СУПЕРКОМПЬЮТЕРНАЯ МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ: ОТ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ЗАДАЧ К ПРОМЫШЛЕННОЙ ПРАКТИКЕ

DNS – LES – DES – RANS

А.В.Горобец



http://noisette.imamod.ru/



ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

Наука и приложения



Моделирование турбулентных течений

- Прямое численное моделирование DNS стоимость
- Моделирование крупных вихрей LES стоимость
- RANS осредненные уравнения H-C стоимость
- RANS-LES гибридные подходы (DES) стоимость





Энергетический спектр изотропной турбулентности



Прямое численное моделирование

Несжимаемые течения – модели турбулентности

Бесконечная скорость распространения возмущений – плохо для распараллеливания Были доступны DNS для DIHT (3 периодики) и CF (2 периодики) Эффективный решатель для 1 периодики – радикальное расширение круга задач







Специализированный параллельный решатель уравнения Пуассона

Технология суперкомпьютерного моделирования несжимаемых течений с оригинальным решателем

- Назначение: прямое численное моделирование 3D задач с периодическим направлением (MPI [1], MPI+OpenMP [2])
- Эффективно задействован самый мощный суперкомпьютер Европы
- Расчеты на гибридных CPU+GPU системах [3]
- Оценка масштабируемости до миллиона СРU ядер ([4] стр. 128)
- Неструктурированные сетки, тела вращения, 3D без периодики

Идея решателя: с помощью преобразования Фурье 3D задача разделяется на 2D задачи, одна или несколько наиболее жестких из них (низкие частоты) решаются оригинальным параллельным прямым методом, остальные параллельным итерационным методом. На практике использовалось до 30 тыс. ядер.



Пример параллельного ускорения на практических задачах, суперкомпьютер Ломоносов (2011)



Пример расчета: развитие течения в каверне с разнотемпературными стенками, Ra = 10¹¹ (изоповерхности температуры), сетка 112 млн узлов, 2007

Основные публикации:

[1] A. Gorobets et al. Computers & Fluids 39 (2010) 525–538 https://gorobets.imamod.ru/pub/caf1.pdf

[2] A. Gorobets et al. Computers & Fluids 49 (2011) 101–109 https://gorobets.imamod.ru/pub/caf2.pdf

[3] A. Gorobets et al. Computers & Fluids 88 (2013) 764–772 https://gorobets.imamod.ru/pub/caf3.pdf

[4] А. В. Горобец. Диссертация д. ф.-м. н. (2015) <u>https://gorobets.imamod.ru/pub/diss.pdf</u>

Прямое численное моделирование несжимаемых течений

Рекордные расчеты течений при естественной конвекции, крупные расчеты модельных задач Назначение: эталонные DNS расчеты для разработки моделей турбулентности и изучения физики течения

- Конвекция в вертикальной каверне (Ra до 10¹¹)
- Падающая на нагретую пластину струя (Re=20000)
- Обтекания квадратного цилиндра (Re=22000)
- Течение в квадратной трубе (Re_T = 1200)
- Течение за обратным уступом (Re_T = 395)
- Конвекция Рэлея–Бенара (Ra до 10¹¹), сетки до 6 миллиардов узлов, до 30 тыс. ядер, 30М CPUh

Int. J. Heat and Mass Transfer 53 (2010), 665-683

Int. J. Heat and Mass Transfer 55 (2012) 789-801

Computers & Fluids 123 (2015) 87–98

Int. J. Heat and Fluid Flow 54 (2015) 258–267

J. Fluid Mech. 863 (2019) 341-363

Physical Review Fluids 5 (2020) 024603 Physics of Fluids 29 (2017) 105103



Прямое численное моделирование

24











Валидационная база для разработки моделей турбулентности



DNS – обратный уступ в канале

DNS – квадратная труба

Научные результаты в промышленных приложениях

Гетерогенный алгоритм и DNS/LES код на основе алгебраического подхода

- Назначение: моделирование несжимаемых течений, неструктурированные сетки, 3D
- Алгоритм из базовых операций линейной алгебры, легкая переносимость на все архитектуры
- X. Alvarez-Farre, A. Gorobets, F. X. Trias. Computers & Fluids 214 (2021) 104768



High Performance Computing Hybrid Portable Code

Разработаны новые методы и модели для моделирования турбулентности

- Семейство LES моделей турбулентности S3QR, S3PR, S3PQ
- Динамический метод расчета подсеточного масштаба $\Delta_{\rm LSQ}, \Delta_{\rm RLS}$
- Регуляризация для уравнений Навье–Стокса
- Динамический метод расчета величины шага по времени

Physics of Fluids 27 (2015) 065103 Physics of Fluids 29 (2017) 115109 J. Scientific Computing 79 (2019) 992–1014 Comput. Phys. Commun. 305 (2024) 109351

Внедрение: САЕ ПО Termofluids, интеграция с HPC²; отечественный код NOISETTE



Суперкомпьютерное моделирование сжимаемых течений

Уравнения Навье – Стокса для вязкого сжимаемого газа

 $\frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}(Q) = \nabla \cdot \mathcal{F}^{V}(Q, \nabla Q) \qquad Q = (\rho, \rho \boldsymbol{u}, E)^{T}$

Конвекция: схемы семейства EBR(+TVD,WENO)

- А. Dervieux (INRIA), И. В. Абалакин, Т. К. Козубская MPS scheme
- Сверхспособности на ТС-сетках
- Упрощенный якобиан в неявной схеме
- Экономичность по памяти, вычислениям, обменам

Bakhvalov P. et. al. IJNMF 81(6) (2016) 331–356EBR schemesBakhvalov P. et. al. CAF 157 (2017) 312–324EBR-WENO/TVDBakhvalov P. et. al. CAF 239 (2022) 105352EBR curvilinear reconstructions

Вязкость: метод локальных разбиений AES

- линейный, совпадает с Р1 Галёркиным на тетраэдрах
- на декартовых сетках для лапласиана 7-точечная схема вместо 27
- важно для GPU в якобиане можно держать только смежность по ребрам
- Bakhvalov P. et. al. JCP 450 (2022) 110819 Averaged Elements Splittings

Время: неявные схемы BDF1, BDF2



Интерполяционные конструкции



Контрольные объемы



Суперкомпьютерное моделирование сжимаемых течений

Моделирование турбулентности: гибридные RANS-LES методы семейства DES

• DES, DDES, IDDES

M. Shur, P. Spalart, M. Strelets, A. Travin. FTAC. 95 (2015) 709 – 737. <u>https://doi.org/10.1007/s10494-015-9618-0</u> Guseva, E., Garbaruk, A., Strelets, M.K. FTAC 98, 481–502 (2017). <u>https://doi.org/10.1007/s10494-016-9769-7</u>

Альтернативные методы и модели RANS, LES, SGS; STG, CD/UW blending

А. П. Дубень et. al. – обобщение на неструктурированные сетки, улучшение DES

• LES модели семейства S3

F. X. Trias, D. Folch, A. Gorobets, A. Oliva. Physics of Fluids 27 (2015) 065103. <u>https://doi.org/10.1063/1.4921817</u>

Адаптивные подсеточные масштабы Δ_{LSQ}, Δ_{RLS} F.X.Trias, A.Gorobets, et.al. Physics of Fluids. 29 (2017) 115109 <u>https://doi.org/10.1063/1.5012546</u>



Гетерогенные параллельные вычисления

Целевые архитектуры:

СРU с внешней памятью SoC CPU+GPU с общей памятью

GPU со встроенной памятью

СРU с гибридной памятью

Гибридные кластерные системы CPU + GPU

Оптимальная конфигурация: 2 CPU + 4 GPU (PCIE symmetric, direct)

Выбор средств разработки:

- **DM MIMD: MPI-1**, MPI-2, MPI-3, MPI-4, MPI-CUDA..., SHEM, ...
- SM MIMD: OpenMP 2.0, 3.0, ...; C++ std, pthreads, IntelTBB
- GPU: OpenCL 1.2, 2.0, ... CUDA, HIP, SYCL, OpenACC...
- Язык программирования: C++11,03,14,17,20...; Fortran...

Требования:

- Максимальная переносимость
 CPU Intel, AMD, IBM, ARM, Эльбрус, ... GPU NVIDIA, AMD, Intel, ...
- Минимальный порог вхождения
- Минимальный набор зависимостей





Многоуровневое иерархическое распараллеливание

• МРІ: декомпозиция 1 уровня – по узлам кластера

внешний inter-node интерфейс (сетевой трафик)

• МРІ: декомпозиция 2 уровня – по вычислительным устройствам узла

внутренний intra-node интерфейс CPU-only режим – распределение по NUMA-узлам (CPU сокетам) GPU-only режим – распределение по GPU Гетерогенный режим – по CPU и GPU с весами по производительности

• OpenMP: декомпозиция 3 уровня – по ядрам или логическим процессорам SMT ядер



Декомпозиция неструктурированной сетки

Многоуровневая декомпозиция, внешний и внутренний интерфейс

MPI распараллеливание







- Упорядочивание сеточных объектов: INNER, INTERFACE, HALO LOCAL = OWN U HALO; OWN = INNER U INTERFACE
- Перекрытие вычислений для устранения обменов LOCAL диапазон вместо OWN
- Группировка обменов мультисолвер для СЛАУ в неявной схеме



Update(x,y); SpMV(b,A,x); SpMV(c,A,y); a = dot(x,y) / dot(u,w);a = div2dot(x,y,u,w);



МРІ распараллеливание

Сетка 16М узлов, Ломоносов

8000

24000

Ускорение (нормированное по 1000 СРU)

1000

- MPI обмены: неблокирующие P2P, overlap сокрытие обменов полезно на CPU, критически важно на GPU
- OpenMP-параллельная запаковка и распаковка MPI сообщений обработка всех буферов МРІ сообщений одним циклом



OpenMP распараллеливание

Нить 0

Нить 1

Обмены не нужны, но нужно устранять гонку

Параллелизм циклов VS точнее балансировка с динамической планировкой NUMA-фактор

Декомпозиция – как в MPI неизбежен некоторый дисбаланс фиксированные подобласти -NUMA-placement

Упорядочивание по подобластям + (R)C-М





OpenMP распараллеливание

• Низкий порог вхождения – вся сложность реализации скрыта

сервисный объект хранит декомпозицию и диапазоны доменов потоков (Lims)

#pragma omp parallel
for(tParallelForIterator i(Lims, N); i<N; ++i){</pre>

• Поддержка сотен потоков – важно для получения преимуществ SMT

EBR3-WENO, Roe, неявная BDF1, RANS, сетка 3М узлов Матчасть: 2 x CPU Intel Xeon 6326, 8xDDR4-3200

MPI	OpenMP	Время, с	Ускорение	
1	1	32	1	
1	64	1.43	22	
2	32	1.27	25	
32	2	1.18	27	



EBR5, неявная BDF2, IDDES, сетка >1М узлов (нестационарный расчет – выше арифметическая интенсивность)

Intel Xeon	Ядер (потоков)	Ускорение	
2 x Gold 5218	32 (64)	30	
Phi 7250	68 (272)	92	



Потоковая обработка и OpenCL реализация

Тоже нужно устранять зависимости и гонку, но более ограниченная парадигма: обработка большого множества независимых и однородных заданий

• Разделение на 2 этапа с промежуточным массивом:

- 1. считаем результат в цикле по ребрам
- 2. суммируем в узлы в цикле по узлам

Zero column sum

пишем в якобиан только внедиагональные блоки собираем диагональ суммированием по столбцам

• Реберная раскраска графа упорядочивание и обработка по цветам





Потоковая обработка и OpenCL реализация

- Максимальное подобие CPU и OpenCL версий, общий формат данных для упрощения изменений и поддержания кода в форме
- Генерация кернел кода на рантайме чтобы избавиться от if-else-й и switch-ей
- Работа с множественными файлами исходного кода обработка лога компилятора для подстановки файлов и строк
- Overlap перекрытие обменов и вычисления сокрытие расходов на передачу данных
- Минимизация заданий work-item-ов для повышения загрузки потоковых мультипроцессоров
- Смешанная точность FP64/FP32

одинарная для якобиана и некоторых прожорливых дискретных операторов – чтобы уменьшить потребление памяти и memory-трафик без потери точности результата

• Всяческое переупорядочивание

блочный RCM, лексикографическая сортировка ребер – для повышения локальности

for(int i=0	0; i <n; ++i){<="" th=""><th></th></n;>	
	Workload	
}		
	$\overline{}$	
kernel vc const i if(i>=N	<pre>Did Workload(){ int i = get_global_id(0); N) return;</pre>	
	Workload	
}		

Гетерогенные вычисления на CPU и GPU

1 МРІ процесс на узел кластера

OpenMP – nested





Гетерогенные вычисления на CPU и GPU

- MPI: многоуровневая декомпозиция
- 1 процесс на устройство СРИ или GPU
- Overlap сокрытие обменов за вычислениями
- CPU: OpenMP параллелизм на основе декомпозиции
- GPU: OpenCL переносимость на разные GPU
- Кернел-код конфигурируется в рантайме
- Полная согласованность СРU и GPU версий
- Автоматическая runtime система тестирования

Andrey Gorobets, Pavel Bakhvalov. Computer Physics Communications. Vol 271. 2022. 108231. <u>https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108231</u>





Параллельная эффективность и производительность

EBR5, BDF2 (BiCGSTAB), IDDES, FP64/32, сетка 80M



K60-GPU: 2 x 16C CPU Intel Xeon Gold 6142 (120 GB/s)

4 x GPU NVIDIA **V100** (32 GB, 900GB/s)



CPU: 2xCPU 24C Intel Xeon 8160



GPU vs 16-core CPU





Гетерогенный режим CPU + GPU

25

30

Численная конфигурация: EBR5, BDF2, IDDES

Параллельная конфигурация: MPI+OpenMP+OpenCL, NT=14/4

Сетка: 12М узлов (обтекание круглого цилиндра)





Lomonosov-2

14C Intel Xeon E5-2697v3 & NVIDIA K40 Умеренное соотношение GPU vs CPU 2:1 http://hpc.msu.ru/node/159



Промышленные приложения: аутсорсинг

• Промышленные НИРы по hi-fi расчетам: штучно, дорого, долго...



Промышленные приложения: импортозамещение САЕ ПО

Для широкого применения необходимо:

- Повышение робастности, упрощение конфигурации численной методики
- Ускорение сходимости в стационарных RANS расчетах мультигрид
- Расширение функциональности (УрС РГ, WF, SAR, CHT, FSI, NLH...)
- Проблемно-ориентированные решения
- Сеточный генератор, GUI, постпроцессор













Многосеточный FAS-MG ускоритель

• Оригинальная MPI реализация

MPI процессы делятся на группы по уровням и по подобластям Изменения в коде - минимальны

• Multi-domain реализация

Полноценная реализация с множественными расчетными областями Каждый MPI процесс работает со всеми уровнями

• OpenCL реализация

Полноценная поддержка вычислений на GPU



A. V. Gorobets. An Approach to the Implementation of the Multigrid Method... Comput. Math. and Math. Physics, 2023, Vol. 63, No. 11, pp. 2150–2161.



Многосеточный FAS-MG ускоритель

• Модельный компрессор

Сетка 20М узлов, 5 ступеней, схема EBR3, RANS SA, MP

Совместно с ИЦ ЧИссл <u>https://rescent.ru/</u>

NOISEtte обогнал NUMECA Fine/Turbo

это самый быстрый коммерческий код для турбомашин, широко использовался на предприятиях ОДК

Устройство		Число	MPI	OpenMP	Время, с
	устройств	процессов	потоков		
CPU Intel Core i9, 18C,	NOISEtte	1	1	36	1680
4xDDR4-2666 85 ГБ/с	NUMECA	1	36	1	2950
CPU Intel Xeon Gold 5218, 16C,		1	1	1	18960
6xDDR4-2666 128 ГБ/с	2	2	32	868 22	
CPU AMD EPYC 7542, 32C,		1	1	1	18400
8xDDR4-3200 205 ГБ/с	2	4	32	488	
GPU NVIDIA A5000, 768 ГБ/с		4	4	-	129
GPU NVIDIA V100, 900 ГБ/с		4	4	-	115

A. V. Gorobets. An Approach to the Implementation of the Multigrid Method... Comput. Math. and Math. Physics, 2023, Vol. 63, No. 11, pp. 2150–2161.



Проблемно-ориентированные решения: турбомашины

Руководитель направления: Алексей Дубень с.н.с., ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, к. ф.-м. н.

- Стационарный интерфейс Mixing Plane слабо отражающие условия, схема Роу
- Интерфейс NLH NonLinear Harmonic







A.P. Duben, A.V. Gorobets et al. Supercomputer Simulations of Turbomachinery Problems with Higher Accuracy on Unstructured Meshes // RuSCDays 2022. LNCS, Vol. 13708. pp. 356–367

A.P. Duben, A.V. Gorobets. Application-Specific Parallel Linear Solver for Nonlinear Harmonics Method with Implicit Time Integration // Supercomputing Frontiers and Innovations, 2025 (In press)

Проблемно-ориентированные решения: винты

Руководитель направления: Владимир Бобков с.н.с., ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, к. ф.-м. н.

- Нестационарный интерфейс Sliding Mesh
- Деформируемые сетки
- Управление и аэродинамические силы
- Модифицированный FW/Н постпроцессор















^{2×10⁻⁴} ³ I.V. Abalakin, V.G. Bobkov et al. Modelling and Supercomputer Simulation of Hinged Rotor // Supercomputing Frontiers and Innovations, 2025 (In press)

Абалакин И.В., Бобков В.Г. et al. Численное моделирование обтекания жесткого винта в косом потоке // Изв. РАН. МЖГ. 2020. № 4. С. 105-116.

Проблемно-ориентированные решения

Руководитель направления: Наталья Жданова с.н.с., ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, к. ф.-м. н.

Сотрудничество: Олег Васильев, проф. Сколтеха, д. ф.-м. н.

• ІВС – погруженные граничные условия







И.В. Абалакин, О.В. Васильев, Н.С. Жданова. Расширение метода штрафных функций Бринкмана для сжимаемых течений вокруг подвижных твердых тел. Матем. моделирование, 34(2), 41–57, 2022.

О.В. Васильев, Н.С. Жданова. Обобщение метода пенализированных пристеночных функций для моделирования турбулентных течений с неблагоприятным градиентом давления // ЖВМ и МФ, 2023, т. 63, №12, с. 159.

Внедрение NOISETTE в отечественные CAE решения

Код TRD-Solver, ИЦЧИссл, Санкт-Петербург

http://rescent.ru/trd-ru https://trd-cae.ru/

Задачи турбомашиностроения, импортозамещение ПО NUMECA Fine/Turbo, AutoGrid Функциональность: RANS решатель, MG, MP, NLH, без доступа к исходному коду CAD и GUI: **C3D**, QT; Сетки: **TRD-Mesher** – блочно-структурированные сетки для турбомашин















Внедрение NOISETTE в отечественные CAE решения

ПО инженерного анализа SIMULTEC, T1, Москва

https://t1.ru/ https://cadflo.ru/

Моделирование сжимаемых течений, CFD и CAA

Функциональность: неисключительная лицензия на весь исходный код

CAD и GUI: SW, KOMПAC-3D, T-Flex; Сетки: UNM - универсальный, hex-dominant, BL



Внедрение NOISETTE в отечественные CAE решения

ПО инженерного анализа SIMULTEC, T1, Москва

https://t1.ru/ https://cadflo.ru/ Моделирование сжимаемых течений, CFD и CAA Функциональность: неисключительная лицензия на весь исходный код CAD и GUI: **SW, КОМПАС-3D, T-Flex;** Сетки: **UNM** - универсальный, hex-dominant, BL



Onera-M6





Внедрение в ПО инженерного анализа Т1

- Робастность численной методики: защитные ограничения EBR схемы
- Автонастройка: схема EBR/WENO, протяжка решения, решатель СЛАУ, шаг по времени, стабилизатор...



Заключение

Результаты

- Разработана суперкомпьютерная CFD технология
- Разработаны гетерогенные параллельные алгоритмы
- Архитектура NOISETTE и MPI/OpenMP/OpenCL реализация
- Адаптация к промышленным приложениям: FAS-MG, ...

Возможности практического применения

- Hi-fi расчеты на крупных суперкомпьютерах
- Внедрение в отечественные САЕ решения

Дальнейшее развитие

- Расширение функциональности: СНТ, FSI, MCF, ...
- Улучшение DES: повышение точности и робастности

http://noisette.imamod.ru



РНФ, проект **24-11-00287**