



Universidad
Nacional
de Córdoba



Facultad de
Ciencias Exactas
Físicas y Naturales



Departamento Aeronáutica

**3° Encuentro Nacional de Computación de Alto Rendimiento para
Aplicaciones Científicas - WHPC 2014**

Córdoba, 5 y 6 de agosto

Grupo de Trabajo

Este grupo de trabajo se desempeña en el Departamento de Aeronáutica; Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de la Universidad Nacional de Córdoba. El mismo está integrado por los siguientes profesionales:

- Dr. Sergio Elaskar
- Dr. José Tamagno
- Dra. Andrea Costa
- Dra. Walkiria Schulz
- Dr. Gustavo Krause
- Mgter. Felipe Gutiérrez-Marcantoni
- Mgter. Juan Pablo Saldía
- Ing. Luis Soria Castro
- Ing. Andrés Cimino
- Ing. Emmanuel Gómez

Áreas de trabajo

Temas de trabajo:

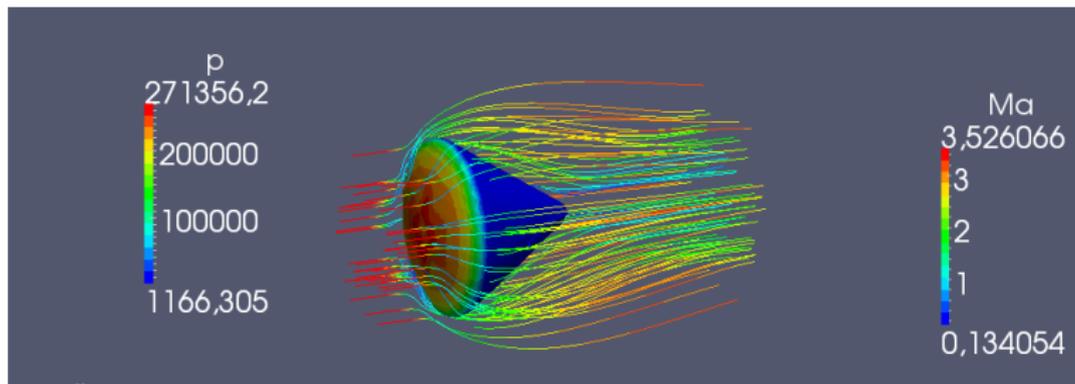
- Dinámica de Gases – Mecánica de Fluidos
 - Simulación numérica de flujos supersónicos de gases
 - Simulación numérica del flujo alrededor de tanques

- Magnetohidrodinámica - Plasmas
 - Simulación de flujos magneto-gas-dinámicos
 - Propulsión espacial por plasma
 - Ondas de Langmuir

Simulación numérica de flujos supersónicos de gases

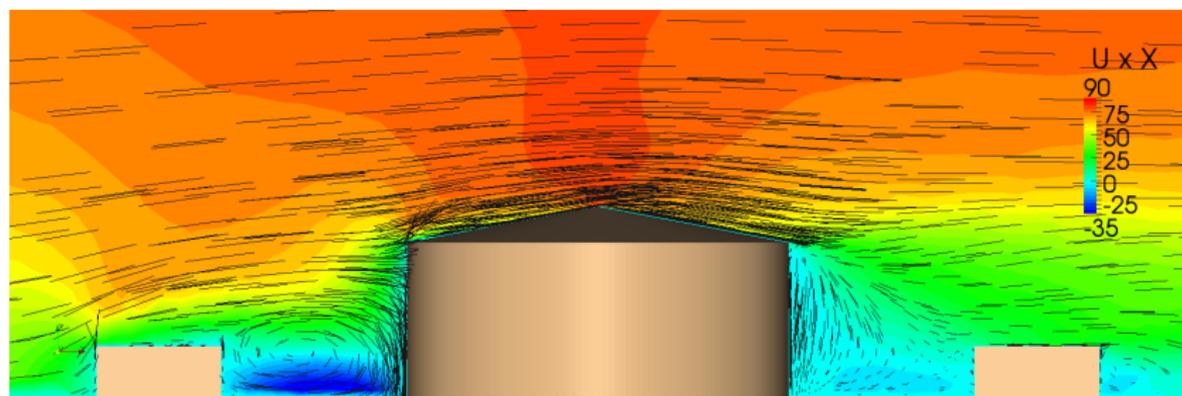
Se busca en esta investigación la mejora y desarrollo de algoritmos numéricos con la finalidad de incrementar la calidad de simulación de flujos gas-dinámicos con elevada entalpía incluyendo cambios químicos, efectos difusivos y turbulentos, como también la simulación de la propagación e interacción de ondas gas-dinámicas. Se está trabajando en dos líneas:

- 1 Desarrollo de códigos propios usando computación en paralelo.
- 2 Uso del software libre y abierto openFOAM.



Simulación numérica del flujo de aire alrededor de tanques

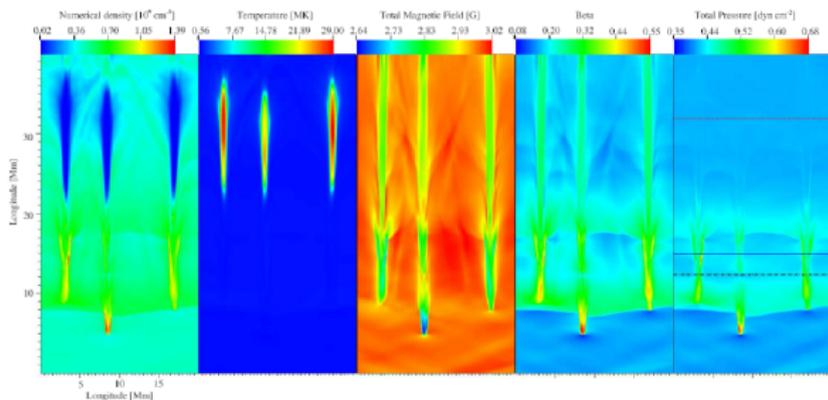
Se llevan a cabo simulaciones del flujo de aire alrededor de tanques y silos utilizando CFD. El objetivo principal es obtener la distribución de presiones alrededor de los cuerpos localizados sobre el nivel del terreno para investigar los efectos topográficos (localización en colinas), de diques de contención y de grupo. El software utilizado es **OpenFOAM**.



Simulación numérica de flujos magneto-gas-dinámicos

Esta investigación tiene dos objetivos principales: Mejoramiento y desarrollo de algoritmos numéricos con la finalidad de incrementar la calidad de simulación de flujos magneto-gas-dinámicos ideales y reales. Aplicación de los nuevos algoritmos y códigos computacionales a la simulación del comportamiento dinámico no lineal de estructuras magnéticas en la corona solar. Se está trabajando en dos líneas:

- 1 Desarrollo de códigos propios.
- 2 Uso del software libre y abierto **FLASH**.



Problemas Computacionales

La simulación de los fenómenos físicos mencionados involucra los siguientes problemas computacionales:

- Resolución espacial (discretización adecuada)
- Resolución temporal (paso de tiempo adecuado)
- Complejidad de los fenómenos estudiados (requerimiento de memoria y capacidad de cálculo)
- Problemas *stiff* (requerimiento de algoritmos específicos)
- Modelado de la turbulencia (*RANS*, *LES*, *DES*)
- Mallas no estructuradas y multiescala (requerimiento de memoria)

Por otro lado, la visualización de resultados implica el manejo de grandes volúmenes de datos por lo que existe una importante demanda de recursos gráficos.

Requerimientos Computacionales

Los requisitos computacionales necesarios están definidos por el tipo de problema estudiado:

$$\text{Requerimientos} \rightarrow \frac{\text{N}^\circ \text{ Ecs.} \times \text{N}^\circ \text{ Celda}}{\text{Paso de tiempo}}$$

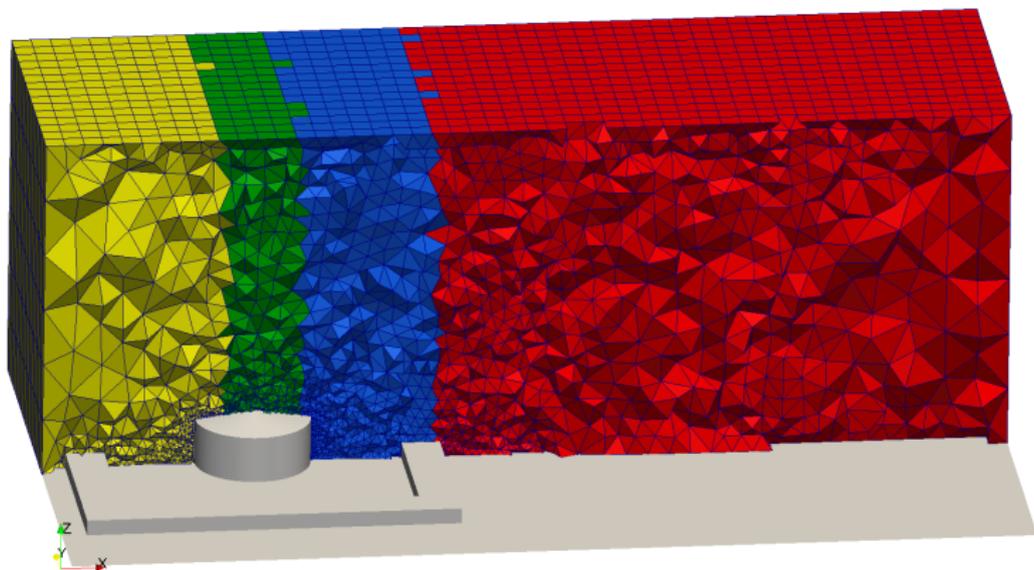
En la simulación de un flujo gas-dinámico, la complejidad del fenómeno incrementa notablemente los requerimientos:

- Flujo turbulento: $\text{N}^\circ \text{ Ecs.} = (4 + Nd)$
- Flujo turbulento reactivo: $\text{N}^\circ \text{ Ecs.} = (4 + Nd) + (Ns - 1) + ODEs(f(Nr, Ns))$
- Flujo turbulento reactivo con no equilibrio termodinámico: $\text{N}^\circ \text{ Ecs.} = (4 + Nd + EMT) + (Ns - 1) + ODEs(f(Nr, Ns))$

Ejemplo: Para un problema de combustión Aire + Metano, podrían llegar a considerarse 53 especies con 800 reacciones, lo que significa un total de 59 ecuaciones de transporte sobre el dominio y 42400 *stiff ODEs*.

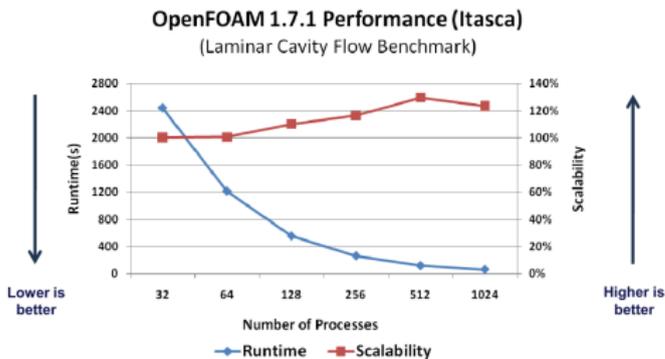
Solución mediante HPC

Solución HPC → **Descomposición de Dominio**

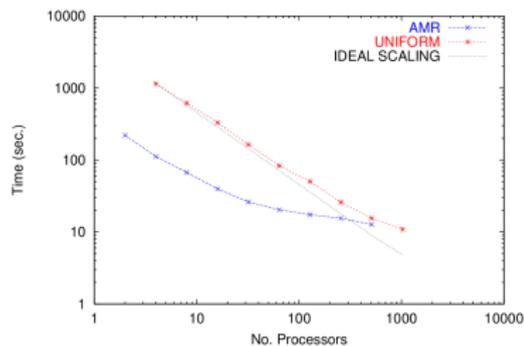


Ejemplos de Escalabilidad

Tanto OpenFOAM como FLASH han demostrado muy buenas performances para su implementación con recursos de cómputo masivamente paralelos.



OpenFOAM



FLASH

Código High Performance Gas Dynamics (*HPGD*)

En cuanto al código *HPGD* de desarrollo propio, el mismo cuenta con las siguientes características:

- Framework para la solución de EDPs en sistemas de cómputo de alta performance.
- Mallas híbridas no estructuradas tanto en 2D cómo en 3D
- Uso extensivo de librerías paralelizadas
 - *Global Arrays* → administración en paralelo de estructura de datos
 - *PETSc* → solver de sistemas lineales (métodos iterativos)
 - *Parmetis* → partición de dominio
- Aplicación en problemas de aero-termodinámica → Navier-Stokes 2D y 3D con no equilibrio termoquímico

Estas características producen muy buena escalabilidad en problemas que involucren grandes dominios computacionales con fenómenos gas-dinámicos complejos.

Expectativas

Aunque tenemos acceso al mejor cluster del país (**Mendieta**), aún los tiempos de cálculo resultan elevados.

Ejemplo: para un dominio de 55000 celdas, resolver las ecuaciones de Euler 2D en OpenFOAM nos lleva 8 horas utilizando 10 núcleos.

Contar con mejores recursos nos permitiría, mejorar las simulaciones.

- Incluyendo física más compleja.
- Analizando dominios más complejos con una mejor resolución espacial.
- Disminuyendo los tiempos de cálculo.
- Mejorando la visualización.

Además, necesitamos **recursos humanos** especializados para la optimización de los códigos y aprovechamiento del hardware.

Muchas gracias por su atención

Referencias

- Fryxell, B., Olson, K., Timmes, F., y Zingale, M. (2000). FLASH: An Adaptive Mesh Hydrodynamics Code for Modelling Astrophysical Thermonuclear Flashes. *The Astrophysical Journal*, 131:273–334.
- Technical Report (2010). Computational Fluid Dynamics, Simulations at Scale: OpenFOAM. *HPC Advisory Council*.