

Требования к оперативной памяти компьютера для матричного подхода к глобальному анализу устойчивости потоков жидкости и газа

(Computer Memory Requirements for Matrix-Forming Approach to Global Stability Analysis of Fluid Flows)

Гарбарук Андрей Викторович
Беляев Кирилл Владимирович
Голубков Валентин Денисович

Суперкомпьютерные дни в России, Москва, 25-26 сентября 2023 г.

Содержание

1. Введение
2. Глобальный анализ устойчивости
 - Формулировка метода
 - Численное решение задачи на собственные значения
3. Рассмотренные задачи
 - Развитие волн Толлмина-Шлихтинга на пластине с неоднородностью
 - Трансзвуковой бафтинг на стреловидном крыле бесконечного размаха
 - Трансзвуковой бафтинг на модели самолета CRM
4. Требуемая оперативная память
 - Влияние количества MPI процессов
 - Влияние размера задачи
5. Заключение

1. Введение

2. Глобальный анализ устойчивости

- Формулировка метода
- Численное решение задачи на собственные значения

3. Рассмотренные задачи

- Развитие волн Толлмина-Шлихтинга на пластине с неоднородностью
- Трансзвуковой бафтинг на стреловидном крыле бесконечного размаха
- Трансзвуковой бафтинг на модели самолета CRM

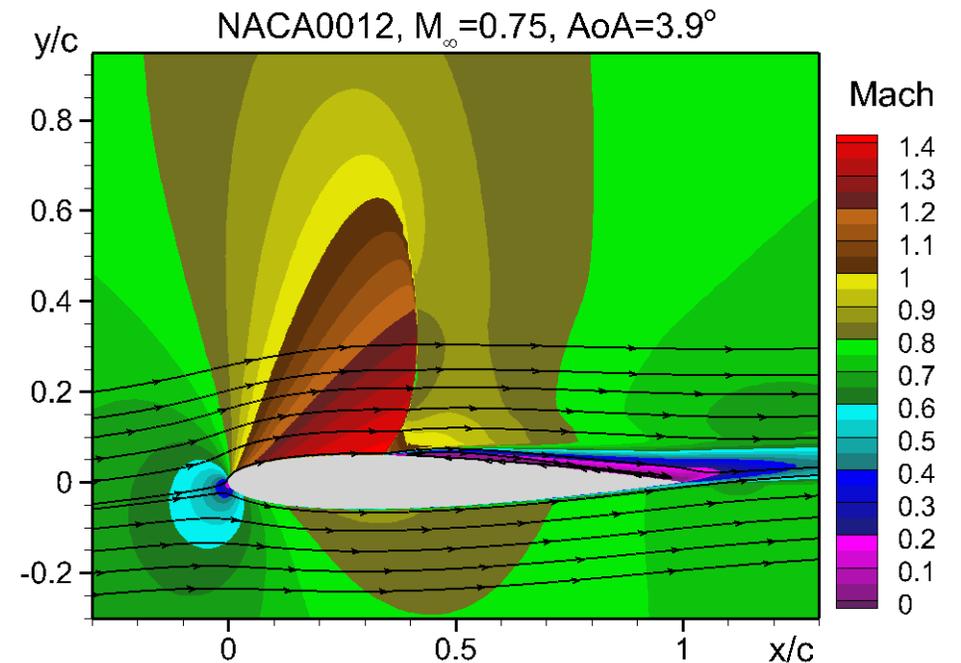
4. Требуемая оперативная память

- Влияние количества MPI процессов
- Влияние размера задачи

5. Заключение

Введение (1/2)

- Зачастую в прикладных задачах необходимо провести исследование устойчивости стационарных решений уравнений Навье-Стокса или Рейнольдса
 - Это помогает ответить на вопрос о том, реализуется ли полученное решение на практике
- Естественным способом исследования устойчивости является решение соответствующих нестационарных уравнений от исследуемого начального приближения
 - Это сопряжено с необходимостью проведения длительных расчетов
 - ✓ Проведение таких расчетов может потребовать больших вычислительных затрат



Исследование трансзвукового бафтинга методом URANS

Введение (2/2)

- Альтернативным подходом является анализ устойчивости на основе решения задачи на собственные значения
 - Этот метод активно развивается и используется уже более 100 лет
 - Большая часть исследований проводилась в рамках анализа устойчивости упрощенных уравнений
 - ✓ Например, параллельный и квазипараллельный подходы
- В последние годы благодаря развитию суперкомпьютеров стал возможен анализ устойчивости в рамках полных 2D и 3D уравнений
 - Этот подход называется глобальным анализом устойчивости (ГАУ) или Global Linear Stability Analysis (GLSA)
- Обычно он реализуется при помощи так называемого матричного подхода
 - Его использование сопряжено с большими затратами оперативной памяти

Доклад посвящен оценке требуемой оперативной памяти при использовании матричного подхода

1. Введение

2. Глобальный анализ устойчивости

- Формулировка метода
- Численное решение задачи на собственные значения

3. Рассмотренные задачи

- Развитие волн Толлмина-Шлихтинга на пластине с неоднородностью
- Трансзвуковой бафтинг на стреловидном крыле бесконечного размаха
- Трансзвуковой бафтинг на модели самолета CRM

4. Требуемая оперативная память

- Влияние количества MPI процессов
- Влияние размера задачи

5. Заключение

Глобальный анализ устойчивости (1/2)

- Нестационарные уравнения движения можно записать в операторной форме

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -R(q) \quad (1)$$

➤ Количество переменных N_v вектора неизвестных q зависит от задачи

✓ При решении 2D уравнений Навье-Стокса $N_v=4$ $q = \{\rho, \rho E, \rho u, \rho v\}^T$

✓ Для 3D уравнений Рейнольдса $N_v=6$ $q = \{\rho, \rho E, \rho u, \rho v, \rho w, \rho v_t\}^T$

- Стационарное решение \bar{q} , устойчивость которого исследуется, удовлетворяет уравнению

$$R(\bar{q}) = 0 \quad (2)$$

- Представим нестационарное решение уравнения (1) в следующей форме

$$q(x, y, z, t) = \bar{q}(x, y, z) + q'(x, y, z, t) \quad (3)$$

- Подставив (3) в (1) и вычтя (2) получим уравнения для возмущений q'

$$\frac{\partial q'}{\partial t} = J(\bar{q})q' = 0 \quad (4)$$

➤ $J(\bar{q}) \equiv \frac{\partial R}{\partial q}(\bar{q})$ – якобиан правых частей уравнений движения

Глобальный анализ устойчивости (2/2)

$$\frac{\partial q'}{\partial t} - J(\bar{q})q' = 0 \quad (4)$$

- Представим возмущения в гармонической форме

$$q'(x, y, z, t) = \hat{q}(x, y, z) \exp(\omega t) \quad (5)$$

- $\omega = \omega_r + i\omega_i$ – комплексная частота
 - ✓ вещественная часть ω_r – показатель роста
 - ✓ мнимая часть ω_i – частота
- Подстановка (5) в (4) приводит к задаче на собственные значения дифференциального оператора J

$$J\hat{q} = \omega\hat{q} \quad (6)$$

- Стационарное решение \bar{q} неустойчиво если в его спектре есть хоть одно собственное число с положительной вещественной частью ω_r
 - ✓ Собственный вектор определяет форму развивающихся возмущений

Дискретная задача на собственные значения

- Задача на собственные значения дифференциального оператора J (6) решается численно

$$M_{kl} \hat{\alpha}_l \square \omega \hat{\alpha}_k \quad (7)$$

- матрица M_{kl} – дискретный аналог оператора J , вектор $\hat{\alpha}_l$ – дискретный аналог вектора амплитуд возмущений \hat{q}
 - ✓ индексы k и l принимают значения от 1 до $N_m = N_p \times N_v$ (N_p – количество узлов сетки, N_v – количество переменных)

- Матрица M является разреженной

- количество ненулевых элементов в строке зависит от типа задачи и порядка аппроксимации
 - ✓ 28 для ламинарных 2D течений
 - ✓ 69 для турбулентных 3D течений

- В граничных точках используются соответствующие линеаризованные граничные условия

$$M_{kl} \hat{\alpha}_l \square 0 \quad (8)$$

- Совокупность (7) и (8) приводит к **обобщенной задаче на собственные значения**

$$M_{kl} \hat{\alpha}_l \square \omega T_{km} \hat{\alpha}_m \quad (9)$$

- T_{km} – диагональная матрица ($T_{kk} = 0$ на границе и $T_{kk} = 1$ во внутренних точках)

Численное решение задачи на собственные значения

- Для численного решения задачи (9) использовался метод Крылова-Шура
 - модификация неявно перезапускаемого метода Арнольди, основанного на проекции на подпространство Крылова
 - эффективен для больших разреженных неэрмитовых матриц (матрица M принадлежит к этому типу)
- Метод Крылова-Шура позволяет вычислить ограниченное количество собственных чисел с наибольшим модулем
 - Для определения устойчивости необходимо собственное число с наибольшей вещественной частью ω_r
 - Для этого применяется трансформация спектра (подход “shift-invert”) и задача на собственные значения (9) заменяется на эквивалентную ей задачу

$$(M_{kl} - \sigma T_{kl})^{-1} T_{lp} \hat{\alpha}_p \approx \theta \hat{\alpha}_k \quad \omega \approx \sigma \approx 1 / \theta \quad (10)$$

- ✓ При правильном выборе параметра σ искомое собственное число оригинальной задачи (9) будет соответствовать собственному числу с наибольшим модулем задачи (10)
- Использование подхода “shift-invert” приводит к необходимости решения системы линейных уравнений
 - Применение итерационных методов не всегда возможно в силу отсутствия диагонального преобладания, поэтому используется обращение матрицы с использованием LU разложения
 - ✓ Основные затраты оперативной памяти связаны с поиском и хранением этого разложения

Программная реализация

- Численное решение уравнений Навье-Стокса и Рейнольдса было выполнено с помощью код NTS (Numerical Turbulence Simulation) СПбПУ
 - Использует перекрывающиеся структурированные сетки типа «Химера»
 - Хорошо верифицирован и валидирован
 - Используется для расчета различных течений жидкости и газа почти 30 лет
 - Использует гибридную MPI-OMP параллелизацию
- Программа для решения обобщенной задачи на собственные значения была написана с использованием библиотек SLEPc/PETSc
 - Эти библиотеки активно используются и развиваются более 20 лет
 - Позволяют использовать внешние солверы
 - ✓ Для LU-разложения и решения на его основе системы линейных уравнений использовалась библиотека MUMPS (использует MPI параллелизацию)
- Расчеты проводились на СКЦ «Политехнический» СПбПУ
 - 625 узлов CPU
 - ✓ Intel Xeon E5-2697v3, 64 GB RAM
 - Максимальное количество узлов, задействованное в одном расчете, - 140

1. Введение

2. Глобальный анализ устойчивости

- Формулировка метода
- Численное решение задачи на собственные значения

3. Рассмотренные задачи

- Развитие волн Толлмина-Шлихтинга на пластине с неоднородностью
- Трансзвуковой бафтинг на стреловидном крыле бесконечного размаха
- Трансзвуковой бафтинг на модели самолета CRM

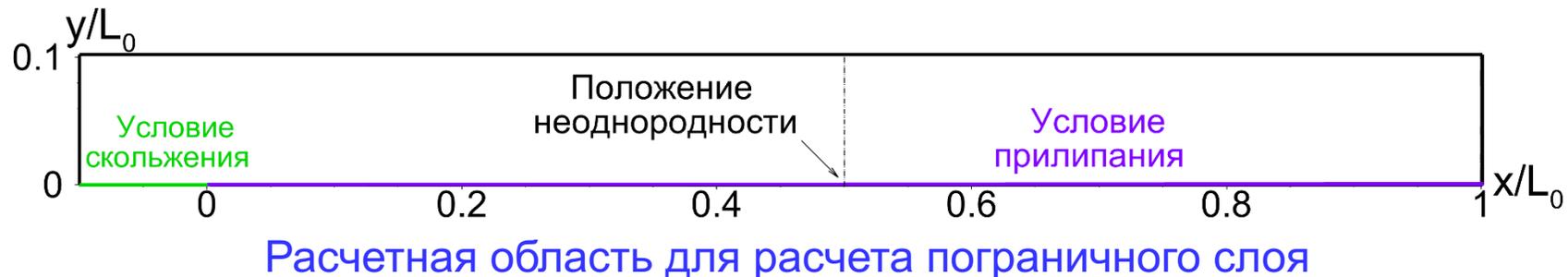
4. Требуемая оперативная память

- Влияние количества MPI процессов
- Влияние размера задачи

5. Заключение

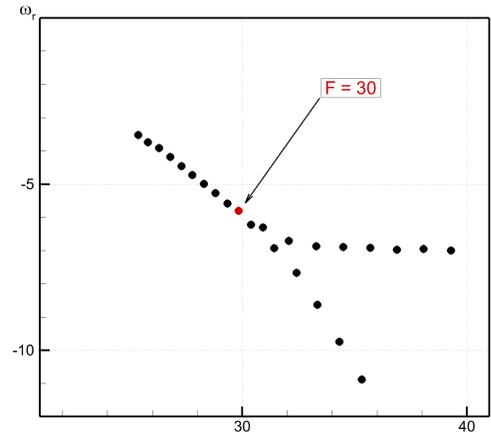
Развитие волн Толлмина-Шлихтинга на пластине с неоднородностью (1/3)

- Пограничный слой без градиента давления на плоской пластине длиной L_0
 - $M = 0.05$, $Re_0 = 3 \cdot 10^6$
 - Размер сетки – $2 \cdot 10^6$ ячеек
 - ✓ Размер матрицы $7.5 \cdot 10^6$ строк ($2.1 \cdot 10^7$ ненулевых элементов)
- Ламинарно-турбулентный переход (ЛТП) на пластине вызван неустойчивостью Толлмина-Шлихтинга (ТШ)
 - На пластине расположена неоднородность (уступ или каверна)
 - ✓ Влияет на развитие волн ТШ и на положение ЛТП
- ГАУ позволяет определить влияние неоднородности на волны ТШ и положение ЛТП

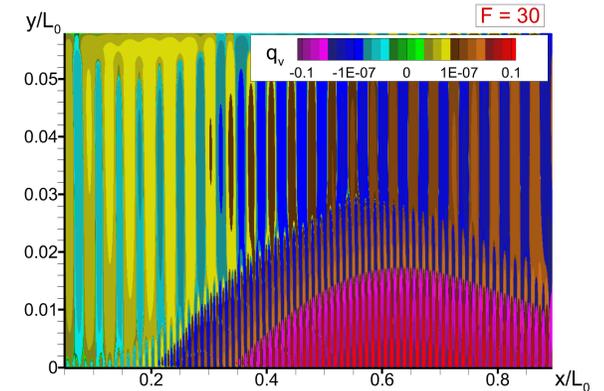


Развитие волн Толлмина-Шлихтинга на пластине с неоднородностью (2/3)

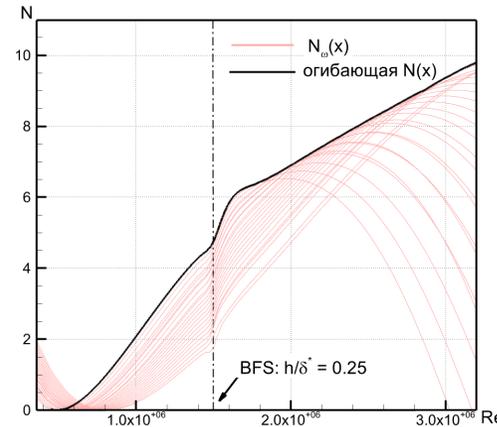
- Результатом анализа устойчивости является набор пар собственных чисел и собственных векторов
 - Из них выбираются пары, соответствующие волнам ТШ с различными частотами
- Для каждой волны определяется показатель роста $N(x) = \ln[B(x)/B_{\min}]$
 - B – амплитуда бегущей волны ТШ
- По совокупности волн находится огибающая $N(x)$ и для каждой неоднородности определяется величина ΔN
 - Характеризует влияние неоднородности на волны ТШ
 - Позволяет определить сдвиг положения ЛТП



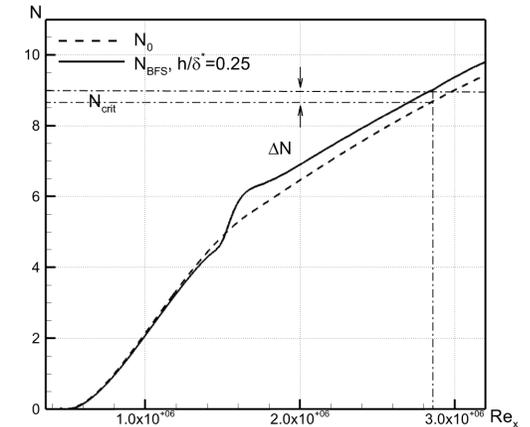
Собственные числа



Пример собственного вектора



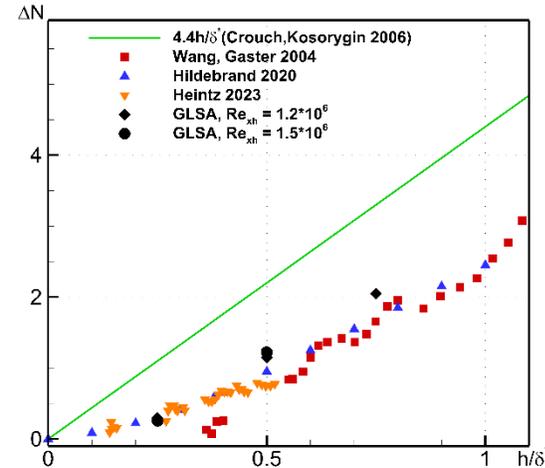
Построение огибающей $N(x)$



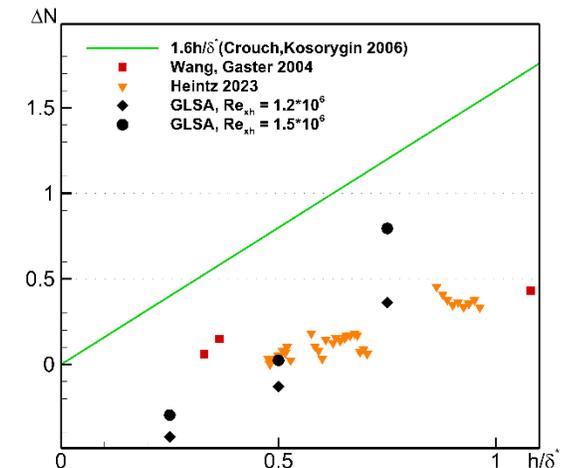
Определение ΔN

Развитие волн Толлмина-Шлихтинга на пластине с неоднородностью (3/3)

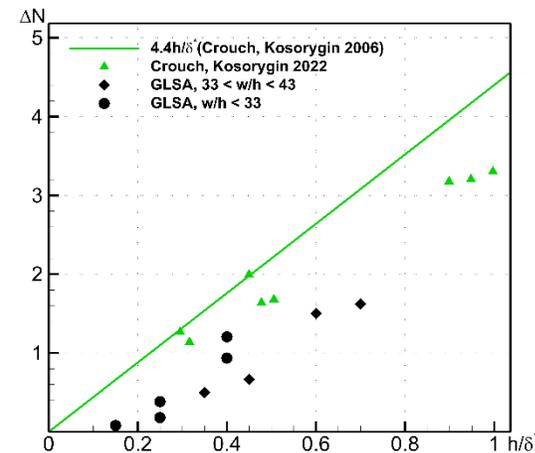
- Результаты анализа хорошо совпадают почти со всеми экспериментальными данными
 - Влияние неоднородностей несколько занижено по сравнению с результатами Crouch, Kosorygin
 - ✓ Это связано с наличием продольного градиента давления в этом эксперименте



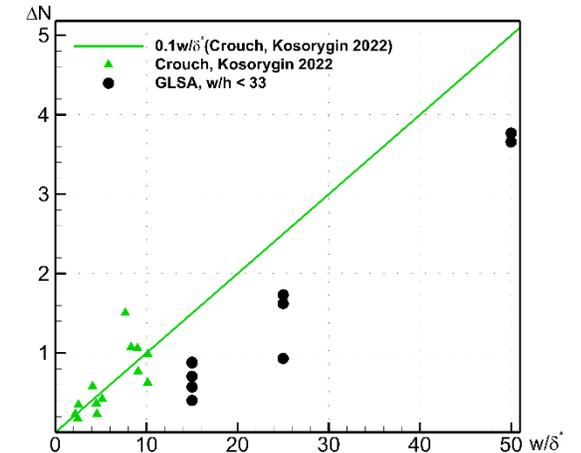
Обратный уступ



Прямой уступ



Мелкие каверны



Глубокие каверны

Трансзвуковой бафтинг на стреловидном крыле бесконечного размаха (1/2)

- Рассматривается обтекание бесконечного стреловидного крыла постоянного сечения (RANS с моделью SACC)
 - В сечении крыловой профиль OAT15A
 - Угол стреловидности Λ от 0 до 30°
 - Угол атаки α от 2.7° до 3.1°
 - Число Маха по нормали к передней кромке $U_\infty \cos(\Lambda)/a$ от 0.72 до 0.74
 - Число Рейнольдса $Re = U_\infty \cos(\Lambda)c/\nu = 3 \cdot 10^6$
- В базовом течении на верхней поверхности крыла возникает скачок уплотнения
 - При некоторых режимах этот скачок начинает совершать периодические движения
 - ✓ Эта неустойчивость называется трансзвуковой бафтинг
 - Колебания скачка приводят к колебаниям подъемной силы
 - ✓ Амплитуда колебаний может достигать $0.1g$
 - Бафтинг является серьезной проблемой для безопасности полетов

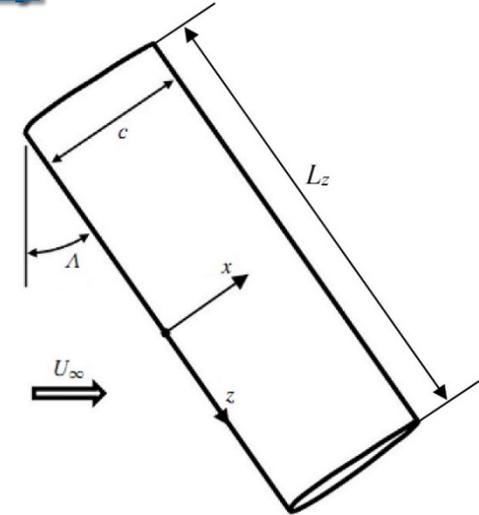
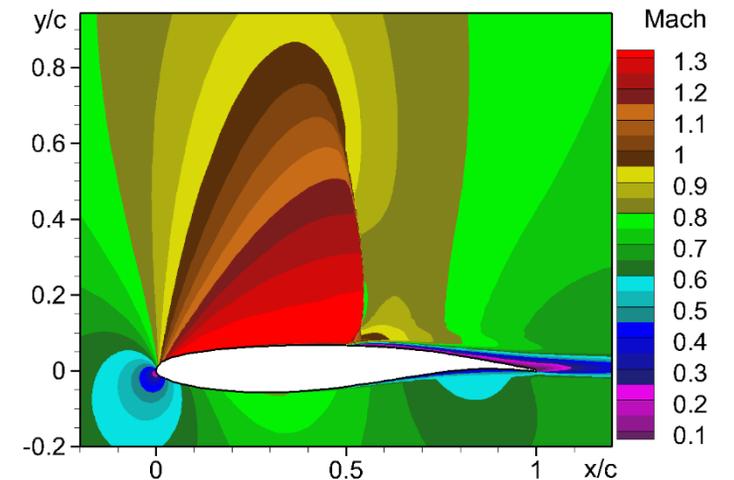


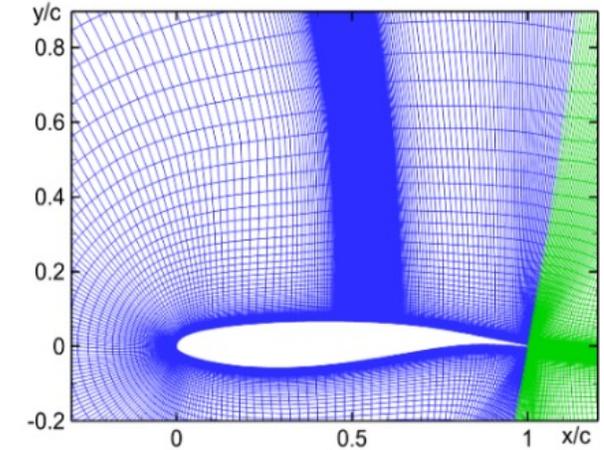
Схема течения



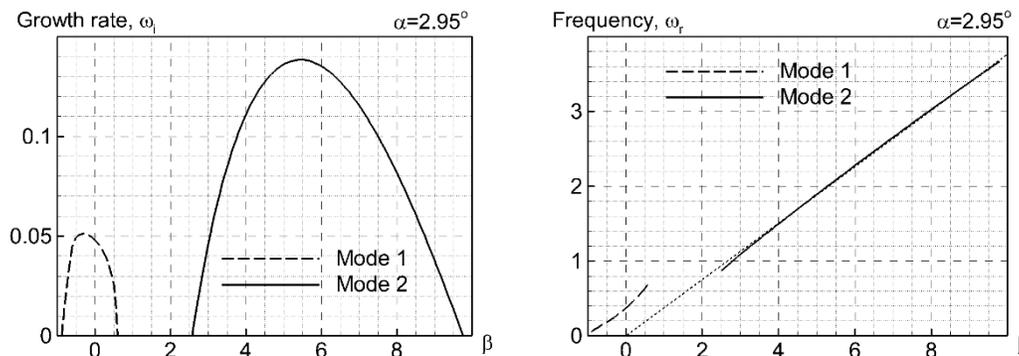
Поле числа Маха

Трансзвуковой бафтинг на стреловидном крыле бесконечного размаха (2/2)

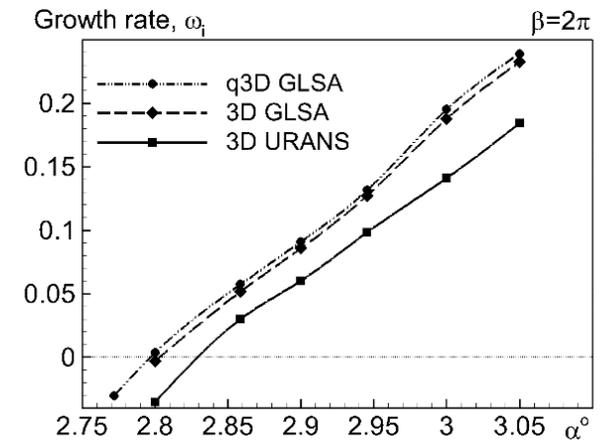
- Расчетная сетка в плоскости $8.5 \cdot 10^4$ ячеек
 - Размер матрицы
 - ✓ q3D постановка - $5.0 \cdot 10^5$ строк ($1.6 \cdot 10^6$ ненулевых элементов)
 - ✓ 3D постановка - $1.1 \cdot 10^7$ строк ($7.7 \cdot 10^8$ ненулевых элементов)
- Результаты расчетов выявили две моды неустойчивости
 - Одна практически двумерная (Mode 1)
 - Вторая по z имеет длину волны порядка хорды крыла (Mode 2)



Расчетная сетка



Зависимость показателя роста и частоты от волнового числа по z

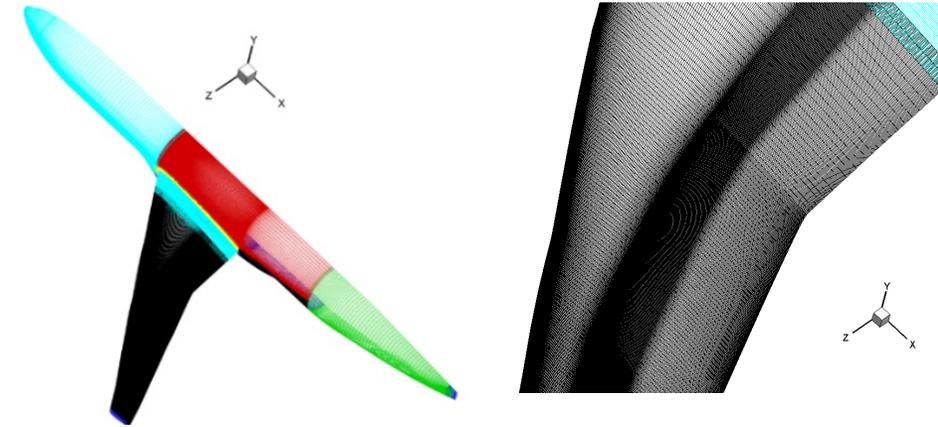


Сравнение результатов
разных методов

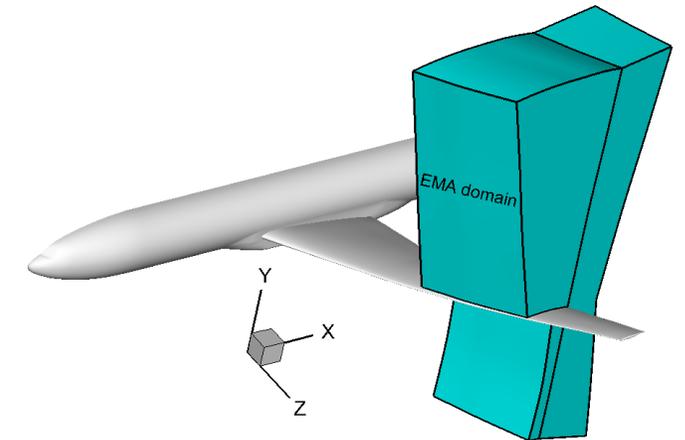
- Результаты разных методов хорошо согласуются между собой

Трансзвуковой бафтинг на модели самолета CRM (1/2)

- Модель самолета CRM
 - $Re = 1.5 \cdot 10^6$
 - $M = 0.85$
 - Угол атаки α от 2.7° до 3.1°
 - RANS SACC
- Расчетная сетка 62 млн узлов
 - Полный 3D анализ устойчивости невозможен на доступных ресурсах
- ГАУ проводился в подобласти на части крыла
 - $z_{min}/L_z = 0.402$ и $z_{max}/L_z = 0.898$
 - Использовалась каждая 4^я линия по z
 - Размер сетки для ГАУ около 2 млн узлов
 - ✓ Ей соответствует матрица $1.5 \cdot 10^7$ строк (10^9 ненулевых элементов)



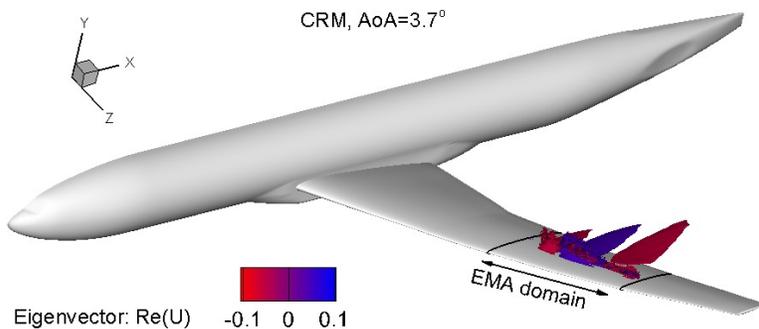
Расчетная сетка



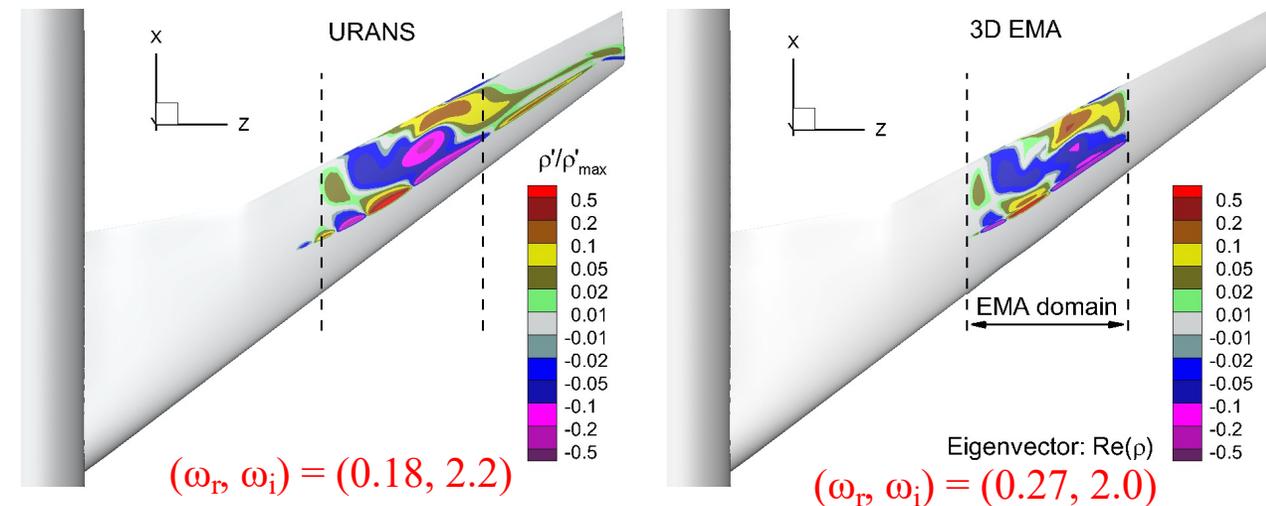
Область, в которой проводился ГАУ

Трансзвуковой бафтинг на модели самолета CRM (2/2)

- ГАУ предсказывает бафтинг на крыле самолета
 - Качественно результаты хорошо согласуются с URANS
 - Количественное различие довольно существенно
 - ✓ Это связано с использованием малой области и более грубой сетки в ГАУ



Результаты ГАУ: изоповерхность собственного вектора



Возмущения плотности на поверхности крыла:
URANS (слева) и ГАУ (справа)

1. Введение

2. Глобальный анализ устойчивости

- Формулировка метода
- Численное решение задачи на собственные значения

3. Рассмотренные задачи

- Развитие волн Толлмина-Шлихтинга на пластине с неоднородностью
- Трансзвуковой бафтинг на стреловидном крыле бесконечного размаха
- Трансзвуковой бафтинг на модели самолета CRM

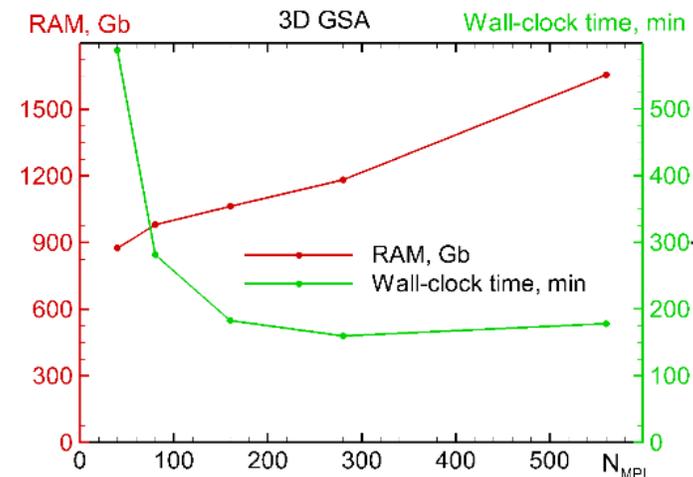
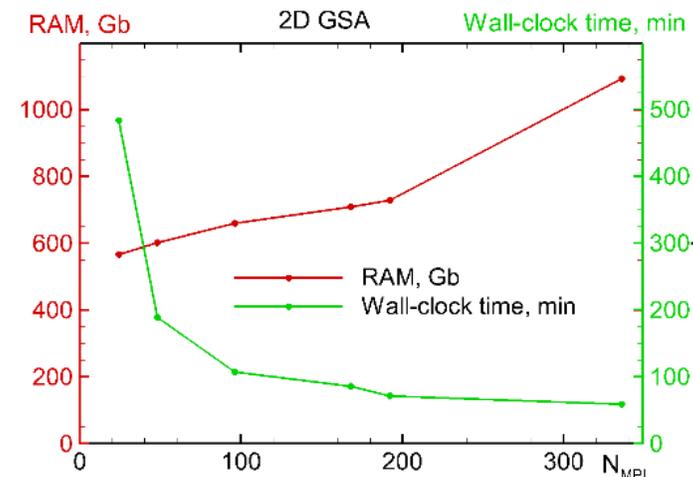
4. Требуемая оперативная память

- Влияние количества MPI процессов
- Влияние размера задачи

5. Заключение

Влияние количества MPI процессов

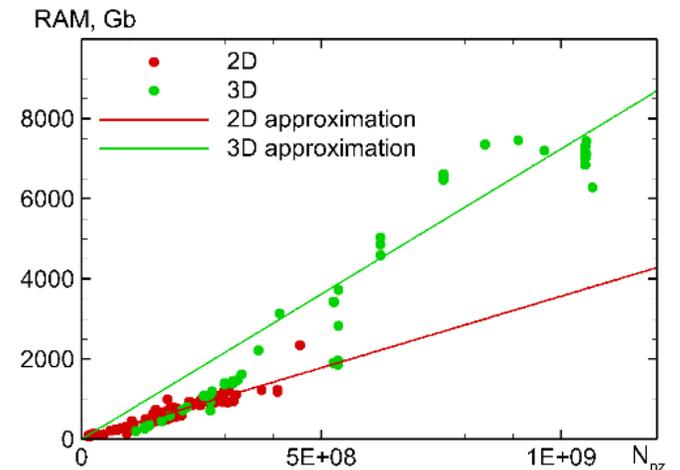
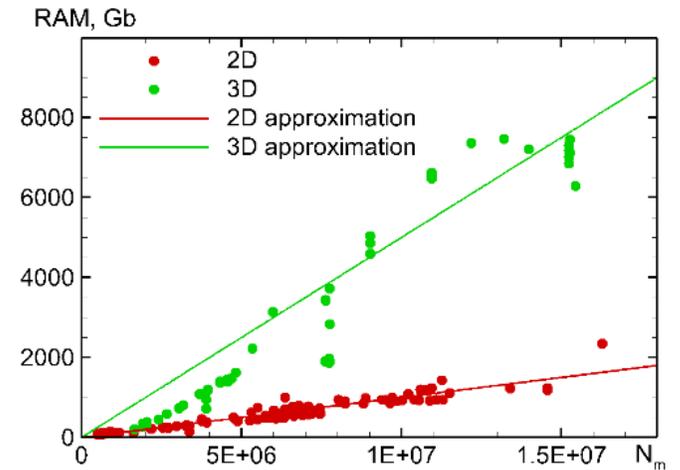
- Основные затраты оперативной памяти связаны с расчетом и хранением LU-разложения матрицы M (MPI параллелизация)
 - Затраты памяти зависят от количества MPI процессов (N_{MPI})
- Было выполнено исследование зависимости количества используемой памяти и времени расчета от N_{MPI} для 2 задач
 - 2D: Матрица M содержит $N_m=7.5 \cdot 10^6$ строк; расчет на 12 узлах
 - 3D: Матрица M содержит $N_m=3.7 \cdot 10^6$ строк; расчет на 20 узлах
- Влияние N_{MPI} существенно
 - Увеличение N_{MPI} в 14 раз ведет к росту затрат памяти в 2 раза
 - Время расчета сильно возрастает при малом количестве N_{MPI}
 - ✓ При $N_{MPI} > 150$ оно почти постоянно
- Выбор N_{MPI} для каждой задачи определяется компромиссом между скоростью и затратами памяти
 - Оптимальное значение
 - ✓ $N_{MPI} = 10^{-5} N_m$ для 2D
 - ✓ $N_{MPI} = 5 \cdot 10^{-5} N_m$ для 3D



Зависимость затрат памяти и времени расчета от количества MPI процессов для 2D (сверху) и 3D (снизу) задач

Затраты оперативной памяти

- Для всех задач (2D и 3D) построена зависимость затрат оперативной памяти от количества строчек матрицы M (N_m) и количества ненулевых элементов (N_{nz})
 - Существенное различие между 2D и 3D
 - ✓ 2D: $\text{RAM (Gb)} = 10^{-4} \cdot N_m = 3.6 \cdot 10^{-6} \cdot N_{nz}$
 - ✓ 3D: $\text{RAM (Gb)} = 5.0 \cdot 10^{-4} \cdot N_m = 7.2 \cdot 10^{-6} \cdot N_{nz}$
 - В 3D задачах LU-разложение требует больше памяти, поскольку плотность матрицы примерно в 2 раза выше чем в 2D
- Ресурсы всего кластера «Политехнический» (625 узлов по 64 Гб) позволяют решать 3D задачи размером $N_m = 7.2 \cdot 10^7$
 - Это соответствует расчетной сетке 12 млн узлов
 - ✓ Недостаточно для решения прикладных задач
- GAU модели самолета CRM требует около 200 Тб RAM
 - В России только корпоративные кластеры Червоненкис и Кристофари Нео имеют достаточные ресурсы
 - Анализ устойчивости таких течений дело недалекого будущего



Зависимость затрат памяти от количества строк матрицы M (сверху) и количества ее ненулевых элементов (снизу)

1. Введение
2. Глобальный анализ устойчивости
 - Формулировка метода
 - Численное решение задачи на собственные значения
3. Рассмотренные задачи
 - Развитие волн Толлмина-Шлихтинга на пластине с неоднородностью
 - Трансзвуковой бафтинг на стреловидном крыле бесконечного размаха
 - Трансзвуковой бафтинг на модели самолета CRM
4. Требуемая оперативная память
 - Влияние количества MPI процессов
 - Влияние размера задачи

5. Заключение

Заключение

- Выполнен анализ затрат оперативной памяти для проведения глобального анализа устойчивости (ГАУ) двумерных и трехмерных течений
 - Определено оптимальное количество MPI процессов
 - Определена зависимость затрат памяти от размера задачи
- Имеющиеся в настоящее время ресурсы достаточны для проведения ГАУ на сетках до 10 млн узлов
 - Этого недостаточно для решения промышленных задач
 - Развитие суперкомпьютеров позволяет надеяться, что это станет возможным в ближайшее время

Спасибо за внимание

