

Исследование возможности параллельных вычислений задач гидроаэродинамики с использованием открытого пакета программ OpenFOAM на кластере СКИФ Урал ЮУрГУ

В.А. Васильев, А.Ю. Ницкий, М.В. Крапошин, А.В. Юскин

Решены задачи гидродинамики тонкого турбулентного слоя в двумерной и трехмерной постановке с использованием пакета прикладных программ OpenFOAM 1.6. Проведена верификация результатов расчета с данными эксперимента, сравнение с результатами и скоростью расчета задач с помощью ANSYS CFX 12.1. При проведении вычислений на кластере СКИФ Урал достигнутое ускорение составило порядка 400.

Введение

В настоящее время развитие коммерческих пакетов расчета задач вычислительной гидроаэродинамики (далее ВГАД), таких как ANSYS CFX, ANSYS FLUENT, CD-adapco STAR-CD и START-CCM+ или пакета Российских разработчиков FlowVision (компания ТЕСИС), достигло высокого уровня эффективности, точности и гибкости, с их помощью можно решать самые различные и сложные задачи. Более того, сегодня трудно представить развитие таких отраслей как автомобильная, авиационная или аэрокосмическая без использования этих пакетов.

Все современные пакеты программ ВГАД решают задачи механики сплошной среды, используя модели, построенные на основе уравнений Навье-Стокса. В основу этих моделей входят три уравнения сохранения: сохранения массы (1), сохранения импульса (2) и сохранения энергии (3):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \cdot \vec{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot \vec{u}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \cdot \vec{u} \otimes \vec{u} + p \cdot I - \tau) = \rho \cdot \vec{g}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \cdot \left(e + \frac{1}{2} \cdot \vec{u}^2 \right) \right] + \vec{\nabla} \cdot \left[\rho \cdot u \cdot \left(h + \frac{1}{2} \cdot \vec{u}^2 \right) - \tau \cdot \vec{u} - \lambda \cdot \vec{\nabla} T \right] = \rho \cdot \vec{g} \cdot \vec{u} + \rho \cdot \dot{q}_s, \quad (3)$$

где \vec{u} - вектор скорости, \vec{g} - вектор силы тяжести, h - энтальпия, e - энергия, p - давление, \otimes - векторное произведение.

Решение вычислительной гидродинамической задачи в рамках пакета ВГАД происходит в три этапа. На первом создается геометрия, строится вычислительная сетка, задаются граничные условия (препроцессор), на втором этапе происходит решение с использованием решателя (solver'a), соответствующего конкретной решаемой проблеме, и, наконец, с помощью специальных программных инструментов - пост-процессоров, полученные результаты представляются графически и анализируются. Пакеты ANSYS CFX и FLUENT в 12 версии пакета ANSYS Multiphysics объединены общей графической оболочкой ANSYS Workbench, позволяющей строить геометрию исследуемого течения и создавать вычислительную сетку; анализ полученных результатов так же производится общей графической оболочкой пост-процессора ANSYS CFD Post, но подготовка задачи к решению (пре-процессор) и непосредственное решение задачи (solver) у пакетов разные.

Реальные задачи ВГАД представляют собой сложные задачи, требующие больших вычислительных мощностей и использования кластерных систем с числом вычислительных ядер от сотен до нескольких тысяч. При этом одной из важных проблем становится эффективность использования пакетов программ при параллельных расчетах.

Коммерческие пакеты позволяют решать параллельно большие задачи, эффективно загружая до тысячи и более вычислительных ядер. На кластере СКИФ Урал ЮУрГУ с использованием пакета ANSYS CFX 11 SP1 получено ускорение порядка 160 при работе на 290 вычисли-

тельных ядрах при решении задачи гидродинамики турбулентного тонкого слоя модельного щелевого уплотнения с вычислительной сеткой 9,8 млн. элементов [1].

Основной проблемой при параллельной работе большого количества вычислительных ядер является стоимость HPC лицензий, позволяющих работать параллельно решателям пакета на ограниченном числе вычислительных ядер. По данным компании "Делкам-Урал", официально представителя фирмы ANSYS в России, стоимость одной лицензии HPC Academic Associate (лицензия для академических организаций, дающая права на проведение коммерческих исследований), при использовании до 128 вычислительных ядер составляет 525 Евро на каждое ядро, последующие лицензии на каждое из оставшихся 1200 вычислительных ядер кластера СКИФ Урал стоят 263 Евро. Кроме того, годовая поддержка, позволяющая получать обновленные версии программного обеспечения в течение года, обойдется 105 Евро за ядро (первые 128 ядер) и 53 Евро за ядро - последующие. Таким образом, стоимость только пакета программного обеспечения ANSYS CFX с возможностью параллельной работы на всех 1328 вычислительных ядрах кластера СКИФ Урал ЮУрГУ будет стоить примерно 1,5 миллиона Евро за 10 лет эксплуатации. Эти затраты соизмеримы с затратами на приобретение самого кластера, вследствие этого, в вычислительных центрах количество лицензий параллельного счета, как правило, не превышает нескольких десятков.

Снижение стоимости параллельных вычислений может быть получено, в частности, путем использования свободно распространяемого программного обеспечения. В настоящее время существует несколько десятков специальных лицензий, позволяющих распространять программные продукты. Наиболее распространенной является лицензия GNU GPL (General Purpose License), единственным ограничением которой является необходимость обязательной ссылки на авторов. Использование программного обеспечения, распространяемого по свободным лицензиям (GPL) совместно с исходным кодом, предоставляют возможность построения пользовательских моделей, так как лицензия открывает доступ к исходному коду и не накладывает каких либо ограничений при использовании имеющихся возможностей пакета, в частности, при параллельных расчетах. Одним из самых используемых продуктов, предназначенных для решения задач ВГАД и распространяемых по лицензии GPL, является пакет OpenFOAM.

Пакет OpenFOAM

Свое название и идеологию построения пакет OpenFOAM берет от предшественника FOAM (Field Operation And Manipulation), который является закрытым и продолжает развиваться параллельно с OpenFOAM. Пакет FOAM был написан Генри Веллером, профессором Лондонского Королевского, был продан как коммерческий компании NABLA Ltd.

В 2004 году начинается история пакета OpenFOAM - в этом году пакет FOAM был выпущен под лицензией GNU GPL (лицензия свободно распространяемого программного обеспечения с открытым кодом) и переименован в OpenFOAM (Open Source Field Operation And Manipulation CFD ToolBox - свободно распространяемый инструментарий вычислительной гидродинамики для операций с полями). В настоящее время пакет OpenFOAM поддерживается и распространяется фирмами OpenCFD Ltd, Wikki Ltd, которые занимается разработкой, распространением, поддержкой и обучением пользователей [2].

Пакет OpenFOAM написан на языке C++ и использует объектно-ориентированные методы программирования. Программное обеспечение включает как готовые модули решения широкого круга задач механики сплошной среды (сжимаемые и несжимаемые среды, электромагнетизм, задачи горения в двигателях внутреннего сгорания), прочностных и экономических задачи), так и позволяет разрабатывать собственные модели и решатели под различные задачи.

В OpenFOAM используется метод конечных элементов для решения уравнений в частных производных на произвольных двумерных и трехмерных областях, описываемых как структурированной, так и неструктурированной (полиэдральной) расчетной сеткой. Кроме того, в основу пакета изначально заложена возможность параллельных вычислений методом декомпозиции расчетной области.

Верификация и сравнение OpenFOAM с коммерческими пакетами ВГАД

Сравнительный анализ сходимости и скорости решения некоторых гидродинамических задач пакетами OpenFOAM и STAR-CD проведен компанией EMCON Technologies [3], сравнение с Fluent проведено компанией ENEA [4]. Верификация пакета на задачах внешнего обтекания различных профилей, включая NASA 0012, проведена ЦАГИ [5].

Анализ возможности использования пакета OpenFOAM для проведения пространственных гидродинамических расчетов активной зоны реактора проведен в Российском Научном Центре "Курчатовский институт" [6].

В данной работе приведены результаты анализа эффективности использования пакета OpenFOAM 1.6 при решении стационарных задач гидродинамики тонкого турбулентного слоя, которые возникают при определении гидродинамических сил в щелевых уплотнениях проточной части гидромашин, торцовых уплотнений или уплотнений с плавающими кольцами. Оценка точности расчета проводилась сравнением полученных результатов с данными эксперимента [7] и результатами расчета, полученными пакетом ANSYS CFX 12.1. Отдельно проведена оценка эффективности использования OpenFOAM при параллельных расчетах на кластере СКИФ Урал при использовании более 500 вычислительных ядер.

В качестве тестовой использована задача гидродинамики тонкого турбулентного слоя, подробно описанная в работе [7], с применением классических моделей турбулентности "k-ε" и "k-ω SST". Рассматривалось установившееся течение в радиальной щели стендовой установки без перекоса, поэтому задача решалась в осесимметричной постановке с заданием граничных условий по давлению на входе и выходе щели. Вычислительная сетка строилась для одноградусного сектора, размер сетки составил 46218 узлов, 29204 элемента.

Одним из сложных этапов решения задачи является процесс создания вычислительной сетки и расчетной модели. OpenFOAM позволяет импортировать различные форматы файлов вычислительных сеток и, в частности, сетку, используемую ANSYS FLUENT и CFX, что сократило время на подготовку задачи для решения в OpenFOAM и позволило оценить скорость, сходимость и точность различных решателей на одинаковой вычислительной сетке.

При решении стационарных задач гидродинамики в OpenFOAM был использован решатель "simpleFoam", в основе которого лежит ставший классическим метод SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). Этот метод был предложен в работе Патанкара и Сполдинга [8] и подробно описан в работе Патанкара [9]. ANSYS CFX использует одинаковый решатель для нестационарных и квазистационарных задач [10], отличный от метода SIMPLE, а так же использует другую методику оценки невязок, вследствие чего оказалось невозможным сравнить пакеты по абсолютной величине невязок или по числу итераций. Для обоих пакетов использовалась версия решателя с двойной точностью (double)

Первые пробные расчеты показали двукратное отставание по абсолютной скорости расчета OpenFOAM от пакета ANSYS CFX, однако после настройки и оптимизации параметров решателя удалось существенно сблизить абсолютные скорости расчета при вполне удовлетворительной точности, получаемой пакетом OpenFOAM. Следует отметить, что время, затраченное на оптимизацию расчетной модели в OpenFOAM сопоставимо со временем оптимизации модели в ANSYS CFX при подготовке работы [7].

Наиболее сложным при расчете тонкого слоя является определение поведения потока на входе в тонкую щель, процесс формирования поля скоростей и распределение давления на начальном участке. На рис. 1 приведены характеристики падения давления по длине щели, полученные при расчете на различных моделях турбулентности для пакетов OpenFOAM и ANSYS CFX 12.1. Как видно из представленных данных, оба пакета дают близкие результаты и имеют незначительное отклонение от эксперимента. Однако можно сказать, что использование k-ε модели дает результат лучше, чем с использование модели k-ω SST.

Оценка сходимости решения задачи проводилась по величине невязки и эволюции распределения давления по длине щели. На рис. 2, 3 приведен график изменения невязок при расчете, в качестве контрольной точки были приняты 200 и 1400 итераций для ANSYS CFX и OpenFOAM соответственно. Процесс сходимости также различен: при решении задачи

OpenFOAM сходимость происходит практически линейно и это дает возможность эффективно управлять и оптимизировать процесс сходимости по ходу расчета "на лету", изменяя например коэффициенты релаксации.

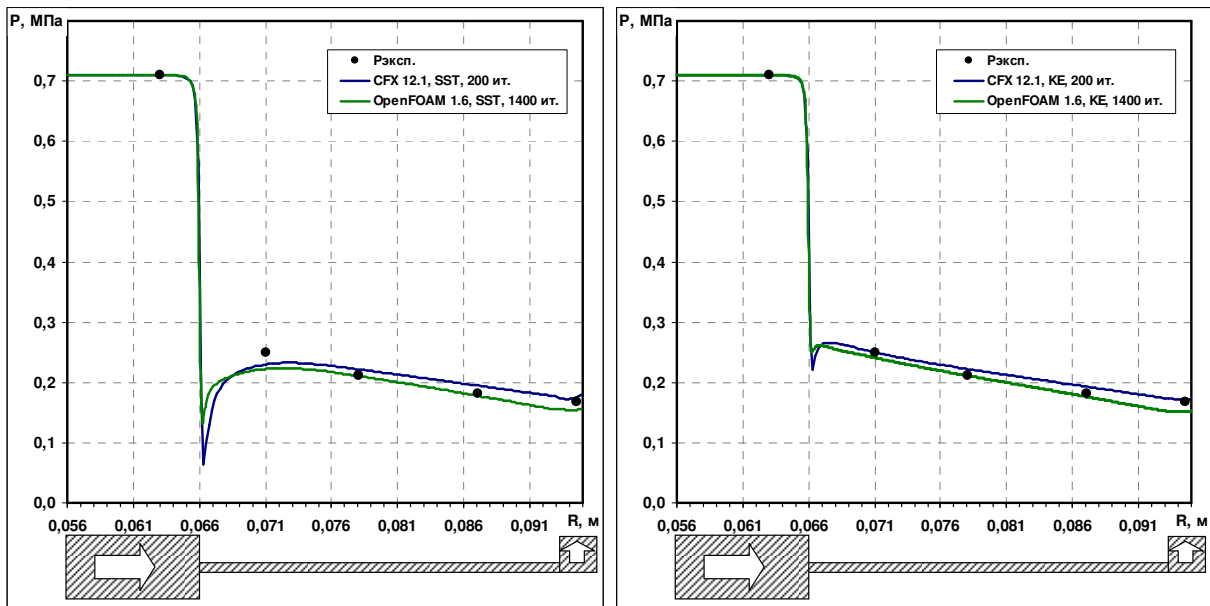


Рис. 1. Сравнение падения давления по длине щели, полученного при расчете на OpenFOAM 1.6, решатель simpleFoam, и ANSYS CFX 12.1 с данными эксперимента; модели турбулентности – $k-\omega$ SST (слева), $k-\epsilon$ (справа)

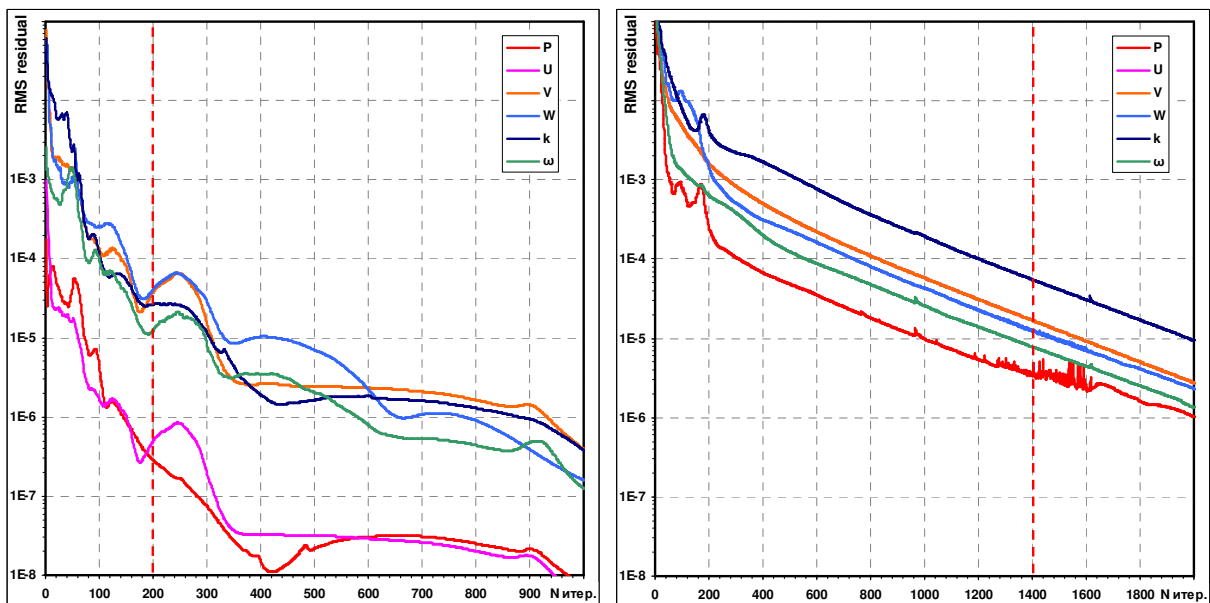


Рис. 2. График невязок по ходу расчета, модель турбулентности $k-\omega$ SST: слева - ANSYS CFX 12.1, контрольная точка – 200 итераций; справа - OpenFOAM 1.6, simpleFoam, контрольная точка – 1400 итераций

Эволюция изменения распределения давления по длине щели приведена на рис. 4, 5. Графический анализ изменения распределения давления в зависимости от числа итераций позволяет наглядно представить процесс решения и дает возможность в реальном времени управлять процессом расчета. Характер поведения решения для пакетов различен, ANSYS CFX приближается к точному решению сверху и снизу, OpenFOAM последовательно приближается к точному решению с одной стороны. Но главным является то, что оба пакета дают хорошее приближение к экспериментальным значениям и мало отличаются друг от друга.

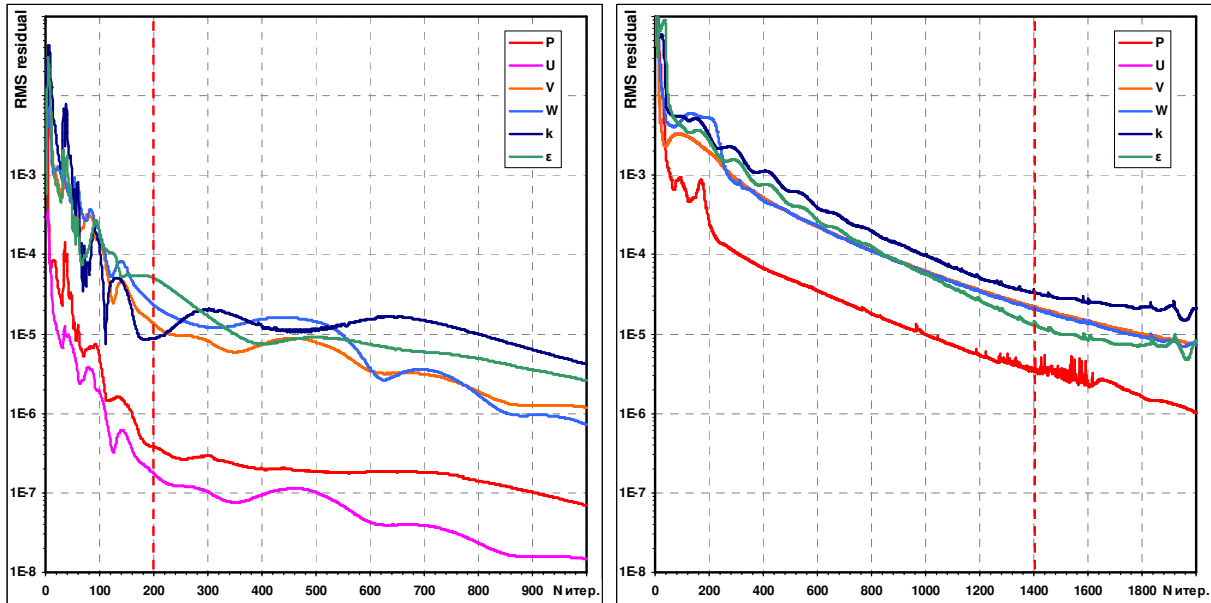


Рис. 3. График невязок по ходу расчета, модель турбулентности $k-\epsilon$: слева - ANSYS CFX 12.1, контр. точка – 200 итер.; справа - OpenFOAM 1.6 , контр. точка – 1400 итер.

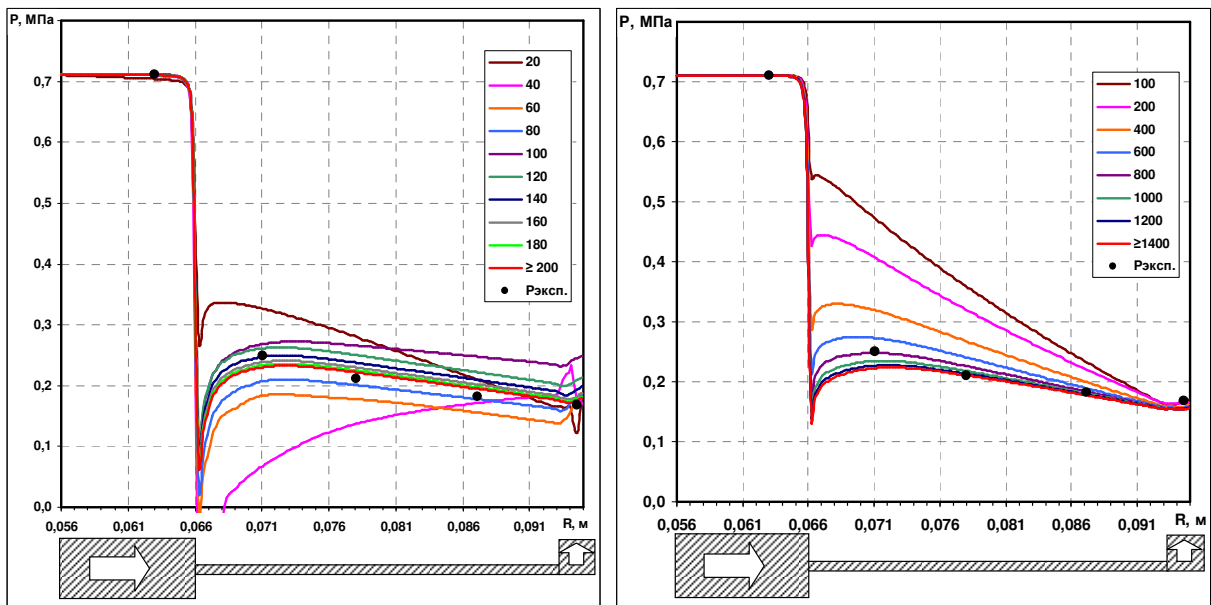


Рис. 4. Эволюция распределения давления по длине щели в ходе расчета, модель турбулент. $k-\omega$ SST: слева - ANSYS CFX 12.1, итер. с 20 по 200 и выше; справа - OpenFOAM 1.6 , итер. с 100 по 1400 и выше.

Важным вопросом является оценка абсолютных скоростей расчета одной и той же задачи различными пакетами. Такая оценка проведена на платформе SuperMicro на двухпроцессорной плате с четырех-ядерными процессорами фирмы INTEL Xeon E5520. В табл. 1 приведены данные абсолютных значений времени счета, полученные при решении задач для $k-\epsilon$ и $k-\omega$ SST моделей.

ANSYS CFX показывает существенно лучшее время счета при использовании $k-\epsilon$ модели и работе на одном вычислительном ядре. При последовательном подключении вычислительных ядер, строки таблиц соответствуют 1, 2, 4, 6 и 8 вычислительным ядрам, разница в скорости счета сокращается, поскольку масштабирование OpenFOAM существенно лучше. На модели $k-\omega$ SST разница в абсолютной скорости счета еще меньше и при загрузке всех 8 вычислительных ядер узла уже абсолютная скорость OpenFOAM становится выше скорости счета пакета ANSYS CFX. Таким образом, несмотря на большую разницу числа итераций абсолютное время счета пакетами практически одинаково.

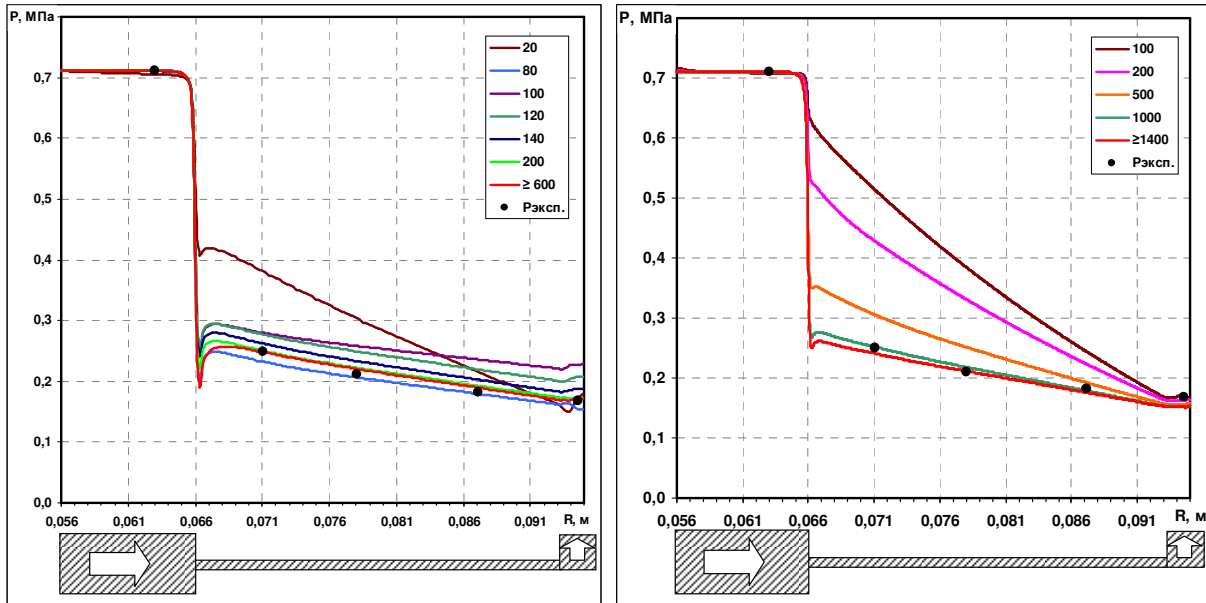


Рис. 5. Эволюция распределения давления по длине щели в ходе расчета, модель турбулент. k-ε: слева - ANSYS CFX 12.1, итер. с 20 по 200 и выше; справа - OpenFOAM 1.6, итер. с 100 по 1400 и выше.

Графическое представление масштабируемости пакетов программ внутри вычислительного узла приведено на рис. 6. Максимальное ускорение получено пакетом OpenFOAM и составляет 5,25 на 8 вычислительных ядрах при решении задачи с использованием модели k-ω SST.

Таблица 1. Производительность OpenFOAM 1.6 и ANSYS CFX 12.1

	ANSYS CFX 12.1, 200 ит.			OpenFOAM 1.6, 1400 ит.		
	t, сек	задач/час*	Ускор.	t, сек	задач/час*	Ускор.
модель k-ε						
E5520 x1	411	8,76	1,00	553	6,51	1,00
x2	220	16,36	1,87	298	12,08	1,86
x4	134	26,87	3,07	169	21,30	3,27
x6	114	31,58	3,61	138	26,09	4,01
x8	103	34,95	3,99	113	31,86	4,89
модель k-ω SST						
E5520 x1	454	7,93	1,00	535	6,73	1,00
x2	243	14,81	1,87	287	12,54	1,86
x4	148	24,32	3,07	148	24,32	3,61
x6	124	29,03	3,66	128	28,13	4,18
x8	112	32,14	4,05	102	35,29	5,25

Примечание: столбец "задач/час" отражает количество решенных задач за 1 час

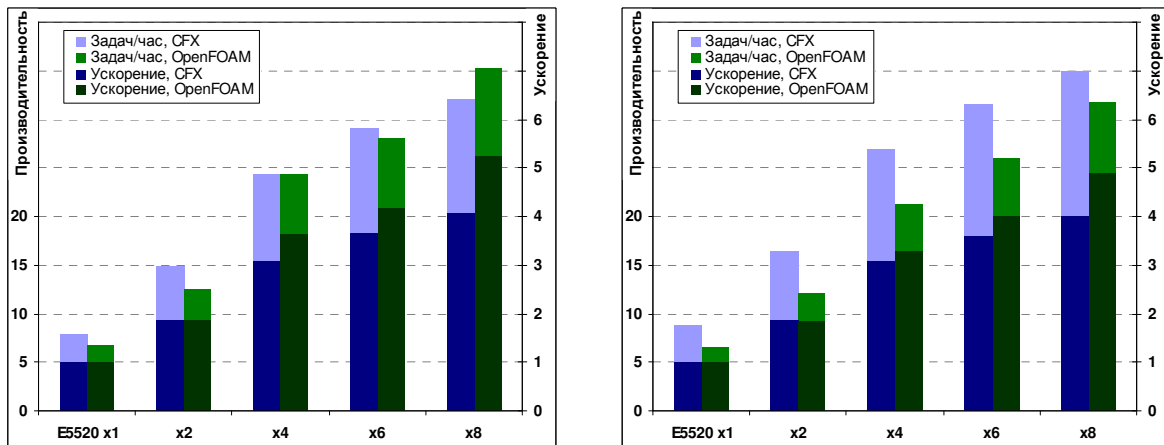


Рис. 6. Производительность ANSYS CFX 12.1 и OpenFOAM 1.6: слева - k-ω SST, справа - k-ε.

Параллельные вычисления задач механики сплошной среды

Тестирование возможностей параллельного счета на большом числе вычислительных ядер проводилось на стационарных задачах гидродинамики тонкого турбулентного слоя с различным числом элементов: малая задача – 29 тыс. элементов (осесимметричная постановка, гексаэдрические и призматические элементы, 46 тыс. узлов); средняя задача – 450 тыс. гексаэдрических элементов, плоское щелевое уплотнение; большая - 7,9 млн. гексаэдрических элементов (8,2 млн. узлов), цилиндрическое уплотнение разгрузочного устройства питательного насоса ПН-1500-350. Использовался решатель simpleFoam (версия с двойной точностью) пакета OpenFOAM 1.6.; расчеты большой задачи проводились в выделенном режиме, остальные – при совместном использовании кластера.

На рис. 7 приведены данные, полученные при решении малой задачи внутри одного узла кластера СКИФ Урал ЮУрГУ (2 x Intel Xeon X5472 3.0 ГГц, интерконнект Infiniband DDR) с использованием до 8 вычислительных ядер в сравнении с результатами, полученными при распределении решения на нескольких узлах при условии, что на каждом узле использовано не более 3 вычислительных ядер. Зеленой линией здесь и далее показано линейное ускорение.

При использовании восьми вычислительных ядер узла кластера получено ускорение, не превышающее 4, при загрузке нескольких узлов кластера с использованием до 3х ядер на узле, максимальное ускорение составило 7.

При решении средней задачи (рис. 8) удалось получить эффективное использование до 40 вычислительных ядер в параллельной работе с ускорением равным 40. В этом случае коэффициент эффективности масштабирования практически был равен 1.

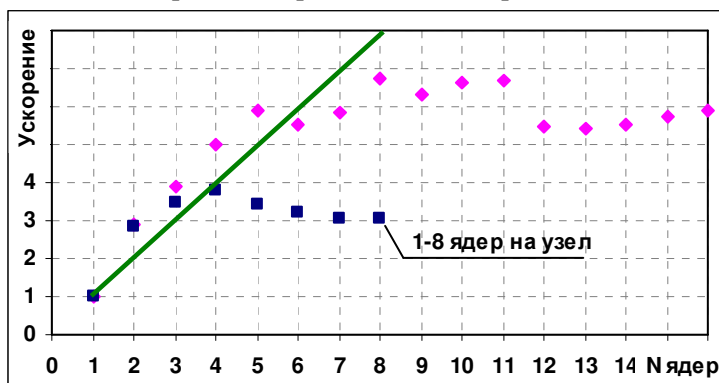


Рис. 7. Масштабирование малой задачи

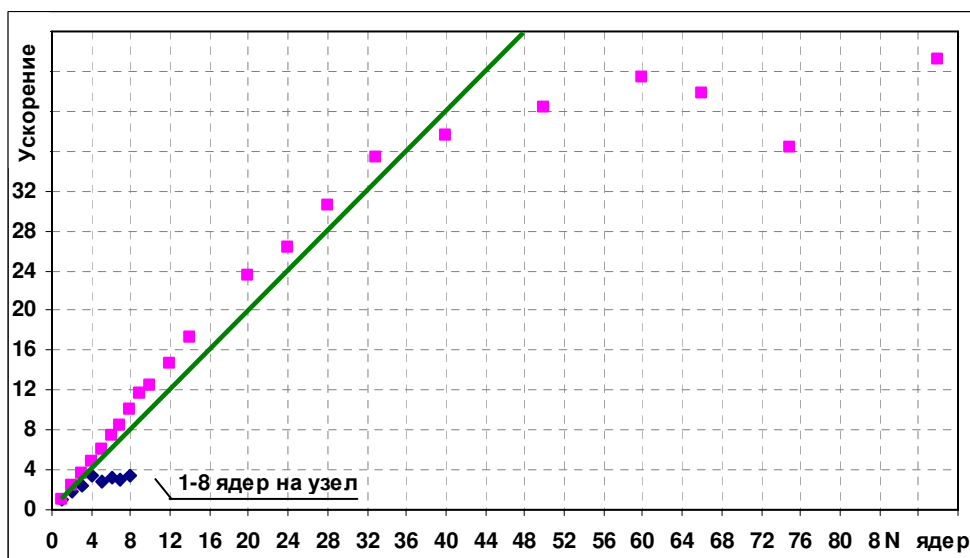


Рис. 8. Масштабирование средней задачи

Наиболее интересные результаты получены на большой задаче, где удалось эффективно загрузить 500 вычислительных ядер кластера СКИФ Урал. При этом максимальное ускорение составило более 400 (рис. 9). Сравнивая полученный результат с результатами, полученными для пакета ANSYS CFX на сходной задаче с числом элементов 9 млн. [1], можно наблюдать существенное различие в полученных ускорениях. Это можно объяснить возможным влиянием работы отдельных узлов на эффективность всей вычислительной системы при решении задач с большой загрузкой кластера. Во всяком случае, при использовании пакета OpenFOAM существенной была оптимизация загрузки и отбраковка отдельных узлов, работающих не штатно, и занижающих производительность всего расчета (рис. 9, линия "сбойный узел"). Для коммерческого пакета ANSYS CFX дополнительная проверка с оценкой влияния качества работы отдельных узлов, должна быть проведена при практически полной загрузке кластера, что требует наличия большого, порядка тысячи, количества НПС лицензий.

Полученные результаты позволяют надеяться, что при увеличении размерности задачи до 30 – 50 миллионов степеней свободы можно будет существенно увеличить число эффективно работающих вычислительных ядер. На кластере СКИФ Урал эффективная параллельная работа более чем 500 вычислительных ядер ограничена архитектурой применяемого вычислительного узла, поскольку эффективность масштабируемости задач ВГАД внутри одного узла составила порядка 50 %.

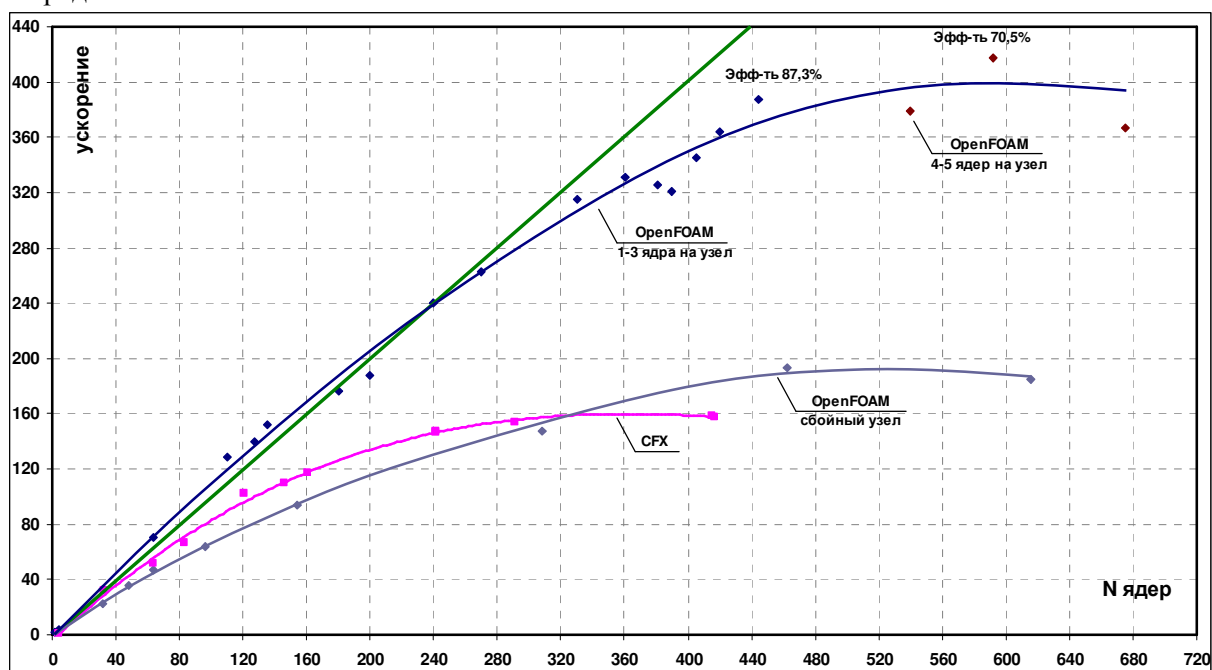


Рис. 9. Масштабирование большой задачи

Выводы

При решении задач гидродинамики тонких турбулентных слоев проточных частей мощных гидромашин может быть использован пакет OpenFOAM, распространяемый на условиях лицензии GNU GPL.

OpenFOAM позволяет проводить расчеты с точностью и временем расчета, соизмеримым с точностью и временем расчета аналогичных задач коммерческим пакетом ANSYS CFX.

OpenFOAM позволяет эффективно использовать вычислительную мощность кластера без ограничения на количество используемых ядер. На кластере ЮУрГУ СКИФ Урал при загрузке ~440 вычислительных ядер на задаче с числом элементов вычислительной сетки ~ 8 млн. получено ускорение, равное 390 (эффективность > 87%).

Отмечены проблемы эксплуатации суперкомпьютера, "не видимые" без проведения специальных диагностических проверок.

Литература

1. Васильев В.А., Ницкий А.Ю. Исследование масштабируемости задач вычислительной гидроаэродинамики на различных многоядерных и многопроцессорных архитектурах // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2010): Труды международной научной конференции (Уфа, 30 марта - 3 апреля 2010 г.)
2. Интернет-ресурс <http://www.openfoam.com/about/>.
3. OpenFOAM and STAR-CD. Integration, Interoperability and Symbiosis, Dr. Mark Olessen, EMCON Technologies// DANSIS-2007: New Trends In CFD, October 2007.
4. F. Ambrosino, S. Raia, A. Funel, S. Podda, S. Migliori. Cross checking OpenFOAM and Fluent results of CFD simulations in ENEA-GRID environment // ENEA, Dipartimento Tecnologie Fisiche e nuovi Materiali.
5. Бычков И.М. Верификация пакета прикладных программ OpenFOAM на задачах обтекания аэродинамических профилей // ЦАГИ, XIX школа-семинар "Аэродинамика Летательных Аппаратов", 2008.
6. Крапошин М.В. Использование открытого кода OpenFOAM для проведения пространственных гидродинамических расчетов активной зоны ВВРД, РИЦ "КИ" // Российский Научный Центр «Курчатовский институт».
7. Васильев В.А., Ницкий А.Ю. Практика решений задач вычислительной гидродинамики тонких турбулентных слоев в щелевых уплотнениях питательных насосов на суперкомпьютерах и в распределенных вычислительных средах // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2009): Труды международной научной конференции (Нижний Новгород, 30 марта - 3 апреля 2009 г.). Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2009. -С. 72-81
8. Patankar. S.V., Spalding D.B. Int. J. Heat Mass Transfer, 15, 1972, p. 1787-1806
9. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости // Москва: Энергоатомиздат, 150 стр.
10. Руководство пользователя ANSYS CFX V12.1: ANSYS CFX-Solver Theory Guide, Discretization and Solution Theory, Numerical Discretization.