Разработка численных методов и универсального пакета программ для решения задач кинетической теории газов, аэроакустики и гиперзвуковой аэродинамики

В.А. Титарев

Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН
ФГУП ЦАГИ, НИО-9
МФТИ

Страничка: http://www.ccas.ru/personal/titarev/titarev.htm

Email: titarev@ccas.ru

НОЦ “Суперкомпьютерные технологии” МГУ, 6 ноября 2012 г.

Вступление

- Основное направление деятельности автора доклада - разработка различных разностных схем (ENO/WENO/ADER и тд)
- Также автору приходится решать задачи из разных областей вычислительной физики
- Решаемые уравнения довольно разные, однако все они гиперболического типа
- Геометрия расчетной области в задачах - разная, от простой до сложной
- Возникла идея создания универсального пакета программ, который бы соединял в себе общие блоки очень разных решателей.
- Ядро пакета создано в 2009-2011 годах.

Приложения

1. Линейные уравнения: удобны для
   - разработки разностных схем - есть точное решение
   - отработки общих для всех решателей блоков
2. Модельные кинетические уравнения
   - Работы проводятся в ВЦ РАН и МФТИ
   - Модели Крука, Шахова и Рыкова
   - Течения в микроканалах и микросоплах, а также внешние задачи
3. Аэроакустика винтов
   - Работы проводятся в Вычислительном центре МК ЦАГИ
   - Сжимаемые уравнения Эйлера во вращающейся системе координат, сложная геометрия реального винта
   - Интеграция с акустическими программами МК ЦАГИ
4. Гиперзвуковая аэродинамика спускаемых аппаратов
   - Работы проводятся в Лаборатории математического моделирования нелинейных процессов в газовых средах, МФТИ
   - Сжимаемые уравнения Навье-Стокса для сложных геометрий
   - Учет химических реакций и других неравновесных явлений

Структура пакета Несветай 3Д

Препроцессор

- Подготовка сетки для проведения расчетов с помощью технологии MPI
- Специальный формат сеток

Постпроцессор

- "сборка" результатов счета на многоблочной сетке
- вывод данных
- вычисление сил/моментов, расхода массы

Вычислительное ядро

- чтение сеток в форматах Neutral & StarCD
- реконструкция функций на произвольных неструктурированных сетках
- ТВД ограничители наклонов
- неявные схемы типа LU-SGS
- алгоритмы ускорения счета с помощью технологий OpenMP и MPI

Кинетический решатель

- Уравнение Больцмана с модельными интегралами столкновений
- Модели Крука и Шахова для одноатомного газа
- Модель Рыкова для двухатомного газа

Аэродинамический решатель

- Сжимаемые уравнения Эйлера
- Сжимаемые уравнения Навье-Стокса
- Решатели задачи о распаде разрыва
- Методы дискретизации вязких потоков

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

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

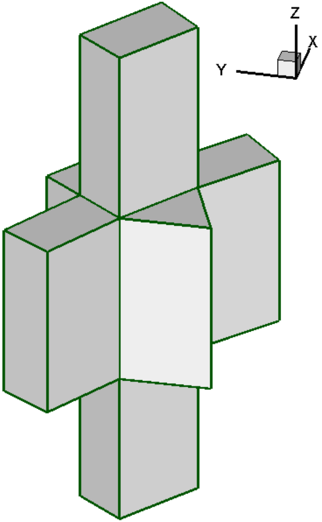
- Неизвестные коэффициенты a_{ik} находятся из условий для каждой ячейки $m = 1, \ldots, M_i$ из шаблона:

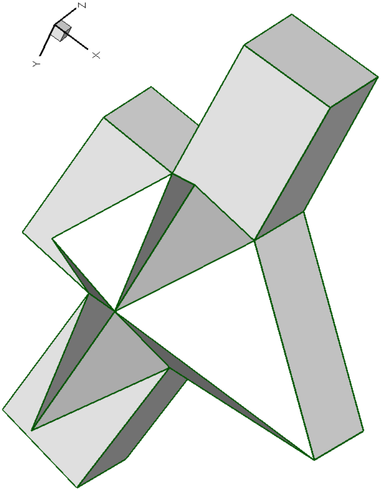
$$\frac{1}{|V'_{im}|} \int\limits_{V'_{im}} p_i(\hat{\mathbf{x}}) \, d\hat{\mathbf{x}} = g_{i0} + \frac{1}{|V'_{im}|} \sum_{k=1}^{K} \int\limits_{V'_{im}} a_{ik} e_{ik} \, d\hat{\mathbf{x}} = g^n_{im}.$$

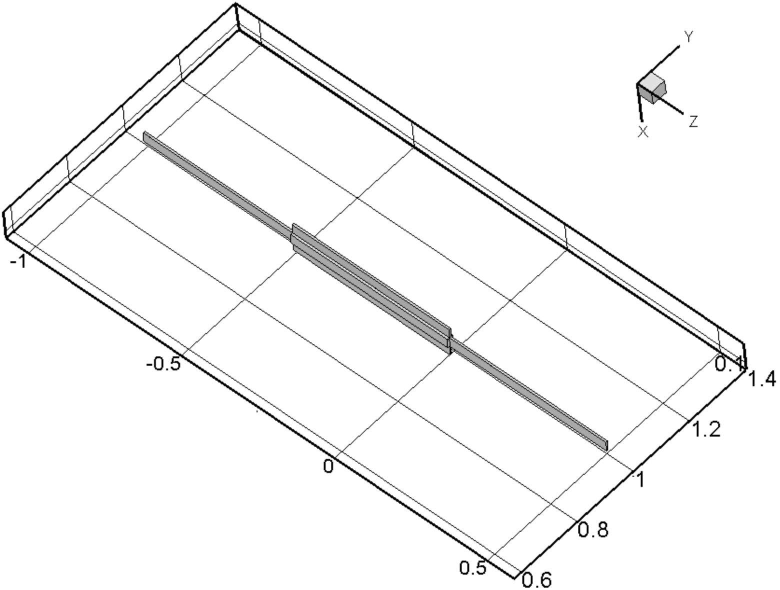
- Окончательно, коэффициенты выражаются через значения g в ячейках шаблона как

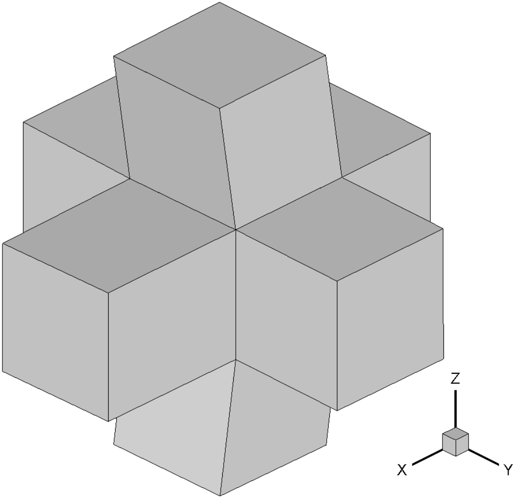
$$\begin{pmatrix} a^n_{i1} \\ a^n_{i2} \\ a^n_{i3} \end{pmatrix} = D_i \cdot \begin{pmatrix} g^n_{00} \\ g^n_{01} \\ g^n_{02} \\ \ldots \\ g^n_{0M_i} \end{pmatrix}, \quad D_i = \begin{pmatrix} d_{00} & d_{01} & \ldots & d_{0M_i} \\ \ldots & & & \\ d_{30} & d_{31} & \ldots & d_{3M_i} \end{pmatrix}.$$

Шаблон ТВД схемы 2-го порядка в физических координатах

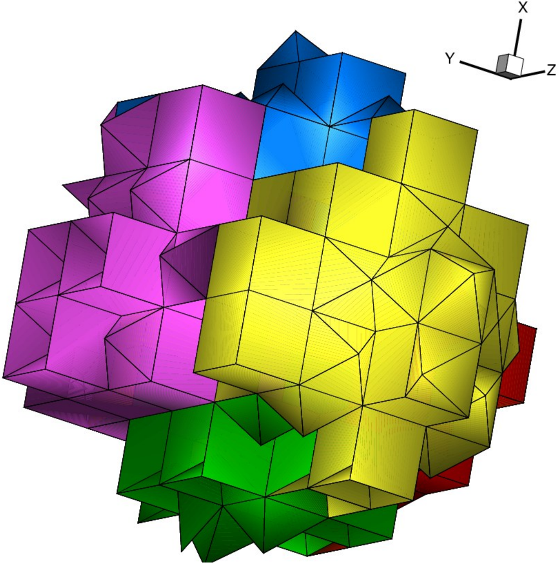




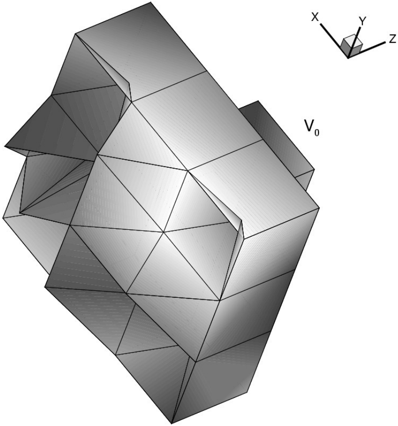

Y
Z
X
-1
-0.5
0
0.5
0.6
0.8
1
1.2
1.4
0.1

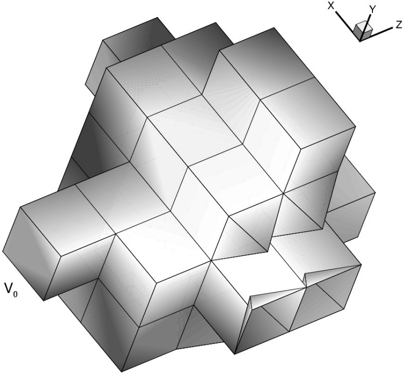

Z
X
Y

WENO схема Титарев & et al (2010)



Первый и второй секторные шаблоны WENO





и так далее...

Неявный метод решения стационарных задач: общий вид

Расчетные уравнения в векторной форме имеют вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{U} + \sum_{k=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_k}\mathbf{F}_k = \mathbf{B}$$

Конечно-объемная схема на произвольной неструктурированной сетке:

$$\frac{\Delta \mathbf{U}_i}{\Delta t} = \mathbf{R}_i^{n+1}, \quad \Delta \mathbf{U}_i = \mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^{n}, \quad \mathbf{R}_i^{n+1} = -\frac{1}{|V_i|}\sum_{l}\mathbf{\Phi}_{il}^{n+1} + \mathbf{B}^{n+1}.$$

Численный поток через грань l ячейки i дается формулой

$$\mathbf{\Phi}_{il} = \int_{A_{il}} (n_x\mathbf{F} + n_y\mathbf{G} + n_z\mathbf{H})dA$$

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: matrix-free метод

Опуская детали, получаем разреженную систему уравнений для приращения вектора консервативных переменных $\mathbf{U}$:

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

которая решается с помощью LU-SGS факторизации (Меньшов & Накамура, 1996 год). Здесь величина s_{il} содержит как оценку скорости волн из конвективного решения, так и вязкие добавки.

Двухшаговая процедура:

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

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

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

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

Параллельный метод

- Для персональных компьютеров реализовано ускорение кода с помощью OpenMP; выигрыш составляет 2.5-3 раза
- Для кластеров основной способ счета - разбиение пространственной сетки на блоки с помощью программы Metis и подготовка входных файлов с помощью препроцессора пакета
- Реализация метода LU-SGS на многоблочной сетке не эквивалентна одноблочному решателю
- Численные эксперименты показывают, что при этом скорость сходимости к стационарному режиму слабо зависит от числа блоков
- Кинетический решатель поддерживает второй вариант ускорения с помощью МПИ без разбиение пространственной сетки на блоки
- Тесты масштабируемости проводились на системах МГУ с использованием до 1024 ядер.

Кинетический решатель

В настоящее время наибоолее популярным методом решения задач механики разреженных газов является DSMC

- Неудобен для нестационарных течений и медленных течений, а так же при малых числах Кнудсена
- Вычислительная эффективность метода не оптимальна из-за использования явных схем продвижения по времени

Кинетическое уравнение Больцмана

- Позволяет относительно легко решать нестационарные задачи
- Допускает разработку методов высоких порядков аппроксимации, включая неявные методы

Существующие решатели:

- Явный многоблочный структурированный код Z.-H. Li & H.-X. Zhang.*J. Comp. Phys.*,v.193, 2004
- **Unified Flow Solver** (UFS) на неструктурированных декартовых сетках V.I. Kolobov *et. al. J. Comp. Phys.*, 223:589–608, 2007
- Метод 1го порядка на тетраэдрах Ю.Ю. Клосс *et. al. Атомная энергия*, 105(4), 2008

S-model Е.М. Шахова (1968)

- В безразмерных переменных записывается в виде:

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

$$\delta = \frac{l_* p_*}{\mu(T_*)\sqrt{2RT_*}} \sim \frac{0.9}{\mathrm{Kn}}, \quad f^{(S)} = f_M \left(1 + \frac{4}{5}(1 - \mathrm{Pr})\mathbf{Sc}(c^2 - \frac{5}{2})\right),$$

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

- Макроскопические величины определяются как интегралы от функции распределения

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

- Граничные условия на поверхности с заданной температурой T_w:

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

- Линеаризованное уравнение так же включено в код.

Консервативный метод дискретных скоростей

- Стационарное решение находится счетом на установление:

$$\frac{\partial}{\partial t} g = -\boldsymbol{\xi} \nabla g + J(g), \quad J = \nu(g^{(S)} - g),$$

  где g - функция распределения f в нелинейном случае и возмущение h в линеаризованном.
- Бесконечная область интегрирования по ξ заменяется конечной
- Кинетическое уравнение заменяется системой из N_ξ неоднородных уравнений переноса для каждой $g_\alpha = g(t, \mathbf{x}, \xi_\alpha)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} g_\alpha = -\boldsymbol{\xi}_\alpha \nabla g_\alpha + J(g_\alpha),$$

  которые связаны через макроскопические переменные в модельном интеграле столкновений J.

Расчет макроскопических величин (Титарев 2003,2007)

Вектор переменных $\mathbf{W} = (n, u_1, u_2, u_3, T, q_1, q_2, q_3)^T$ находится из системы уравнений

$$\sum_\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{\xi} \\ \xi^2 \\ \mathbf{v}v^2 \end{pmatrix}_\alpha (f_\alpha^{(S)} - f_\alpha)\omega_\alpha + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ 2\,\mathrm{Pr}\,\mathbf{q} \end{pmatrix} = \mathbf{0}.$$

Индексы i и n опущены для простоты.
Система из 8 уравнений решается методом Ньютона с начальным приближением вида

$$\begin{pmatrix} n \\ n\mathbf{u} \\ \frac{3}{2}nT + n\mathbf{u}^2 \\ \mathbf{q} \end{pmatrix} = \sum_\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{\xi} \\ \xi^2 \\ \frac{1}{2}\mathbf{v}v^2 \end{pmatrix}_\alpha f_\alpha\omega_\alpha$$

Замечание 1: метод применим к любой кинетической модели

Замечание 2: для $\mathrm{Pr} = 1$ решение сводится к методу работы Mieussens, 2000, полученному из других соображений

Параллельная версия метода

Одноблочный метод

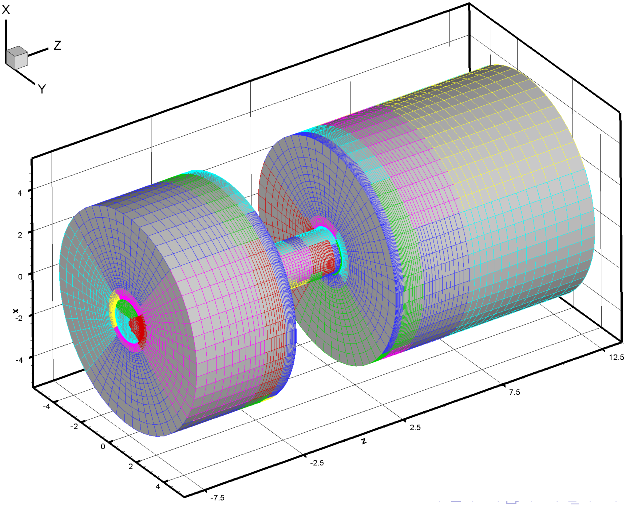
Pros:	Cons:
• transient identical to single-block implicit method • relatively simple to code • convenient for special versions	• relatively high memory requirements per core • does not scale well above 128 cores for $N_{space} > 10^5$

Многоблочный метод

Pros:	Cons:
• excellent scaling • can handle spatial meshes of arbitrary size	• requires complicated coding (to be done once) • steady-state convergence slower than for single-block version

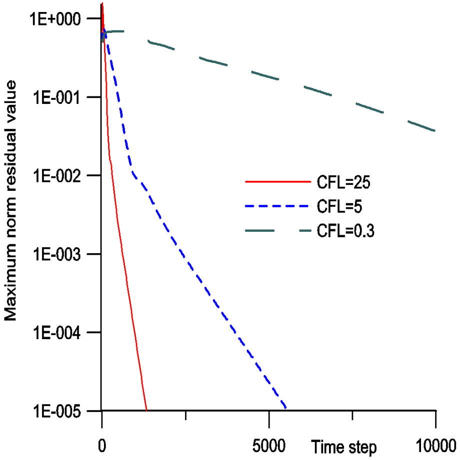
Тестирование метода: течение в круглой трубе

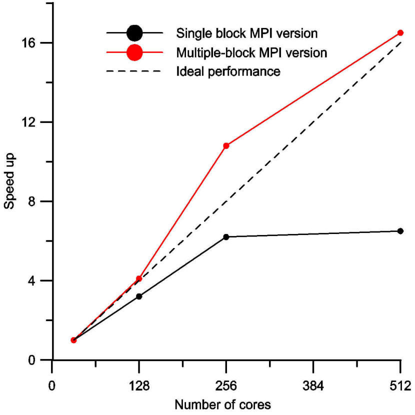
Труба длины L и радиуса R. В резервуарах $p_1 > p_2$, $T_1 = T_2 = T_0$.
Геометрия: L/R=5 & сетка из $267{\times}10^3$ гексаэдров.
Тестовые расчеты выполнялись для $p_1/p_2 = 2$.



Эффективность LU-SGS и масштабируемость

Решение строится для $\delta_1 = 1$ с помощью квази-одномерной разностной схемы на Ломоносове.

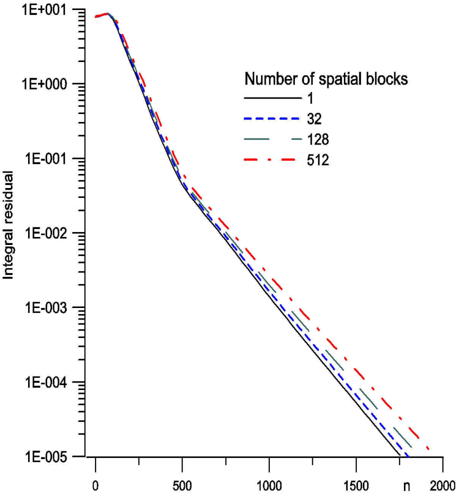




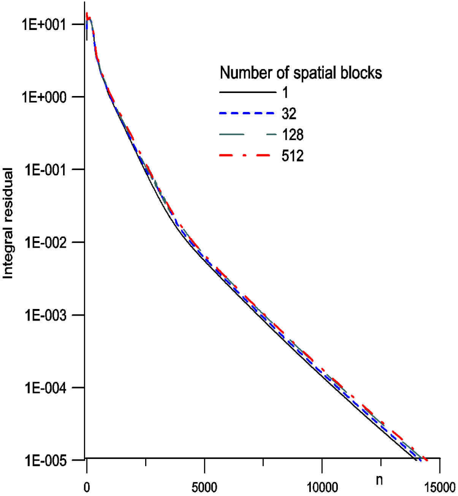
Влияние числа блоков на скорость сходимости

Все результаты для квази-одномерной схемы с ограничителями наклона.

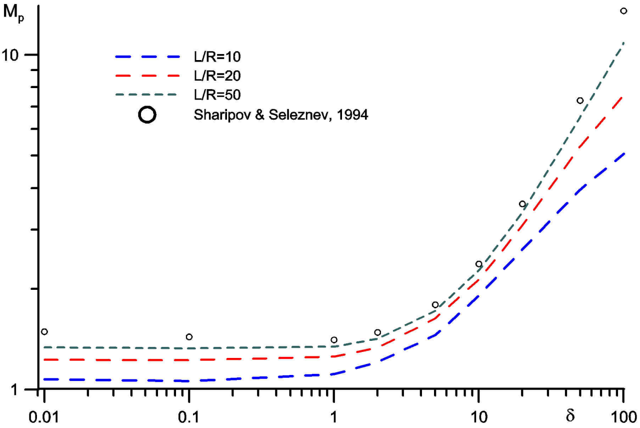
$\delta = 1$



$\delta = 20$

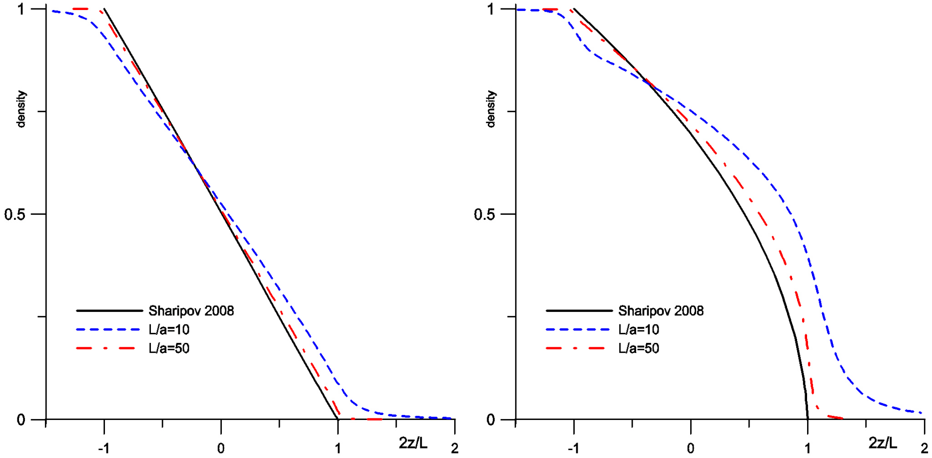


Определим $M_p = -(L/\Delta p)\dot{M}$.
Штриховые линии - расчет для $L/R = 10$, 20, 50 (Titarev & Shakhov, 2012).
Символы - приближенное решение из Sharipov & Seleznev, 1994, Sharipov 2008.



Истечение в вакуум (2)

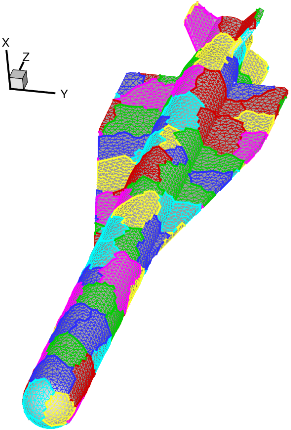
Распределение плотности вдоль оси трубы для $\delta_1 = 1$ (слева) and $\delta_1 = 100$ (справа).

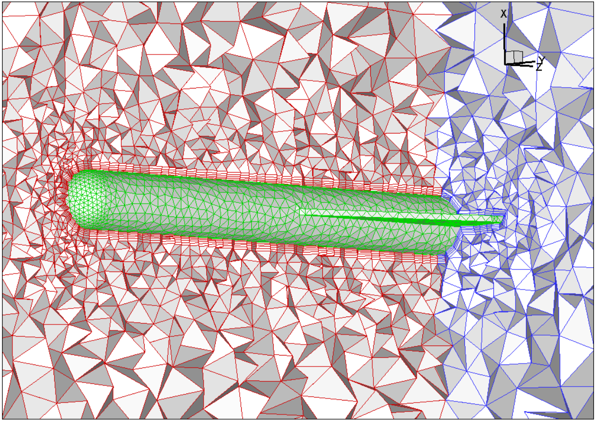


Очевидное условие $L/R \gg 1$ недостаточно для применения приближенной формулы. Требуется также чтобы $\mathrm{Kn} \cdot \mathrm{L} \gg 1$.

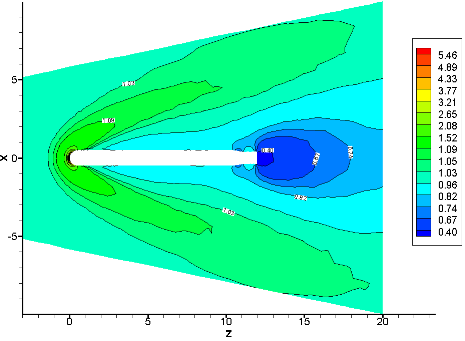
Внешняя задача: $M_\infty = 3$ and $\delta_\infty = 1$.

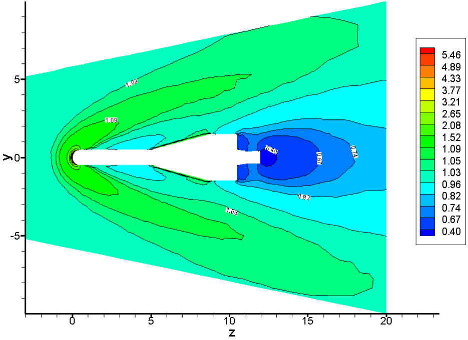
Расчеты проводились в рамках работы по гранту Правительства РФ по постановлению N 220 'О мерах по привлечению ведущих ученых в российские образовательные учреждения высшего профессионального образования' по договору N 11.G34.31.0072.





Линии уровня плотности в x-z и y-z плоскостях





Расчет акустики винтов в МК ЦАГИ

Цель: создать среду моделирования, включающую в себя все этапы решения рассматриваемой задачи:

1. получение геометрии винта в формате CAD (форматы stl, iges, step)
2. построение расчетной сетки в физическом пространстве
3. расчет обтекания с использованием суперкомпьютеров
4. запись нестационарной истории распределения макропараметров на лопастях
5. обработка результатов в акустическом пост-процессоре
6. выдача рекомендаций разработчикам.

Полученный код будет 'in-house' кодом НИО-9.

Все результаты получены совместно с В.Ф. Копьевым и И.В. Беляевым

Расчетные уравнения

Уравнения Эйлера сжимаемого газа во вращающейся системе координат:

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

где векторы консервативных переменных, конвективных потоков и источник имеют вид

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = (u - V_x)\mathbf{U} + p\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = -\rho\begin{pmatrix} 0 \\ -v \cdot \omega \\ +u \cdot \omega \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \text{и т.д.}$$

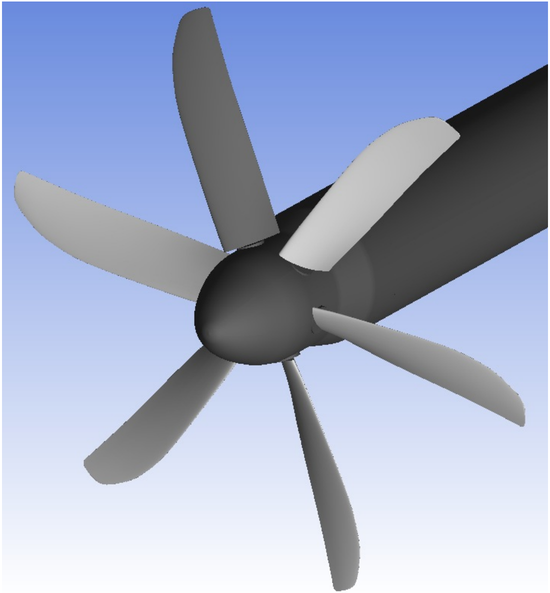
Здесь (V_x, V_y, V_z) отвечает за вращение системы координат с угловой скоростью ω:

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

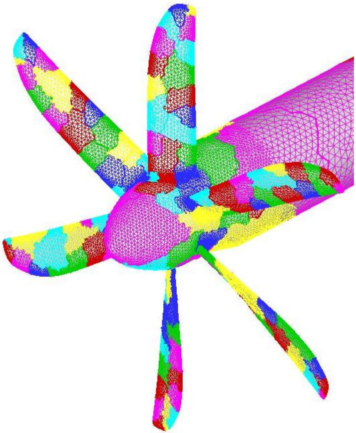
Примеры расчетов: обтекание шестилопастного винта

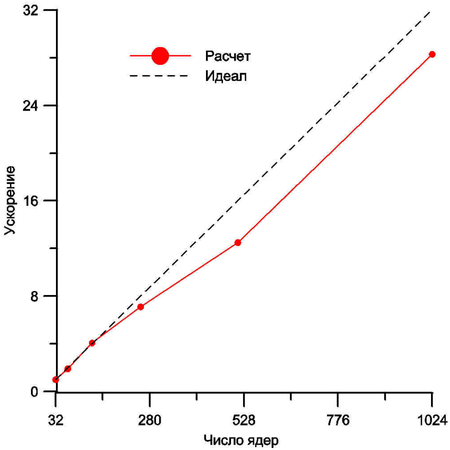
- Геометрия предоставлена А. Лысенковым (ЦАГИ). Помощь в обработке оказал А. Савельев (ЦАГИ)
- В расчетах использовались как полная геометрия, так и упрощенная (без поворотного механизма)
- Условия: равномерный набегающий поток с заданной температурой
- Меняющиеся параметры: (1) скорость потока V, м/с (2) скорость вращения N, об/мин
- Из эксперимента ЦАГИ известны тяга, крутящий момент и шум
- Наша задача: сравниться с экспериментом по всем параметрам

Геометрия винта

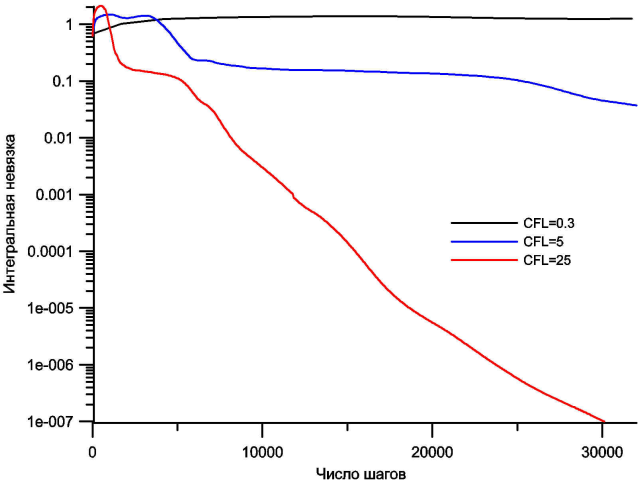


Тестовый расчет: 5 миллионов тетраэдров



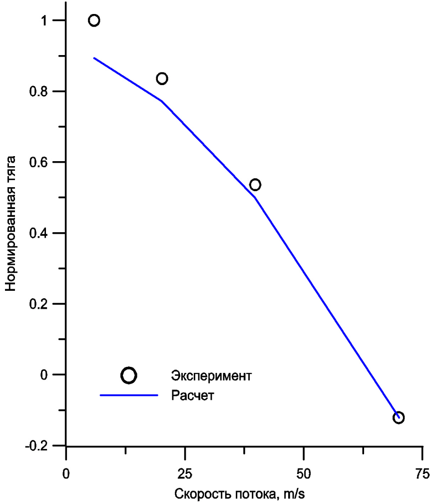


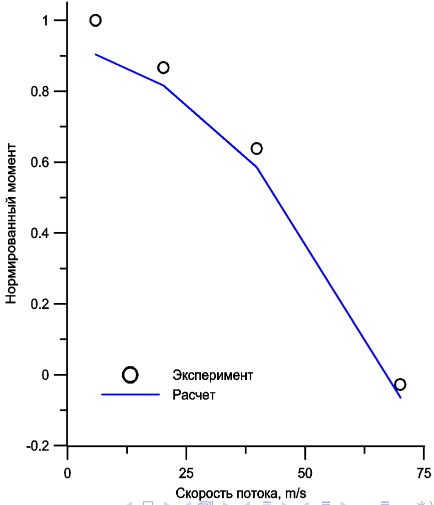
Сходимость в интегральной норме для V=39.8 м/с, 128 ядер



Основные расчеты: 5-10 миллионов ячеек

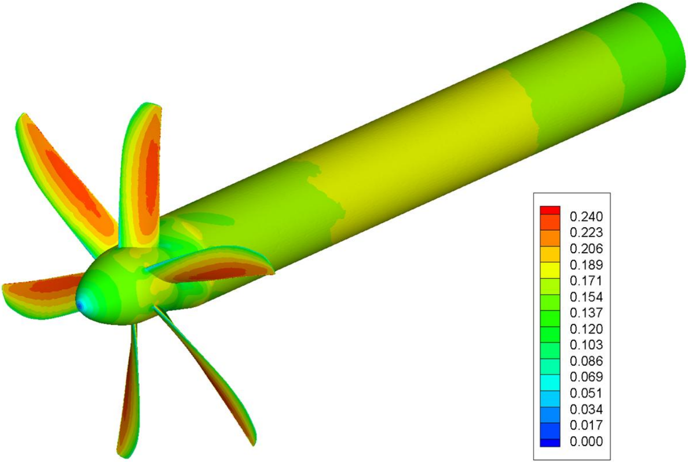
Сравнение с экспериментом: нормированные тяги и крутящий момент для скорости вращения N = 5000 об/мин





Распределение числа Маха по поверхности

Скорость набегающего потока V=39.8 м/с



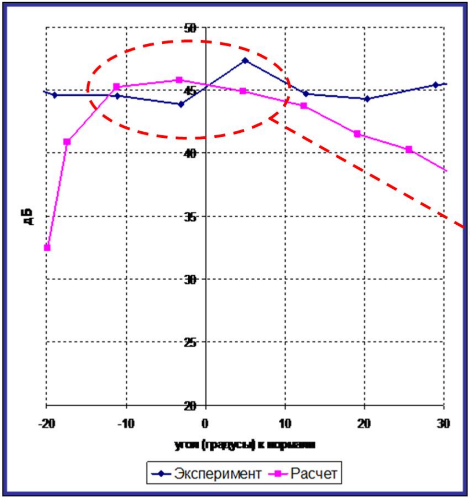
Расчет шума винта по теории Хансена

- В сечениях лопасти вдоль радиуса брались геометрические параметры
    - хорда, максимальная толщина лопасти в данном сечении и функция распределения толщины лопасти вдоль хорды

  и рассчитанные нагрузки
    - функция распределения нагрузок вдоль хорды, суммарное значение нагрузок в данном сечении
- Полученные данные позволяют определить
    - шум вытеснения (связанный с геометрией лопасти)

  и
    - шум нагрузки (связанный с силами, действующими на лопасть)

Направленность суммарного шума винта для V=39.8 м/с:



Область удовлетворительного согласия с экспериментом

Обсуждение результатов

- Наблюдается хорошее согласия с экспериментом при небольшых углах отклонения от плоскости вращения винта
- Для больших углов различие достигает 20 децибелл, при этом экспериментальные данные явно нефизичные
- Объяснение: в расчетах не учитывается реальная геометрия трубы, которая приводит к многочисленным отражениям акустических волн
- Подтверждение - расчеты Онера для другого винта в той же трубе Т-104

Задачи гиперзвукового обтекания тел

- Работа ведется в лаборатории С.В. Утюжникова в МФТИ в рамках работы по гранту Правительства РФ по постановлению N 220 'О мерах по привлечению ведущих ученых в российские образовательные учреждения высшего профессионального образования' по договору N 11.G34.31.0072.
- Страничка лаборатории: http://www.flowmodellium.ru
- Основная задача лаборатории: создание вычислительного комплекса по математическому моделированию задач высотной гиперзвуковой аэродинамики перспективных космических ЛА во всем диапазоне чисел Рейнольдса (Кнудсена).
- Особенностью разрабатываемого комплекса программ является сочетание современных вычислительных алгоритмов с возможностью учета реальных физических эффектов в широком диапазоне режимов движения гиперзвуковых летательных аппаратов.
- Комплекс программ будет создан на основе существующих заделов основных исполнителей

Текущая версия решателя

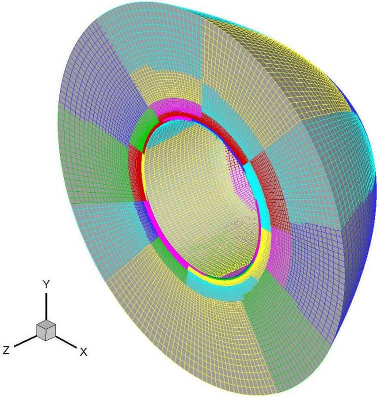
Решатель находится в стадии интеграции с блоком учета физико-химических процессов. Для идеального газа имеются:

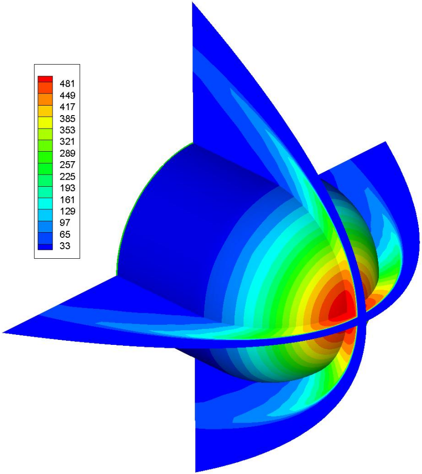
- Способ реконструкции для конвективных потоков
  - полностью неструктурированный подход
  - локально-одномерная схема для гексаэдров
- Распад разрыва:
  - метод Русанова, потоки HLL, HLLC и гибридный
- Аппроксимация вязких членов
  - Схема типа центральных разностей на грани + штрафная функция на границе (Dumbser 2010)
  - Прямой способ расчета (Mitchell 1994)
- Продвижение по времени - одношаговая схема с решателем LU-SGS (Накамура и Меньшов, 1996)

Код полностью паралельный для любой комбинации 'строительных' блоков.

Обтекание цилиндра, затупленного по сфере, $M_\infty = 20$

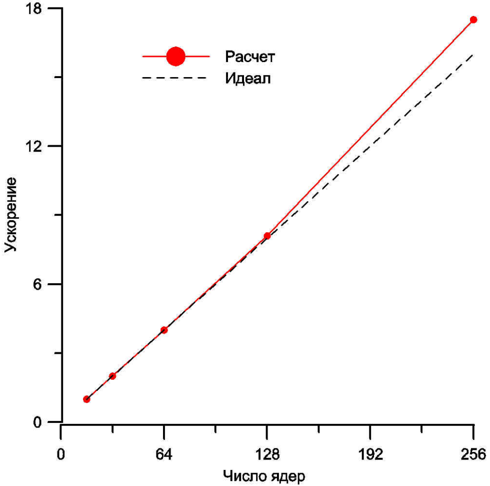
Сетка из 900 тыс ячеек. Первая ячейка по нормали к поверхности имеет размер 10^{-4}, 100 ячеек по нормали, 128 процессоров.





Масштабируемость кода: вязкий решатель

Сетка из 900 тысяч гексаэдров, структурированный решатель второго порядка точности. Расчет на Чебышеве.



Некоторые 3Д публикации

1. V.A. Titarev (2007). Conservative numerical methods for model kinetic equations. Computers and Fluids. V. 36, N. 9. p. 1446 – 1459.
2. M. Dumbser, M. Kaser, 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.
3. 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
4. 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, N. 4, P. 1585 - 1601
5. V.A. Titarev (2012). Efficient deterministic modelling of three-dimensional rarefied gas flows, Communications in Computational Physics, V. 12, N. 1, pp. 162-192
6. V.A. Titarev and E.M. Shakhov (2012). Computational study of a rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum. Vacuum, Special Issue "Vacuum Gas Dynamics". V. 86, N. 11, p. 1709-1716.
7. V.A. Titarev (2012). Efficient numerical solution of the model kinetic equations. In: Numerical methods for Hyperbolic Equations. Editors: E. Vazquez-Cendon, A. Hidalgo, P. Garcia-Navarro and L. Cea. Taylor & Francis Group.