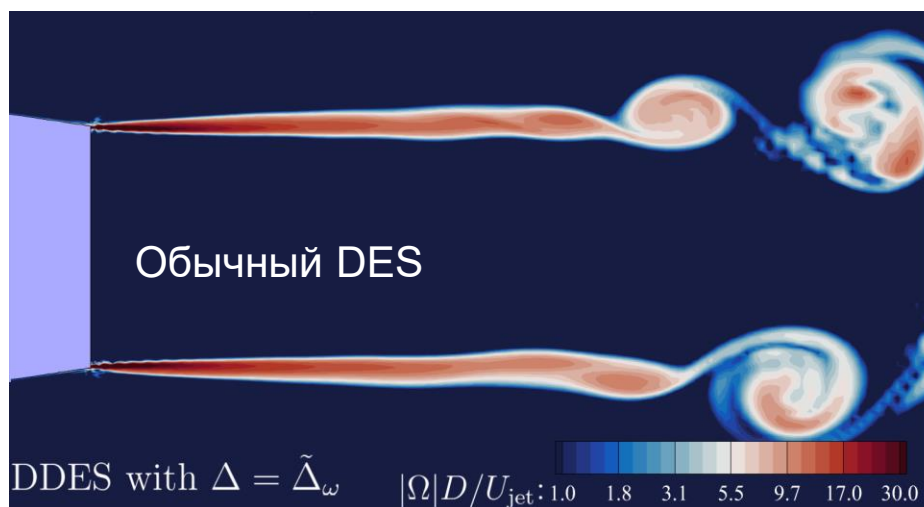


GPU vs 16-core CPU



Вихреразрешающее моделирование турбулентности

- **Гибридные RANS-LES методы DES, DDES, IDDES** – методика М. Л. Шура, М. Х. Стрельца и ко.
М. Shur, P. Spalart, M. Strelets, A. Travin. FTAC. 95 (2015) 709 – 737. <https://doi.org/10.1007/s10494-015-9618-0>
Guseva, E., Garbaruk, A., Strelets, M.K. FTAC 98, 481–502 (2017). <https://doi.org/10.1007/s10494-016-9769-7>
- **Альтернативные методы и модели RANS, LES, SGS; STG, CD/UW blending**
А. П. Дубень et al. – обобщение на неструктурированные сетки, улучшение DES
- **LES модели семейства S3**
F. X. Trias, A. Gorobets, et al. Physics of Fluids 27 (2015) 065103. <https://doi.org/10.1063/1.4921817>
- **Адаптивные подсеточные масштабы Δ_{LSQ} , Δ_{RLS}**
F.X.Trias, A.Gorobets, et al. Physics of Fluids. 29 (2017) 115109 <https://doi.org/10.1063/1.5012546>
F.X.Trias, A.Duben, et al. Physics of Fluids. 37 (2025) 085239 <https://doi.org/10.1063/1.5012546>



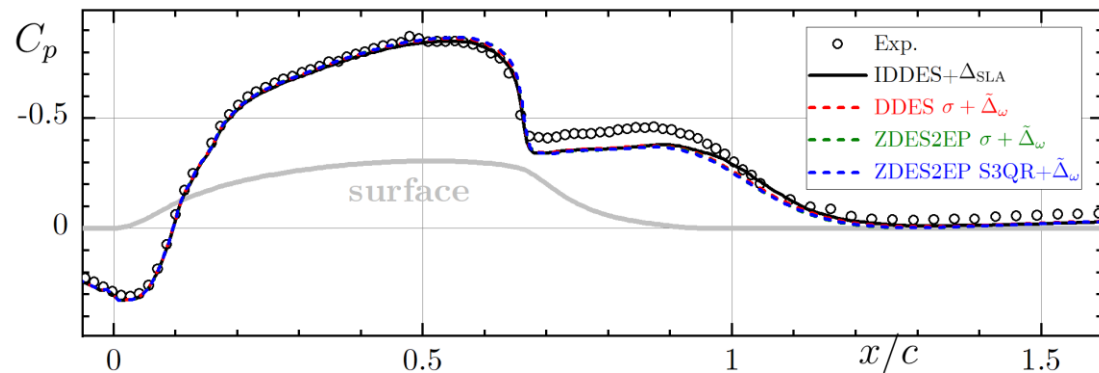
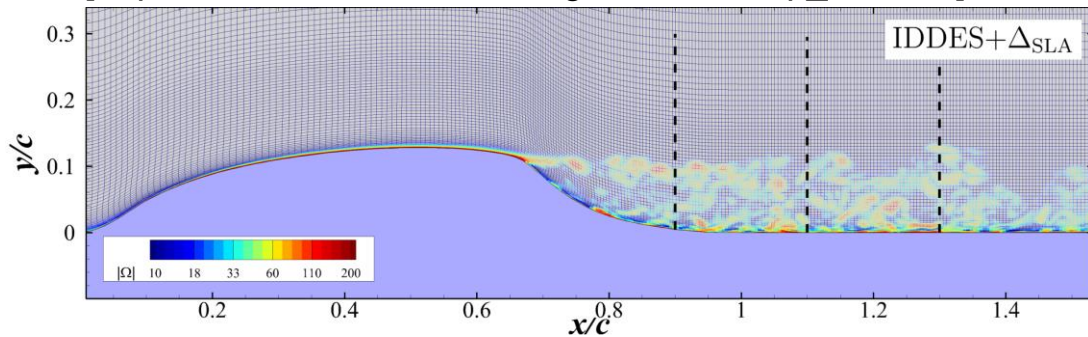
Вихреразрешающее моделирование турбулентности

DDES-EP: Detached Eddy Simulation with Enhances Protection of boundary layer

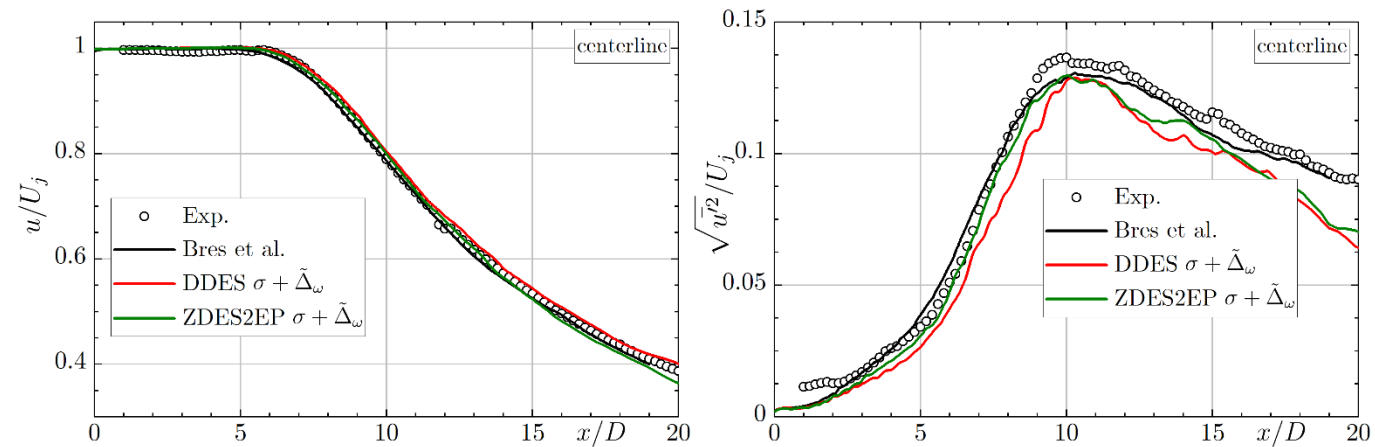
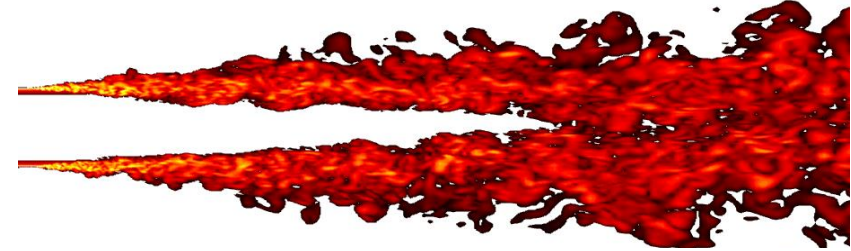
- улучшенная защита пограничного слоя
- не требует специальной калибровки констант защитной функции DDES для GAM подходов
- адаптировано для RANS моделей SA и SST
- адаптировано для GAM DES подходов
 - подсеточные LES моделей σ , S3*, WALE
 - динамические масштабы $\tilde{\Delta}_\omega$, Δ_{SLA} , Δ_{lsq}

NASA wall-mounted hump

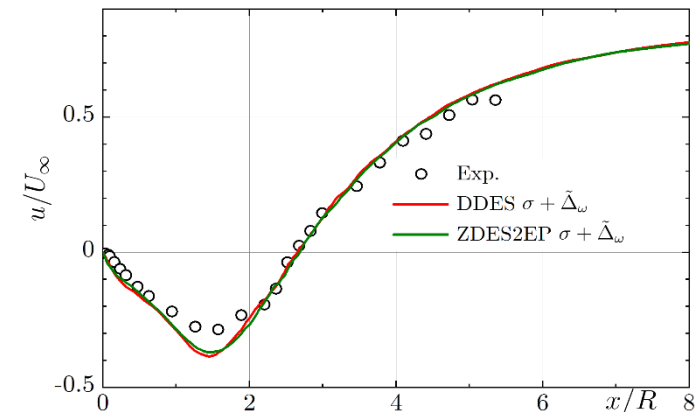
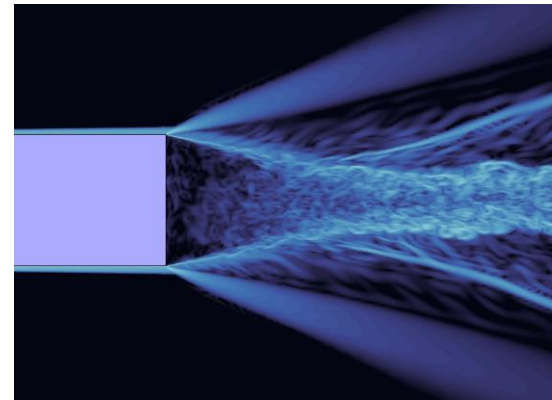
[https://turbmodels.larc.nasa.gov/nasahump_val.html]



Дозвуковая струя $M=0.9$
[Bres et al., 2018]



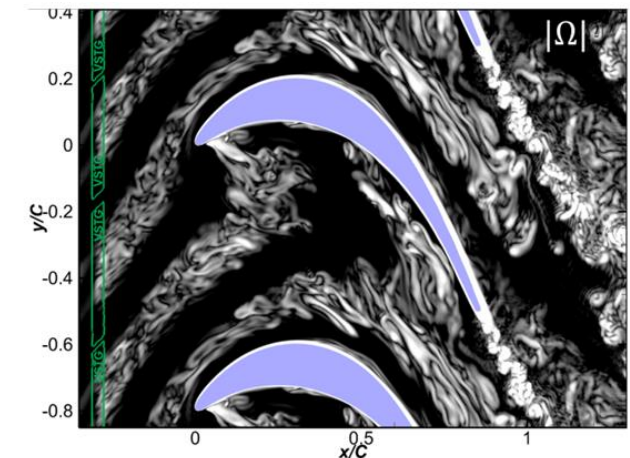
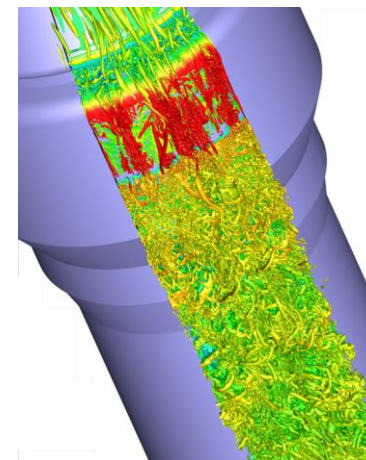
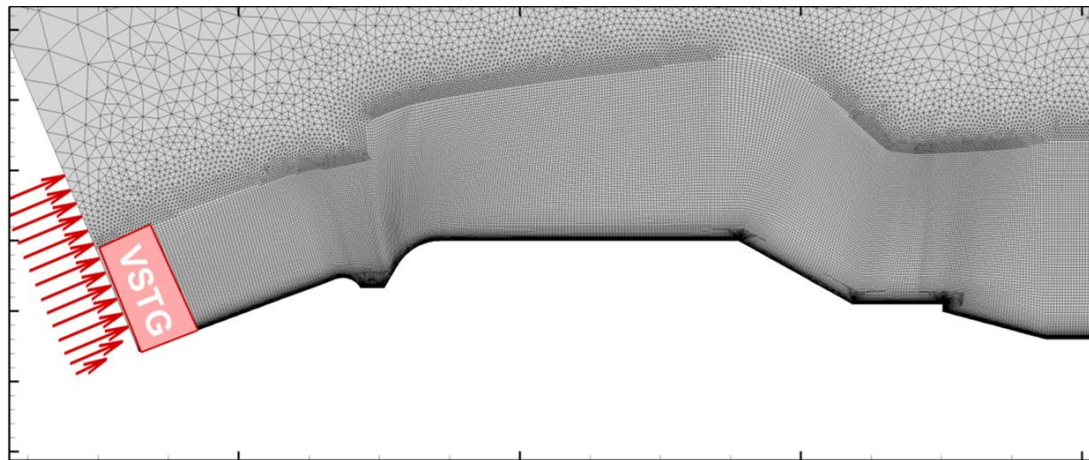
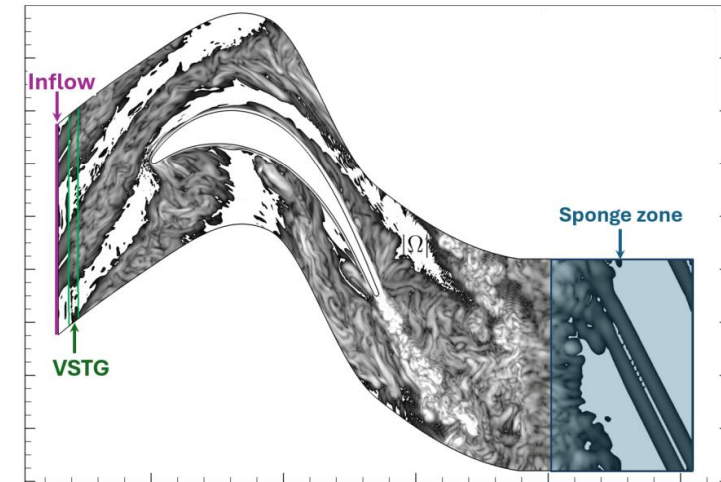
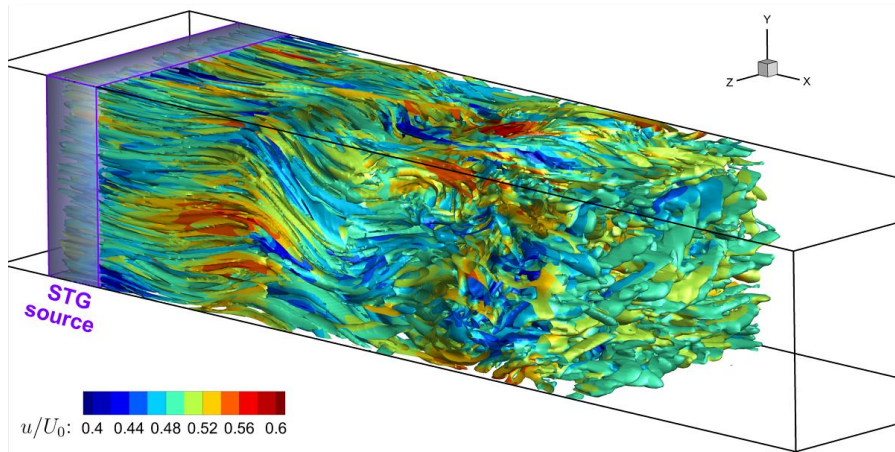
Сверхзвуковое ($M=2.46$) течение за
донным срезом цилиндра [Herrin&Dutton, 1994]



Вихреразрешающее моделирование турбулентности

- Генерация синтетической турбулентности

моделирование фрагментов сложного объекта, RANS – LES интерфейс



Shur, M., Strelets, M., Travin, A., et al.: Improved Embedded Approaches. Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design 134, 65–69 (2017). https://doi.org/10.1007/978-3-319-52995-0_3

Генератор синтетической турбулентности VSTG

Осцилляции скорости в узле

$$\mathbf{u}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_{ij} \mathbf{v}'(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{v}'(\mathbf{r}, t) = 2\sqrt{(3/2)} \sum_{n=1}^{N_m} \sqrt{q^n} [\boldsymbol{\sigma}^n \cos(k^n \mathbf{d}^n \cdot \mathbf{r}' + \phi^n)]$$

$$\mathbf{A} = A_{ij}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{R} = R_{ij}(\mathbf{r}): \mathbf{R} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$$

Нормированная амплитуда моды

$$q^n = \frac{E(k^n) \Delta k^n}{\sum_{n=1}^{N_m} E(k^n) \Delta k^n}, \quad E(k) = \frac{(k/k_e)^4}{[1 + 2.4(k/k_e)^2]^{17/6}} f_\eta f_{\text{cut}}$$

$$f_\eta = \exp[-(12k/k_\eta)^2], \quad f_{\text{cut}} = \exp\left(-\left[\frac{4 \max(k - 0.9k_{\text{cut}}, 0)}{k_{\text{cut}}}\right]^3\right)$$

Kernel-функции:

- **STGAmplitudes** – вычисление амплитуд q^n
- **STGSources** – вычисление пульсаций $\mathbf{u}'$

Проблемы:

1. STG вносит дисбаланс
2. Малое количество объектов
3. Много мат. функций, внутренние циклы

Shur, M.L., Spalart, P.R., Strelets, M.K., Travin, A.K.: Synthetic Turbulence Generators for RANS-LES Interfaces in Zonal Simulations of Aerodynamic and Aeroacoustic Problems. Flow, Turbulence and Combustion 93, 6392 (2014) <https://doi.org/10.1007/s10494-014-9534-8>

Shur, M., Strelets, M., Travin, A., et. al.: Improved Embedded Approaches. Go4Hybrid: Grey Area Mitigation for Hybrid RANS-LES Methods. Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, 134, 6569 (2018), https://doi.org/10.1007/978-3-319-52995-0_3

Ускорение VSTG

Версии kernel-функций:

- **DP / MP** – двойная точности или смешанная точность
- **WI / WG** – вычисление пульсаций u' в узле одной work-item или одной work-group

Ускорение на GPU: ×13 (DP 20)

GPU V100 vs CPU

16C Intel Xeon Gold

Сокращение времени

на GPU: 6% → 1%

Ускорение от MP – до ×3

Ускорение от WG – до ×3

Device	Version	Workgroup size	STGAmplitudes kernel, ms	STGSource kernel, ms
GPU A5000	DP-WI	32	74.9	52.6
	DP-WI	16	129.79	91.94
	MP-WI	32	25.3	22.4
	MP-WI	16	14.6	40.38
	MP-WG	32	9.66	40.65
	MP-WG	16	16.10	67.95
GPU V100	DP-WI	32	118.05	9.05
	DP-WI	16	77.45	8.04
	MP-WI	32	106.38	8.98
	MP-WI	16	60.04	7.27
	MP-WI	8	26.44	10.42
	MP-WG	32	9.01	22.76
	MP-WG	16	11.67	16.03

Задача T106 LPT, сетка 7M узлов, 0.5M в зоне VSTG

DDES-EP: улучшенная защита пограничного слоя

Функция защиты пограничного слоя $f_p = f_d [1 - (1 - f_{p2}) f_R]$

Inner – внутренняя зона пограничного слоя

функция GAM – Gray Area Mitigation

$$f_d(\mathcal{G}_{\text{inn}}) = 1 - \tanh \left[(C_{d1} r)^{C_{d2}} \right]$$

$$\mathcal{G}_{\text{inn}}(A) = \frac{A + \nu}{\sqrt{u_{i,j} u_{i,j}} \kappa^2 d_w^2}$$

$$f_R(\mathcal{G}_{\text{sep}}) = \begin{cases} 1, & \text{if } \mathcal{G}_{\text{sep}} \leq C_{d4} \\ \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{-6\alpha}{1-\alpha^2}\right)}, & \text{if } C_{d4} < \mathcal{G}_{\text{sep}} < \frac{4}{3}C_{d4} \\ 0, & \text{if } \mathcal{G}_{\text{sep}} \geq \frac{4}{3}C_{d4} \end{cases}$$

Outer – внешняя зона пограничного слоя

$$f_{p2} = \frac{f_d(2.5 \cdot \mathcal{G}_{\text{inn}})}{f_d(\mathcal{G}_{\text{inn}})} f_d(\mathcal{G}_{\text{out}}), \quad \mathcal{G}_{\text{out}} = \frac{C_{d3} \max(0, -\partial A / \partial n)}{\sqrt{u_{i,j} u_{i,j}} \kappa d_w}$$

$$\mathcal{G}_{\text{sep}} = \frac{\partial B}{\partial n} \sqrt{\frac{A}{\sqrt{u_{i,j} u_{i,j}}}}$$

$$A \equiv v_t \text{ для SA } v_t^R = k/\omega \text{ для SST}$$

Kernel-функции:

$$B \equiv \Omega \text{ для SA и SST или для SST}$$

- **DESCalcFprot** – вычисление защитной функции f_p
- **CalcDabsOmegaDn** – вычисление градиента модуля завихренности

$$\Omega_{\text{bis}} = \left(\frac{k}{(\kappa d_w)^2} \right)^{\frac{1-\alpha_{\text{bis}}}{2}} \cdot \omega^{\alpha_{\text{bis}}}$$

Deck, S., Renard, N.: Towards an enhanced protection of attached boundary layers in hybrid RANS/LES methods. Journal of Computational Physics 400 108970 (2020) <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.108970>

Renard, N., Vaquero, J., Gand, F., Deck, S.: A fully automatic and robust hybrid Reynolds-Averaged Navier Stokes Large Eddy Simulation approach based on the Menter Shear Stress Transport $k-\omega$ model. Physics of Fluids 36 (11) (2024) <https://doi.org/10.1063/5.0222762>

Ускорение DDES-EP

Версии kernel-функций:

- **DP / MP** – двойная точности или смешанная точность
- **GC / GR** – Gradients Calculation / Gradients Reuse
- **1WI / 3WI** – 1 или 3 Work-Item на узел

Ускорение на GPU: ×9.5 (DP 11)

GPU V100 vs CPU

16C Intel Xeon Gold

Сокращение времени

на GPU: 6% → 1%

Ускорение 3WI – до ×1.5

Ускорение от разделения
на два керна – до ×3

Device	Version	DESCalcFprot kernel, ms
GPU A5000	DP-GC	35.75
	MP-GC	11.86
	MP-GR	3.82
GPU V100	DP-GC	44.36
	MP-GC	28.64
	MP-GR	2.23

Device	Version	DESCalcFprot kernel, ms	CalcDabsOmegaDn kernel, ms	TotalTime, ms
GPU A5000	DP-1WI	27.47	-	27.47
	MP-1WI	11.07	-	11.07
	MP-3WI	2.465	6.55	9.01
GPU V100	DP-1WI	44.59	-	44.59
	MP-1WI	23.73	-	23.73
	MP-3WI	1.8	5.765	7.565

Задача CylBase – обтекание цилиндра, сетка 4.5M

Сокращение потребления памяти

Или сокращение времени...

- Общий буфер для локальных массивов

- Экономия 10 ~ 15% по расходу памяти

- Экономия 1 ~ 2% по времени

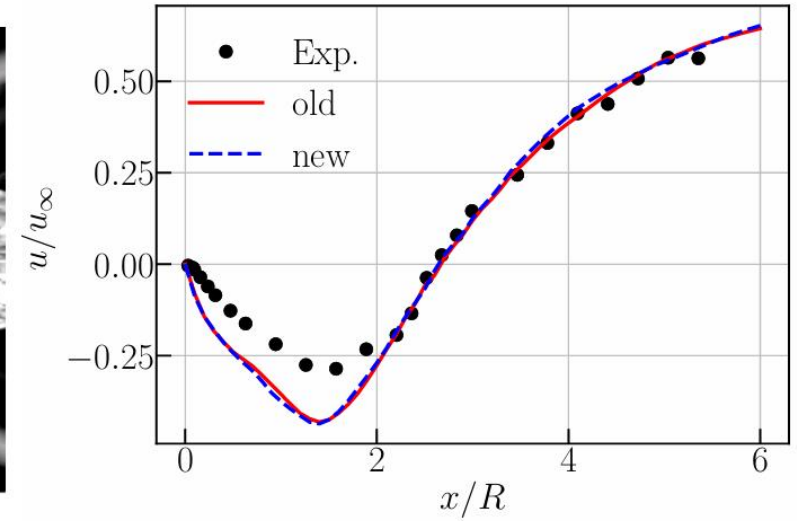
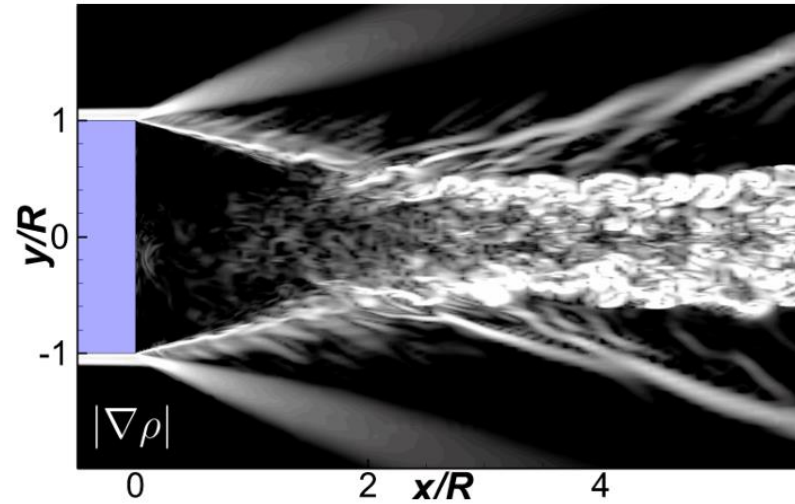
Потребление памяти:
3.2 ~ 3.5 КБ на узел

Purpose	Size, B	Approximate size per node, B		
		Hexa mesh	Hybrid mesh	Tetra mesh
Convective fluxes and viscous terms	$N_s \times N_v \times 8$	600	420	300
Gradients of variables	$N_n \times N_v \times 3 \times 8$	144	144	144
BiCGSTAB arrays	$N_n \times N_v \times 9$	54	54	54
$ \Omega $ gradient for DES-EP(SA)	$N_n \times 3 \times 8$	24	24	24

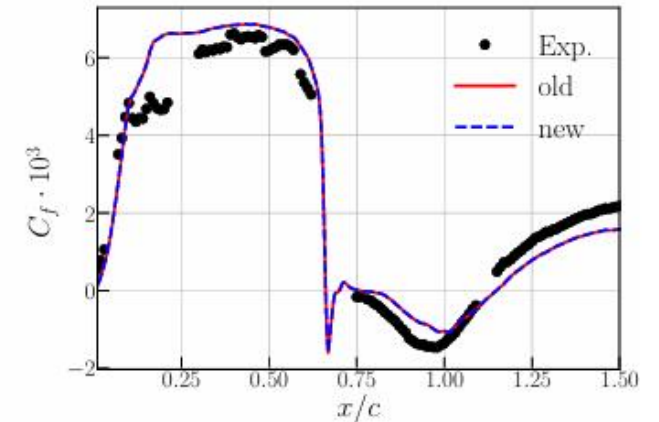
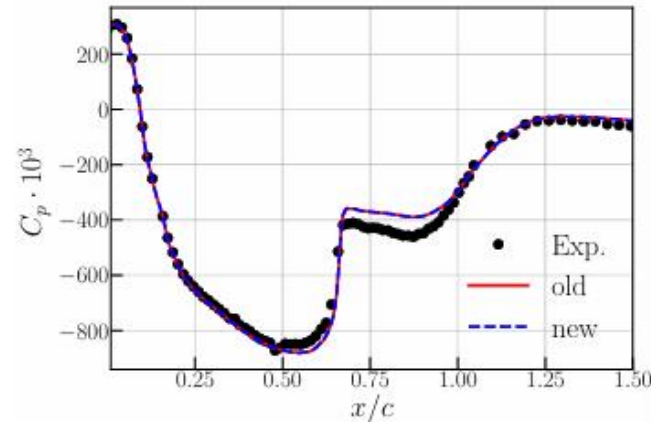
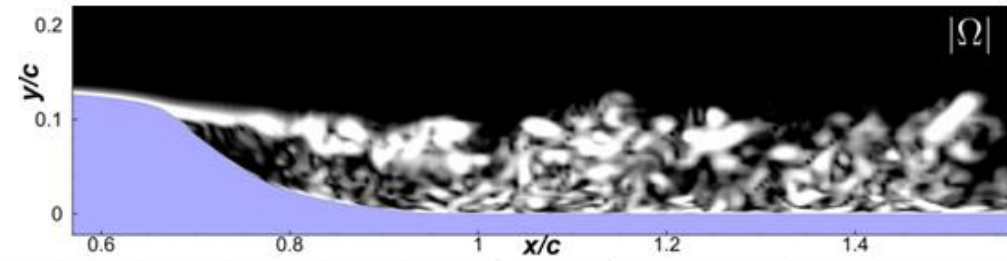
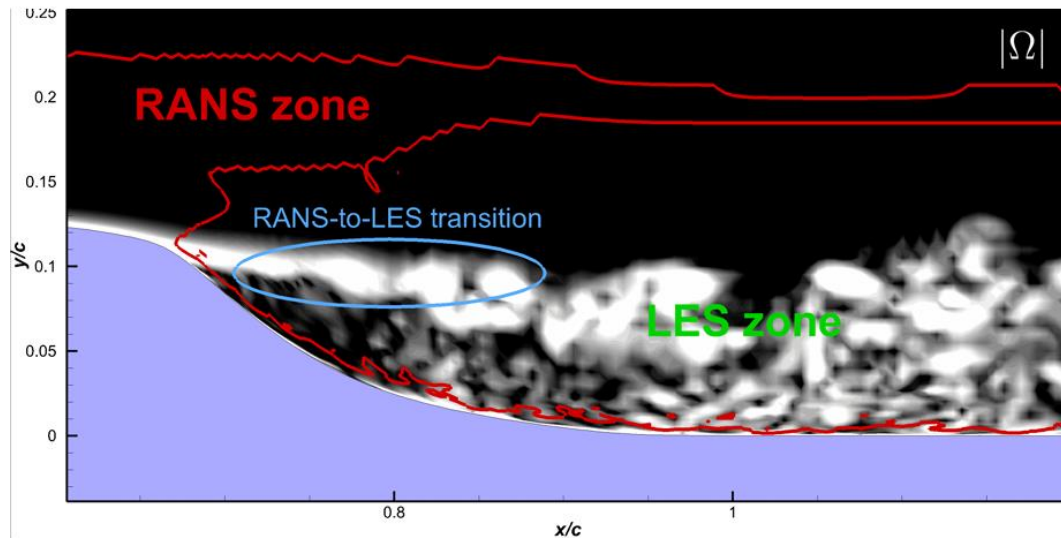
Purpose	Size, B	Approximate size per mesh node, B		
		Hexa mesh	Hybrid mesh	Tetra mesh
Jacobian matrix storage	$(2 \times N_f + N_n) \times (5^2 + (N_v - 5)) \times 4$	730	1000	1300
Edge-based scheme coef.	$N_f \times 12 \times 4$	144	240	280
Gradient operator coef.	$2 \times (N_s + N_n) \times 3 \times 4$	340	220	175
Face normals and areas	$N_f \times 4 \times 8$	100	160	190
Viscosity scheme coef.	$N_s \times 6 \times 4$	300	200	150

Проверка точности результата: сравнение с исходной версией

Сверхзвуковое ($M=2.46$) течение
за донным срезом цилиндра
[Herrin&Dutton, 1994],
сетка 4.5 млн узлов



NASA wall-mounted hump
[https://turbmodels.larc.nasa.gov/nasahump_val.html]
сетка 6.5 млн узлов



Заключение

Повышение производительности

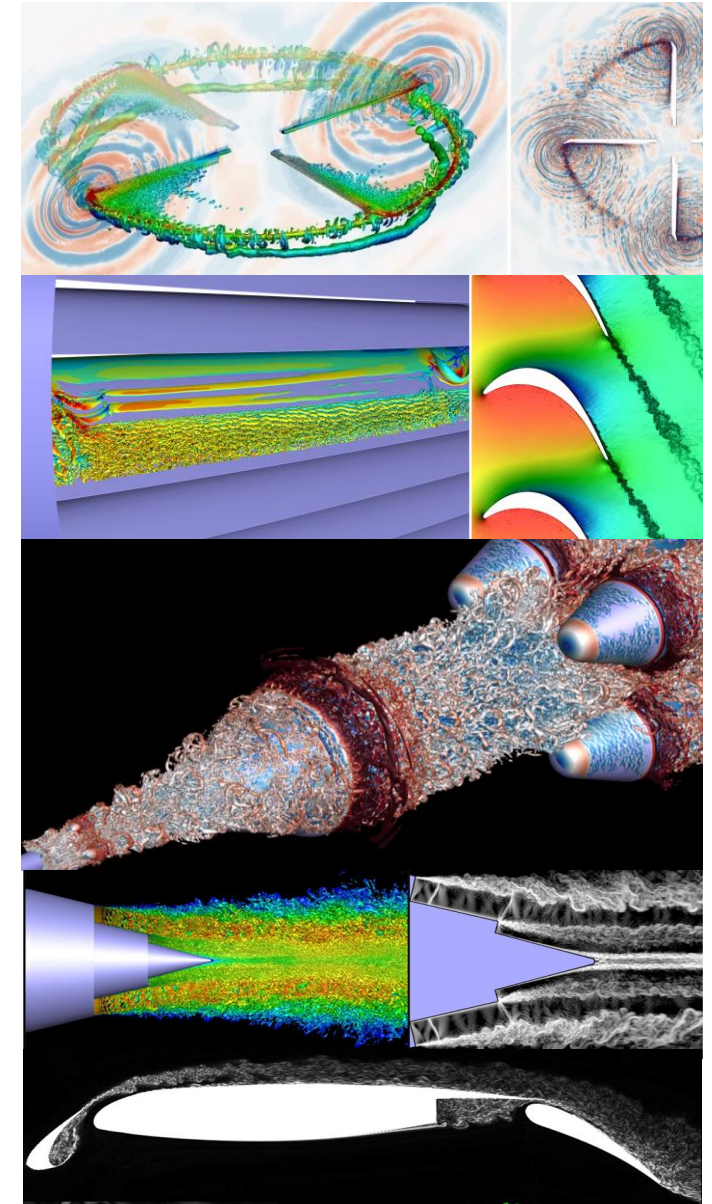
- Мат. функции в одинарной точности (ускорение до 3 раз)
- Уменьшение объема работы work-item (ускорение до 3 раз)
- Разделение на две kernel-функции (ускорение до 3 раз)
- Снижено потребление памяти

Возможности использования

- Hi-fi расчеты задач газовой динамики и аэроакустики – НИР
- Прикладное ПО суперкомпьютерного ЦКП ИПМ им. М. В. Келдыша РАН
- Внедрение в отечественные CAE решения – CADFLO, TRD-CAE

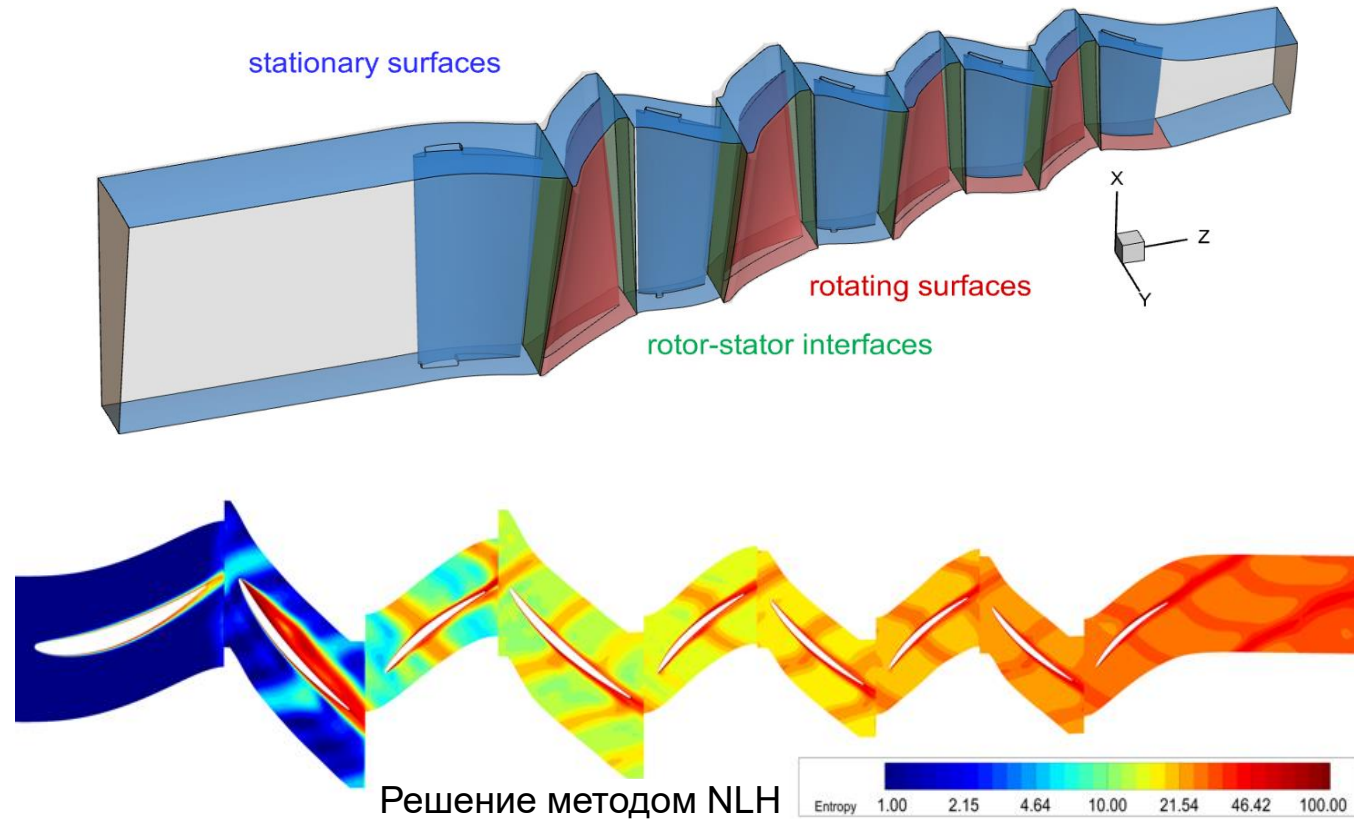
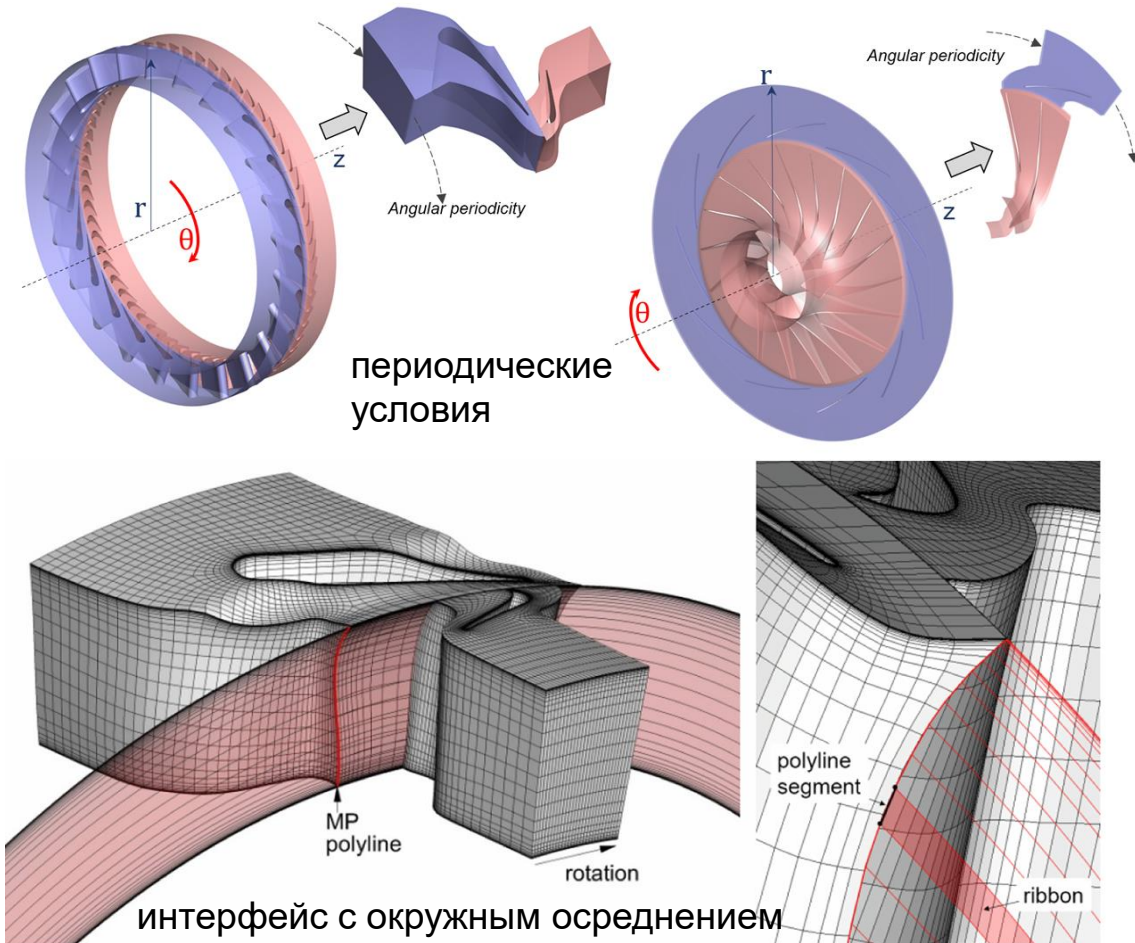
Сайт кода NOISETTE

<http://noisette.imamod.ru>



Проблемно-ориентированные решения: турбомашины

- **Стационарный интерфейс Mixing Plane**
слабо отражающие условия, схема Poу
- **Интерфейс NLH – NonLinear Harmonic**
- **Многосеточный ускоритель FAS-MG**



A.P. Duben, A.V. Gorobets et al. Supercomputer Simulations of Turbomachinery Problems with Higher Accuracy on Unstructured Meshes // RuSCDays 2022. LNCS, Vol. 13708. pp. 356–367

A.P. Duben, A.V. Gorobets. Application-Specific Parallel Linear Solver for Nonlinear Harmonics Method with Implicit Time Integration // Supercomputing Frontiers and Innovations, 2025 (In press)

Проблемно-ориентированные решения: турбомашины

- **Модельный компрессор – 2 минуты на 4 GPU**

Сетка 20M узлов, 5 ступеней, схема EBR3, RANS SA, MP

Совместно с ИЦ ЧИссл <https://rescent.ru/>

NOISEtte обогнал NUMECA Fine/Turbo

это самый быстрый коммерческий код для турбомашин,
широко использовался на предприятиях ОДК

Устройство		Число устройств	MPI процессов	OpenMP потоков	Время, с
CPU Intel Core i9, 18C, 4xDDR4-2666 85 ГБ/с	NOISEtte	1	1	36	1680
	NUMECA	1	36	1	2950
CPU Intel Xeon Gold 5218, 16C, 6xDDR4-2666 128 ГБ/с		1	1	1	18960
		2	2	32	868
CPU AMD EPYC 7542, 32C, 8xDDR4-3200 205 ГБ/с		1	1	1	18400
		2	4	32	488
GPU NVIDIA A5000, 768 ГБ/с		4	4	-	129
GPU NVIDIA V100, 900 ГБ/с		4	4	-	115

- **Модельная турбина – 70 секунд на 4 GPU**

Сетка 15M узлов, 5 ступеней, схема EBR3, RANS SA, MP

