

"Развитие новых методов эффективного численного моделирования задач аэротермодинамики". Евгений Александрович Малков, ИТПМ СО РАН, 30.12.2022

Состав коллектива

Кудрявцев Алексей Николаевич, д.ф.-м.н., с.н.с. ИТАМ СО РАН.

Малков Евгений Александрович, д.ф.-м.н., в.н.с. ИТАМ СО РАН.

Аннотация

Цель проводимых на кластере расчётов — решение задач в рамках бюджетной темы ИТПМ СО РАН «*Развитие новых методов эффективного численного моделирования задач аэротермодинамики*» (Приоритетное направление III.22 Механика жидкости, газа и плазмы, многофазных и неидеальных сред, механика горения, детонации и взрыва. III.22.5.2. Математическое моделирование в современных задачах аэротермодинамики высокоскоростного полета), и выполнение заданий гранта РФФ «*Численное исследование возникновения и развития неустойчивостей в течениях разреженных газов, проект № 18-11-00246*». Основное внимание в последние два года было уделено разработке параллельных алгоритмов полулагранжевых методов с использованием консервативной WENO схемы 5-го порядка для выполнения на GPU. На основе программной реализации этих алгоритмов проводилось компьютерное моделирование развития неустойчивости гравитирующих систем.

Все расчёты проводились на серверах HP SL390s G7 и сервере HPE Apollo 6500 Gen10 гибридной архитектуры.

Результаты расчётов представлены в двух статьях принятых к печати в журнале WoS и Scopus.

Отметим, что без использования вычислительных ресурсов ИВЦ НГУ выполнение упомянутых численных исследований было бы невозможным. Планируемые расчеты для исследования эволюции 3D-моделей гравитирующих систем на основе полулагранжевых методов могут быть проведены только с использованием гибридной вычислительной системы HPE Apollo 6500 Gen10.

Гранты

Работа поддержана грантами:

- РФФ 18-11-00246 «Численное исследование возникновения и развития неустойчивостей в течениях разреженных газов», руководитель А.Н. Кудрявцев.

- РФФ 18-11-00246-П «Численное исследование возникновения и развития неустойчивостей в течениях разреженных газов», руководитель А.Н. Кудрявцев.

Публикации

1. Malkov E.A., Kudryavtsev A.N. Numerical Solution of the Poisson Equation with Vacuum Boundary Conditions Using TPU. AIP Conference Proceedings (2022). В печати.
2. Malkov E.A., Kudryavtsev A.N. Numerical Solution of the Transport Equation for Simulating the Evolution of 2D Gravitating Systems. AIP Conference Proceedings (2022). В печати.

ОТЧЁТ

Тема работы: Развитие новых методов эффективного численного моделирования задач аэротермодинамики:

1. Численное исследование возникновения и развития неустойчивостей в течениях разреженных газов, грант РФФ - проект No 18-11-00246.
2. Численное исследование возникновения и развития неустойчивостей в течениях разреженных газов, грант РФФ - проект No 18-11-00246-П

Состав коллектива:

Кудрявцев Алексей Николаевич, д.ф.-м.н., с.н.с. ИТАМ СО РАН.

Малков Евгений Александрович, д.ф.-м.н., в.н.с. ИТАМ СО РАН.

Научное содержание работы:

1. Постановка задачи.

На основе разработанных программ, реализующих численное решение уравнений Власова-Пуассона различными методами, провести компьютерное моделирование развития неустойчивости в бесстолкновительных гравитирующих системах.

2. Современное состояние проблемы.

Необходимым условием адекватных расчетов динамики гравитирующих систем является корректное численное решение уравнения переноса, бесстолкновительного кинетического уравнения. Использование для его решения современных численных методов высокого разрешения требует больших вычислительных ресурсов. Расчеты на их основе многомерных задач стали возможны только в самое последнее время благодаря появлению мощных гибридных вычислительных систем, включающих, наряду с CPU, графические процессоры общего назначения, GP GPU. Важным направлением в численном моделировании динамики гравитирующих систем является разработка

параллельных алгоритмов численных схем высокого разрешения уравнений переноса и их программная реализация.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Выбор численной схемы для решения уравнения Власова на основе сравнения расчетов с аналитическим решением.

Один из недостатков моделей бесконечно тонких дисков в численных исследованиях спиральных галактик заключается в том, что в рамках этой модели можно рассматривать только моды колебаний в плоскости диска. Это рассмотрение корректно при линейном анализе устойчивости, когда поведение мод независимое. Однако, при численных расчетах, когда колебания имеют конечную амплитуду и происходит взаимодействие отдельных мод колебаний - в плоскости диска и перпендикулярно диску, необходимо использовать модель диска конечной толщины, чтобы получить адекватные реальности результаты. На это, в частности, указывалось в работе [1] для мотивировки исследований устойчивости эллиптических дисков по отношению к изгибным колебаниям. Моделями дисков конечной толщины могут служить сильно сжатые эллипсоиды.

При численном моделировании эволюции дисков конечной толщины возникают две проблемы, связанные с адаптацией коды для трехмерных расчетов. В принципе код программы изначально включал возможность выбора размерности задачи. Однако, сложность заключалась в том, что размерность вычислительной сетки в 6-мерном фазовом пространстве ограничивается вычислительными ресурсами, даже современных гибридных кластеров. При малой размерности вычислительной сетки возникают дополнительные требования к дискретной аппроксимации уравнений Власова-Пуассона и начальной функции распределения. В связи с этим была проведена трудоемкая работа по выбору численной схемы.

Оценка схема проводилась на основании сравнения расчетов с точным решением уравнения Власова

$$f = \frac{\sigma_0}{2\pi \sqrt{\alpha^2 - \gamma^2}} \frac{1}{\sqrt{J}}, \quad (1)$$

где

$$J = (\alpha^2 - \gamma^2) \left(1 - \frac{x^2 + y^2}{a^2}\right) - a^2 \left[\left(u_x - \frac{\dot{a}}{a}x + \frac{\gamma y}{a^2}\right)^2 + \left(u_y - \frac{\dot{a}}{a}y - \frac{\gamma x}{a^2}\right)^2 \right], \quad (2)$$

$$\ddot{a} = \frac{\alpha^2}{a^3} + A(t)a. \quad (3)$$

является неконсервативным первым интегралом этого уравнения, здесь $A(t)$ - произвольная функция времени, описывающая изменение внешнего гравитационного поля с квадратичным потенциалом. α, γ - некоторые константы, подчиняющиеся очевидному соотношению $\gamma^2 < \alpha^2$. По ходу расчетов проводились вычисления инвариантов Антонова [2], являющиеся коэффициентами K_0, K_2 многочлена относительно λ -

$$\begin{vmatrix} \overline{x^2} & \overline{xy} & \overline{xu_x} - \lambda & \overline{xu_y} \\ \overline{x^2} & \overline{xy} & \overline{xu_x} & \overline{xu_y} - \lambda \\ \overline{x^2} + \lambda & \overline{xy} & \overline{xu_x} & \overline{xu_y} \\ \overline{x^2} & \overline{xy} + \lambda & \overline{xu_x} & \overline{xu_y} \end{vmatrix} = 0. \quad (4)$$

$$\lambda^4 + K_2 \lambda^2 + K_0 = 0. \quad (5)$$

Инвариант K_0 выражает сохранение фазового объема, что согласуется с теоремой Лиувилля. Его изменение характеризует диссипативность численной схемы. Коэффициент K_2 в нашем случае выражает сохранение циркуляции.

Вычисление моментов функции распределения сопряжено с большими вычислительными затратами. Поэтому программный код для численных экспериментов разрабатывался для выполнения на графических картах поколения не ниже Volta, на которых есть, так называемые, Tensor Processing Units (TPU) - специализированные процессоры с аппаратной реализацией алгоритмов линейной алгебры. TPU были разработаны компанией Google и предназначены в первую очередь для решения задач глубокого машинного обучения (deep learning tasks), основанного на построении artificial neural networks (ANN). В алгоритмах ANN применяется операция свёртки и именно её аппаратная реализация на TPU используется для вычислений в других предметных областях. Вычисления на TPU поддерживаются математическими библиотеками TensorFlow [3] компании Google с открытым кодом, а также библиотеками cuBLAS [4] и cuTensor [5] компании NVIDIA.

Результаты сравнения полулагранжевых схем, WENO схемы пятого порядка аппроксимации и upwind схемы того же порядка показаны на рисунках 1-2 (слева результаты расчётов с использованием WENO схемы, справа - upwind).

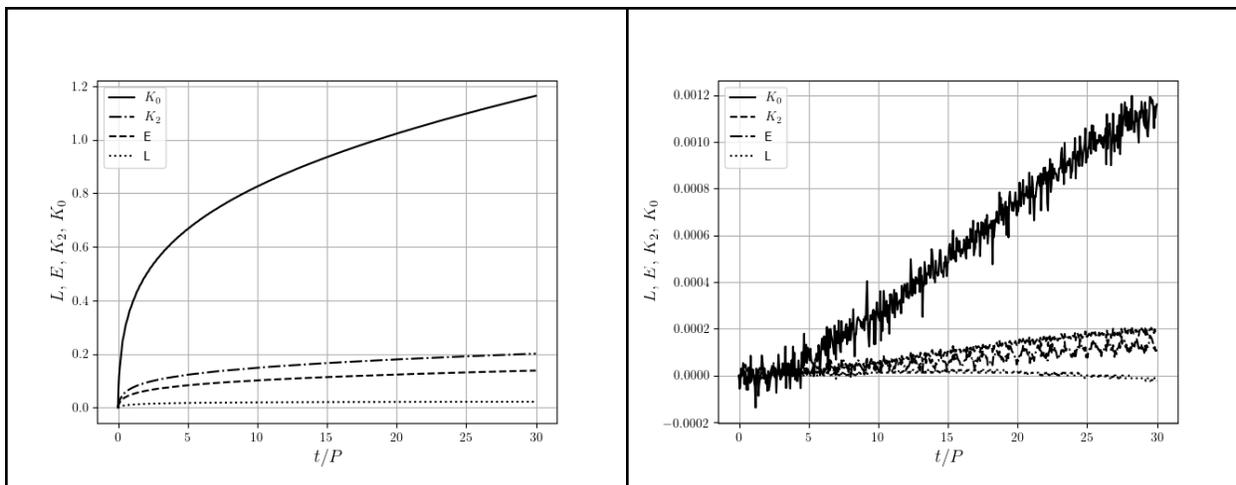


Рис. 1 - Изменение углового момента L , энергии E и инвариантов K_0 и K_2 .

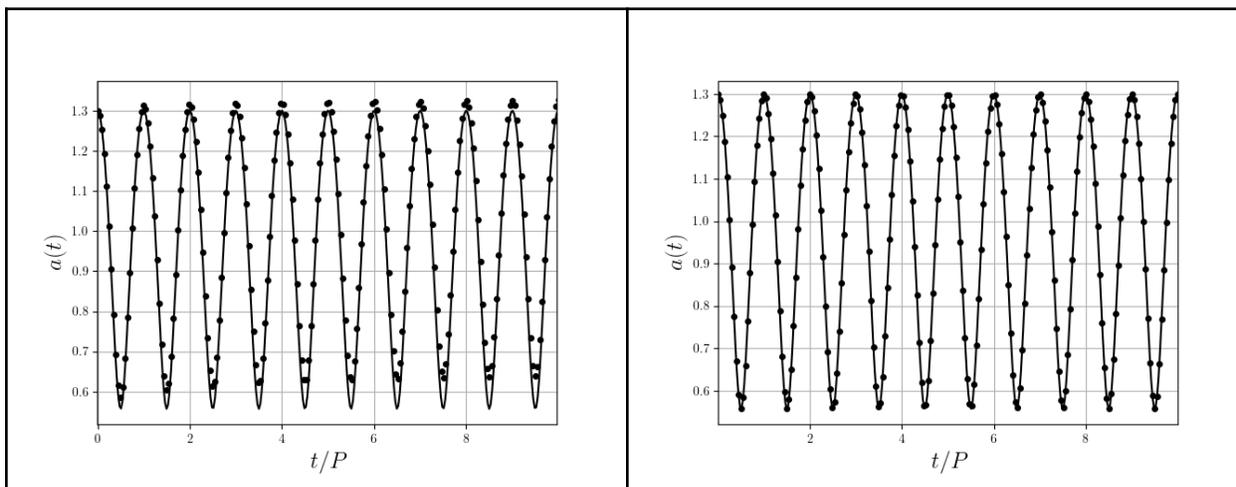


Рис. 2 - Сравнение расчетных пульсаций модели с точным решением.

Численные расчеты, проведенные с `upwind` схемой, с высокой точностью совпадают с теоретическими расчетами. Тогда, как `WENO` схема приводит к неадекватному результату.

Вторая проблема адаптации кода к 6-мерному фазовому пространству связана с выбором точного нестационарного решения уравнений Власова-Пуассона для сравнения с результатами численных расчетов, в соответствии с нашим подходом к валидации кода, и его инициализацией. Такое решение было получено на основании метода, изложенного в статье [6]:

$$f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \frac{\rho_0}{\pi a_1^2} \left[\beta_+ \delta \left(v_1 - \frac{\dot{a}_1}{a_1} x_1 - \frac{\alpha_1}{a_1^2} x_2 \right) \delta \left(v_2 - \frac{\dot{a}_1}{a_1} x_2 + \frac{\alpha_1}{a_1^2} x_1 \right) + \right. \\ \left. \beta_- \delta \left(v_1 - \frac{\dot{a}_1}{a_1} x_1 + \frac{\alpha_1}{a_1^2} x_2 \right) \delta \left(v_2 - \frac{\dot{a}_1}{a_1} x_2 - \frac{\alpha_1}{a_1^2} x_1 \right) \right] \times \\ \left[\alpha_3^2 \left(1 - \frac{x_1^2 + x_2^2}{a_1^2} - \frac{x_3^2}{a_3^2} \right) - a_3^2 \left(v_3 - \frac{\dot{a}_3}{a_3} x_3 \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (6)$$

Эта модель представляет твердотельно вращающийся с угловой скоростью

$$\Omega(t) = \frac{\alpha_1(\beta_+ - \beta_-)}{a_1^2(t)} \quad (7)$$

эллипсоид вращения однородной пространственной плотности

$$\rho(t) = \frac{\rho_0}{a_1^2(t)a_3(t)} \quad (8)$$

Пульсации эллипсоида описываются уравнениями для его полуосей:

$$\ddot{a}_1 = \frac{\alpha_1^2}{a_1^3} + \pi G \rho_0 \frac{\partial \Phi}{\partial a_1}, \quad (9)$$

$$\ddot{a}_3 = \frac{\alpha_3^2}{a_3^3} + \pi G \rho_0 \frac{\partial \Phi}{\partial a_3} \quad (10)$$

где

$$\Phi(a_1, a_3) = \int_0^\infty \frac{ds}{(a_1^2 + s)\sqrt{a_3^2 + s}} \quad (11)$$

Это решение является нестационарным обобщением решений Фримана [7] и Бисноватого-Когана Г.С., Зельдовича Я.Б. [8]

Используя уравнения (9)-(11) можно записать квадрат угловой скорости для стационарного эллипсоида:

$$\Omega^2 = 2\pi G \rho \frac{\sqrt{1-e^2}}{e^2} \left(\frac{\arcsin e}{e} - \sqrt{1-e^2} \right). \quad (8)$$

Из уравнения (10) находим значение α_3^2 :

$$\alpha_3^2 = 2\pi G\rho a_3^4 \frac{\sqrt{1-e^2}}{e^2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-e^2}} - \frac{\arcsin e}{e} \right) \quad (9)$$

Процедуру дискретной аппроксимации стационарной модели без потери общности поясним, используя упрощенный фрагмент кода. Инициализируется эллипсоид с конкретными геометрическими и динамическими параметрами. Алгоритмы распараллеливаются на графическом процессоре с использованием библиотеки cuRand. На рисунке 3 представлены результаты дискретной аппроксимации.

```
#include <cuda.h> //процесс инициализации функции распределения
//распараллеливается на GPU с использованием интерфейса CUDA
#include <stdio.h>
#include <curand_kernel.h> //для генерации псевдослучайных чисел используется
#include <curand.h> //библиотека cuRand
#define R 1.0
#define G 1.0
#define rho 1.0
#define c 0.2
#define beta 4
struct point{
float x,y,z;
float vx,vy,vz;
};
////////// для генерации координат в фазовом пространстве применяется метод обращения и формулы (8) и (9) //////////
__global__ void glnitPoints(point* p, curandState *states){
int id=threadIdx.x + blockIdx.x*blockDim.x;
int seed = id;
////////// генерируются координаты точек, однородно заполняющих сферу с радиусом R //////////
curand_init(seed, id, 0, &states[id]);
float r=R*curand_uniform(&states[id]);
r=powf(r, 1.0/3.0);

seed=id + blockDim.x*gridDim.x; //смещение на blockDim.x*gridDim.x для генерации новой
curand_init(seed, id, blockDim.x*gridDim.x, &states[id]); //последовательности псевдослучайных чисел
float phi=2.0*PI*curand_uniform(&states[id]);

seed=id + 2*blockDim.x*gridDim.x;
curand_init(seed, id, 2*blockDim.x*gridDim.x, &states[id]);
float cospsi=-1.0+2.0*curand_uniform(&states[id]);

p[id].x=r*sqrtf(1.0-cospsi*cospsi)*cosf(phi);
p[id].y=r*sqrtf(1.0-cospsi*cospsi)*sinf(phi);
p[id].z=r*cospsi;
////////// однородное сжатие сферы вдоль оси z с сохранением плотности и массы //////////
float a=sqrtf(R*R*c);
p[id].x=p[id].x*a/R;
p[id].y=p[id].y*a/R;
p[id].z=p[id].z*c/R;
////////// генерируются координаты точек в скоростном пространстве //////////
float e=sqrtf(1.0 - c*c/a/a);
float Om = 2.0*PI*G*rho*sqrtf(1.0 - e*e)*( asinf(e)/e - sqrtf(1.0 - e*e) )/e/e;
Om=sqrtf(Om);
float om=(float)( id < blockDim.x*gridDim.x/beta) - (id >= blockDim.x*gridDim.x/beta) )*Om;

p[id].vx=om*p[id].y;
p[id].vy=-om*p[id].x;

seed+=blockDim.x*gridDim.x;
curand_init(seed, id, 3*blockDim.x*gridDim.x, &states[id]);
float pz=-PI/2.0+PI*curand_uniform(&states[id]);

float alpha3_2=2.0*PI*G*rho*powf(c,4)*sqrtf(1.0 - e*e)*(1.0/sqrtf(1.0 - e*e) - asinf(e)/e )/e/e;
```

```

float eps = alpha3_2*(1.0-( p[id].x*p[id].x + p[id].y*p[id].y)/a/a - p[id].z*p[id].z/c/c);
eps=sqrtf(eps);
p[id].vz=eps*sinf(pz)/c;
}

```

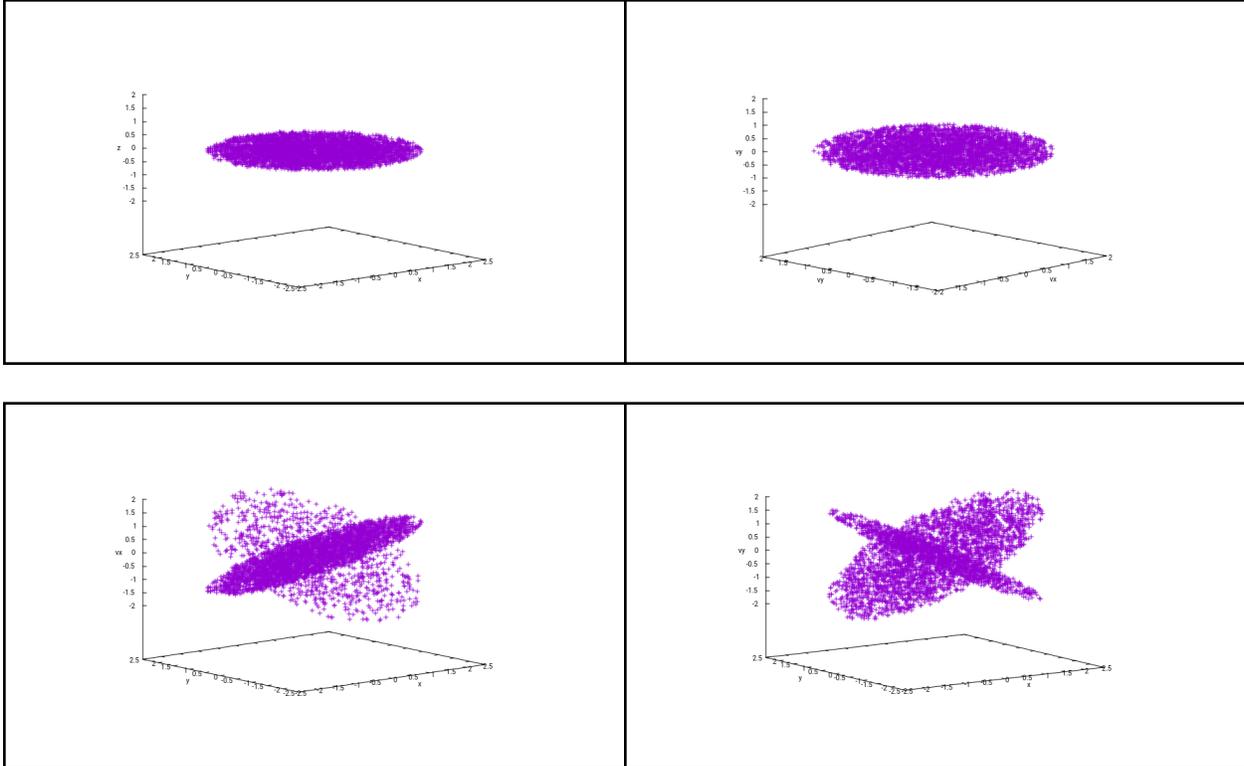


Рис. 3 - Проекция шестимерного фазового пространства с фазовой плотностью, соответствующей обобщенной модели Фримана - Зельдовича - Бисноватого-Когана.

Полученная аппроксимация функции распределения подходит непосредственно для бессеточного метода прямого моделирования системы n тел и для методов частиц-в-ячейках. В методах частиц-в-ячейках необходимо проводить дополнительно интерполяцию в узлы расчетной сетки в физическом пространстве. В полулагранжевых методах требуется провести интерполяцию в узлы фазового пространства. В проекте принимается интерполяция, предложенная в работе [9].

4. Результаты.

На основе инвариантов фазовых потоков разработан критерий для оценки вычислительных схем для решения бесстолкновительного кинетического уравнения - уравнения Власова.

Выполнено численное решение уравнения Власова с использованием схем пятого порядка аппроксимации - WENO схемы и `upwind` схемы. Показано преимущество линейной схемы `upwind` по сравнению со схемой сквозного счета - WENO схемой, для решения уравнения Власова.

Детально изучено точное решение уравнения Власова, представляющее вращающийся и пульсирующий эллипсоид, нестационарное обобщение решения Фримана - Зельдовича - Бисноватого-Когана.

Разработан и реализован алгоритм дискретной аппроксимации этого решения.

5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Полученные результаты были получены за приемлемое время исключительно за счёт использования тензорных ядер GPU архитектуры Volta.

6. Перечень публикаций, содержащих результаты работы.

Malkov E.A., Kudryavtsev A.N. Numerical Solution of the Poisson Equation with Vacuum Boundary Conditions Using TPU. AIP Conference Proceedings (2022). В печати.

Malkov E.A., Kudryavtsev A.N. Numerical Solution of the Transport Equation for Simulating the Evolution of 2D Gravitating Systems. AIP Conference Proceedings (2022). В печати.

Литература

1. Malkov E.A. Sov. Astron. Vol. 33, 1989, pp. 614-618.
2. Antonov V.A. Vestnik LGU. Vol. 13, 1965, pp. 136-148.
3. <https://www.tensorflow.org/overview/>
4. <https://docs.nvidia.com/cuda/cublas/>
5. <https://docs.nvidia.com/cuda/cutensor/>
6. Malkov E.A., Nuzhnova T.N. Astronomical and Astrophysical Transactions. Vol. 22(2), 2003, pp. 237–244.
7. Freeman K.C. MNRAS. Vol. 134, 1966, p. 1.
8. Бисноватый-Коган Г.С., Зельдович Я.Б. Астрофизика. Vol. 5(3), 1969, p. 425.
9. Малков Е.А., Иванов М.С. Вычислительные методы и программирование. Т. 12, 2011, сс. 368-374.