Пятая всероссийская конференция
«Вычислительный эксперимент в аэроакустике»
22 – 27 сентября 2014 года, г.Светлогорск

Численное моделирование задач газовой динамики и аэроакустики на вычислительных системах с графическими ускорителями

И.С. Меньшов, ИПМ РАН им. М.В. Келдыша
П.В. Павлухин, НИИ «Квант», ИПМ РАН им. М.В. Келдыша

Проблемы решения задач на суперкомпьютерах

- Суперкомпьютеры сегодня и завтра – с массовыми мультитредовыми архитектурами;
- Алгоритмы под них должны обладать достаточной простотой;
- Трехмерные задачи во многих случаях со сложной геометрией и, следовательно, с сетками большого размера;
- Для явных схем (простых для распараллеливания) это влечет уменьшение шага по времени;

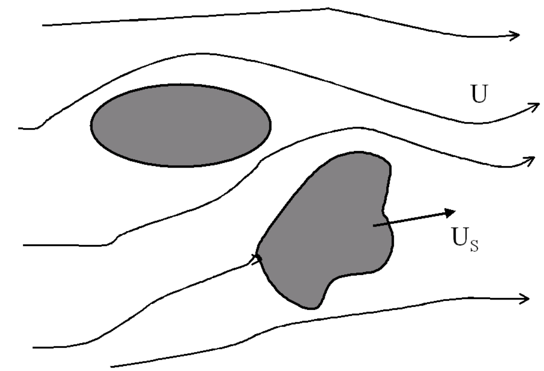
Размер задач растет, шаг по времени уменьшается, в результате – стремительный рост вычислительной сложности

Предлагаемые подходы

- Рассмотрим с алгоритмической точки зрения простые методы, но без жесткого ограничения шага по времени;
- Вместо неструктурированных, многоблочных сеток для GPU предпочтительнее использовать декартовы сетки;
- Численный метод должен позволять решать задачи со сложной геометрией, представляемой на декартовой несвязной сетке;

Математическая модель

Стандартная постановка (Эйлерова жидкость)



$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t}+\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i}=0 \quad (\mathbf{U}-\mathbf{U}_s,\mathbf{n})=0 \quad p=(\gamma-1)\rho(E-\frac{u^2}{2})$$

Альтернативная постановка с специальной правой частью – компенсационным потоком

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t}+\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i}=-\mathbf{F}_w$$

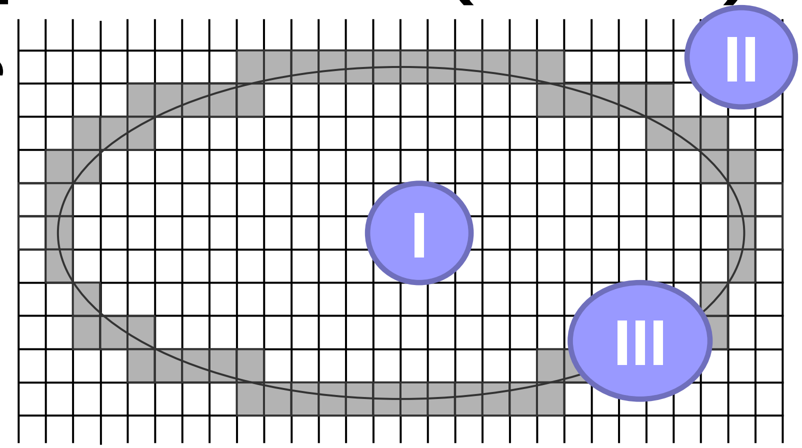
$$F_w=\begin{pmatrix}\rho(\mathbf{U}-\mathbf{U}_s,\mathbf{n})\\ \rho(\mathbf{U}-\mathbf{U}_s,\mathbf{n})\mathbf{U}+(p-p_w)\mathbf{n}\\ \rho(\mathbf{U}-\mathbf{U}_s,\mathbf{n})E+(p\mathbf{U}-p_w\mathbf{U}_s,\mathbf{n})\end{pmatrix}\delta(\mathbf{x},\Gamma)$$

Pw – мгновенная реакция со стороны жесткой стенки

$$u=(\mathbf{U}-\mathbf{U}_s,\mathbf{n})<0 \qquad p_w=p\left[1+\frac{\gamma(\gamma+1)}{4}M^2+\sqrt{\gamma^2M^2+\frac{\gamma^2(\gamma+1)^2}{16}M^4}\right]$$

$$u=(\mathbf{U}-\mathbf{U}_s,\mathbf{n})>0 \qquad p_w=p\left[1-\frac{\gamma-1}{2}M\right]^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}}$$

Метод свободной границы (FBM)



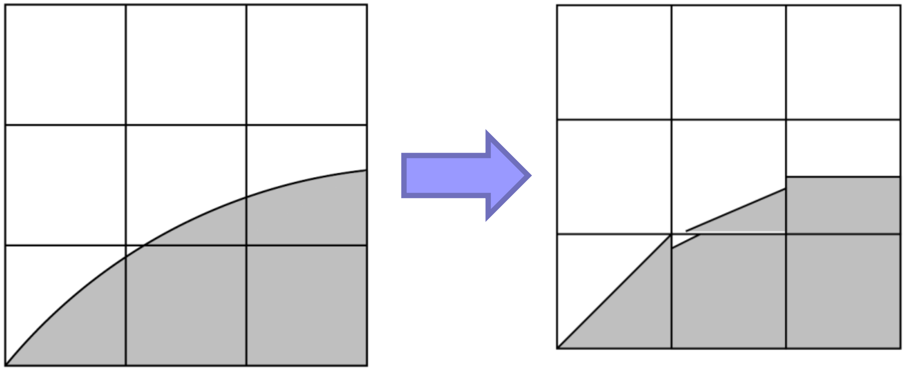
Ω – объемлющее сеточное разбиение

D - твердое включение с *Г* = ∂**D**

3 типа ячеек:

I. Внутри тв включения $c_i \subset D$
II. Вне тв включения $c_i \subset \Omega \setminus D$
III. Пересекающие *Г* - $c_i \cap \Gamma \neq \emptyset$

В ячейках типа III выполняется линейное приближение *Г*



По всем ячейкам из **Ω** выполняется сквозной единообразный расчет.

Численный метод

$$\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{f}_i}{x_i} = -\boldsymbol{F}_w$$

- дискретизация по пространству методом конечного объема;
- метод С. К. Годунова вычисления потоков на гранях ячеек;
- второй порядок точности по времени и пространству;

$$v_i \frac{\partial \boldsymbol{q}_i}{\partial t} = -\sum\nolimits_\sigma s_\sigma \cdot \boldsymbol{f}_\sigma + v_c \cdot \boldsymbol{f}_c$$

Явная схема, устойчива с $\Delta t \leq \lambda(\boldsymbol{q}_i^n)$

$$\boldsymbol{q}_i^{n+1} = \boldsymbol{q}_i^n - \frac{\Delta t}{v_i} \sum\nolimits_\sigma s_\sigma \cdot \boldsymbol{f}_\sigma(\boldsymbol{q}^{\boldsymbol{n}}) + \frac{\Delta t}{v_i} \cdot v_c \cdot \boldsymbol{f}_c\ (\boldsymbol{q}^{\boldsymbol{n}})$$

Гибридная явно-неявная схема

$$\boldsymbol{q}_i^{n+1} = \boldsymbol{q}_i^n - \frac{\omega_i \Delta t}{v_i} \sum_\sigma s_\sigma \cdot \boldsymbol{f}_\sigma(\boldsymbol{q}^{\omega}) + \frac{\Delta t}{v_i} \cdot v_c \cdot \boldsymbol{f}_c\ (\boldsymbol{q}^{\boldsymbol{n+1}})$$

$$t^\omega = \omega t^n + (1-\omega) t^{n+1}$$

$$\boldsymbol{q}_i^\omega = \boldsymbol{q}_i^n + (1-\omega_i)(\boldsymbol{q}_i^{n+1} - \boldsymbol{q}_i^n)$$

Схема абсолютно устойчива при $\omega_i = \min\left(1, \frac{\lambda(\boldsymbol{q}_i^\omega)}{\Delta t}\right)$

Численный метод

$$\left(1+\frac{(1-\omega_i)\Delta t}{\Delta\tau}\right)\delta q_i^s = -R_i^s - \frac{\Delta t}{v_i}\sum_\sigma s_\sigma\cdot\delta f_\sigma + \frac{\Delta t}{v_i}\cdot v_c\cdot\delta f_c$$

Итерационная невязка:

$$R_i^s = \frac{1}{v_i}\left(\sum_\sigma s_\sigma\cdot f_\sigma(q^{\omega,s}) + \omega_i\Delta q_i^s\right) + \frac{v_c}{v_i}\cdot f_c\left(q^{n+1,s}\right)$$

$$\delta q_i^s = q_i^{n+1,s+1} - q_i^{n+1,s}$$

$$\Delta q_i^s = q_i^{n+1,s} - q_i^n$$

$$\boxed{A\delta^s q = R}$$

- СЛАУ для определения итерационного инкремента

Метод **LU-SGS**:

Факторизация: $A = L + D + U \approx (L+D)*D^{-1}*(U+D)$

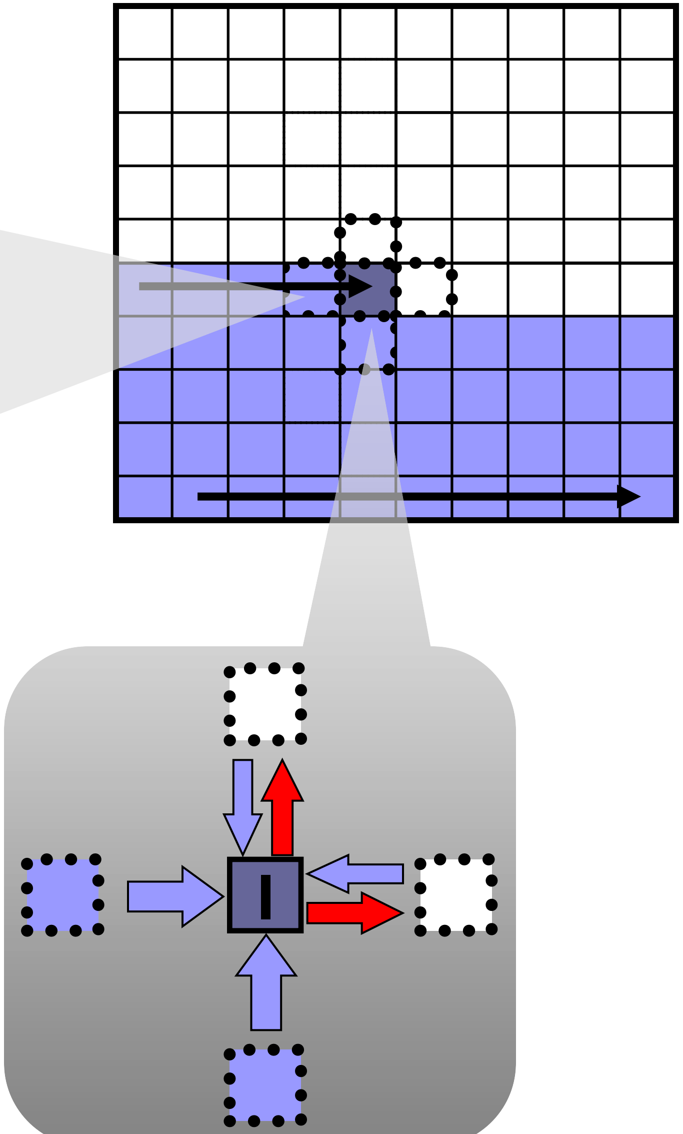
Forward: $(L+D)\widetilde{\delta^s}q = R$

Backward: $(U+D)\delta^s q = D\widetilde{\delta^s}q$

Порядок обхода ячеек расчетной области, неявная схема:

```
if (I > J) {//сосед обсчитан
   ...
   cell[I] = f1(cell[J]);
   ...
}

if (I < J) {//сосед не обсчитан
   ...
   cell[I] = f2(cell[J]);
   cell[J]+= ...
}
```



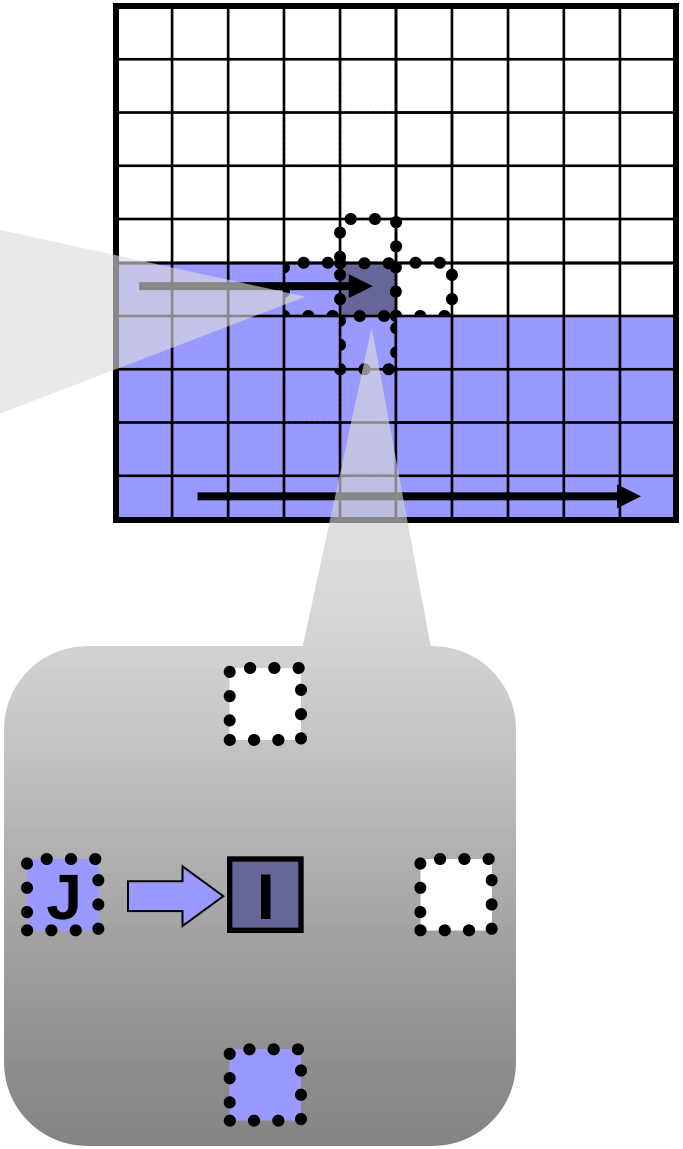
-ячейка обсчитана

-ячейка не обсчитана

Порядок обхода ячеек расчетной области, неявная схема:

```
if (I > J) {//сосед обсчитан
   ...
   cell[I] = f1(cell[J]);
   ...
}

if (I < J) {//сосед не обсчитан
   ...
   cell[I] = f2(cell[J]);
   cell[J]+= ...
}
```



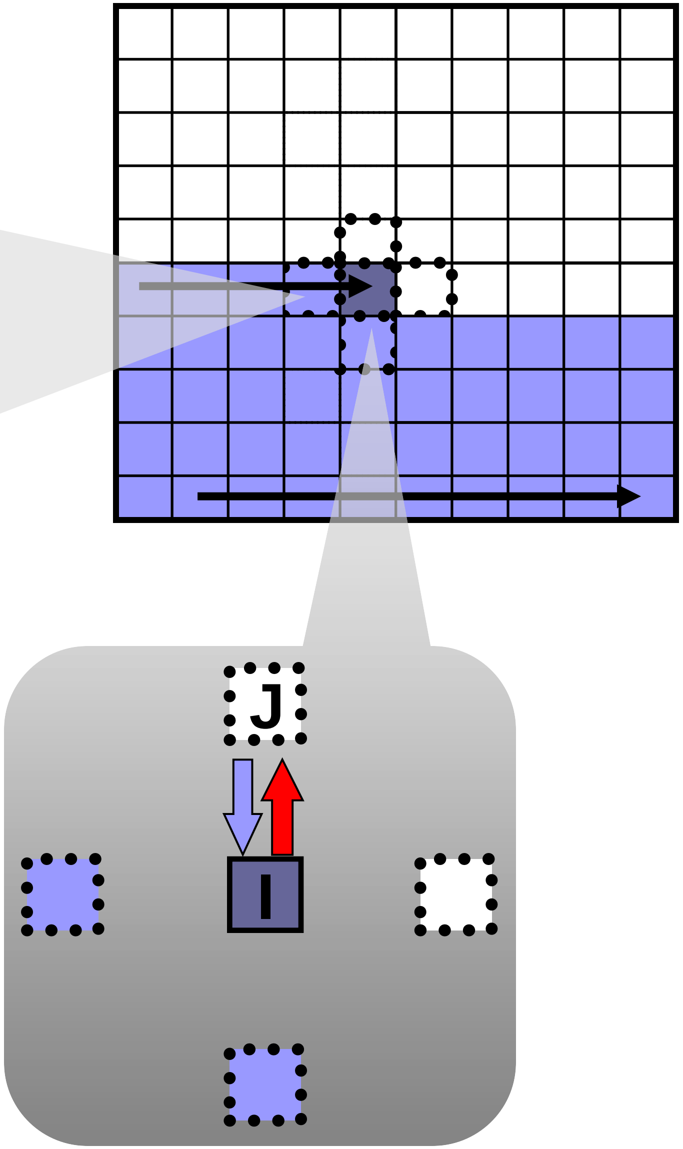
-ячейка обсчитана

-ячейка не обсчитана

Порядок обхода ячеек расчетной области, неявная схема:

```
if (I > J) {//сосед обсчитан
   ...
   cell[I] = f1(cell[J]);
   ...
}

if (I < J) {//сосед не обсчитан
   ...
   cell[I] = f2(cell[J]);
   cell[J]+= ...
}
```



-ячейка обсчитана

-ячейка не обсчитана

LU-SGS - распараллеливание

Цель: создать **эффективный** параллельный алгоритм для неявного метода LU-SGS, **в точности** реализующий работу последовательного

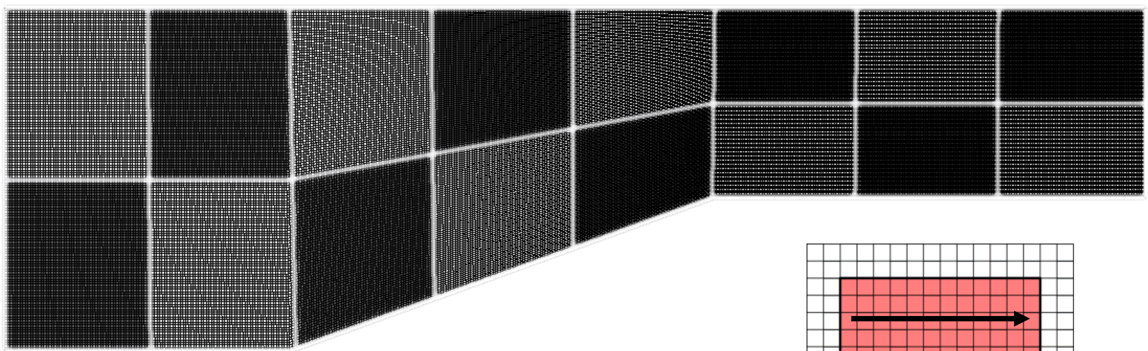
Особенности метода позволяют ввести 2-уровневую параллельность:

- Разделение работы на несколько GPU;
- Работа внутри одного многопоточного GPU;

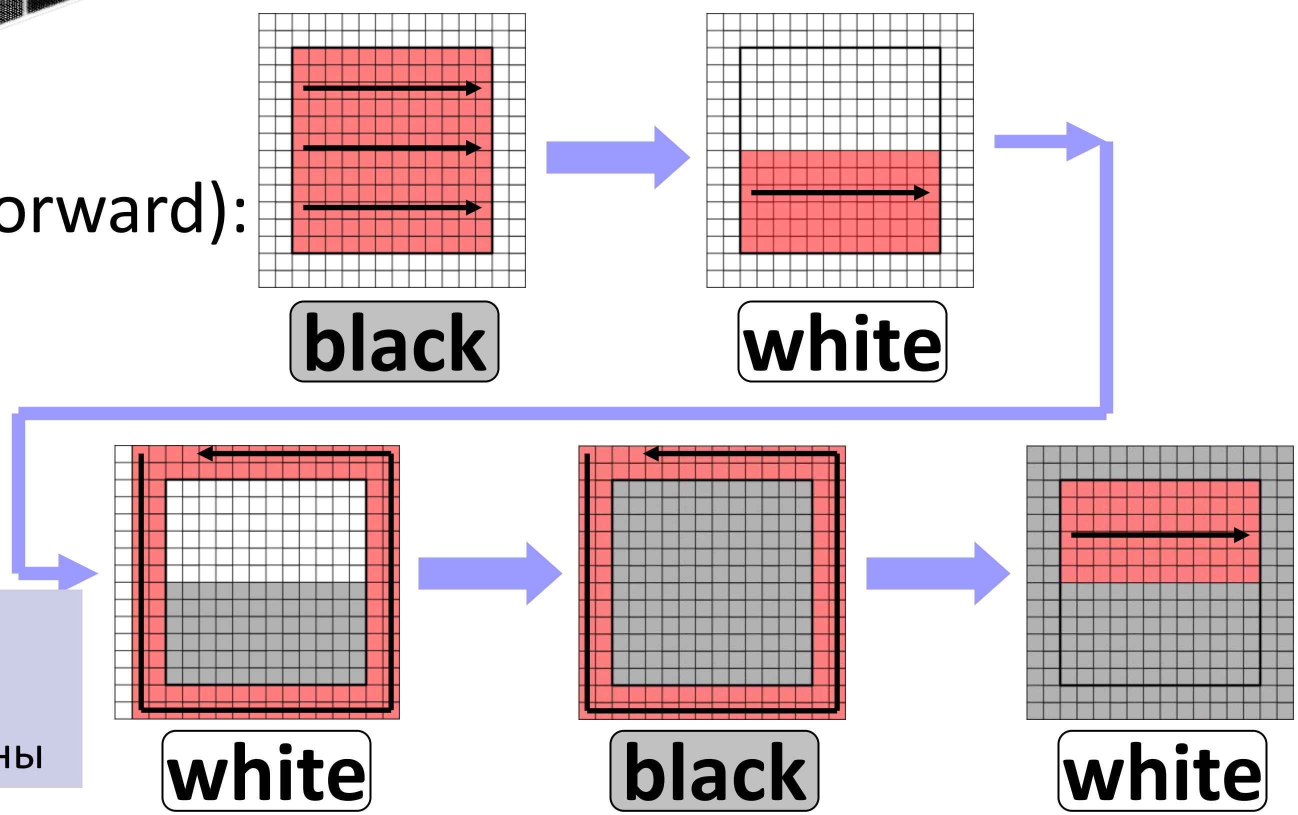
Для этого необходимо выбрать специальный порядок обхода ячеек.

Глобальный порядок обхода ячеек расчетной области

1. Декомпозиция расчетной области – «black» и «white» блоки:



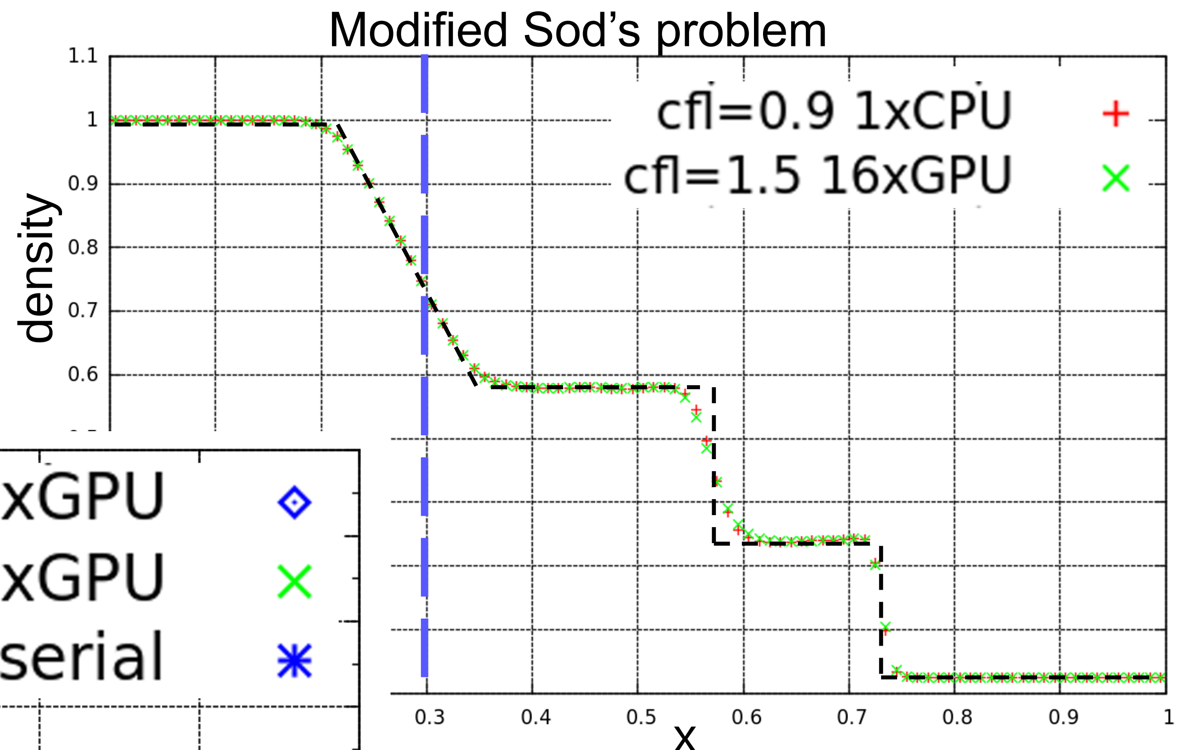
2. Обход блоков (forward):

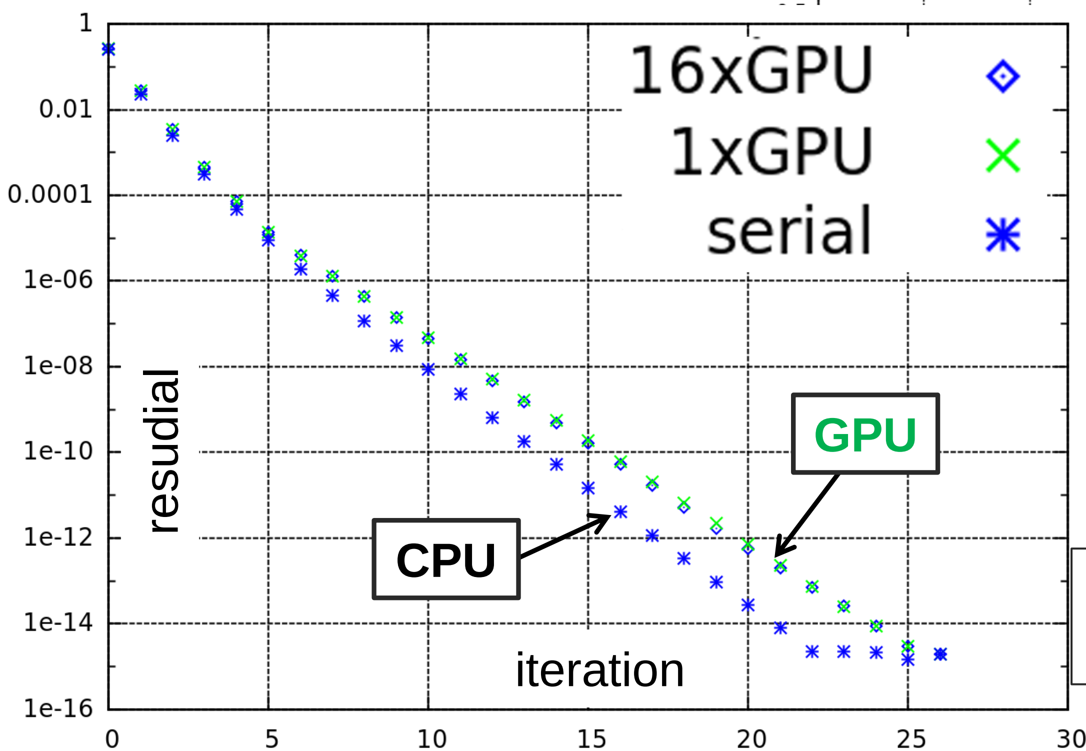


- ячейки обсчитываются
- ячейки обсчитаны
- ячейки еще не обсчитаны

Результаты расчетов

1D, Распределение плотности, t=0.2, 100 ячеек

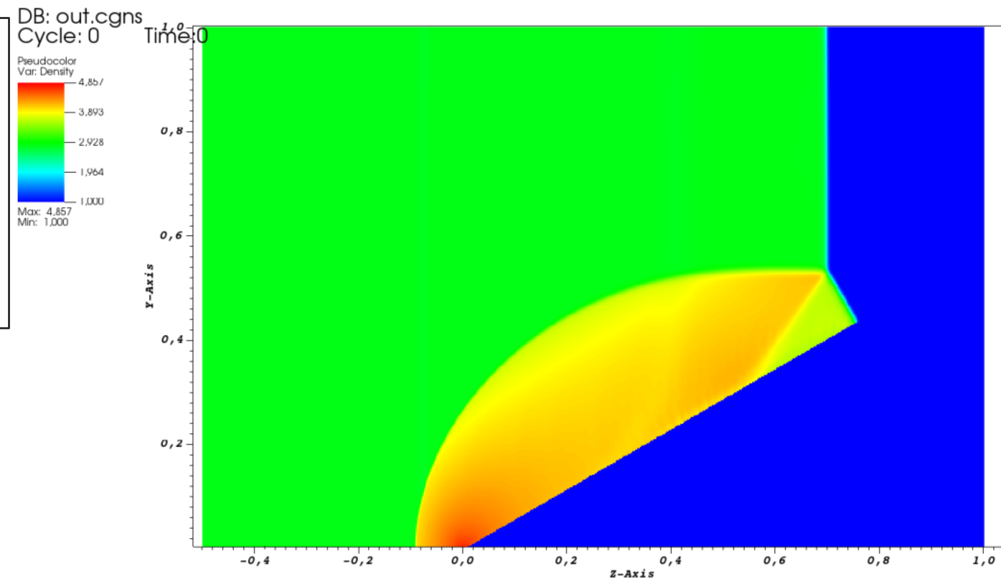




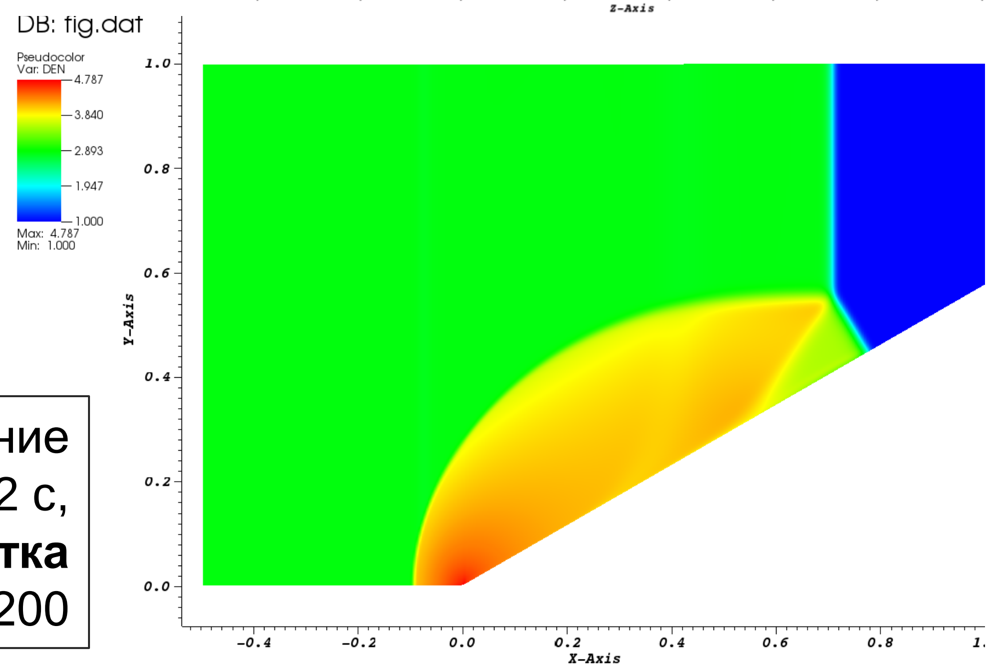
Значение невязки от числа итераций

Результаты расчетов

3D, Распределение давления, t=0.32 с, **несвязная декартова сетка** 600x400x6, метод свободной границы



Обтекание клина, M=2.12, θ=30°.
Н.у. – ударная волна: до фронта p=1,ρ=1,**v**=0, после фронта – с условием Ренкина – Гюгонио

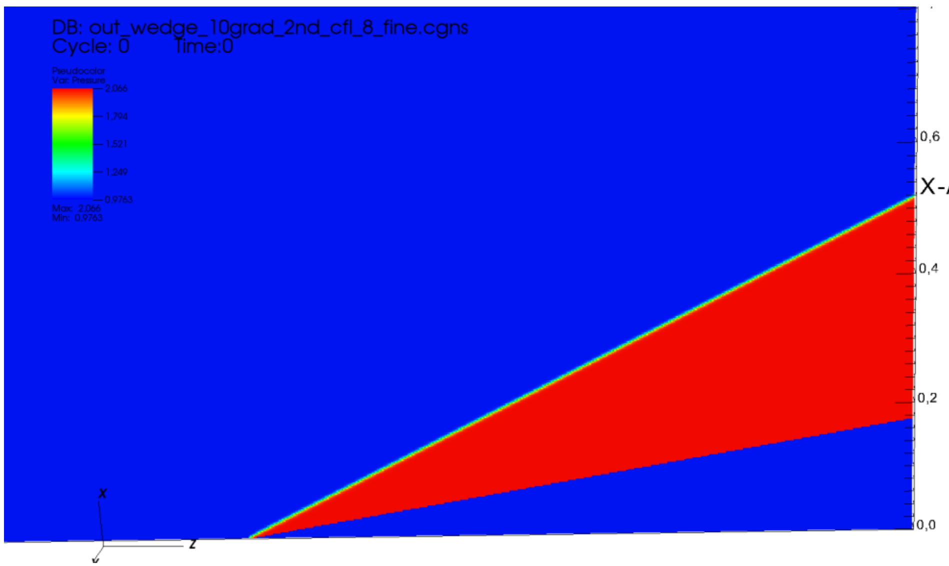


2D, Распределение давления, t=0.32 с, **связная декартова сетка** 300x200

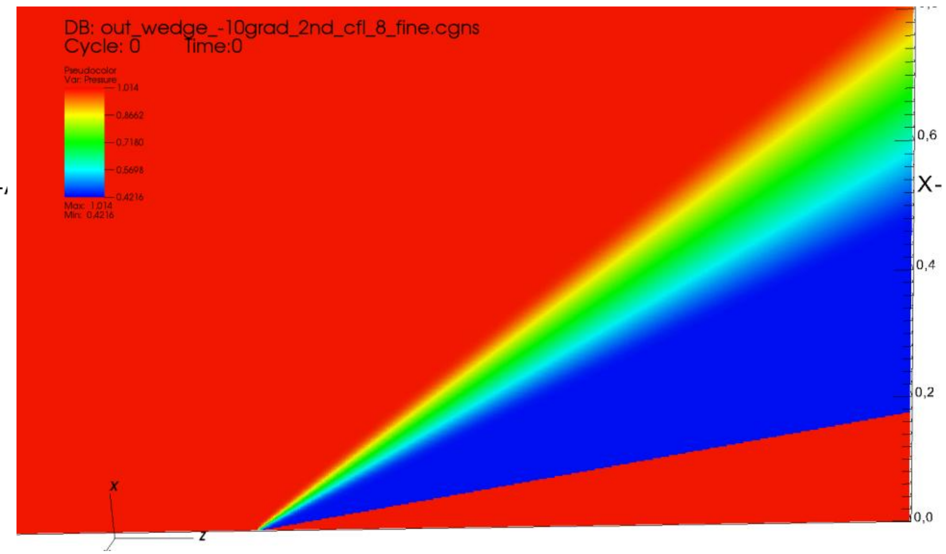
Результаты расчетов

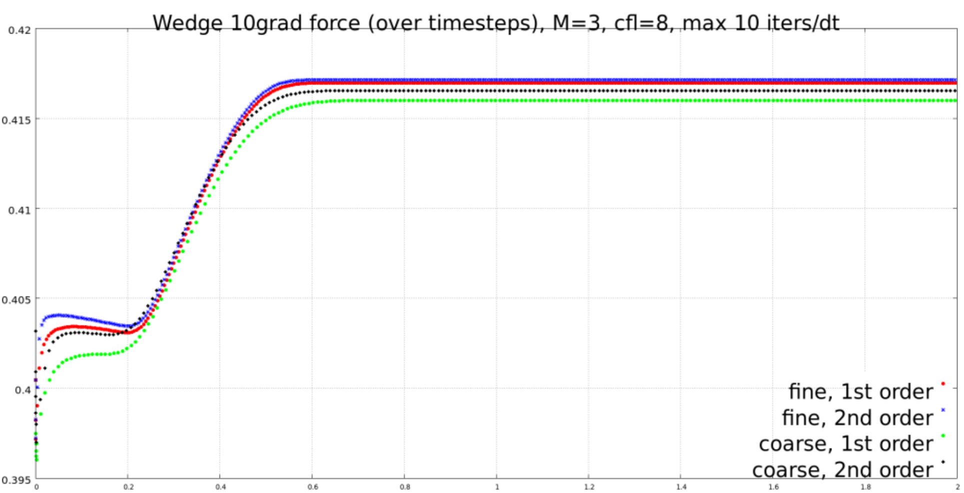
Клин 10°, набегающий поток - +/-10°, M=3

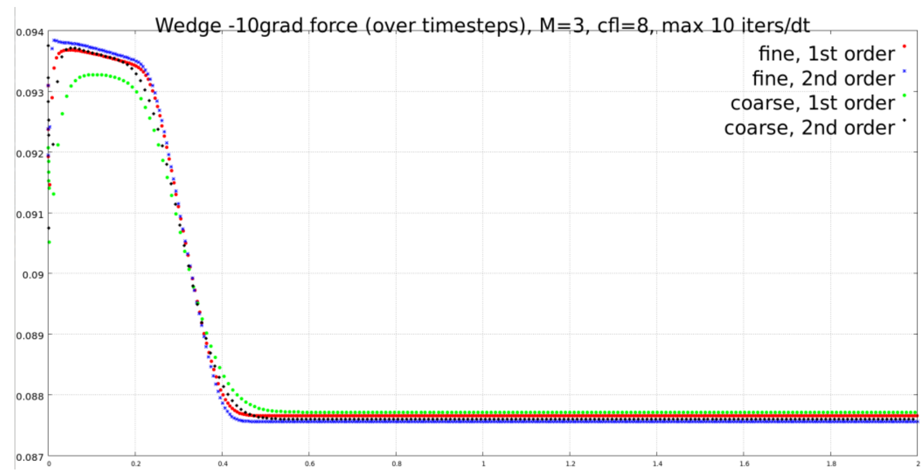
Ударная волна



Волна разряжения

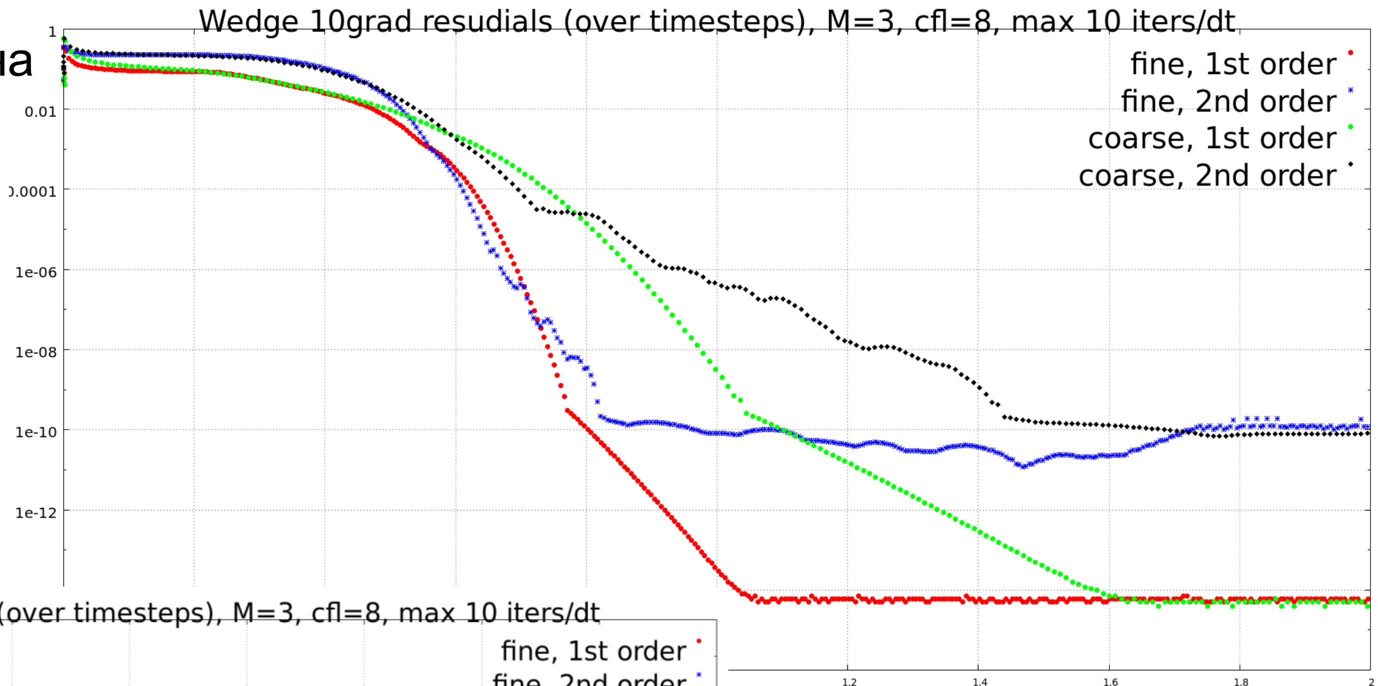


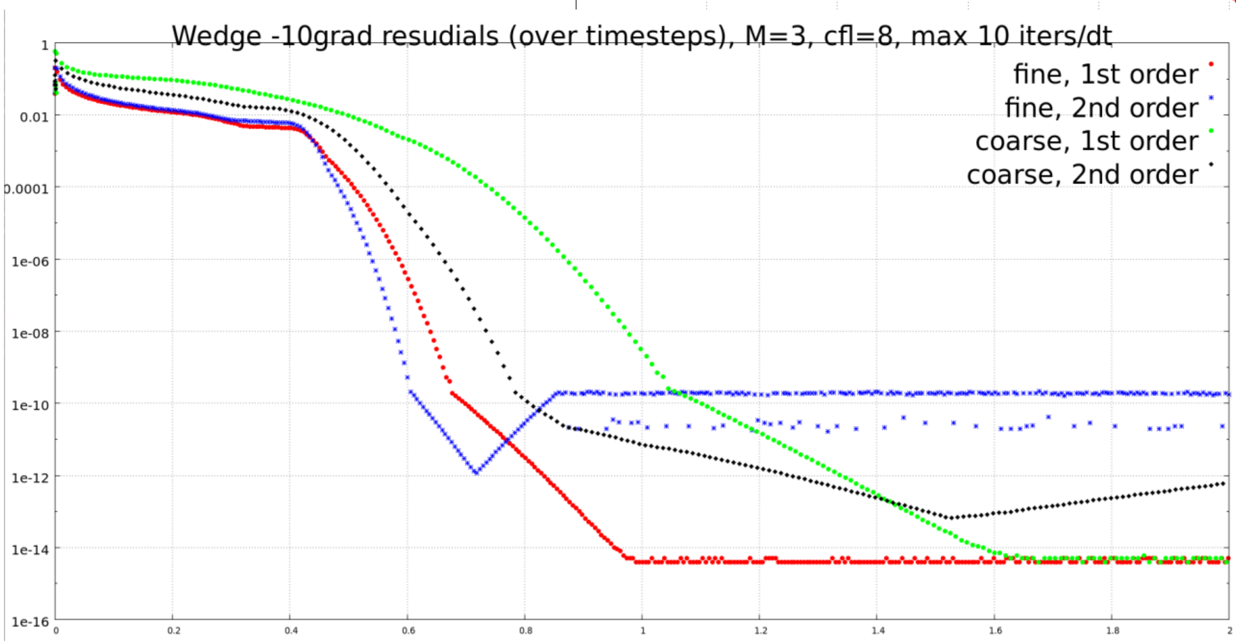




Результаты расчетов

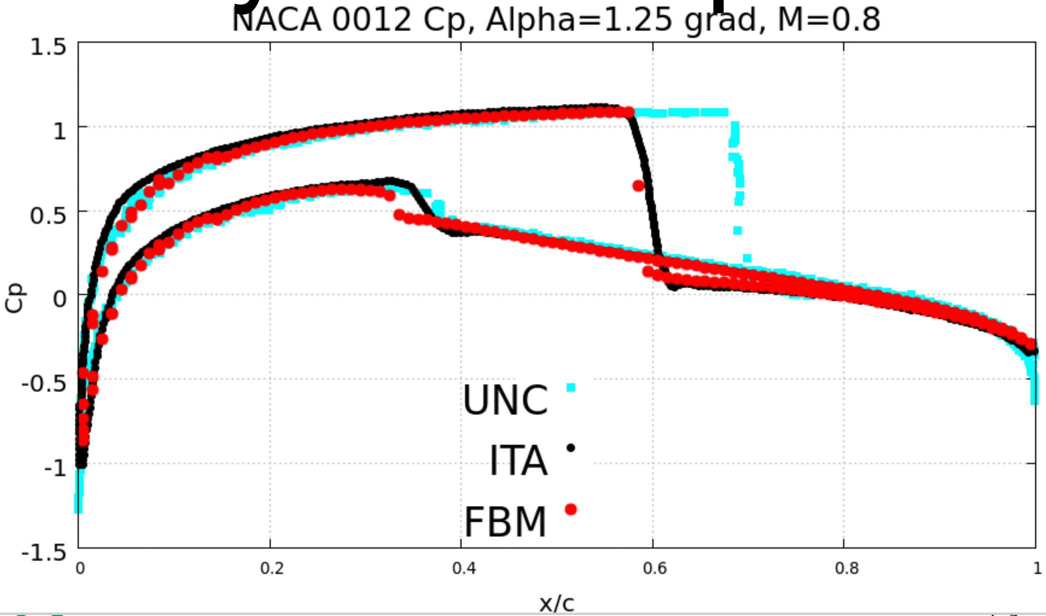
Клин 10°, ударная волна

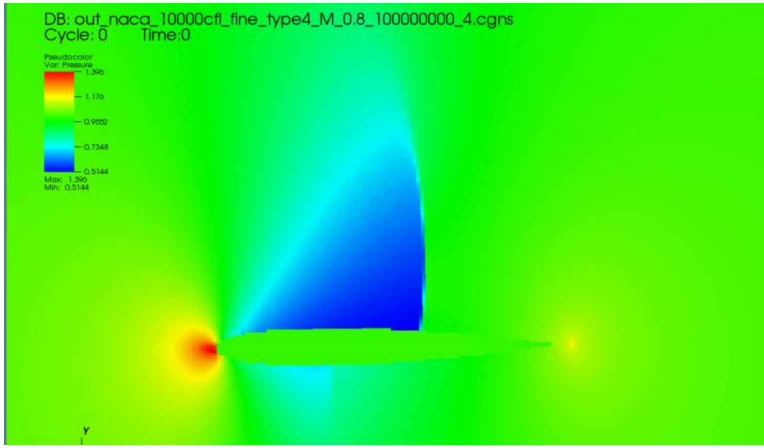


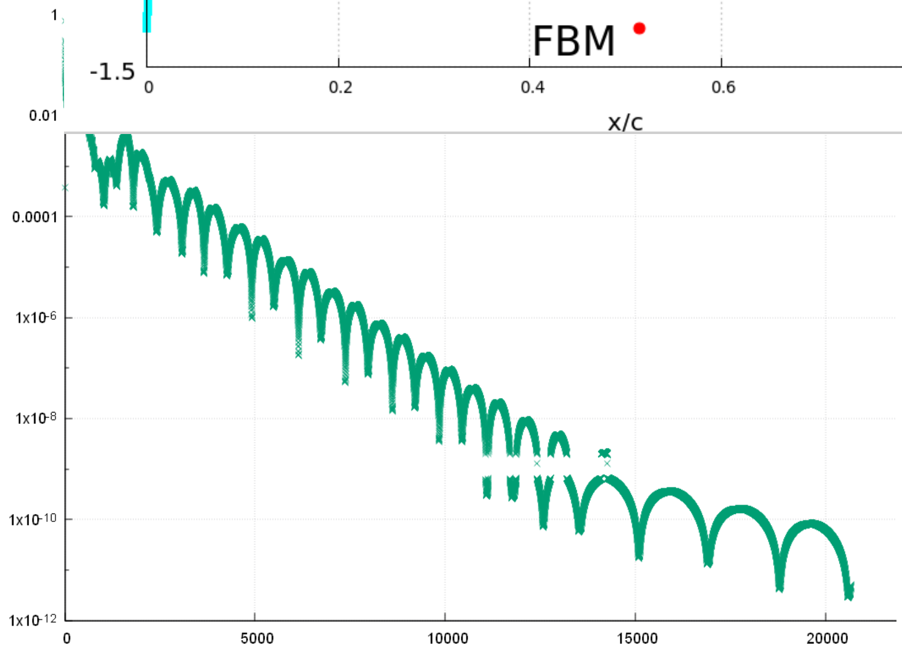


Клин 10°, волна разряжения

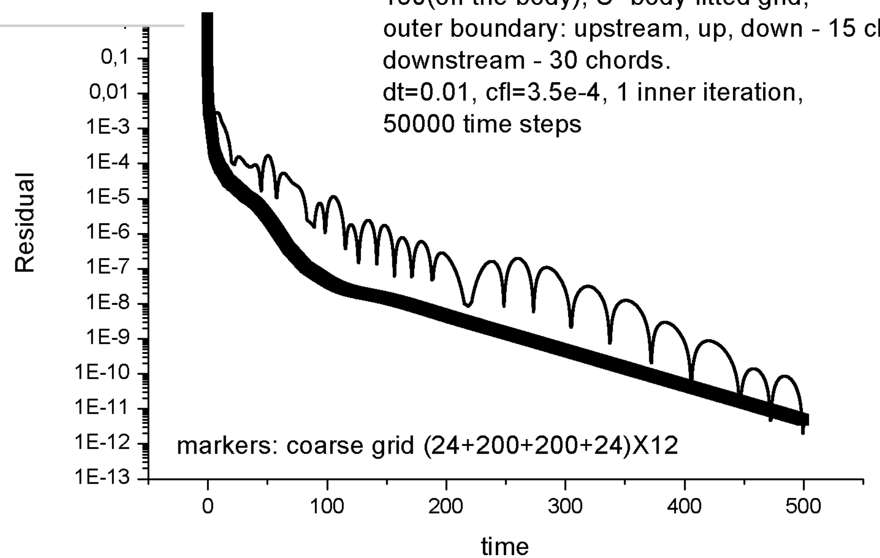
Результаты расчетов







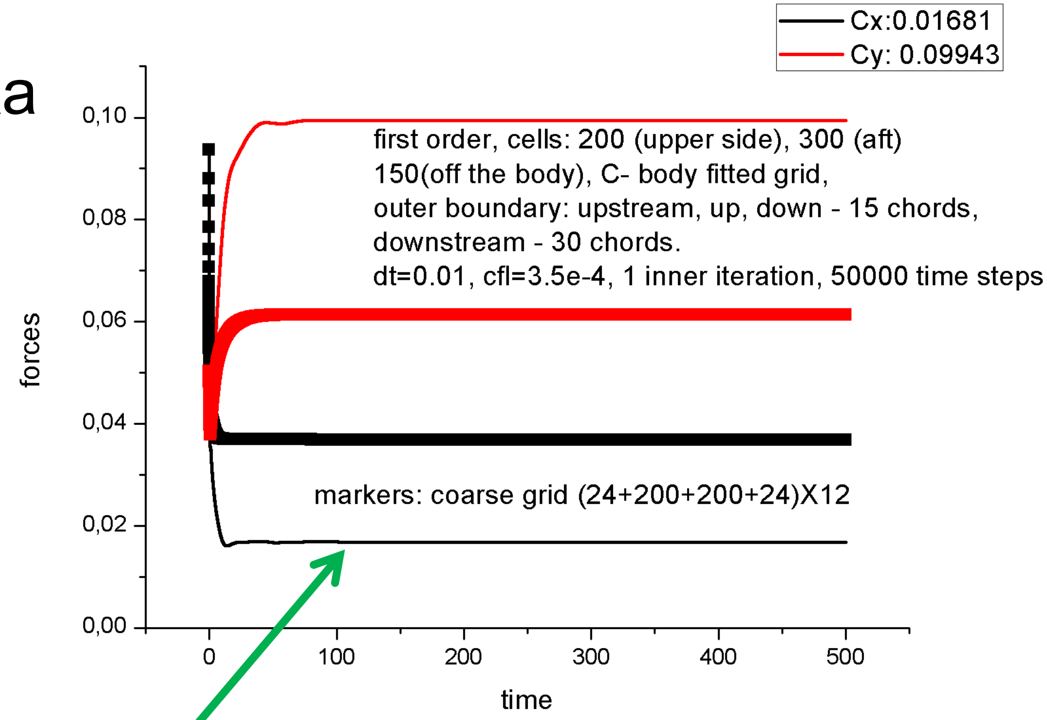
first order, cells: 200 (upper side), 300 (aft)
150(off the body), C- body fitted grid,
outer boundary: upstream, up, down - 15 chords,
downstream - 30 chords.
dt=0.01, cfl=3.5e-4, 1 inner iteration,
50000 time steps

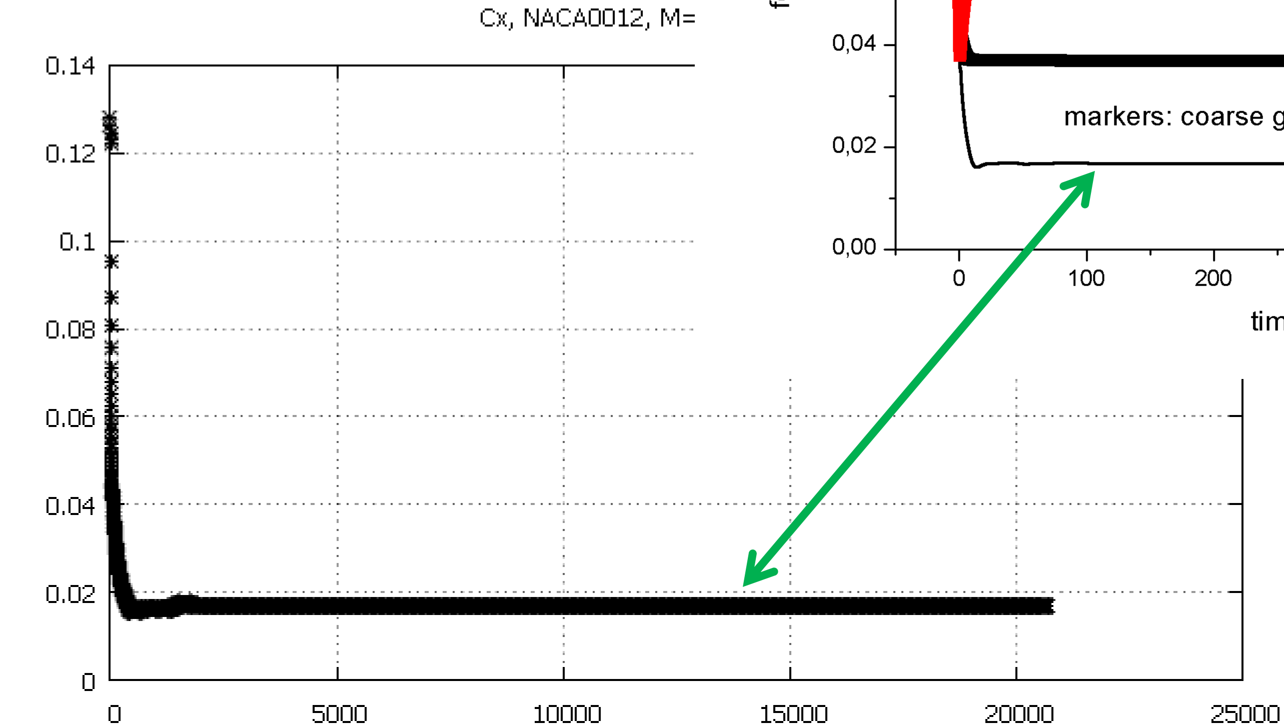


Oscar Arias, Oscar Falcinelli, Nide Fico Jr. and Sergio Elaskar. *FINITE VOLUME SIMULATION OF A FLOW OVER A NACA 0012 USING JAMESON, MacCORMACK, SHU AND TVD ESQUEMES* // Mecanica Computational Vol XXVI, pp 3097-3116, 2007.

Результаты расчетов

Связная сетка



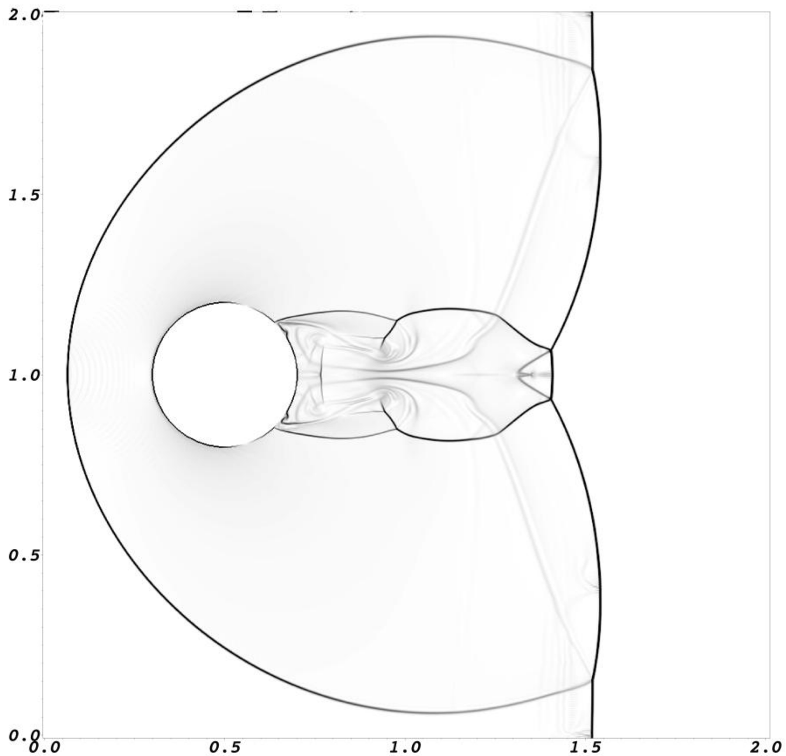


FBM

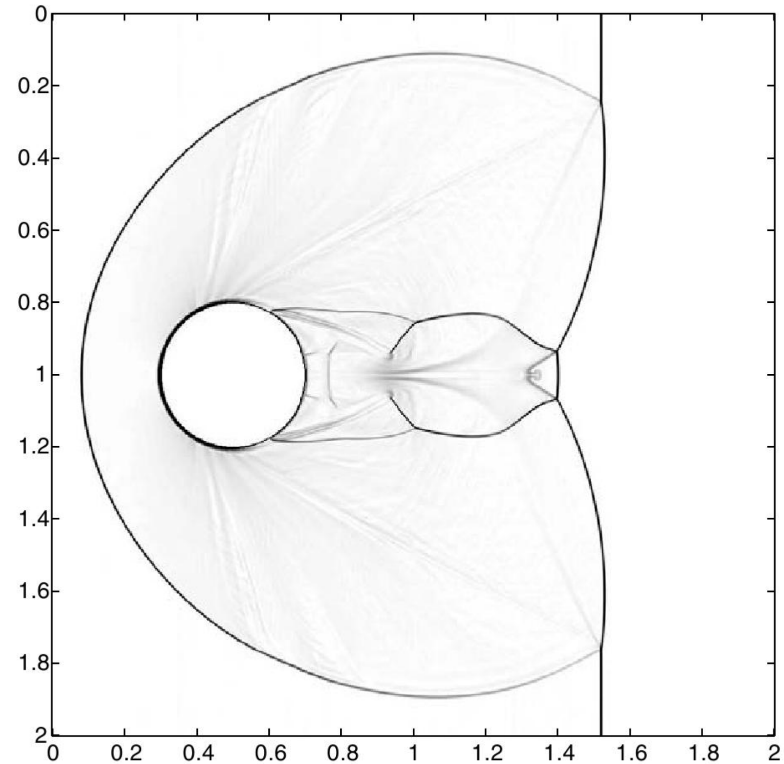
Результаты расчетов

2D, Обтекание цилиндра, M=3, 1024x1024, t=0.4

Numerical Schlieren



Free Boundary Method (32 GPU)



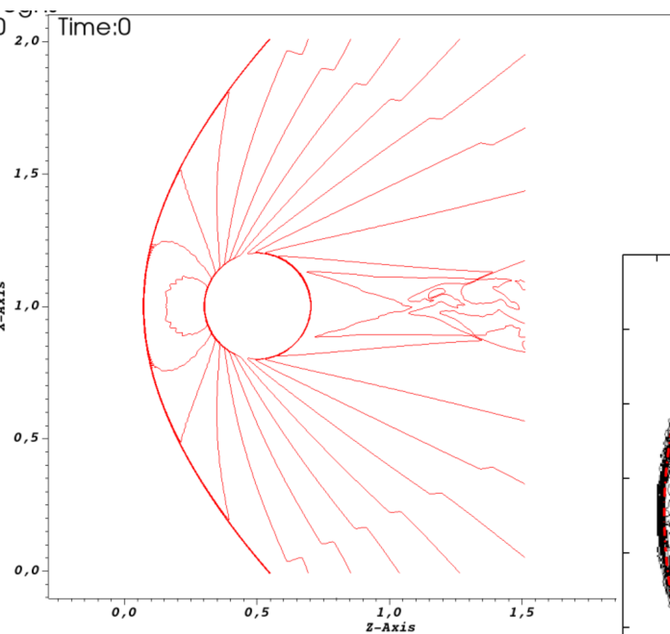
Penalisation Method*

*O. Boirona, G. Chiavassa, R. Donat. *A high-resolution penalization method for large Mach number flows in the presence of obstacles* // Computers & Fluids, N 38, pp 703-714, 2009.

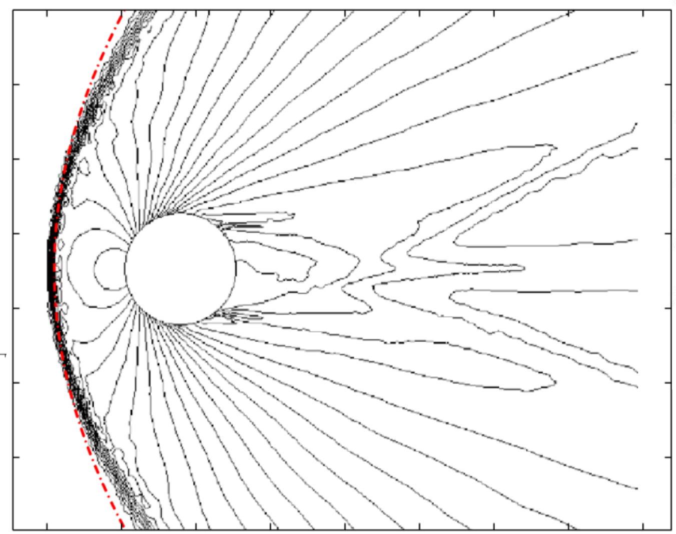
Результаты расчетов

2D, Обтекание цилиндра, M=2, 1024x1024

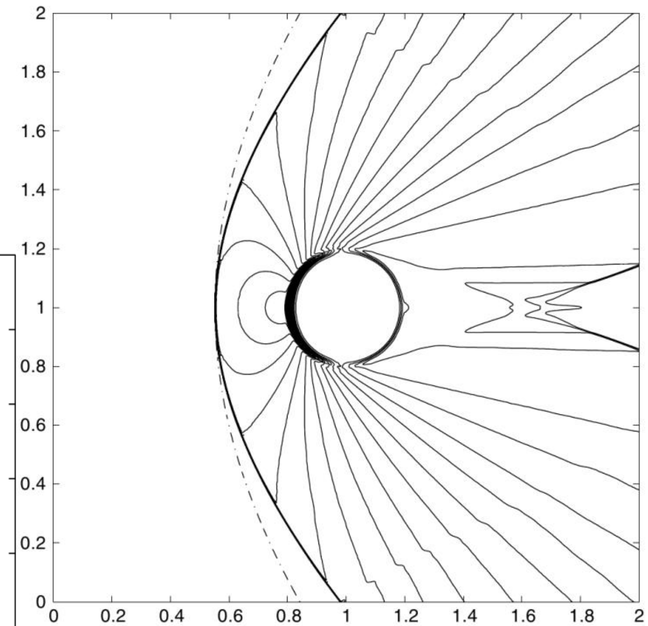
Isodensity lines



Free Boundary Method
(32 GPU)



Fluent (unstructured)

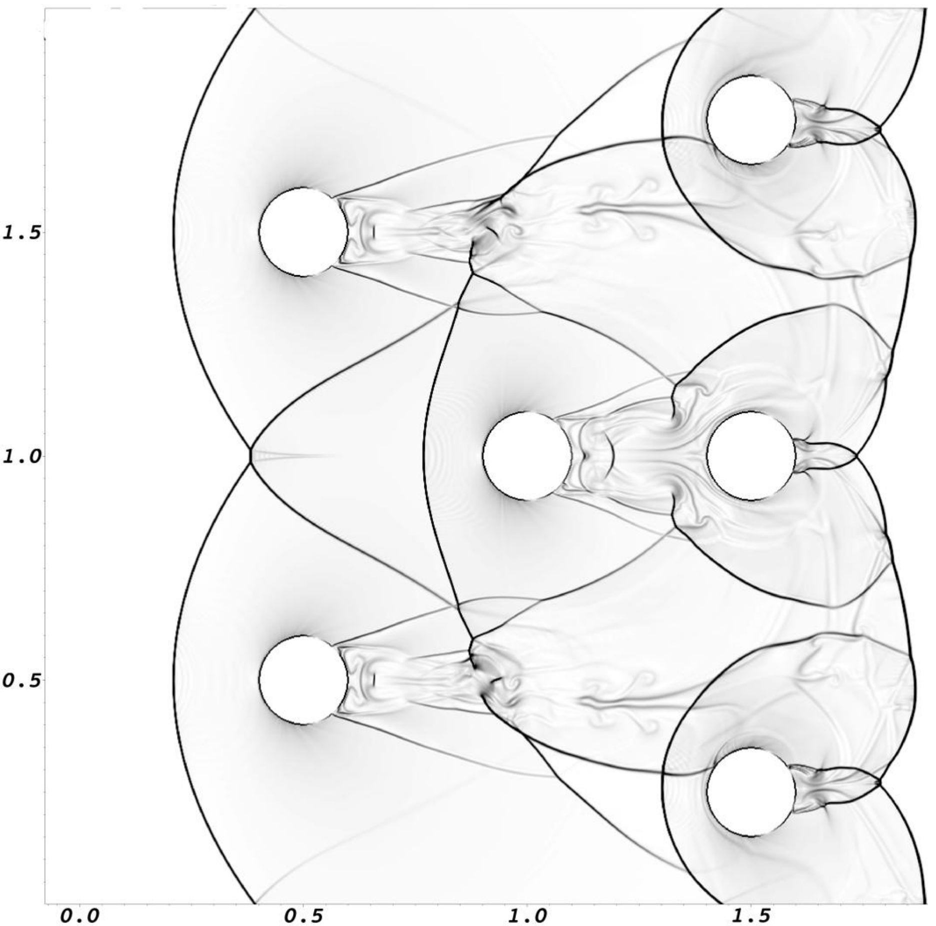


Penalisation Method

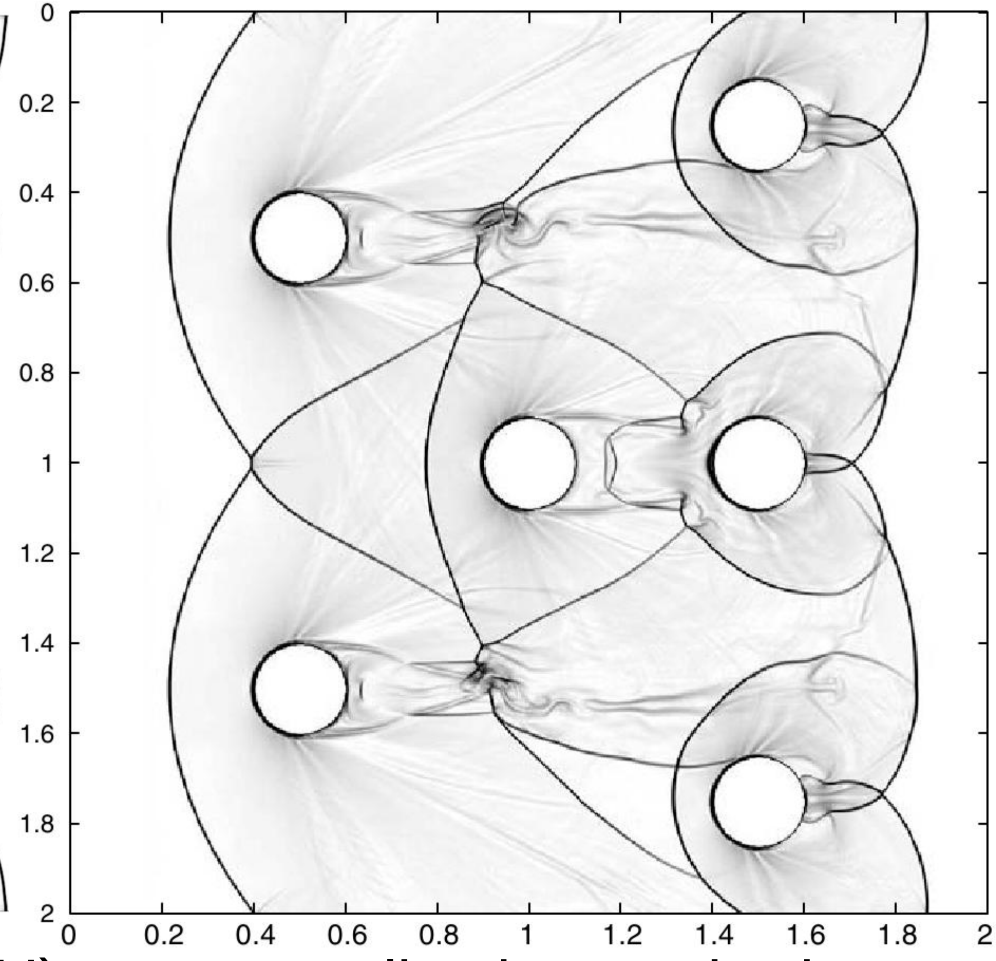
Результаты расчетов

2D, Обтекание группы цилиндров, M=3, 1024x1024, t=0.5

Numerical Schlieren



Free Boundary Method (32 GPU)



Penalisation Method

Результаты расчетов

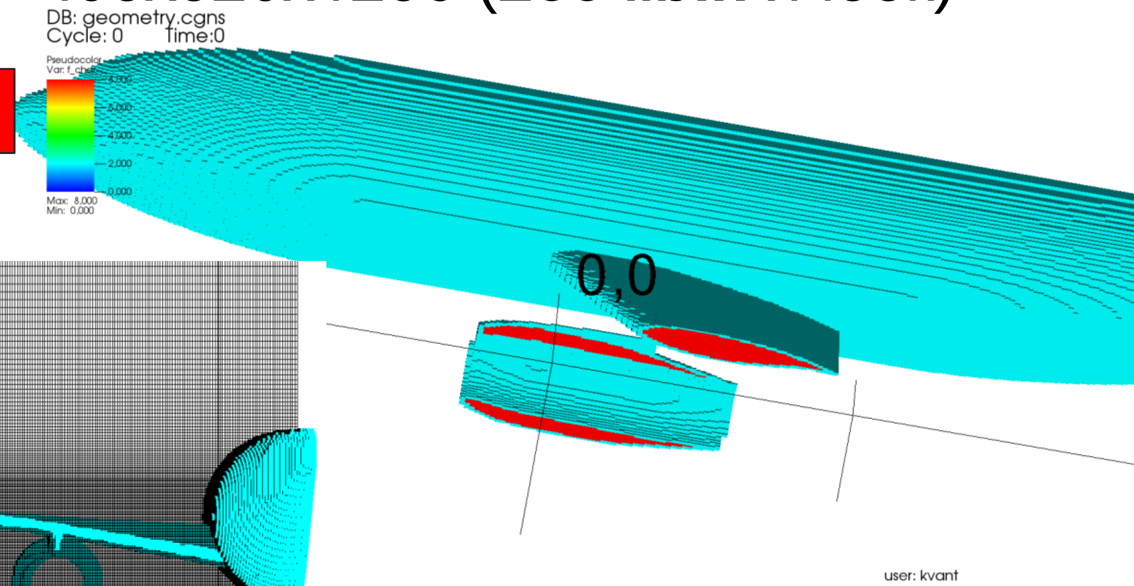
DLR F6

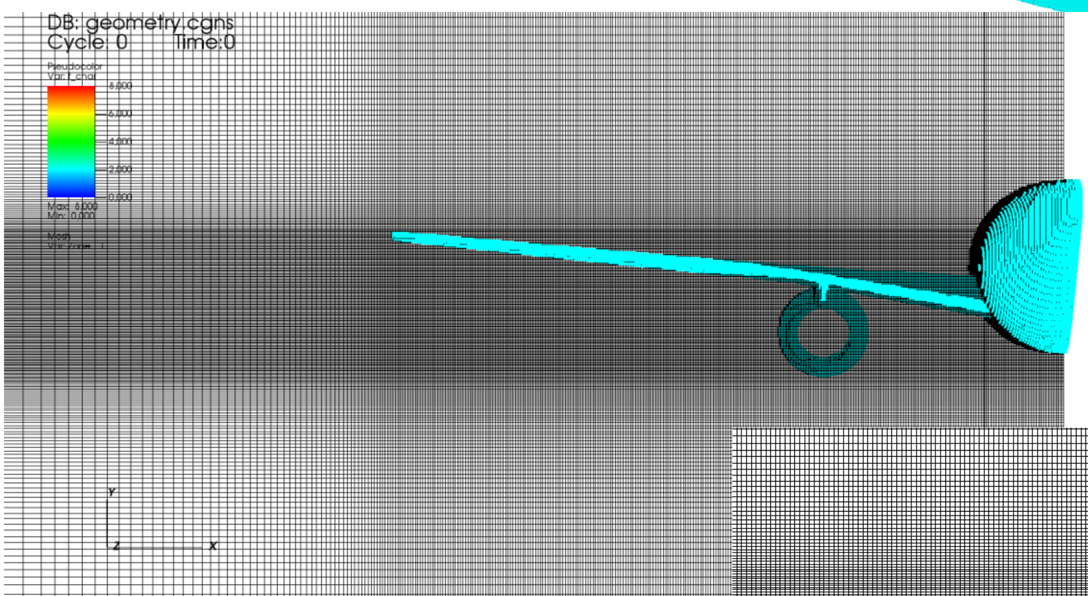
Ручное построение геометрии – до 1.5 месяцев

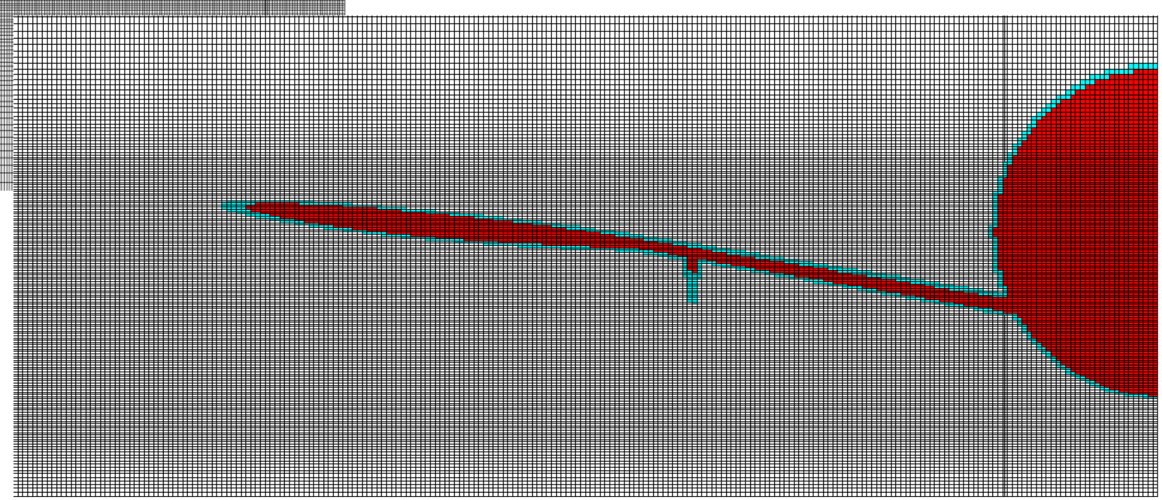
Результаты расчетов

DLR F6, расчетная сетка - 408x520x1256 (**266 млн** ячеек)

Автоматическое построение



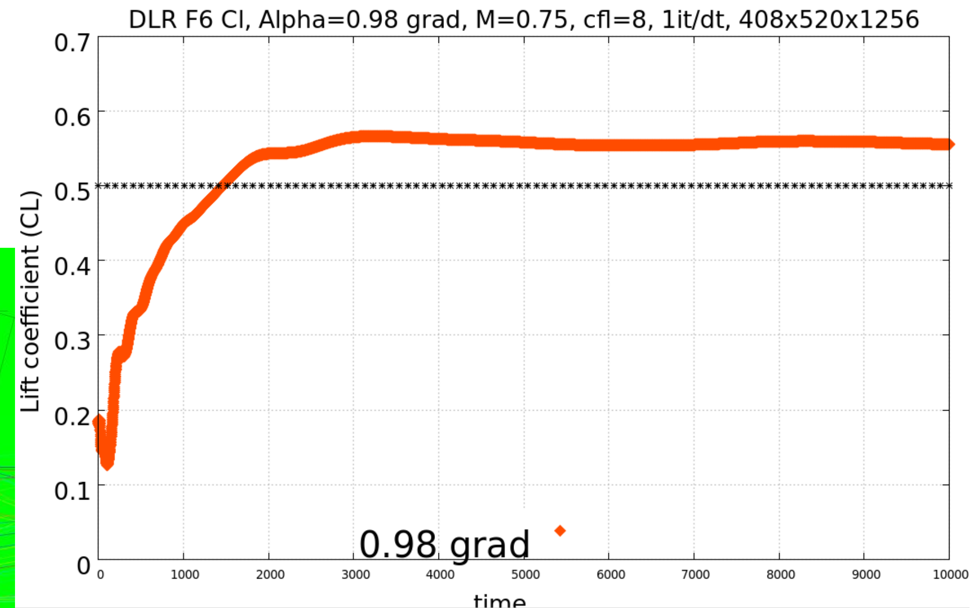


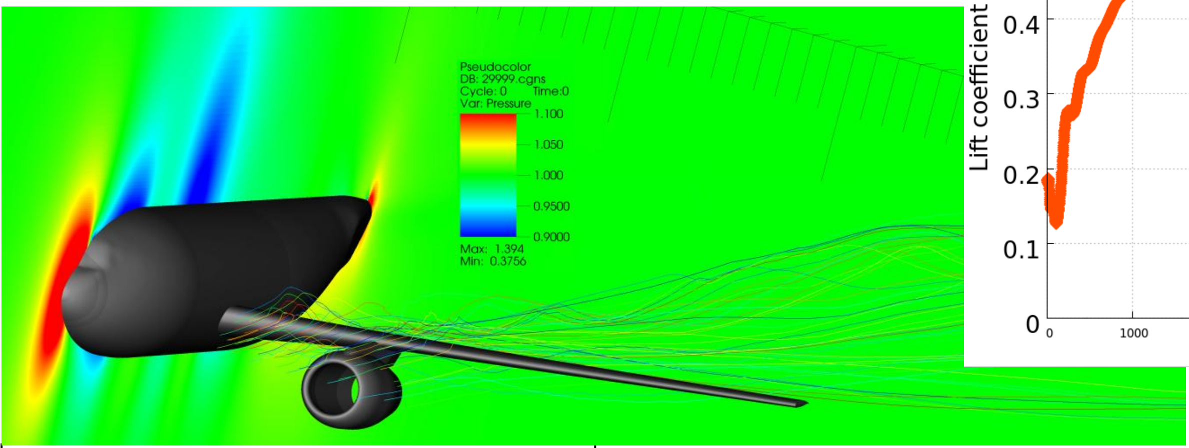


- пересекаемая ячейка
- внутренняя ячейка

Результаты расчетов

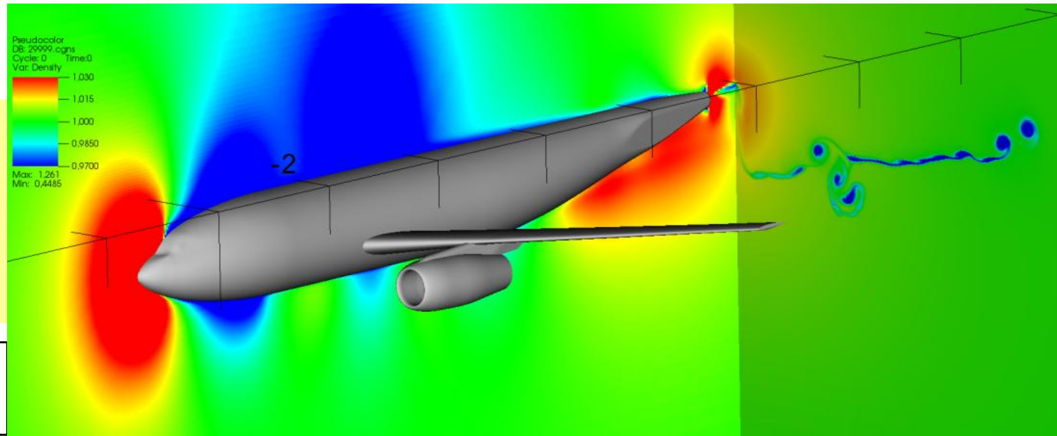
3D, DLR F6, M=0.75,α=0.98°, 260 млн ячеек,





Pressure & streamlines

162 GPU, 3 часа
СК «Лобачевский»,
ННГУ им Н.И.Лобачевского



Density

Результаты расчетов

, 260 млн ячеек,

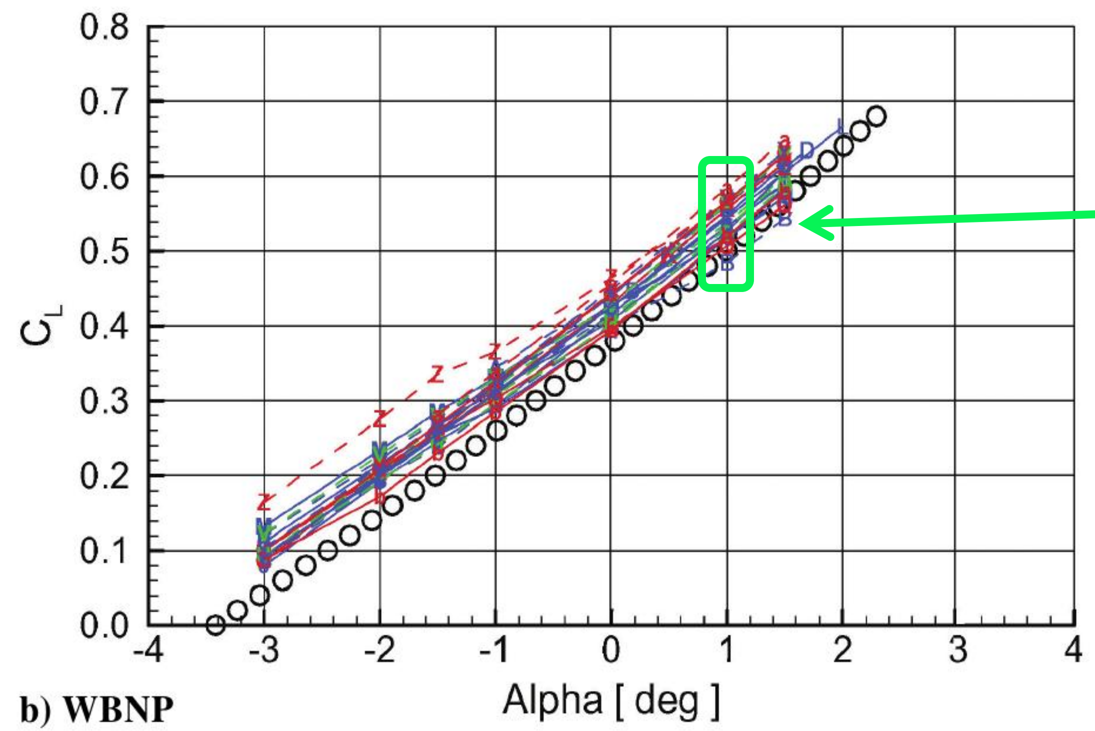
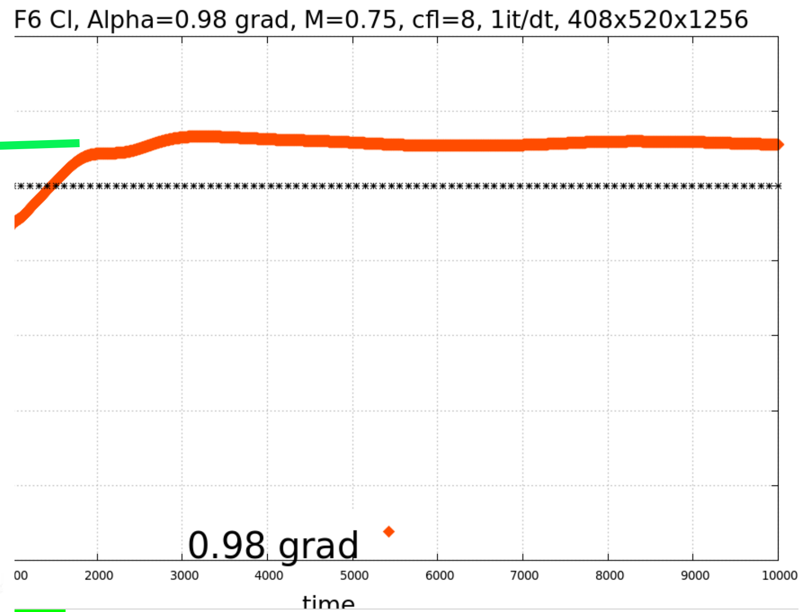
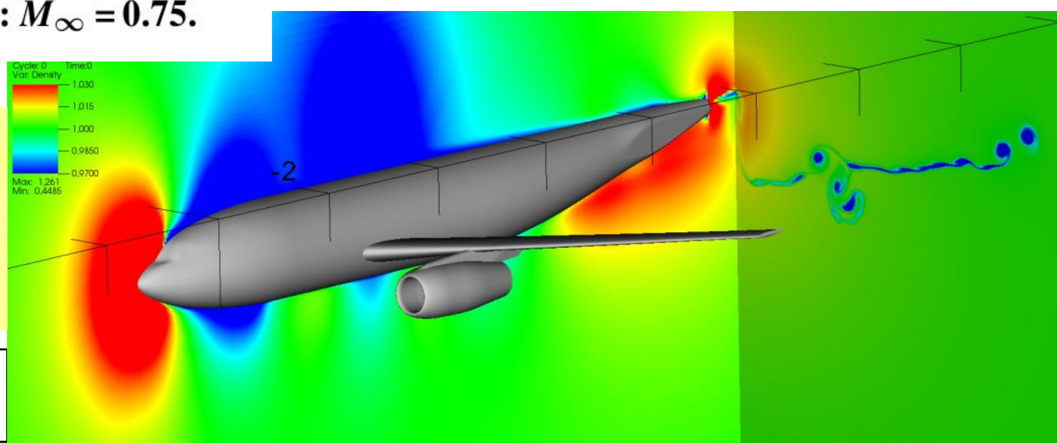


Fig. 10 **Composite lift curve results for case 2: $M_\infty = 0.75$.**

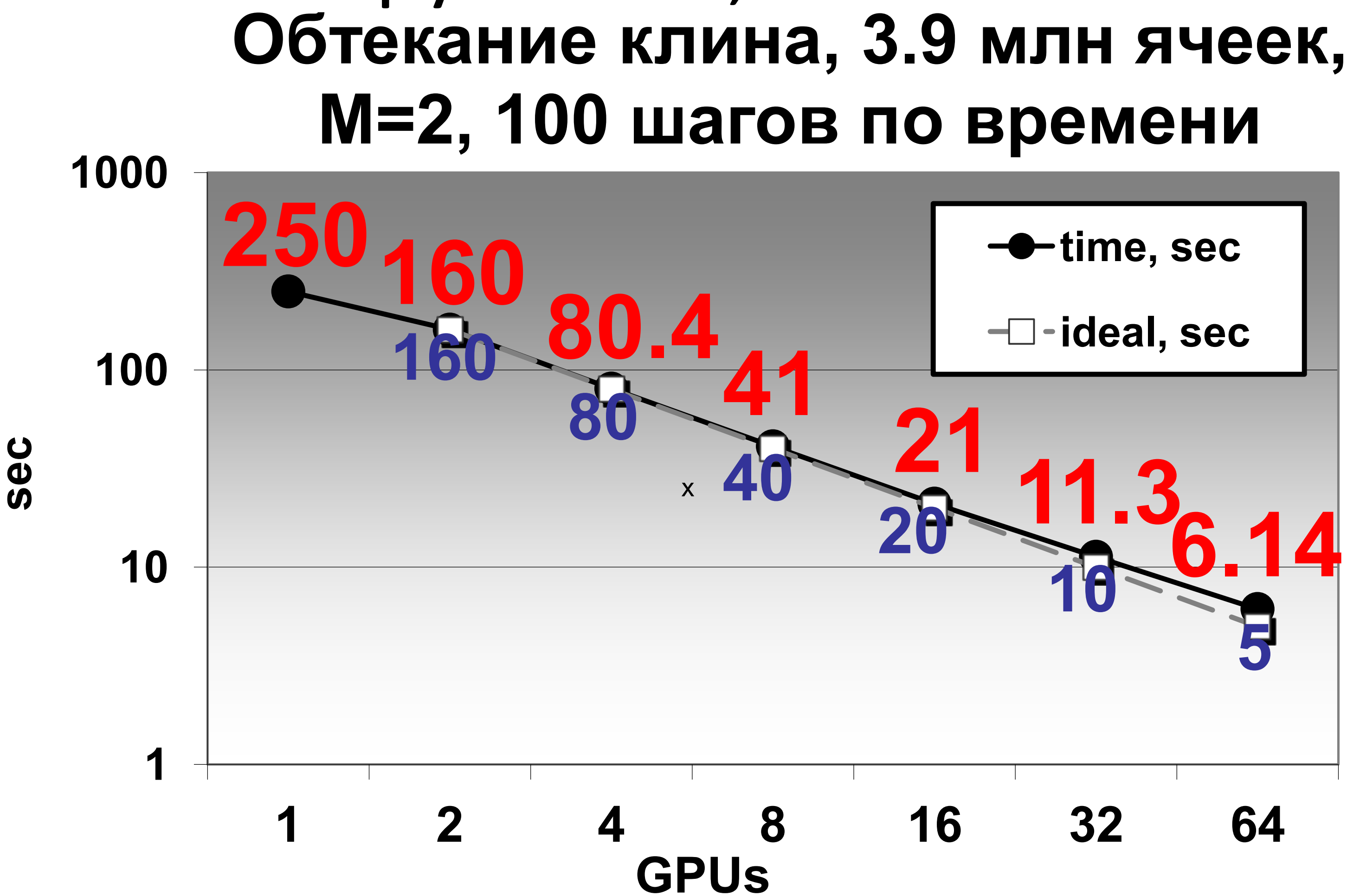


162 GPU, 3 часа
СК «Лобачевский»,
ННГУ им Н.И.Лобачевского



Density

Масштабируемость, 2D



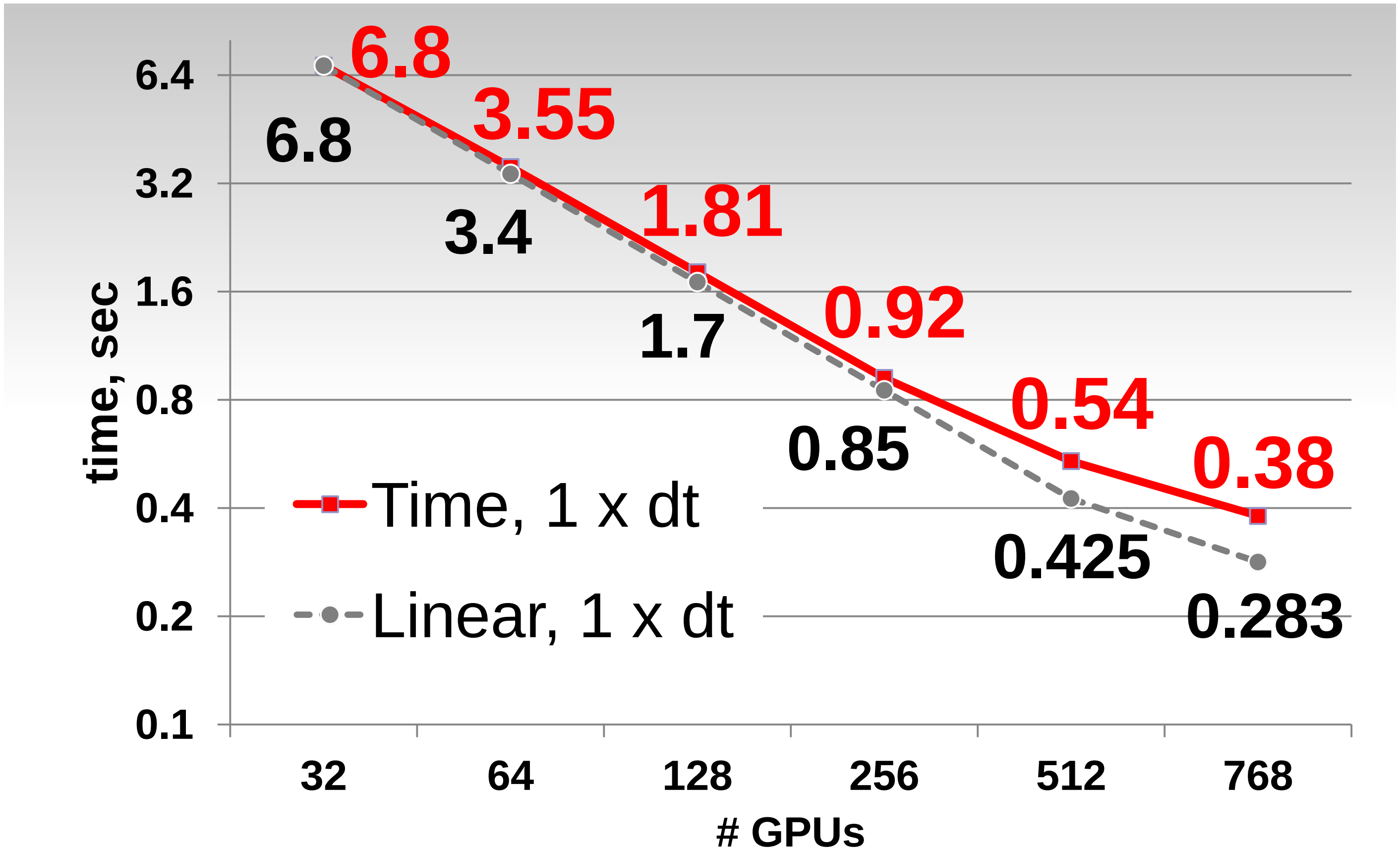
СК К100, ИПМ им М.В. Келдыша

Эффективность – **80%** на 64 GPU

Масштабируемость, 3D

150 млн ячеек, 1 шаг по времени

(взаимодействие ударной волны и погран слоя)



СК «Ломоносов», МГУ им М.В. Ломоносова

Эффективность – **75%** на **768 GPU**

Ускорение 1 GPU / 1 CPU(core) ~ **15-30x**

Выводы

- Построен параллельный алгоритм для метода LU-SGS, доказана его корректность и эквивалентность последовательной версии;
- Реализован эффективный программный комплекс на основе параллельной версии LU-SGS с использованием метода свободной границы и декартовых сеток для расчета задач газовой динамики на multi-GPU системах;
- Предварительные результаты показали корректность работы программного комплекса и его хорошую масштабируемость на системах петафлопного уровня;
- Проведено численное моделирование ряда задач аэродинамики;

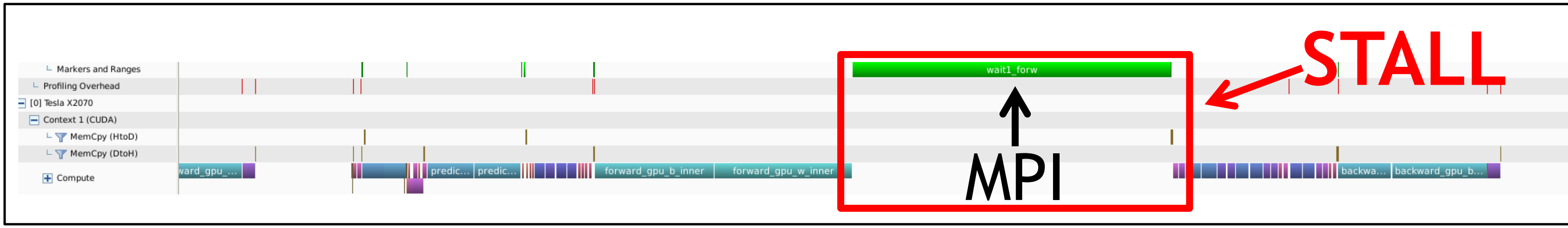
Планы

- Учет вязких диссипативных эффектов;
- Решение сопряженных задач газовой динамики и механики твердого тела;
- Оптимизация решателя под современные и будущие архитектуры GPU и других сопроцессоров;
- Real-time визуализация расчетов;

Спасибо за внимание!

Взаимодействие CUDA и MPI

MPI Send/Recv – **RENDEZVOUS (default)**



Rendezvouz → Eager: +30% performance!

MPI Send/Recv - **EAGER**