



Учебная программа трека «Возможности открытых пакетов для решения задач МСС»

Читаемый на Летней Суперкомпьютерной Академии МГУ трек нацелен на получение знаний в области решения задач механики сплошной среды (МСС) с использованием свободного программного обеспечения и суперкомпьютерных технологий. Трек включает в себя базовые и тематические лекции, а также практические занятия.

Слушателям будет рассказано о возможностях открытых пакетов Salome/OpenFOAM/Paraview для решения задач МСС. Особое внимание будет уделено возможностям создания собственного решателя на базе открытого пакета OpenFOAM, решению практических задач с использованием пакетов Salome/OpenFOAM/Paraview с применением ресурсов вычислительного кластера web-лаборатории UniHUB ИСП РАН.

Занятия трека проходят в НОЦ «Суперкомпьютерные технологии» МГУ имени М.В. Ломоносова в ауд. 230/1. В программе трека возможны изменения.

Пререквизиты: знания в области механики сплошной среды (гидродинамика, аэродинамика, многофазные среды и турбулентные течения, гидроупругость, теория горения), уравнения в частных производных, численные методы решения СЛАУ, методы построения расчетных сеток, основы программирования на C++, ОС Linux.

Лекторы и организаторы учебного трека



Аветисян Арутюн Ишханович, ИСП РАН, директор, д.ф.-м.н., профессор РАН

Научные интересы: анализ и оптимизация программ, безопасность программного обеспечения, технологии параллельных и распределенных вычислений

e-mail: arut@ispras.ru



Крапошин Матвей Викторович, ИСП РАН, к.ф.-м.н., с.н.с.

Научные интересы: механика сплошной среды, вычислительная гидродинамика, численные методы, параллельное программирование

e-mail: m.kraposhin@ispras.ru



Стрижак Сергей Владимирович, НРЕ Россия, к.т.н.,
Руководитель проектов.

e-mail: strijhak@yandex.ru

Научные интересы: гидроаэродинамика, вычислительная аэроакустика, модели турбулентности и горения, ветроэнергетика, суперкомпьютеры и системы хранения данных, методы обработки больших данных



Ткаченко Игорь Вячеславович, СПбГМГТУ, кафедра «Гидроаэромеханика и морская акустика», д.т.н., профессор РАН

Научные интересы: гидродинамика корабля, моделирование гидрофизических полей морской среды, численные методы, программное обеспечение на основе технологии параллельных вычислений

e-mail: igor.v.tkachenko@mail.ru



Щеглов Георгий Александрович, МГТУ им. Н.Э. Баумана, кафедра «Аэрокосмические системы», д.т.н., профессор

Научные интересы: вихревые методы в вычислительной гидродинамике, компьютерное проектирование и моделирование аэрокосмических систем, динамика конструкций

e-mail: h15r@yandex.ru



Сибгатуллин Ильяс Наилевич, к.ф.-м.н., доцент механико-математического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: ilias.sibgat@gmail.com

Научные интересы: вычислительная гидродинамика, динамические системы, турбулентность, конвекция, внутренние волны, физика атмосферы и океана

ПРОГРАММА УЧЕБНОГО ТРЕКА

Время	Блок	Ведущий	Содержание
26.06	2017	Понедельник	День 1
10:50-11:10	Введение	Стрижак С.В.	ИСП РАН. Программа «Университетский кластер». Облачные вычисления. Web-лаборатория UniHUB. Аппаратные и программные ресурсы.
11:10-12:10	Лекция 1 Обзор открытых пакетов для решения задач МСС	Стрижак С.В.	Рассматриваются различные подходы для решения задач МСС (механика сплошной среды). Проводится сравнение возможностей коммерческих и открытых пакетов. На примере ОС CAE Linux проводится обзор открытых пакетов для решения задач МСС. CAE Linux построена на базе Linux Ubuntu. Предназначена для научных расчетов и математического моделирования с использованием МКЭ и МКО для задач гидродинамики и прочности. Проводится краткий обзор пакетов Salome, Elmer, Code-Saturne, Code-Aster, FDS, OpenFOAM, Nek5000, Paraview. Приводятся примеры решения академических и промышленных задач, в том числе с использованием суперкомпьютерных технологий.
12:10-12:20	Перерыв		
12:20-13:00	Лекция 2 Возможности web-лаборатории UniHUB	Стрижак С.В.	Созданная технологическая платформа UniHUB (www.unihub.ru) объединяет в концепции ‘облачных’ вычислений такие возможности, как доступ к ресурсам (высокопроизводительные системы, хранилища данных, центры компетенции), передача знаний (лекции, семинары, лабораторные работы) и механизмы, поддерживающие деятельность сообщества профессионалов. В частности, платформа позволяет создать предметно-ориентированные Web-лаборатории. Системный программный стек платформы включает себя Linux/Debian, Joomla, PHP, MySQL, OpenVNZ, OpenPBS, Globus Toolkit. Новая версия UniHUB 2.0 реализована с помощью ПО OpenStack. В рамках программы «Университетский кластер» ведутся работы, целью которых является интеграция в вычислительную инфраструктуру свободных прикладных пакетов: SALOME, OpenFOAM, ParaView. Рассказывается о возможностях работы с планировщиком задач OpenPBS на вычислительном кластере.
13:00-13:40	Лекция 3 Основные уравнения гидродинамики, метод контрольного объема и пакет OpenFOAM	Сибгатуллин И.Н.	OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) – это набор средств языка программирования C++ для настройки и расширения численных решателей для задач механики сплошной среды, включая вычислительную гидродинамику. Он поставляется с растущим набором написанных решателей, применимых к широкому кругу задач. Проводится сравнение двух различных направлений (основная и расширенная версии) в развитии пакета OpenFOAM. Численная методика, заложенная

			в коде, основывается на методе контрольного объема для неструктурированных сеток. Пакет представляет собой отдельные самостоятельные модули. Рассматривается структура каталогов. Обсуждаются особенности построения расчетного примера, различные расчетные схемы и граничные условия. Проводится классификация решателей и утилит.
13:40-15:00	Перерыв на обед		
15:00-15:40	Лабораторная 1 Работа в OpenFOAM	Крапошин М.В. Сибгатуллин И.Н.	Демонстрация подготовки и запуска на счет тестового примера в OpenFOAM. Переключение между различными версиями OpenFOAM на кластере UniHUB. Настройка окружения в .bashrc. В рамках данной лабораторной работы рассматривается течение в каверне с подвижной крышкой. Исследуется плоское течение несжимаемой ньютоновской жидкости при числах Рейнольдса, соответствующих ламинарному и переходному режимам (100 и 1000 соответственно). Расчет проводится с помощью решателя isoFoam. Обсуждаются особенности подготовки расчетного примера, подготовки расчетной сетки с помощью утилиты blockMesh. Исходными данными являются скорость движения крышки и давление. В результате расчета можно получить распределение давления, поле скорости, построить линии тока.
15:40-16:20	Расчет течения в каверне		
16:20-16:30	Перерыв		
16:30-17:00	Лабораторная 2 Расчет обтекания обратного уступа	Крапошин М.В. Сибгатуллин И.Н.	В работе рассматривалась задача о моделировании течения для случая обтекания обратного уступа дозвуковым потоком несжимаемого газа. Уравнения для связи скорости и давления решаются итерационным алгоритмом SIMPLE (решатель simpleFoam). В результате расчета могут быть получены значения компонент скорости, давления, подсеточной кинетической энергии, пульсационные составляющие, спектральные характеристики пульсации давления. С помощью решателя pisoFoam и подхода LES проводится расчет нестационарного режима течения. Визуализация проводится с помощью пакета Paraview.
17:00-17:30	Лабораторная 3 Работа на суперкомпьютере «Ломоносов» Основные возможности	Сибгатуллин И.Н. Крапошин М.В.	Знакомство с возможностями работы на суперкомпьютере «Ломоносов». Основные возможности планировщика задач SLURM. Особенности настройки и работа с открытым пакетом OpenFOAM.
17:30-	Лабораторная 4		Рассматривается течение сжимаемой среды (воздух) с дозвуковыми скоростями под

18:00	Моделирование свободной конвекции в комнате с подогревом	Крапошин М.В. Сибгатуллин И.Н.	воздействием архимедовой силы в кубическом замкнутом объеме. Подъемная сила возникает в результате нагрева среды в некоторой области нижней стенки. Входными параметрами являются температура нагреваемого тела, модель турбулентности, скорость и давление в набегающем потоке. Обсуждаются особенности задания граничного условия для температуры. Для расчета используется решатель <code>buoyantPimpleFoam</code> .
18:00	Окончание дня 1		
27.06	2017	Вторник	День 2
10:50- 11:30	Лекция 4 Программирование в OpenFOAM	Крапошин М.В.	Рассматривается архитектура пакета OpenFOAM с точки зрения исходного кода. Проводится обзор основных возможностей языка программирования C++. Использование технологий C++ (инкапсуляция, наследование, полиморфизм) в OpenFOAM. Особенности сборки исходного кода. Уровни абстракции в OpenFOAM. Основные классы в OpenFOAM (<code>polyMesh</code> , <code>fvMesh</code> , <code>Time</code> , <code>Field</code> , <code>fvPatchField</code> , <code>lduMatrix</code> , <code>fvMatrix</code> , <code>fvcs</code> , <code>fvcm</code>). Примитивы системного уровня. Представление полей в OpenFOAM. Представление разреженных матриц. Дискретизация слагаемых в уравнениях. Особенности реализации кода (<code>Code styling</code>). Создание собственного решателя. Особенности реализации класса <code>Pstream</code> для параллельных вычислений в OpenFOAM.
11:30- 12:10	Лабораторная 5 Создание собственного решателя в OpenFOAM	Крапошин М.В. Корчагова В.Н.	Рассматриваются уравнения эллиптического, гиперболического, параболического типа. Приводятся примеры построения решателей (<code>elliFoam</code> , <code>hyper1Foam</code> , <code>hyper2Foam</code> , <code>parabFoam</code>), процедура компиляции исходного кода. Проводится расчет тестовых примеров.
12:10- 12:20	Перерыв		
12:20- 13:40	Лабораторная 6 Создание собственного решателя в OpenFOAM	Крапошин М.В. Корчагова В.Н.	Рассматривается добавление уравнения для переноса скалярной величины в стандартный решатель <code>icoFoam</code>
13:40- 15:00	Перерыв на обед		
15:00- 16:20	Лекция 5 Возможности открытых пакетов Salome и Paraview	Крапошин М.В.	История создания пакетов. Рассматривается платформа SALOME (создание геометрии и расчетной сетки) и пакет Paraview (визуализация результатов расчетов). Рассматривается применение пакета Paraview для визуализации данных, а также

			основные операции, связанные с анализом полученных в результате расчетов полей.
16:20-16:30	Перерыв		
17:20-18:00	Лабораторная 7 Расчет тестовой задачи с использованием Salome/OpenFOAM/Paraview	Калиш С.А. Крапошин М.В.	Подготовка простейшей геометрии (цилиндр, сфера, канал) в пакете Salome. Задание граничных поверхностей. Построение расчетной сетки в Salome с использованием тетраэдров и гексаэдров. Сохранение данных и конвертация сетки в формат OpenFOAM. Подготовка расчетного примера. Расчет обтекания цилиндра и сферы внешним потоком. Расчет трансзвукового течения в канале. Варьирование исходных данных. Обработка и анализ результатов.
18:00	Окончание дня 2		
28.06	2017	Среда	День 3
10:50-11:30	Лекция 6 Использование CFD-технологий и пакета OpenFOAM в задачах корабельной гидродинамики.	Ткаченко И.В.	Проводится обзор задач корабельной гидродинамики (внутренняя и внешняя задача корабельной гидродинамики, течения со свободной поверхностью, динамики морских объектов, гидродинамика морской среды). Особенности протекания гидродинамических процессов в приложениях корабельной гидродинамики (высокие числа Рейнольдса, наличие жидких границ). Особенности постановки внутренней и внешней задач корабельной гидродинамики и методы их решения. Моделирование динамики и гидродинамики судна (6DOF+CFD). Рассматриваются примеры моделирования задач корабельной гидродинамики в пакете OpenFOAM.
11:30-12:00	Лабораторная 8 Особенности постановки задачи качки судов	Тряскин Н.В. Ткаченко И.В.	Импорт расчетной сетки в OpenFOAM. Выбор модели турбулентности, установка начальных и граничных условий, настройка параметров расчета. Моделирование обтекания судна в однородном потоке жидкости с помощью решателя waveFoam.
12:00-12:10	Перерыв		
12:10-13:40	Лабораторная 9 Особенности построения сеток для судов в snappyHexMesh	Тряскин Н.В.	Коррекция исходной геометрии судна и подготовка файла геометрии судна в формате STL. Создание «фоновой» сетки, определяющей расчетную область и базовый уровень плотности сетки, создание адаптированной сетки средствами утилиты snappyHexMesh. Практика проводится на примерах твердотельных моделей судна.
13:40-15:00	Перерыв на обед		
15:10-16:20	Лабораторная 10 Моделирование качки судов	Тряскин Н.В.	Практика проводится на примерах твердотельных моделей судна. Обработка и визуализация результатов расчета. Расчет, отладка и анализ результатов в Paraview.

16:20-16:30	Перерыв		
16:30-18:00	Лабораторная 11 Расчет тестовой задачи с использованием Salome/OpenFOAM/Paraview	Тагиров А.М., Крапошин М.В.	Продолжение лабораторной работы №7.
18:00	Окончание дня 3		
29.06	2017	Четверг	День 4
10:50-11:30	Лекция 7 Решение задач вычислительной аэроакустики с помощью открытого ПО	Корчагова В.Н.	Обзор методов вычислительной аэроакустики, реализованных в OpenFOAM v. 4.1 в рамках библиотеки libAcoustics: акустической аналогии Керла, акустической аналогии Фокса-Вильямса - Хоукинга, расчета акустических волн в дальнем поле методом граничных элементов (с использованием стороннего открытого программного пакета ВЕМ++). Обсуждение деталей реализации.
11:30-12:40	Лабораторная 12 Расчет акустического поля методами библиотеки libAcoustics	Корчагова В.Н. Тагиров А.М. Крапошин М.В.	Расчет акустического поля пульсирующей сферы и колеблющейся сферы с помощью методов, реализованных в библиотеке libAcoustics.
12:40-12:50	Перерыв		
12:50-13:50	Лекция 8 Прикладные задачи аэродинамики	Стрижак С.В.	Рассматриваются возможности пакета OpenFOAM для решения задач аэродинамики. В пакете существуют различные решатели: simpleFoam, pisoFoam, rhoSimpleFoam, rhoPisoFoam, MRFsimpleFoam, sonicFoam, rhoCentralFoam, dbnsFoam. Обсуждается решатель, основанный на годовновских схемах: flux vector splitting (HLLC и производные), flux difference splitting (ROE), схемы AUSM и Rusanov, доступные ограничители (SlopeLimiter). Обсуждаются особенности выбора расчетных схем и

			граничных условий. Возможности для моделирования турбулентных течений. Подходы RANS/LES/DES. Различные модели турбулентности. Расчет обтекания тела при наличии вращения. Рассматриваются решатели с поддержкой динамических сеток.
13:50-15:00	Перерыв на обед		
15:00-16:30	Лекция 9 Актуальные задачи аэрогидроупругости	Щеглов Г.А.	Рассматриваются вопросы аэрогидроупругости: совместное решение уравнений упругой динамики элемента конструкции с уравнениями гидродинамики. Центральным вопросом является построение интерфейса «Жидкость-Конструкция (Fluid-Structure Interface - FSI)» на подвижной деформируемой стенке обтекаемого тела. Для моделирования динамики жидкости предполагается использовать пакет OpenFOAM с решателями типа FSI. Обсуждаются вопросы выбора пакета для моделирования динамики конструкции.
16:30-16:40	Перерыв		
16:40-18:00	Лабораторная 13 Задачи гидроупругости	Щеглов Г.А. Тагиров А.М. Стрижак С.В.	Рассматриваются тестовые примеры: расчет обтекания упругой балки в потоке жидкости, расчет течения в каверне с упругой стенкой. Рассматриваются цели, задачи, ожидаемые эффекты. Проводится знакомство со структурой электронной расчетной схемы для задачи FSI. Выполняется обработка результатов расчета. В качестве решателя используется isoFSIFoam. Расчет проводится в параллельном режиме на кластере.
18:00	Окончание дня 4		
30.06	2017	Пятница	День 5
10:50-12:10	Лекция 10 Моделирование многофазных течений и течений со свободной поверхностью	Сибгатуллин И.Н.	В лекции представлен обзор и классификация имеющихся подходов моделирования многофазных течений, реализованных в OpenFOAM. Проведено сравнение лагранжева траекторного подхода и эйлера подхода. Показаны преимущества и недостатки каждого из методов. Рассматриваются области приложения. Основное внимание будет уделено моделированию многофазных турбулентных течений. В рамках лекции будут представлены примеры использования различных солверов при расчете на вычислительном кластере. Рассматриваются решатели twoPhaseEulerFoam, bubbleFoam, cavitatingFoam. Метод VOF. Обзор спектрального метода для моделирования турбулентных течений.
12:10-	Перерыв		

12:20			
12:20-13:50	Лабораторная 14 Моделирование течений со свободной поверхностью	Сибгатуллин И.Н. Стрижак С.В.	Рассматриваются классические задачи о неустойчивости Релея-Тейлора в двумерном и трёхмерном случае. Задание начальных условий проводится с помощью утилиты funkySetFields. Рассматривается изменение граничных условий. Выполняется модификация уравнения состояния для моделирования проникающей конвекции с максимумом плотности. Добавление уравнения для диффузии соли. Рассматривается задача о моделировании развития одномодовой неустойчивости Релея-Тейлора в двумерном и трёхмерном случае. Проводится расчет и построение значений маркерной функции в виде изоповерхностей на базе решателя interFoam. Выполнение лабораторной работ для моделирования многофазных течений (damBreak, bubbleColumn и др.)
13:50-15:00	Перерыв на обед		
15:00-15:40	Лабораторная 15 Задачи аэродинамики	Стрижак С.В. Калиш С.А. Сибгатуллин И.Н.	Расчет обтекания сверхзвуковым потоком обратного уступа, профиля крыла. Расчет аэродинамических коэффициентов. Завершение решения выбранной задачи в Salome/OpenFOAM/Paraview
15:40-16:30	Лабораторная 16 Расчет турбулентного пламени	Стрижак С.В. Калиш С.А. Сибгатуллин И.Н.	Рассматривается задача о моделировании турбулентного пламени в 3D постановке. Обсуждаются особенности подготовки расчетного примера, построения расчетной сетки, выбора начальных и граничных условий. Для моделирования турбулентного пламени используется концепция диссипации вихрей на базе решателя fireFoam.
16:30-18:00	Тестирование		Участники трека выполняют тестовые задачи.
18:00	Завершение трека		