

РЕШЕНИЕ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МНОГОМЕРНЫХ ЗАДАЧ ГАЗОДИНАМИКИ НА МНОГОЯДЕРНЫХ ПРОЦЕССОРАХ И GPU

Б.П. Рыбакин, В.Д. Горячев

Введение. В данной работе представлены результаты математического моделирования взаимодействия ударной волны с одиночным пузырьком газа пониженной плотности в трехмерной постановке. Математическое моделирование осуществлялось на основе уравнений Эйлера с помощью метода конечных объемов высокого порядка на равномерной сетке. Максимальный размер вычислительной области равнялся $4096 \times 1024 \times 1024 \sim 4.295$ миллиарда ячеек. Расчеты на больших сетках требуют достаточно большого количества оперативной памяти и больших вычислительных ресурсов. В работе были использованы технологии параллельного программирования OpenMP и CUDA.

Моделирование ударного взаимодействия пузырька газа пониженной плотности с ударной волной в трехмерной постановке в последнее время становится предметом детальных исследований. Это связано с многими практическими задачами: моделированием процессов турбулентного горения в прямоточных воздушно-реактивных двигателях (ПВРД), моделированием безоперационного удаления камней в почках (литотрипсия) в медицине, при изучении эффектов сонолюминисценции, при моделировании задач астрофизики и т. д. Экспериментальные исследования указанных процессов имеют большое значение, но технически трудоемки и не позволяют выяснить тонкие подробности происходящих процессов, таких как возникновение и распад внутренних волн, индуцированных ударной волной вихрей и других эффектов. Численное моделирование таких процессов на высокопроизводительных компьютерах позволяет подробно исследовать особенности происходящих физических явлений.

Нестационарные газодинамические задачи, возникающие на практике, представляют большой интерес. Решение таких задач в трехмерной постановке с учетом процессов горения и детонации и влияния на газодинамические процессы гравитационных и магнитных полей требует значительных вычислительных ресурсов. Опыт таких решений необходим для проектирования перспективных двигателей нового поколения, гиперзвуковых летательных аппаратов, для прогнозирования повышения отдачи нефтеносных пластов с помощью процессов управляемого горения. Для моделирования взрывов сверхновых звезд, исследования формирования галактик, моделирования климата и предсказания погоды также необходимо проводить большой объем вычислительной работы. В настоящее время для проведения таких расчетов используются эффективные разностные схемы высокого разрешения.

Изучению процессов взаимодействия ударной волны с пузырьком газа пониженной плотности посвящено большое количество работ [1-5]. В этих работах исследовались различные аспекты динамики пузырька — его деформация, диффузия, теплопередача, влияние магнитных полей и т. п.

Постановка задачи. Рассматривалась задача взаимодействия ударных волн различной интенсивности со сферическими полостями, заполненными газом с меньшим значением плотности. С практической точки зрения, такие задачи позволяют изучить процесс образования вихрей при контактом взаимодействии нескольких газов с различными плотностями и уравнениями состояния [4,6]. Систему уравнений газовой динамики, записанную в консервативной форме, можно представить в виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_i v_j + P \delta_{ij}) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((e + P) v_j \right) = 0 \quad (3)$$

Уравнение состояния использовалось в виде: $e = 1/2 \rho v^2 + \epsilon$. В приведенных выше уравнениях (1) ρ — плотность, $v_i, \{i=x,y,z\}$ — скорость, $P = (\gamma - 1) \epsilon$ — давление, ϵ — удельная внутренняя энергия, e — полная энергия.

Расчетная область представляла собой параллелепипед, заполненный покоящимся газом с плотностью $\rho_0 = 1.0$ и давлением $p_0 = 1.0$. Внутри этого параллелепипеда задавалась сферическая область радиуса $r = r_0$, с центром в точке (x_0, y_0, z_0) . Слева, в точке с координатами $x = x^*$, располагается плоская ударная волна, которая движется слева направо. Начальные условия слева от ударной волны и вне сферического пузырька задаются следующим образом $(p, \rho, u, v, w)^T = (p_b, \rho_b, u_b, v_b, w_b)^T$. Внутри полости давление и плотность равны $p = p_b = 1.0$, $\rho = \rho_b = 0.01377$. За ударной волной искомые величины определяются с помощью соотношений Ренкина -

Гюонио. Число Атвуда для данного варианта равно $At=0.973$. Число Маха равно $M=2.5$. На правой и левой границах расчетной области задавалось граничное условие свободного протекания. На остальных границах задавались условия равенства нулю нормальной к границе компоненты скорости.

Численный метод.

Система уравнений (1) - (3) в векторной форме имеет вид:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

Здесь

$$\mathbf{u} = (\rho, \rho v_x, \rho v_y, \rho v_z, e)^T \quad \mathbf{F} = (\rho v_x, \rho v_x^2 + P, \rho v_x v_y, \rho v_x v_z, \rho e + P)^T \quad (5,6)$$

Потоки \mathbf{G} и \mathbf{H} определяются аналогично (6).

Численную схему решения уравнений Эйлера можно записать в следующем виде:

$$\frac{(u_{i,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^n)}{\Delta t} + \frac{(F_{i+1/2,j,k} - F_{i-1/2,j,k})}{\Delta x} + \frac{(G_{i,j+1/2,k} - G_{i,j-1/2,k})}{\Delta y} + \frac{(H_{i,j,k+1/2} - H_{i,j,k-1/2})}{\Delta z} = 0$$

Схема второго порядка точности $F(2)_{ti+1/2}$ выводилась из противопоточной схемы первого порядка $F(1)_{ti+1/2}$. Эта коррекция вводилась в расчетный код для устранения ложных временных осцилляций, их общее число на текущем временном шаге не превышало количество осцилляций на предыдущем шаге: $TV(u_{i+1}) \leq TV(u_i)$. Для выполнения этих условий применялись различные ограничители: *minmod*, *superbee*, *vanLeer*. Проведенные расчеты показали, что для данной задачи наилучшие результаты дает ограничитель *vanLeer*.

Схема решения и подробное описание тестовых расчетов приведены в работах [4,6]. Размеры расчетной сетки в численном эксперименте варьировались от $1024 \times 512 \times 512$ до $4096 \times 1024 \times 1024$. Часть предварительных расчетов проводилась на сетке $128 \times 128 \times 128$.

Распараллеливание вычислений. Эффективное моделирование сложных трехмерных течений, невозможно без использования высокопроизводительной вычислительной техники и технологий параллельного программирования.

При проведении расчетов были использованы кластер кафедры высокопроизводительных вычислений МГУ и рабочая станция с достаточно большой производительностью. Узел кластера имеет следующие характеристики: два процессора Intel Xeon E5 2630, каждый процессор имеет по 6 ядер, тактовая частота 2.3 GHz. Объем оперативной памяти - 128 Гб. Процессоры поддерживают технологию HyperThreading (HT). Для расчетов было доступно 24 ядра. Кроме того, на этом узле находится графический ускоритель Nvidia Kepler K20 с 5 Гб памяти GDDR5. На этом узле удалось провести расчеты на сетке $4096 \times 1024 \times 1024$. Нужно отметить, что проведение расчетов на сетках с более чем 4 миллиардами расчетных узлов представляет собой значительные сложности. Файл с записью контрольной точки занимает более 90 Гбайт, файлы с результатами расчетов также занимают достаточно много места на жестких дисках. Часть расчетов велась на рабочей станции с двумя процессорами Intel Xeon E5 2620, частотой 2.0 GHz и 64 Гб оперативной памяти. Использование равномерных эйлеровых сеток было предопределено применением технологии распараллеливания OpenMP.

Алгоритм расчета был основан на применении метода распараллеливания вычислений по физическим координатам. Из четырехмерного массива консервативных переменных вырезалось одномерное сечение массива по каждой пространственной переменной и распределялось между процессорами. На каждом временном шаге интегрирования методом Рунге-Кутты рассчитывались величины, определенные в центрах ячеек, затем вычислялись потоки через границы соответственно для волн движущихся направо и движущихся влево.

Примененная методика позволила эффективно проводить вычисления. На рис. 1 приведены графики ускорения расчетов, полученных на сетке $512 \times 512 \times 512$ и на сетке размерами $1024 \times 1024 \times 1024$. На левом рисунке полученное ускорение можно представить в виде кусочно-линейной функции. До количества процессоров равного 8 полученное ускорение растет линейно, почти по закону Амдала. Дальнейший рост ускорения тоже близок к линейной зависимости, но с другим углом наклона прямой. На сетке $512 \times 512 \times 512$ максимальное ускорение на 24 процессорах было порядка 15. Результаты, полученные на сетке $1024 \times 1024 \times 1024$, немного отличаются. Это связано с тем, что из соображений экономии расчетного времени, вычисления проводились до физического времени, меньшего, чем на сетке меньшего размера.

Расчеты ускорения на сетке $4096 \times 1024 \times 1024$ не проводились, так как вычисления на одном или двух процессорах требуют на порядки большего процессорного времени. Расчеты велись с использованием технологии CUDA. Для этого были использованы директивы *cuF*. Это новые директивы, которые позволяют запускать простые подпрограммы, написанные на Фортране, с выполнением на графических процессорах. Такие директивы располагаются перед циклом или группой вложенных циклов и позволяют компилятору PGI Fortran запускать эти подпрограммы на ядрах GPU. Запуск таких *cuF* ядер аналогичен запуску обычного шеврона $\lll \ggg$, в котором задаются размеры вычислительного блока и грида. Размеры блока и грида могут

быть заданы пользователем, или вычислены CUDA автоматически. Ускорение, полученное с помощью `cuF` ядер, сильно зависит от используемых графических процессоров и от объема памяти на них.

Ниже приводится пример запуска подпрограммы на графическом ускорителе с помощью `cuF` ядер. Здесь `n` количество тесно вложенных циклов, которые запускаются на GPU.

```
integer:: n1,n2
type (dim3):: grid, block
grid = dim3(min(65535,(n1+31)/256), min( 65535,n2 ), 1)
!$cuF kernel do(n) <<< grid,256 >>> (U1,n1,n2)
do j = 1, n2
  do i = 1, n1
    .....
  enddo
enddo
```

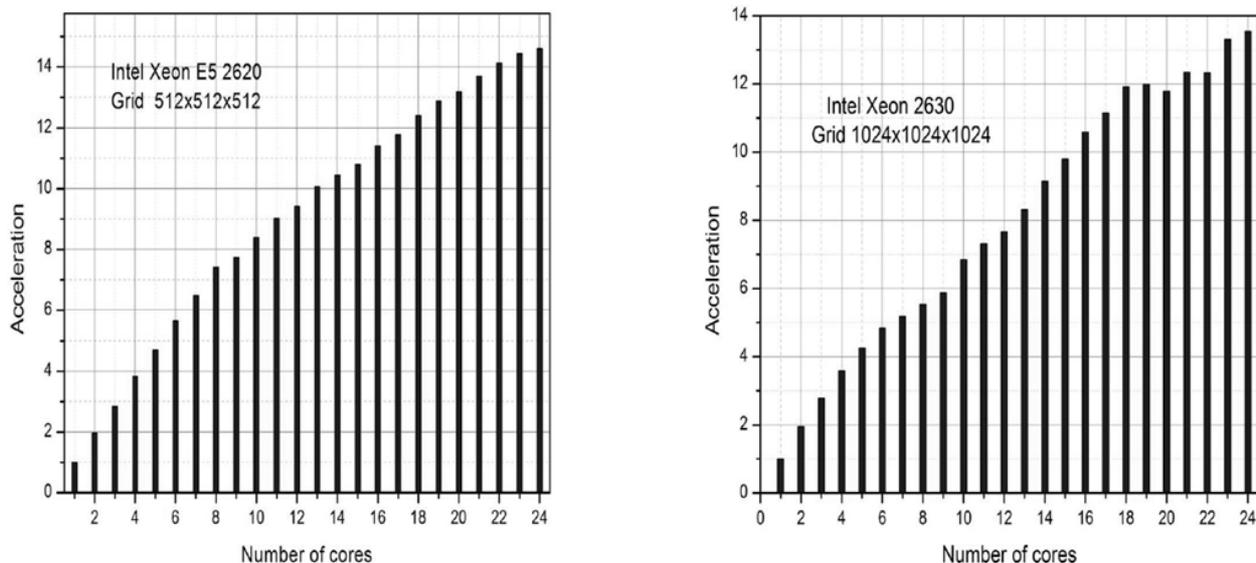


Рис. 1. Ускорение, полученное с использованием OpenMP на 24 ядрах процессоров Intel Xeon E5 2620 и 2630.

Применение очень больших сеток затрудняет программирование вычислительного кода на PGI Fortran (или C). Это связано с тем, что память на графических процессорах не превышает 6 Gb. Поэтому приходится очень часто вести обмен информацией через медленную шину PCI_E. Ситуацию немного улучшает применение нескольких графических процессоров. Сейчас ведутся работы по распараллеливанию созданной расчетной программы на четыре графических процессора multi GPU NVIDIA M2090.

Результаты расчетов

Для получения детальной картины динамически быстро-изменяемого течения численные расчеты велись на достаточно подробной сетке. Размер расчетной сетки достигал $4096 \times 1024 \times 1024$, что составляет $4.295 \cdot 10^9$ ячеек. Радиус пузырька для такой сетки был равен 128 расчетным ячейкам, что позволяет с большими деталями изучить возникающие течения в его пределах. Для визуализации нестационарных трехмерных течений необходимо использовать достаточно производительные графические постпроцессоры. В данной работе использовалась система визуализации HDVIS [7], с использованием которой было возможно представление детальной картины течения с управляемой подготовкой анимации его динамической перестройки.

На представленных ниже рисунках приводятся результаты анализа процесса взаимодействия ударной волны со сферической областью пониженной плотности. При воздействии ударной волны на внутреннюю (условную) границу пузырька с меньшей плотностью, появляются отраженные и проходящие волны. Это показано на рис. 2., где приведено распределение плотности газа для моментов безразмерного времени $t = 7.5 - 12.5 - 17.5$. Здесь даны пояснения по распределению и положению основной, предварительно плоской, ударной волны, отраженных и прошедших волн, изменения поверхностей раздела деформируемого пузырька. На фрагменте 1 рисунка, представлена начальная стадия взаимодействия ударной волны с пузырьком на момент безразмерного времени $t=7.5$, когда ударная волна еще не достигла его внутренней границы. По мере продвижения ударной волны образуется отраженная от внутренней поверхности пузырька производная волна (2, 3). На этом же рисунке, представлен фрагмент картины распределения плотности внутри пузырька (4). На изображении 5 представлены полусферическая волна, которая движется навстречу падающей ударной волне, что приводит к началу формирования вихревого кольца. Хорошо различаются прошедшая и отраженная волны, волны разрежения. Полученные результаты находятся в удовлетворительном согласии с данными работы [8], где

проведен анализ процессов отражения и прохождения ударной волны от внутренней границы пузырька. Впервые такие нелинейные акустические эффекты были исследованы в работе [1] в 1987 году.

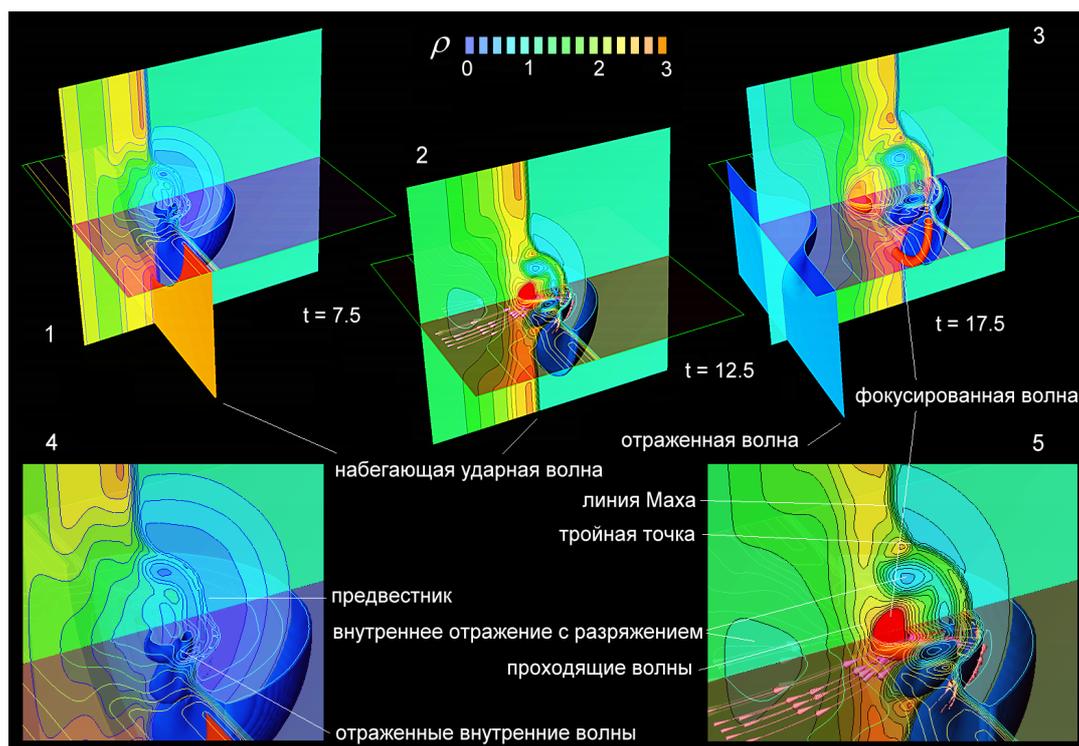


Рис. 2. Тестовый расчет: распределение плотности для трех моментов времени

Сформированные ударной волной вихревые кольца во многом инициированы неустойчивостью Рихтмайера-Мешкова, которая возникает и развивается при падении ударной волны на границу раздела сред с различными газодинамическими состояниями. Ее можно рассматривать, как предел неустойчивости Релея-Тейлора при импульсном взаимодействии. Эта неустойчивость подробно исследована в газодинамических расчетах течений в одномерной и двухмерной постановках, при падении ударной волны в ударной трубе на границу раздела двух газов, с различными термодинамическими характеристиками. Несовпадение на границе градиентов плотности и давления вызывает образование бароклинных завихрений [9]. Такое смещение провоцирует дальнейший рост неустойчивости течения и спонтанное увеличение вихревых образований разного масштаба.

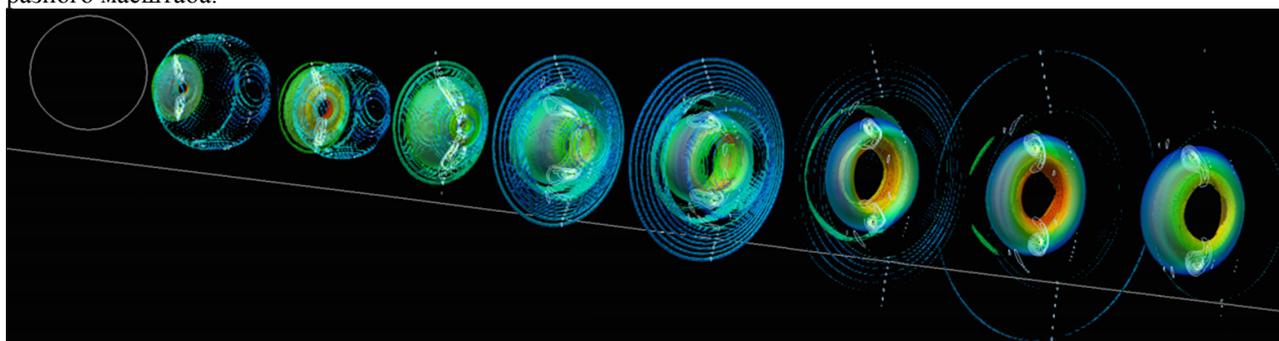


Рис. 3. Деформация пузырька гелия при взаимодействии с воздушной ударной волной ($M = 2.5$).

Последовательно представлены изоповерхности модуля завихренности течения - $|\text{rot}U| = 10$ в моменты времени с $t = 5$ до $t = 160$.

На приведенном выше рисунке показана динамика образования вихревого кольца при взаимодействии воздушной ударной волны с числом Маха $M=2.5$ с пузырьком гелия, с представлением его условной границы через поверхности модуля завихренности течения, в моменты безразмерного времени от $t = 5$ до $t = 160$.

Изоповерхности $|\text{rot}U|$ показаны в диапазоне значений от 1 до 30.

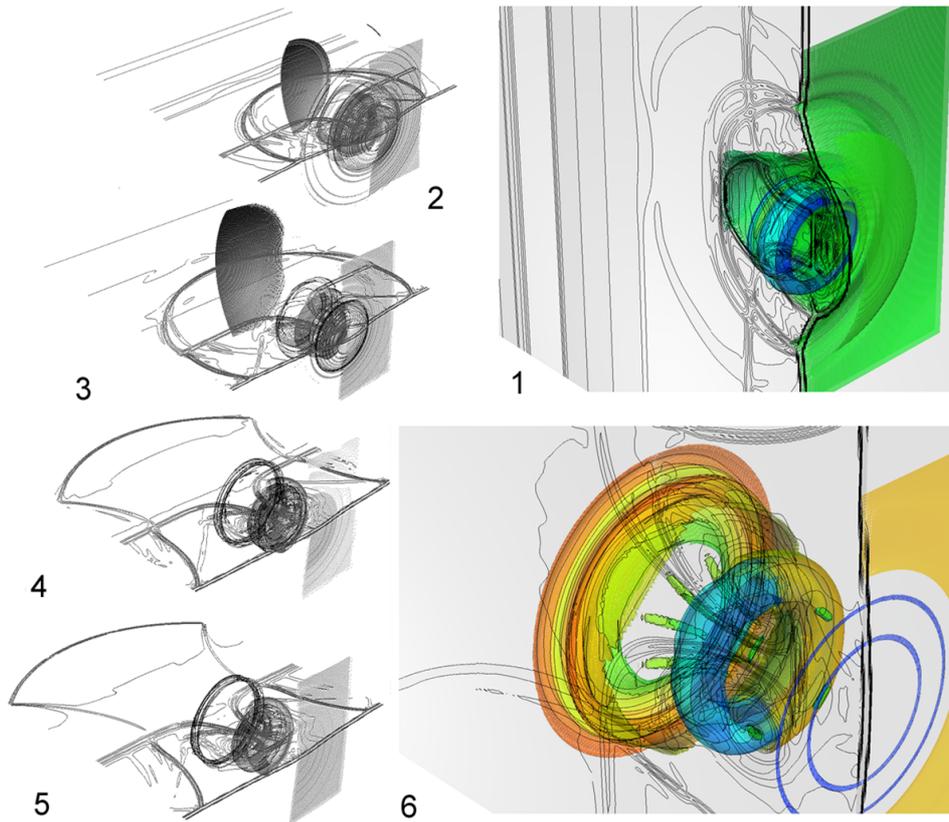


Рис. 4. Фазы развития газодинамических полей при взаимодействии ударной волны с пузырьком гелия в моменты времени: $t = 52$ (1), $t = 100$ (2), $t = 130$ (3), $t = 168$ (4), $t = 189$ (5), $t = 200$ (6)

Формирование структуры взаимодействующих волн показано на рис. 4. Отметим, что приведенная сцена визуализации в HDVIS выполнялась с использованием стилизации в виде карандашного эскиза и акварельного наброска. Такая имитация представления особенностей течения позволяет контрастно выявить необходимые детали формирования системы ударных волн и скалярных полей.

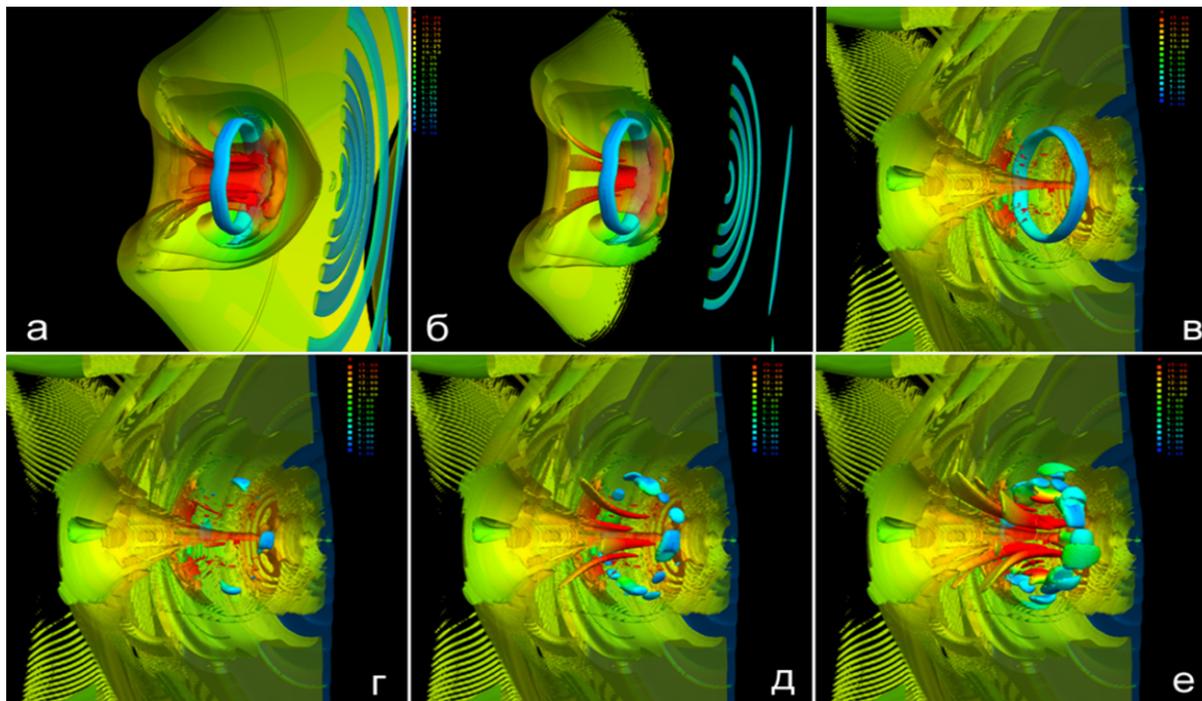


Рис. 5. Исоповерхности модуля завихренности при взаимодействии ударной волны с пузырьком гелия в момент времени $t = 200$. Нарастание завихренности. $|\text{rot}U|$: 10 – 2 (а); 10 – 1 (б); 10 – 0.1 (в). $|\text{rot}U| = 0.1$: $|\text{rot}U_x| = 4$ (г); $|\text{rot}U_x| = 2$ (д); $|\text{rot}U_x| = 1$ (е)

Достаточно подробное представление о быстротекущем временном преобразовании скоростных и скалярных полей дает использование сюжетных анимаций течения, создаваемых средствами HDVIS. Ряд таких видеосюжетов широко использовался для анализа результатов моделирования.

Процесс образования и развития неустойчивости Рихтмайера-Мешкова иллюстрируется на Рис. 5. Здесь на трех верхних рисунках приведены isoповерхности последовательных значений модуля завихренности $|\text{rot}U|$, на нижних рисунках показано поле компоненты завихренности $|\text{rot}U_x|$.

В качестве итога этапа работы по исследованию газодинамических течений можно отметить, что проведено достаточно подробное компьютерное моделирование процесса взаимодействия плоской воздушной ударной волны с пузырьком гелия. Вычисления проводились в нестационарной трехмерной постановке на расчетной сетке, содержащей более 4 миллиардов ячеек. Был построен и проверен в численном эксперименте параллельный вычислительный алгоритм, который показал хорошее ускорение вычислений для сеток размером до $1024 \times 1024 \times 1024$ на 24 процессорах Intel Xeon E5 2620 и 2630. Для проверки работоспособности кода с распараллеливанием на графических процессорах было использовано программирование с PGI Fortran cuff ядрами. На следующем этапе вычислений планируется распараллелить расчетную программу для multi GPU. В перспективе планируется численно исследовать взаимодействие косой ударной волны с областью пониженной плотности.

Благодарности. Работа велась при поддержке Президиума РАН по Программе № 18 и грантов РФФИ № 11-07-00679, 11-07-00135.

ЛИТЕРАТУРА:

1. J. Haas and B. Sturtevant, "Interaction of weak shock-waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 181, pp. 41–76, 1987.
2. J. Picone and J. Boris, "Vorticity Generation by Shock Propagation through Bubbles in a Gas," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 189, pp. 23–51, 1988.
3. D. Ranjan, J. Oakley, and R. Bonazza, "Shock-bubble interactions," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 43, no. 1, pp. 117–140, 2011.
4. B. Rybakin. Modeling of 3-D Problems of Gas Dynamics on Multiprocessing Computers and GPU. *Computers & Fluids*, Elsevier, DOI information: 10.1016/j.compfluid. 2012. 01.016, 31-JAN-2012.
5. B. Hejazialhosseini, D. Rossinelli, C. Conti, P. Koumoutsakos. High throughput software for direct numerical simulations of compressible two-phase flows. SC12, November 10-16, 2012, Salt Lake City, Utah, USA.
6. Б.П. Рыбакин. Решение трехмерных задач газовой динамики на графических ускорителях. *Вестник УГАТУ*, 2012 г. т.16, №6(51), стр. 108-112, ISSN 1992-6502.
7. В. Д. Горячев, М. Е. Балашов, М. С. Иванов, Д. В. Хотяновский. Визуализация газодинамических течений в системе HDVIS // Труды Всероссийской суперкомпьютерной конференции "Научный сервис в сети

Интернет: масштабируемость, параллельность, эффективность" - 2009, Изд-во МГУ, Москва, 2009, стр. 55-59.

8. J. Neiderhaus. A Computational Parameter Study for Three-Dimensional Shock-Bubble Interactions, 2007, University of Wisconsin, UWFD-1334.
9. S. K. Shankar, S. Kawai, S. Lele. Numerical Simulation of Multicomponent Shock Accelerated Flows and Mixing using Localized Artificial Diffusivity Method. AIAA 2010-352. pp. 1-31.