

Обзор решателя "Несветай"

В.А. Титарев

Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН

ВЦ РАН, 21.02.2012

План презентации

- ① Краткое описание пакета "Несветай"
- ② Неявная расчетная схема для уравнений Навье-Стокса
- ③ Апроксимация по пространству
- ④ Примеры расчетов

- ① Набор решателей, построенных единой базовой библиотеки
- ② Кинетический решатель
 - Уравнение Больцмана с модельным интегралом столкновений Шахова
 - ТВД схема по пространству + неявный одношаговый метод дискретизации по времени типа LU-SGS
 - Консервативность по модельному интегралу столкновения
 - MPI версия протестирована на 512 процессорах, эффективность около 80%
- ③ Газодинамический решатель
 - сжимаемые уравнения Эйлера и Навье-Стокса в безразмерной форме
 - OpenMP дает ускорение в 3 раза на дешевом 6 ядерном процессоре
 - Реализован счет на произвольном числе ядер с помощью MPI и domain decomposition

Обзор возможностей базовой библиотеки

Текущая версия библиотеки "Несветай" реализует следующие операции:

- ① процедуры чтения и обработки сетки
 - используемые форматы - Neutral, StarCD
- ② процедуры 3х-мерной реконструкции в локальных переменных
 - элементы произвольной формы
 - 1-ый порядок, линейные и ТВД схемы 2-5 порядков
 - ограничители Барта, ван дер Вегта, Венкатаクリшнана
- ③ процедуры квази-одномерной реконструкции для гексаэдров
 - ТВД с ограничителями minmod & van Leer
 - WENO3
- ④ процедуры вывода результатов в формате Tecplot
- ⑤ препроцессор для использования многоблочных сеток
 - разбиение на блоки делается с помощью Metis

① Входные файлы:

- Сетка в Neutral/Star CD форматах, включая разметку поверхностей с граничными условиями
- Входной файл с описанием типов граничных условий
- Входной файл с заданием типа решателя
- Входной файл с заданием номера задачи, начальных данных, времени счета, числа Куранта

② Структура решателя

- Плоские списки вершин, граней и ячеек
- Двухмерные массивы значений решения в ячейках
- Плоские массивы значений решения и потоков через грани

③ Распараллеливание:

- по методу OpenMP - 3х кратное ускорение на AMD Phenom X6
- по методу MPI - протестировано до 128 ядер (используются non-blocking communications)

Расчетные уравнения с вращением

Сжимаемые уравнения Навье-Стокса в системе координат, вращающейся вокруг оси Z с угловой скоростью ω :

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{F} - \mathbf{F}_v) + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{G} - \mathbf{G}_v) + \frac{\partial}{\partial z} (\mathbf{H} - \mathbf{H}_v) = \mathbf{B},$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = (u - V_x) \mathbf{U} + p \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ u \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = -\rho \begin{pmatrix} 0 \\ -v \cdot \omega \\ +u \cdot \omega \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{и т.д.}$$

$$V_x = -y\omega, \quad V_y = x\omega, \quad V_z = 0$$

Метод решения: общий вид

Используется неявная конечно-объемная схема на произвольной неструктурированной сетке:

$$\frac{\Delta \mathbf{U}_i}{\Delta t} = \mathbf{R}_i^{n+1}$$

где

$$\Delta \mathbf{U}_i = \mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n, \quad \mathbf{R}_i^{n+1} = -\frac{1}{|V_i|} \sum_l \Phi_{il}^{n+1} A_{il} + \mathbf{B}_i^{n+1}.$$

Численный поток через грань l ячейки i дается формулой

$$\Phi_{il} = \frac{1}{|A_{il}|} \int_{A_{il}} (n_x(\mathbf{F} - \mathbf{F}_v) + n_y(\mathbf{G} - \mathbf{G}_v) + n_z(\mathbf{H} - \mathbf{H}_v)) dA$$

Линеаризация по времени дает следующее выражение:

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

Записывая разностную схему для всех ячеек сетки, получаем итоговую форму

$$\left(\mathbf{I} - \Delta t \frac{\partial \mathbf{R}^n}{\partial \mathbf{U}} \right) \Delta \mathbf{U} = \Delta t \mathbf{R}^n$$

Метод решения (2): линеаризация для уравнений Эйлера

Численный поток имеет вид:

$$\Phi_{il}^{n+1} = \frac{1}{A_{il}} \int_{A_{il}} T_{il}^{-1} \mathbf{F}(T_{il} \mathbf{U}^{n+1}) dA = T_{il}^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{Q}_i^{n+1}, \mathbf{Q}_{\sigma_l(i)}^{n+1}), \quad \mathbf{Q}^{n+1} = T_{il} \mathbf{U}^{n+1}$$

где T_{il} - матрица поворота для грани l , $\sigma_l(i)$ - соседняя ячейка для грани l .
Функция \mathbf{f} - решатель задачи о распаде разрыва (поток Русанова)

$$f(\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2) = \frac{1}{2} (\mathbf{F}(\mathbf{Q}_1) + \mathbf{F}(\mathbf{Q}_2)) - \frac{1}{2} s(\mathbf{Q}_2 - \mathbf{Q}_1)$$

Линеаризуя численные потоки уравнения относительно t^n , получаем, что в каждой ячейке i приращение решения в этой ячейке связано с приращением решения в соседних ячейках по следующей формуле:

$$\Delta \mathbf{U}_i + \frac{\Delta t}{|V_i|} \sum_l T_{il}^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{Q}_i^n} T_{il} \Delta \mathbf{U}_i + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{Q}_{\sigma_l(i)}^n} T_{il} \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)} \right) A_{il} = \Delta t \mathbf{R}_i^n$$

При этом источник \mathbf{B} в правой части схемы аппроксимируется явным образом.

Метод решения (3): упрощение

Вычисляем матрицы Якоби в левой части схемы, используя приближение 1-го порядка по пространству

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{Q}_i^n} = \frac{1}{2} (\mathbf{A}(\mathbf{Q}_i^n) + s_{il} \mathbf{I}), \quad \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{Q}_{\sigma_l(i)}^n} = \frac{1}{2} (\mathbf{A}(\mathbf{Q}_{\sigma_l(i)}^n) - s_{il} \mathbf{I}), \quad \mathbf{A}(\mathbf{Q}) = \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{Q})}{\partial \mathbf{Q}}$$

После некоторых упрощений схема принимает вид

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i + \frac{\Delta t}{2|V_i|} \sum_l \left(T_{il}^{-1} \mathbf{A}(\mathbf{Q}_{\sigma_l(i)}) T_{il} - s_{il} \mathbf{I} \right) A_{il} \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)} = \Delta t \mathbf{R}_i^n,$$

$$D_i = 1 + \frac{\Delta t}{2|V_i|} \sum_l s_{il} A_{il}$$

Дальнейшее упрощение получается при замене

$$\mathbf{A}(\mathbf{Q}_{\sigma_l(i)}) \Delta \mathbf{Q}_{\sigma_l(i)} \approx \Delta \mathbf{F}_{il} = \mathbf{F}(\mathbf{Q}_{\sigma_l(i)} + \Delta \mathbf{Q}_{\sigma_l(i)}) - \mathbf{F}(\mathbf{Q}_{\sigma_l(i)})$$

Итог:

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i + \frac{\Delta t}{2|V_i|} \sum_l \left(T_{il}^{-1} \Delta \mathbf{F}_{il} - s_{il} \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)} \right) A_{il} = \Delta t \mathbf{R}_i^n$$

Метод решения (4): обобщение на уравнения НС

Требуются две модификации:

- ① Правая часть \mathbf{R} включает не только конвективные потоки, но и вторые производные.
- ② Используемый в левой части метод распада разрыва изменяется

$$f(\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2) = \frac{1}{2}(\mathbf{F}(\mathbf{Q}_1) + \mathbf{F}(\mathbf{Q}_2)) - \frac{1}{2}\hat{s}(\mathbf{Q}_2 - \mathbf{Q}_1)$$

где величина \hat{S} содержит как оценку скорости волн из конвективного решения, так и вязкие добавки

$$\hat{s} = s + \frac{\mu_{12}}{\rho_{12}|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}, \quad \rho_{12} = \frac{1}{2}(\rho_1 + \rho_2), \quad \mu_{12} = \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2)$$

Для одномерного случая $|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| \approx \Delta x$.

Метод решения (5): решение СЛАУ

Полученная разреженная система уравнений

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i + \frac{\Delta t}{2|V_i|} \sum_l \left(T_{il}^{-1} \Delta \mathbf{F}_{il} - s_{il} \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)} \right) A_{il} = \Delta t \mathbf{R}_i^n$$

решается с помощью LU-SGS факторизации (Меньшов & Накамура, 1996 год).

Опуская детали, получаем двухшаговую процедуру:

- ① Backward sweep: $i = N, N-1, \dots, 1$.

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i^* = -\frac{\Delta t}{2|V_i|} \sum_{l:\sigma_l(i) < i} \left(T_{il}^{-1} \Delta \mathbf{F}_{il} - s_{il} \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)} \right) A_{il} + \Delta t \mathbf{R}_i^n$$

- ② Forward sweep: $i = 1, 2, \dots, N$.

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i = \Delta \mathbf{U}_i^* - \frac{\Delta t}{2|V_i|} \sum_{l:\sigma_l(i) > i} \left(T_{il}^{-1} \Delta \mathbf{F}_{il} - s_{il} \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)} \right) A_{il}$$

Проверка сходимости к стационарному режиму

Проверяем два критерия как функции номера шага по времени n :

- ① Поведение невязки в нормах L_∞ , L_1
- ② Для задач с вращением - установление тяги и крутящего момента

Вектор невязки в ячейке i определяется следующим образом:

$$\mathbf{R}_i^n = -\frac{1}{|V_i|} \sum_l \Phi_{il}^n A_{il} + \mathbf{B}_i^n$$

Общая невязка для поля течения

$$\mathcal{E}_\infty = \max_i \|\mathbf{R}_i\|, \quad \mathcal{E}_1 = \sum_i \|\mathbf{R}_i\| V_i$$

Наша цель: уменьшить невязку на несколько порядков и получить постоянство тяги и момента как функции номера шага по времени.

Обсуждение неявной схемы

- ① Реализована для сеток с ячейками произвольной формы
- ② "Matrix-free" подход позволяет легко менять физические модели и соответственно векторы потоков
- ③ Простое обобщение на системы уравнений с жесткой правой частью (D ; заменяется матрицей)
- ④ Эффективное распараллеливание с помощью MPI & domain decomposition
- ⑤ Правая часть может быть аппроксимирована схемами разных типов, например неструктурированной TVD/WENO, структурированной TVD/WENO.

Неструктурированная ТВД схема произвольного порядка

- Используется локальная система координат $\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ (Dumbser & Kaser 2007 (tetra) , Titarev 2010 (mixed-element)).
- Для скалярной величины g реконструкционный многочлен имеет вид

$$p_i(\hat{\mathbf{x}}) = g_i + \sum_{k=1}^K a_{ik} e_{ik}(\hat{\mathbf{x}}), \quad e_{ik} \equiv \hat{x}_k - \frac{1}{|V'_{i0}|} \int_{V'_{i0}} \hat{x}_k d\hat{\mathbf{x}}.$$

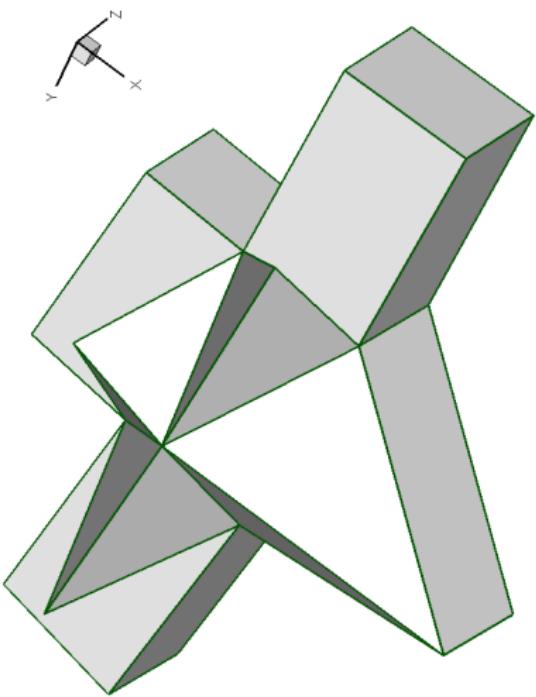
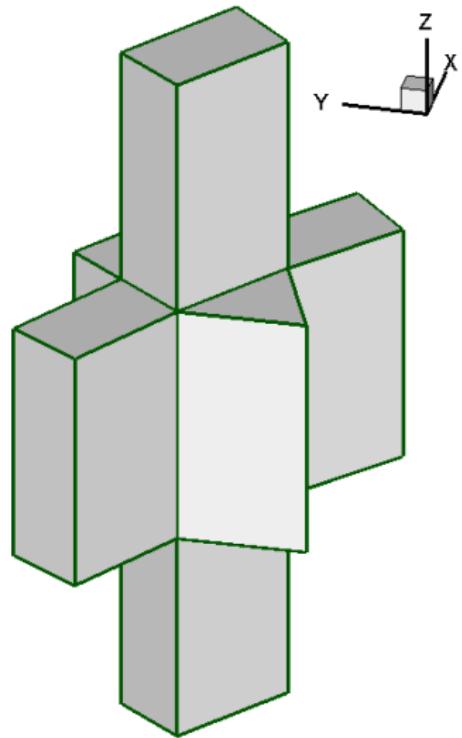
- Неизвестные коэффициенты a_{ik} находятся из условий для каждой ячейки $m = 1, \dots, M_i$ из шаблона:

$$\frac{1}{|V'_{im}|} \int_{V'_{im}} p_i(\hat{\mathbf{x}}) d\hat{\mathbf{x}} = g_{i0} + \frac{1}{|V'_{im}|} \sum_{k=1}^K \int_{V'_{im}} a_{ik} e_{ik} d\hat{\mathbf{x}} = g_{im}^n.$$

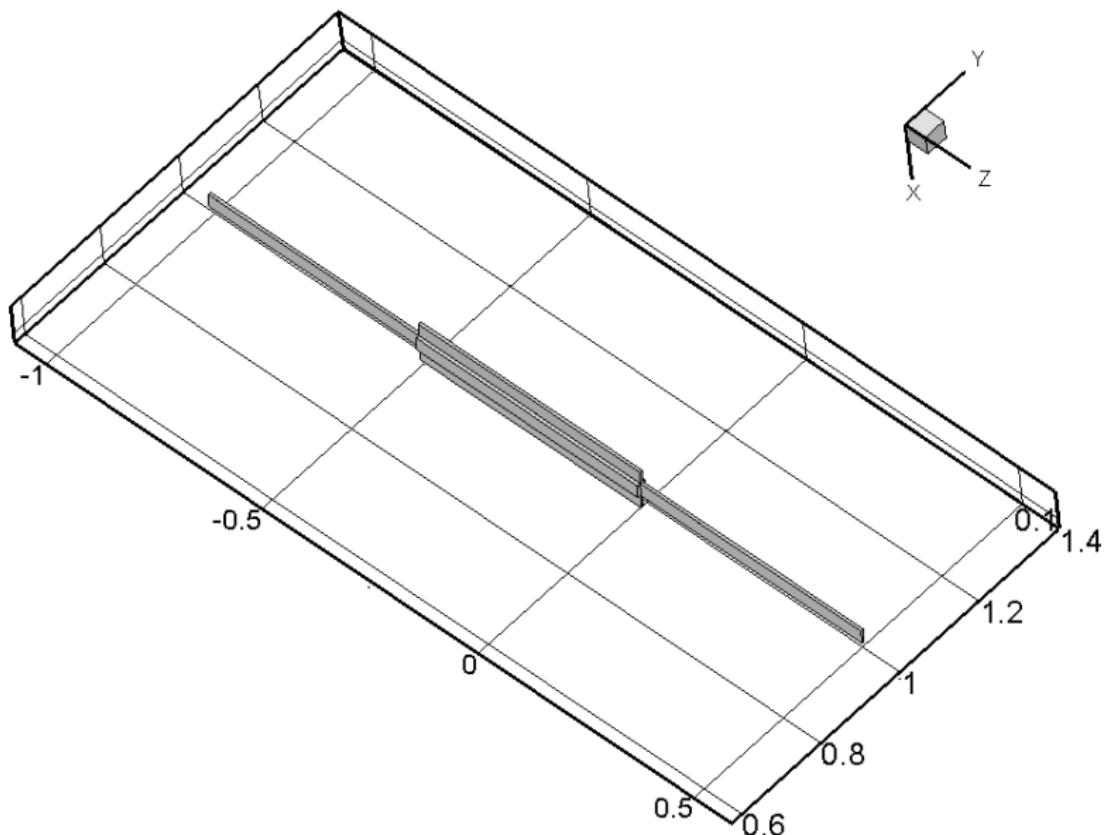
- Окончательно, коэффициенты выражаются через значения g в ячейках шаблона как

$$\begin{pmatrix} a_{i1}^n \\ a_{i2}^n \\ a_{i3}^n \\ \vdots \\ g_{0M_i}^n \end{pmatrix} = D_i \cdot \begin{pmatrix} g_{00}^n \\ g_{01}^n \\ g_{02}^n \\ \vdots \\ g_{0M_i}^n \end{pmatrix}, \quad D_i = \begin{pmatrix} d_{00} & d_{01} & \dots & d_{0M_i} \\ \dots & & & \\ d_{30} & d_{31} & \dots & d_{3M_i} \end{pmatrix}.$$

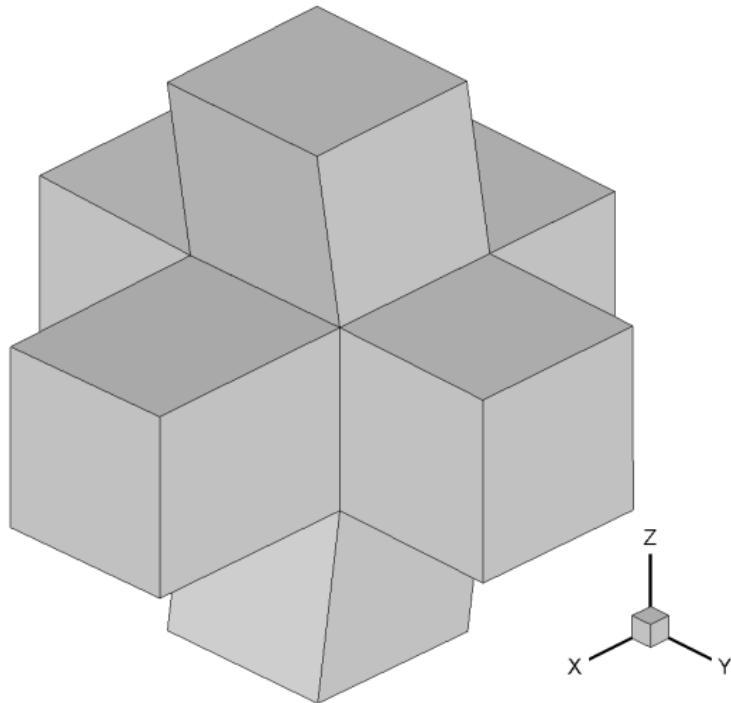
Шаблон ТВД схемы в физических координатах



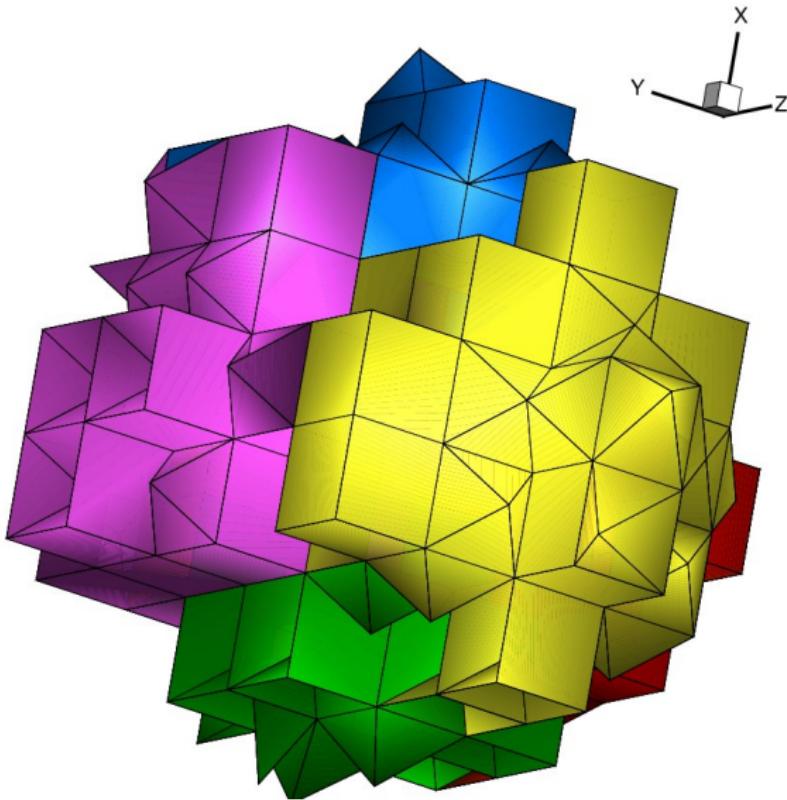
Влияние отображения в локальную систему координат (i)



Влияние отображения в локальную систему координат (ii)



WENO схема Титарев & et al (2010)



Кинетический решатель (i)

- Основное уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} + \xi_z \frac{\partial f}{\partial z} = \nu(f^+ - f),$$

$$\nu = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{nT}{\mu} \frac{1}{Kn}, \quad f^+ = f_M \left(1 + \frac{4}{5}(1 - \text{Pr}) \mathbf{Sc} \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) \right),$$

$$f_M = \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp(-c^2), \quad \mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{T}}, \quad \mathbf{v} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}, \quad \mathbf{S} = \frac{2\mathbf{q}}{nT^{3/2}}.$$

- Макроскопические переменные

$$\left(n, n\mathbf{u}, n\left(\frac{3}{2}T + u^2\right), \mathbf{q} \right) = \int \left(1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \frac{1}{2}\mathbf{v}\mathbf{v}^2 \right) f d\boldsymbol{\xi}.$$

- Границные условия на поверхности:

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f_w = \frac{n_w}{(\pi T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right), \quad \xi_n = (\boldsymbol{\xi}, \mathbf{n}) > 0,$$

$$n_w = N_i/N_r, \quad N_i = - \int_{\xi_n < 0} \xi_n f d\boldsymbol{\xi}, \quad N_r = + \int_{\xi_n > 0} \xi_n \frac{1}{(\pi T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right) d\boldsymbol{\xi}.$$

Кинетический решатель (ii)

- Дискретизация в физическом пространстве и неявный метод продвижения по времени идентичны описанным выше
- В пространстве молекулярных скоростей используется консервативный подход к вычислению интеграла столкновений
- MPI версия с разбиением на блоки в скоростном пространстве (эффективность около 80% на 512 ядрах)
- Возможно обобщение на другие кинетические модели
- В работе версия с многоблочным подходом в физическом пространстве.

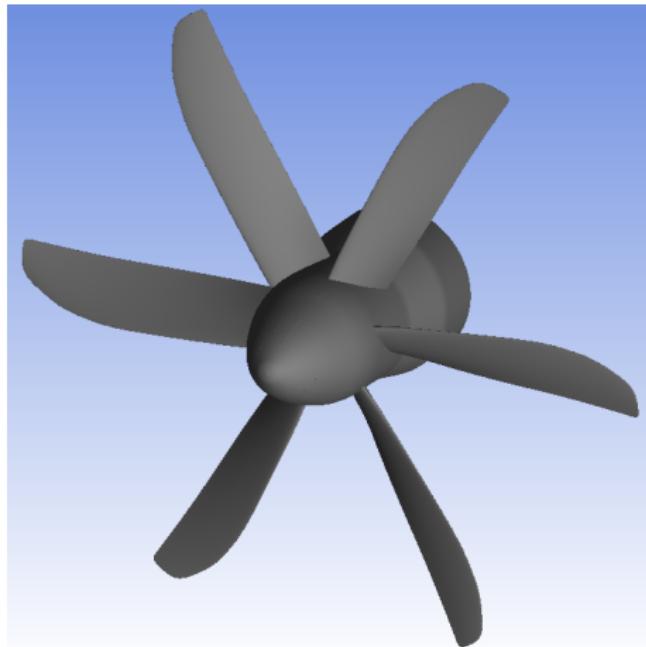
Примеры расчетов: обтекание модельной геометрии шестилопастного винта

Условия: равномерный набегающий поток

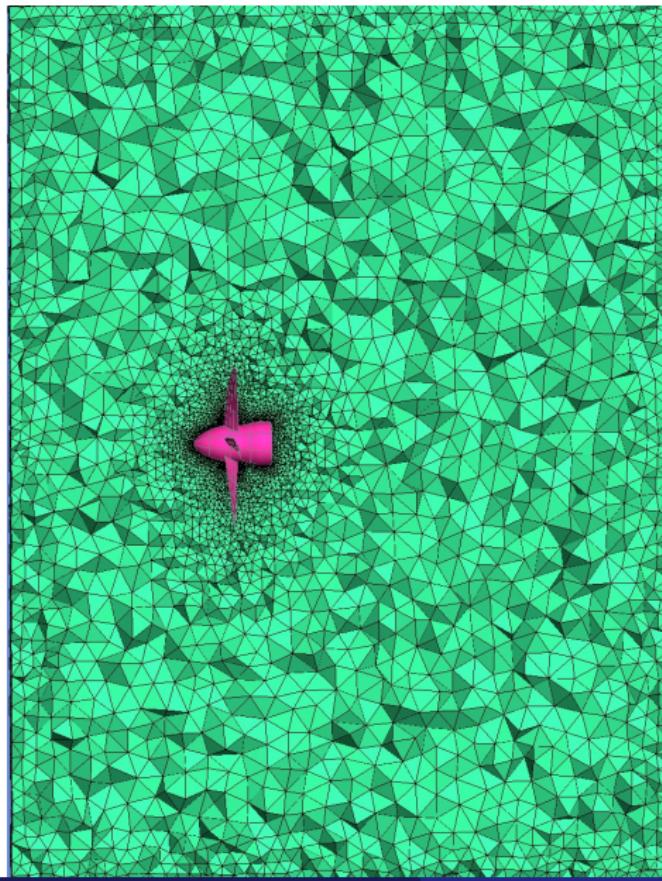
Меняющиеся параметры:
скорость вращения N , об/мин
скорость набегающего потока V , м/с

Из эксперимента известны тяга и вращающий момент

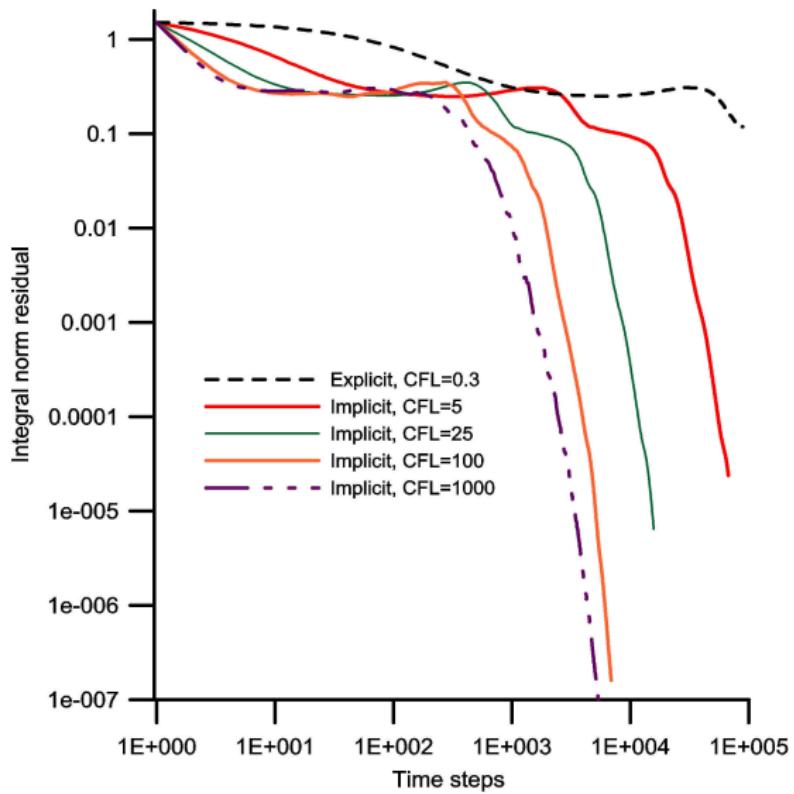
Экспериментальные данные представлены ЦАГИ им. Н.Е. Жуковского



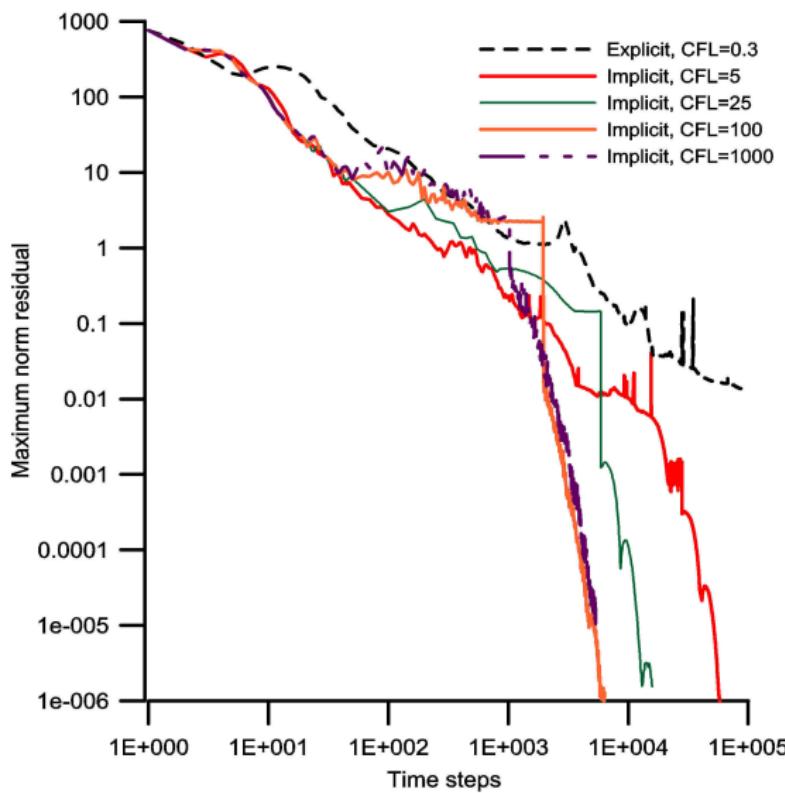
Тестовый расчет: около 0.5×10^6 узлов, 2.8×10^6 тетраэдров, 64 блока.



История сходимости в интегральной норме, все расчеты на 64 блоках.



История сходимости в максимальной норме



Сравнение с экспериментом (уравнения Эйлера)

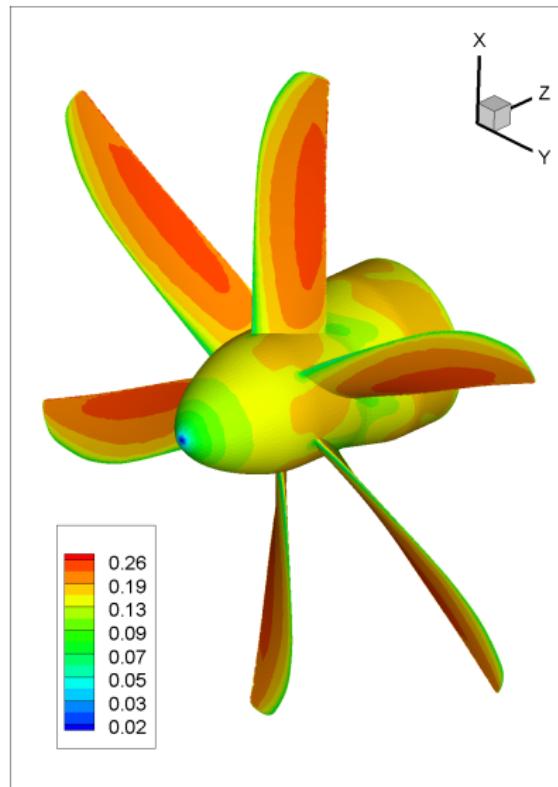
Для заданного режима расхождение с экспериментом e для тяги N определяется по формуле

$$e = \frac{|N_{\text{расчет}} - N_{\text{эксперимент}}|}{N_{\text{максимальная}}}$$

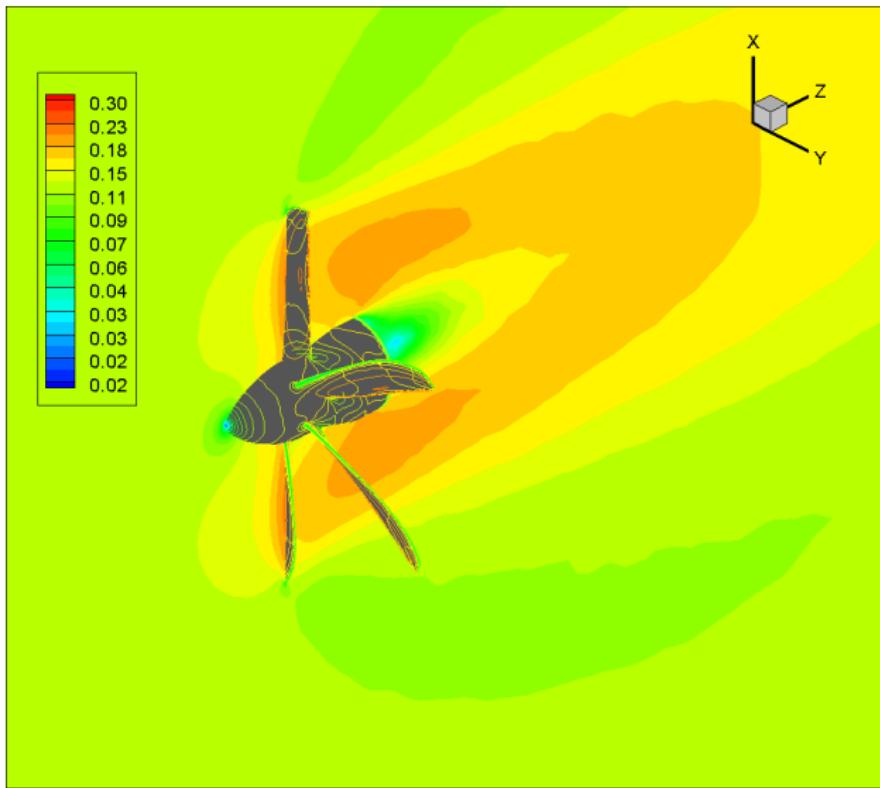
где $N_{\text{максимальная}}$ – максимальная тяга вина в эксперименте.
Отметим, что эксперимент проводился для полной геометрии.

Режим	Расхождение
$V = 5.9 \text{ m/s}, N=4987 \text{ об/мин}$	9%
$V = 20.2 \text{ m/s}, N=4999 \text{ об/мин}$	5%
$V = 39.8 \text{ m/s}, N= 4993 \text{ об/мин}$	3%
$V = 40.1 \text{ m/s}, N=3493 \text{ об/мин}$	0.5%

Распределение числа Maxa по поверхности винта для $V = 39\text{м/с}$



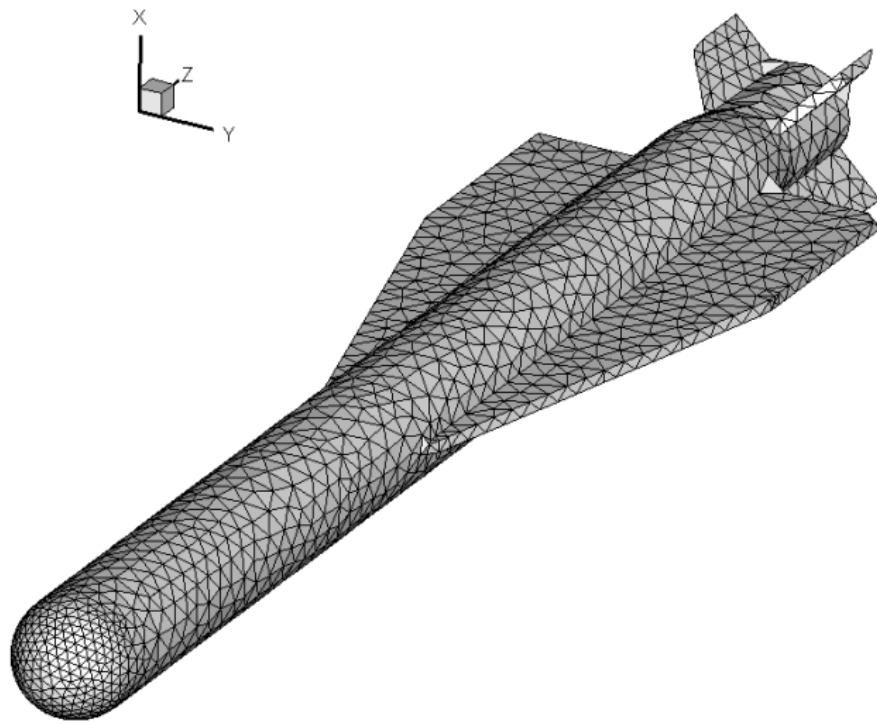
Распределение числа Маха по плоскости симметрии для $V = 39\text{м}/\text{с}$



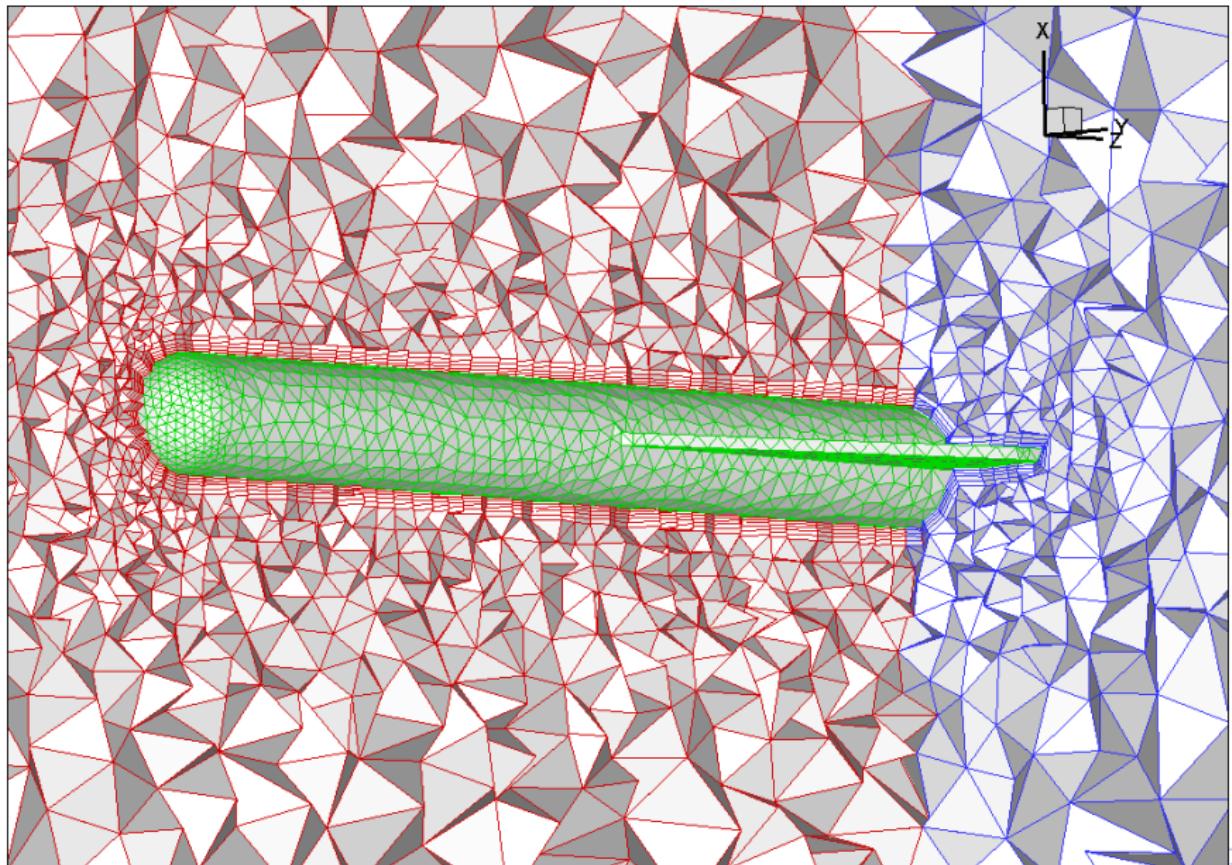
Выводы

- ① Использование неявной схемы уменьшает требуемое число итераций (шагов по времени) в 10-100 раз.
- ② Стоимость одного шага по времени для неявного ТВД варианта схемы на 50% меньше, чем для явного.
- ③ Основное ускорение будет достигнуто для уравнений Навье-Стокса (в работе)

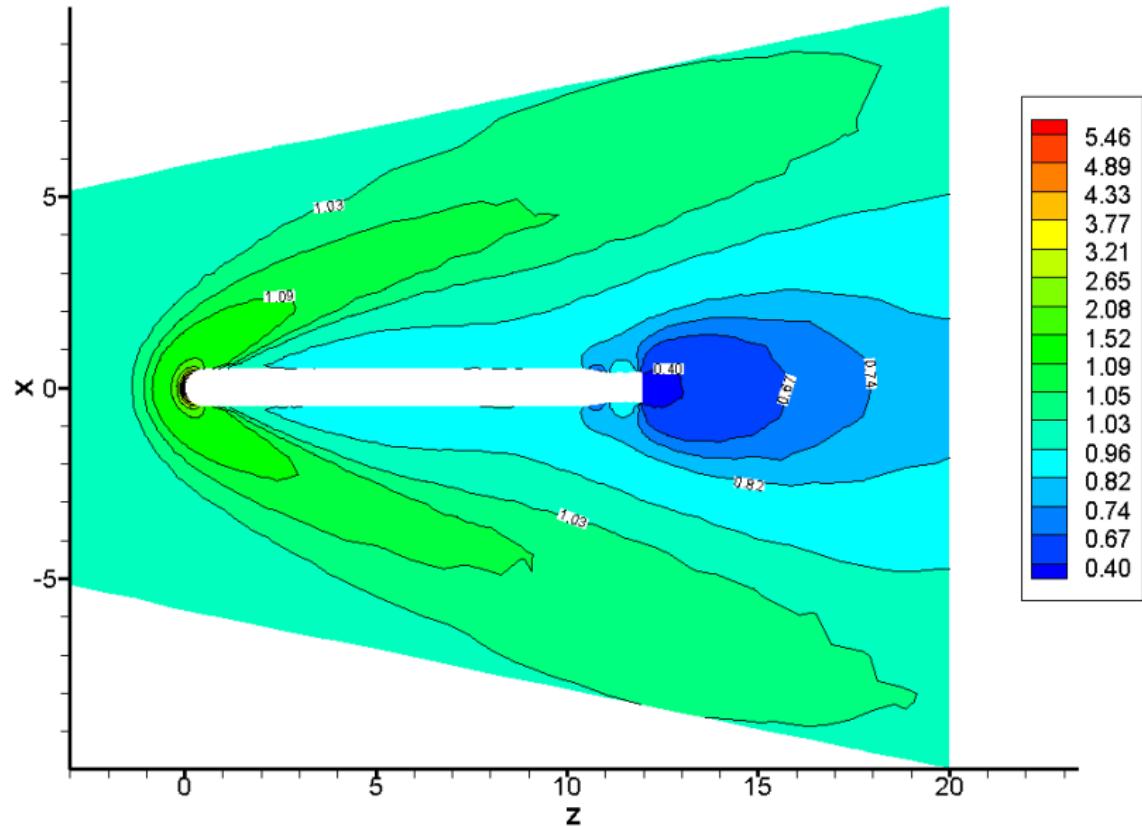
Пример расчета: обтекание ракеты разреженным газом



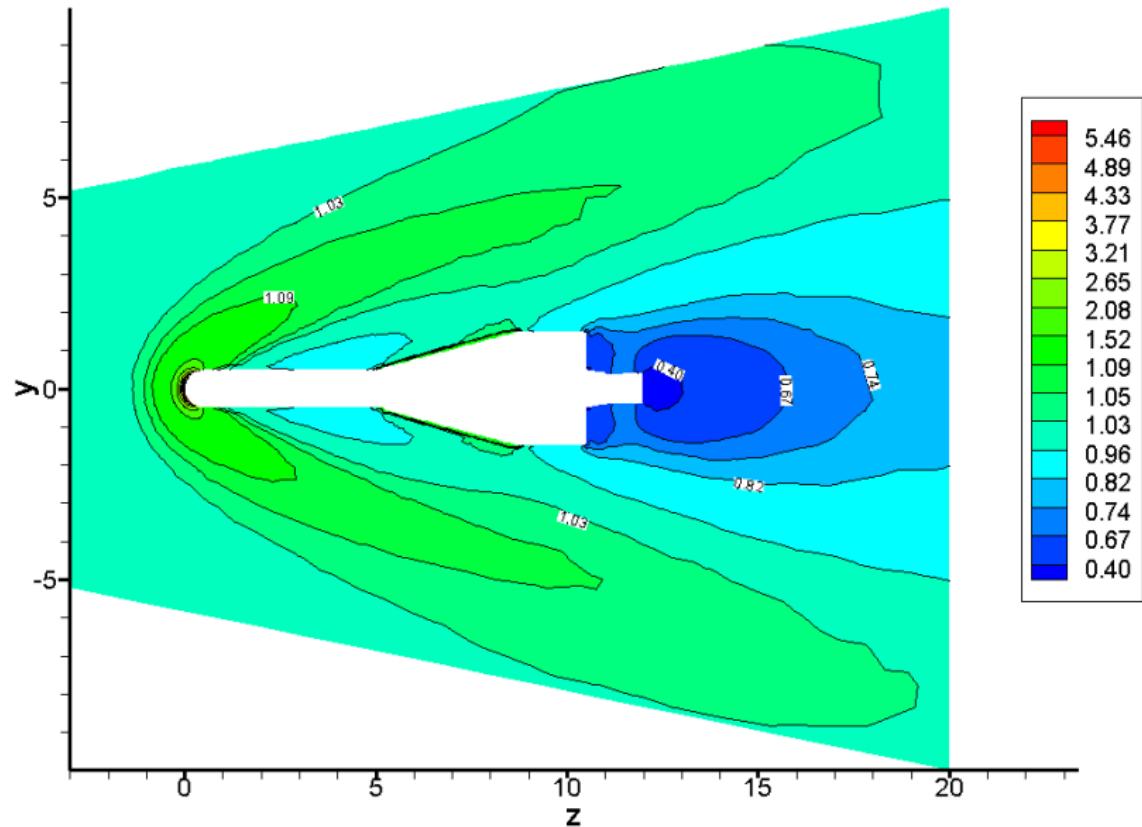
Пример расчета (2)



Плотность в плоскости x-z



Плотность в плоскости y-z



Некоторые публикации

- ① V.A. Titarev (2012). Efficient deterministic modelling of three-dimensional rarefied gas flows, Communications in Computational Physics, V. 12, N. 1, p. 161-192.
- ② V.A. Titarev and D. Drikakis (2011). Uniformly high-order schemes on arbitrary unstructured meshes for advection-diffusion equations. Computers & Fluids. V. 46, N. 1, pp. 467-471.
- ③ P. Tsoutsanis, V.A. Titarev and D. Drikakis (2011). WENO schemes on arbitrary mixed-element unstructured meshes in three space dimensions. Journal of Computational Physics, V. 230, P. 1585 - 1601.
- ④ В.А. Титарев (2010). Неявный численный метод расчета пространственных течений разреженного газа на неструктурированных сетках. Ж. вычисл. математики и мат. физики, Т. 50, N 10, с. 1811-1826
- ⑤ V.A. Titarev (2010). Implicit unstructured-mesh method for calculating Poiseuille flows of rarefied gas. Communications in Computational Physics, V. 8, N 2, pp. 427-444
- ⑥ M. Dumbser, M. Käser, V.A. Titarev and E. F. Toro (2007). Quadrature-free non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for nonlinear hyperbolic systems, Journal of Computational Physics. V. 221, N.2, pp. 693-723