

Параллельные технологии решения задач аэродинамики в комплексе программ «FlowModellium»

А.В. Чикиткин¹, В.А. Титарев^{1,2}, М.Н. Петров¹, С.В. Утюжников^{1,3}
МФТИ¹, ВЦ ФИЦ ИУ РАН², University of Manchester³

В работе описываются технологии численного моделирования высокоскоростных течений сжимаемого газа с учетом неравновесных химических реакций, которые реализованы в программном комплексе «FlowModellium» лаборатории математического моделирования нелинейных процессов в газовых средах МФТИ. Отличительными особенностями аэродинамического решателя FlowModellium являются возможность использования блочно-структурированных и гибридных неструктурированных сеток, применение экономичной неявной схемы высокого порядка аппроксимации на таких сетках и двухуровневое MPI+OpenMP распараллеливание, которое позволяет в полной мере использовать современные суперкомпьютеры. Показано, что масштабируемость алгоритма зависит от используемой модели течения, которая, в свою очередь, изменяет соотношение между вычислениями и межпроцессорными обменами данными. Приводятся примеры расчетов внешнего обтекания тел сложной пространственной формы с использованием до 15616 гиперпоток на системе МВС-10П, установленной в Межведомственном Суперкомпьютерном Центре, и до 61440 потоков на системе Petastream, установленной в СПбГУ. Получена хорошая масштабируемость при использовании до 256 ускорителей Intel Xeon Phi.

Ключевые слова: Xeon Phi, LU-SGS, неструктурированные сетки, неравновесные реакции, вычислительная аэродинамика, конечно-объемные методы

1. Введение

Моделирование внешнего обтекания тел сложной формы с учетом химических реакций требует больших вычислительных ресурсов. Большая часть имеющихся научно-исследовательских кодов, созданных для численного решения указанных задач, адаптированы для кластеров с 4-6-ядерными процессорами. Современные системы используют узлы с существенно многоядерными процессорами, а также many-core сопроцессоры Intel Xeon Phi. Поэтому, адаптация программных комплексов для таких систем представляет актуальную прикладную задачу. Стоит отметить, что при разработке научно-исследовательских программ всегда стоит необходимость выполнять подобные модификации с минимальными изменениями в существующих методах и программах. В настоящем докладе представлен обзор методов реализации параллельных вычислений, используемых в кодах лаборатории Математического моделирования нелинейных процессов в газовых средах МФТИ.

2. Основные уравнения и используемый метод

Предполагаем, что среда подчиняется уравнению состояния идеального газа. В безразмерных переменных расчетные уравнения записываются в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \nabla(\mathbf{F} - \frac{1}{\text{Re}_*} \mathbf{G}) = \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad \text{Re}_* = \frac{\rho_* v_* L_*}{\mu_*}.$$

Здесь \mathbf{U} - вектор консервативных переменных, \mathbf{F} , \mathbf{G} - тензоры конвективных и вязких потоков по координатным направлениям, \mathbf{S} - источниковый член. Конкретный вид данных векторов зависит от используемой физической модели. Например, для однотемпературной модели с неравновесной химией возможные химические компоненты O , N , O_2 , N_2 , NO , O^+ ,

N^+ , NO^+ , O_2^+ , N_2^+ , e . При этом длина вектора \mathbf{U} равна 9 для 5-компонентной модели и 15 для 11-компонентной. Параметр Re_* формально получается при переходе к безразмерным переменным и не совпадает с реальным числом Рейнольдса задачи.

Стационарное решение системы строится методом установления по времени с помощью неявной конечно-объемной схемы высокого порядка аппроксимации. На произвольной неструктурированной сетке схема имеет вид:

$$\frac{\Delta \mathbf{U}_i}{\Delta t} = \mathbf{R}_i^{n+1}, \quad \Delta \mathbf{U}_i = \mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, N_{cell}$$

$$\mathbf{R}_i^{n+1} = -\frac{1}{|V_i|} \sum_l \Phi_{li}^{n+1} + \mathbf{S}(\mathbf{U}_i^{n+1}), \quad \Phi_{li} = \int_{a_{li}} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{F} - \frac{1}{Re_*} \mathbf{G}) da.$$

Высокий порядок точности по пространству достигается использованием пространственной интерполяции вектора простых переменных с использованием ограничителей наклонов. Для нахождения конвективной части численного потока используются различные методы задачи о распаде разрыва: HLLC, Osher, Roe, точный распад. Для вязких потоков используется нахождение производных величин в центрах граней через значения в прилегающих ячейках и в вершинах грани.

Проведем линеаризацию разностной схемы относительно значений на нижнем временном слое:

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

Опуская промежуточные выкладки, получаем, что приращение решения в ячейке i связано с приращением решения в соседних ячейках по следующей формуле:

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i + \frac{1}{2|V_i|} \sum_l \Psi(\mathbf{U}_{\sigma_l(i)}, \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)}) = \mathbf{R}_i^n$$

Полученная разреженная система уравнений решается с помощью приближенной LU-SGS факторизации (Меньшов & Накамура, 1996 год):

Обратный ход: для $i = N_{cell}, N_{cell} - 1, \dots, 1$

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i^* = -\frac{1}{2|V_i|} \sum_{l: \sigma_l(i) < i} \Psi(\mathbf{U}_{\sigma_l(i)}, \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)}^*) + \mathbf{R}_i^n$$

Прямой ход для $i = 1, 2, \dots, N_{cell}$.

$$D_i \Delta \mathbf{U}_i = \Delta \mathbf{U}_i^* - \frac{1}{2|V_i|} \sum_{l: \sigma_l(i) > i} \Psi(\mathbf{U}_{\sigma_l(i)}, \Delta \mathbf{U}_{\sigma_l(i)})$$

3. Реализация параллельных вычислений

В расчетах используются сетки с большим числом ячеек, что требует использование многопроцессорных ЭВМ. Применяется двухуровневая модель параллельных вычислений с целью максимально эффективного использования современных процессоров. Верхний уровень использует MPI и геометрическую декомпозицию расчетной сетки:

- С помощью внешней программы (например Metis или модуль И. Капорина, ВЦ РАН) сетка разбивается на непересекающиеся блоки, число которых равно числу MPI-процессов
- для обмена данными в фиктивных ячейках используются обычные средства обмена MPI

Нижний уровень – использование технологии OpenMP реализации параллельных вычислений на системах с общей памятью. При необходимости на узле может быть использована произвольная комбинация MPI процессов и OpenMP нитей.

Параллельные вычисления внутри узла выполняются с использованием технологии OpenMP. В целом, алгоритм продвижения на шаг по времени для расчета на системе с общей памятью состоит следующих шагов:

1. Вычисление значений переменных в вершинах сетки ($i_{vertex} = 1, \dots, N_{vertex}$)
2. Вычисление значений переменных на гранях сетки ($i_{cell} = 1, \dots, N_{cell}$)
3. Нахождение конвективных и вязких потоков ($i_{face} = 1, \dots, N_{face}$)
4. Вычисление источникового члена ($i_{cell} = 1, \dots, N_{cell}$)
5. Вычисление ΔU_i (цикл по ячейкам) и обновление вектора U_i

Для первых четырех шагов алгоритма достаточно использовать стандартную конструкцию с динамическим планировщиком и правильно подобранным размером блока:

```

chunk_size = flow_ptr%mesh%element_chunk
!$OMP parallel do schedule(dynamic, chunk_size) private(icell, St_ptr)
do icell=1, mesh_ptr%NelementReconstruction
  St_ptr => mesh_ptr%cellstencils(icell)
  Call AtomicReconstruction(flow_ptr, St_ptr)
enddo
!$OMP end parallel do
    
```

Рис. 1. Пример простого параллельного цикла

Основная трудность - реализация параллельной версии LU-SGS-метода. Последовательный алгоритм метода LU-SGS нельзя напрямую сделать параллельным, т.к. прямой и обратный ходы метода являются циклами с явной зависимостью по данным.

В многопоточная версии LU-SGS-метода пространственная сетка разбивается на блоки, на каждом шаге по времени каждый поток выполняет все действия только для ячеек своего блока. Простейший способ сделать алгоритм параллельным: не учитывать соседние ячейки из других блоков. Однако, если число ячеек сетки не очень велико, а блоков много, может оказаться, что большая часть соседей ячейки принадлежат другому блоку. В этом случае, если не учитывать вклад от соседей, итерации могут разойтись. Проблема становится особенно заметной при использовании Intel Xeon Phi (244 гиперпотока/блока) и при расчете высокоскоростных течений при наличии следа. На рисунке 2 изображено разбиение типичной сетки.

В литературе предложено улучшение: можно взять приближения метода Якоби для всех ячеек из других блоков, которые нужны данному блоку:

$$U_{\sigma_l(i)} = R_{\sigma_l(i)}^n / D_i,$$

Однако с ростом числа нитей получаемый алгоритм может вести себя как обычный блочный LU-SGS.

Для обобщения на случай большого количества узлов используется MPI. При нахождении правой части используются обычные обмены значениями переменных в гало-ячейках. Для параллельной реализации LU-SGS-алгоритма существуют две возможности:

- Не учитывать соседей из других блоков
- Записать в гало-ячейки приближение по методу Якоби

$$\Delta U_i = R_i^n / D_i$$

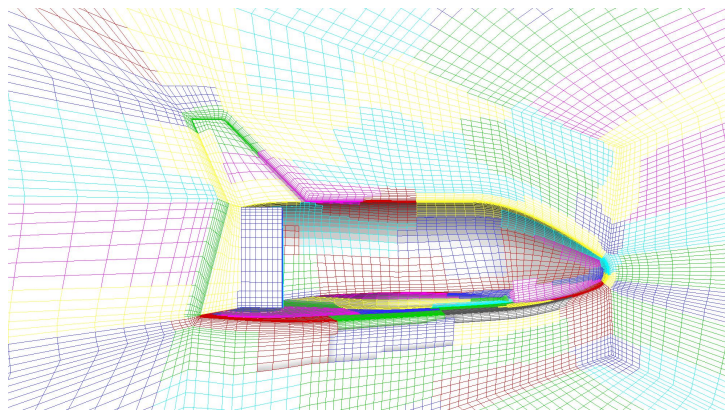


Рис. 2. Геометрия ВКА ЦАГИ, неструктурированная сетка из 305 тысяч гексаэдров

Как уже говорилось выше, первый способ снижает надёжность метода, поэтому используется второй способ, который незначительно увеличивает число операций. Полученный неявный численный метод с двухуровневой моделью параллельных вычислений позволяет вести расчет течений с большими числами Маха.

4. Тестовые расчеты

4.1. Многопоточная однопроцессорная версия

Тестовая задача - обтекание тела RAM-C гиперзвуковым потоком газа. Сетка 600 тысяч гексаэдров. Вычисления проводились в лаборатории на сервере с 2 процессорами Intel Xeon E5-2697v (12 ядер, частота 2.7 гигагерца) и на сервере с сопроцессором Intel Xeon Phi 5110p (61 вычислительный модуль, 244 гиперпотока, частота 1.053 Ghz). На рисунке 3 показано поле течения для обтекания с числом Маха набегающего потока $M_\infty = 27$.

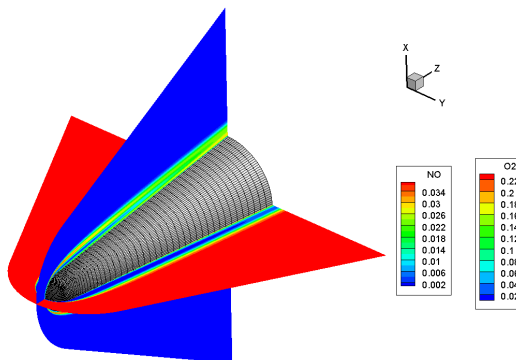


Рис. 3. Поле течения вокруг геометрии RAM-C

Рисунок 4 показывает масштабируемость алгоритма. Слева расчет на Intel Xeon E5-2697v, справа - на Intel Xeon Phi 5110p. 61 модуль соответствует 244 гиперпотоку на Intel Xeon Phi 5110p. По результатам расчётов Intel Xeon Phi 5110p \approx на 10% быстрее одного 12-ядерного Xeon E5-2697v. По результатам расчетов на МВС-10П, Intel Xeon Phi 7110X \approx два 8-ядерных Xeon E5-2690.

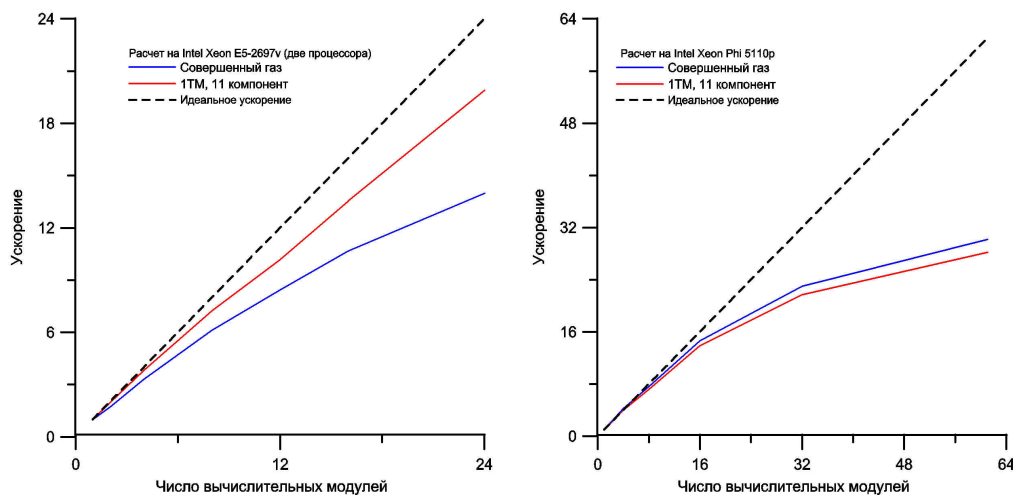


Рис. 4. Масштабируемость внутри одного узла. Под модулем понимается ядро, на Xeon Phi на 1 ядро - 4 потока

4.2. Многопроцессорная версия

Рассчитывалось обтекания трехмерной геометрии модели спускаемого аппарата. Использовались две модели: совершенный газ и однотемпературная модель с неравновесными реакциями (5 компонент для воздуха). Режимы обтекания $M_\infty = 10 \dots 40$, угол атаки $\alpha = 25 \dots 35$.

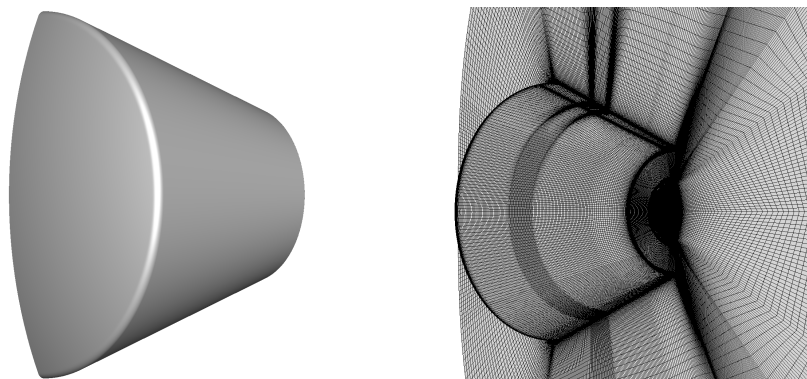


Рис. 5. Модель спускаемого аппарата и расчётная сетка

Расчетная сетка содержала 5.5 миллионов гексаэдров, 147 блоков.

Для проверки масштабируемости тестовые расчеты были выполнены на системах Petastream МСЦ РАН и СПбПУ. Система Petastream МСЦ РАН содержит 64 узла, узел состоит из сопроцессора Intel Xeon Phi 7110X (244 гиперпотока, частота 1.2 Ghz, 16 gb RAM), используются компилятор Intel Fortran 2015 & Intel MPI. На рисунке 6 показано ускорение. При переходе от 8 узлов к 64 ускорение составляет 7.3 раза (91%) для модели 1tm. Стоит заметить, что для теста умышленно была выбрана относительно небольшая сетка, чтобы проверить, как будет масштабироваться алгоритм с малым объемом вычислений на большом числе потоков.

Система Petastream СПбГПУ содержит 256 узлов, узел состоит из сопроцессора Intel Xeon Phi 5120D (240 гиперпотоков, частота 1.053 Ghz, 8 gb RAM, используются компилятор Intel Fortran 2016 & Intel MPI. На рисунке 7 показано ускорение для разных моделей газа. Для совершенного газа ускорение 5.22 раза при переходе от 16 узлов к 128 (65%). Для модели 1tm ускорение 11.6 раза при переходе от 16 узлов к 256 74%. Видно, что рас-

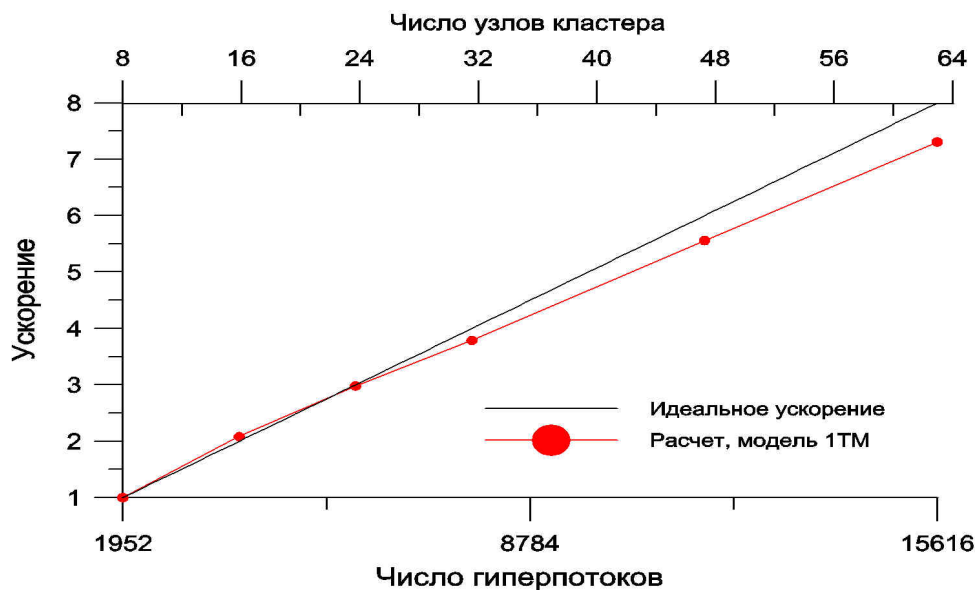


Рис. 6. Масштабируемость на Petastream MBC

чёт по модели идеального газа не ускоряется на числе узлов больше 128. Это объясняется тем, что в модели с химическими реакциями большую часть расчета занимает вычисление источникового члена, связанного с реакциями. Эти вычисления выполняются независимо всеми потоками и не требуют обменов данными. За счет этого доля обменов уменьшается и получается удовлетворительное ускорение. Напротив, в модели идеального газа, с ростом числа блоков сетки сильно возрастает число граничных ячеек, а, следовательно, и обменов, что приводит к ухудшению масштабируемости на большом числе узлов и потоков.

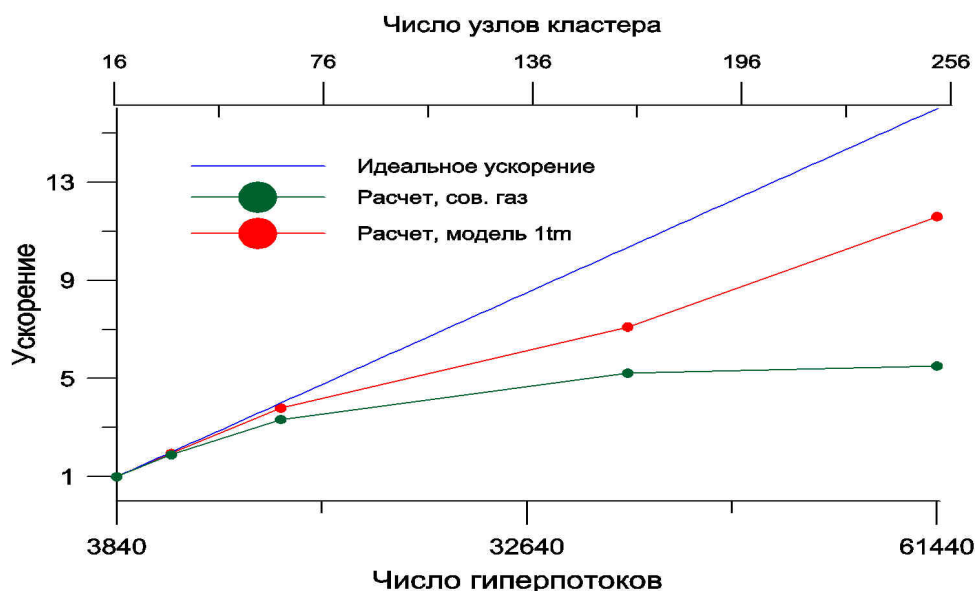


Рис. 7. Масштабируемость на системе Petastream СПбГПУ

5. Заключение

Были описаны особенности параллельной реализации численных методов в программном комплексе FlowModellium лаборатории математического моделирования нелинейных

процессов в газовых средах МФТИ. Представленные тестовые расчеты показывают хорошую масштабируемость программы на большом числе узлов. Показано, что при использовании модели идеального газа на большом числе узлов системы Petastream масштабируемость может ухудшаться из-за увеличения доли обменов данными.

В дальнейшем планируется оптимизация MPI-пересылок для расчетов на сопроцессорах Intel Xeon Phi, использование неблокирующих пересылок, а также расширенное тестирование на тетраэдральных и призматических сетках. Работа поддержана Грантом Правительства РФ по постановлению N 220 по договору N 11.G34.31.0072, заключенного между Министерством образования и науки РФ, ведущим ученым и МФТИ, проектом РФФИ 15-07-02986, Консультациями Российского отделения Интел и ЗАО «РСК Технологии».

Parallel technologies for solution of aerodynamic problems in software package «FlowModellium»

A.V. Chikitkin¹, V.A. Titarev^{1,2}, M.N. Petrov¹, S.V. Utyuzhnikov^{1,3}
MIPT¹, FRC IC RAS², University of Manchester³

In this paper we describe computational methods for high speed gas flows with nonequilibrium chemical reactions, which implemented in software package «FlowModellium» of Laboratory for mathematical modeling of nonlinear processes in gas media. Key features of described solver include the use hybrid unstructured meshes, efficient implicit scheme with high order of accuracy and two-level MPI+OpenMP parallel implementation, which allows to use modern supercomputers. We describe different parallel versions of implicit numerical scheme based on the LU-SGS method. Robustness and efficiency of the algorithm are demonstrated on a number of test problems. It is shown that scalability of the algorithm depends on the physical model used. This is because the choice of the model changes ratio between computations and data exchange between processors. We present examples of computed flows around complex three-dimensional bodies using up to 15616 hyperthreads on MVS-10P system of JSC and up to 61440 hyper threads on RSK PetaStream system of SPbPU. Good scalability up to 256 Intel Xeon Phi coprocessors is shown.

Ключевые слова: Intel Xeon Phi, LU-SGS, unstructured meshes, non-equilibrium chemistry, computational fluid dynamics, finite volume methods