



CONVERGE3.0最新功能及 开发进展

艾迪捷信息科技(上海)有限公司
技术部

CONVERGE小组 叶良春

Copyright (C) IDAJ Co., LTD. All Rights Reserved.

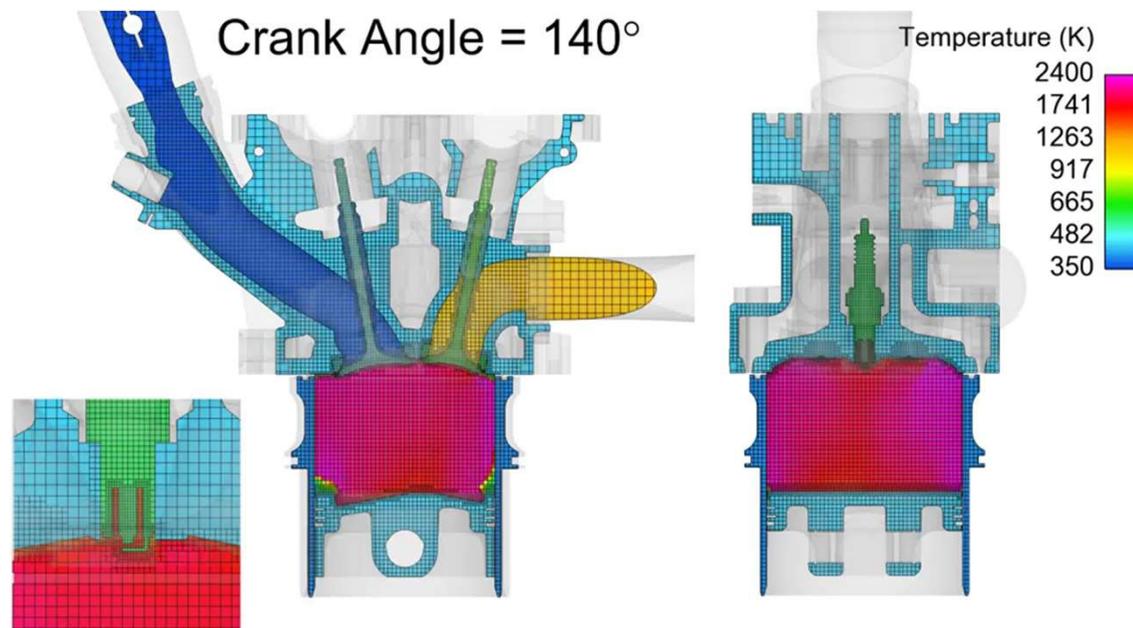
CONVERGE3.0新功能

◆ 3.0版主要新功能

- ◆ 边界层网格
- ◆ 嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆ 通用周期性边界
- ◆ 求解器性能提升
- ◆ MRF模型改进
- ◆ 尿素输运模型改进
- ◆ RSM 湍流模型追加
- ◆ YAML 格式输入文件

◆ 3.0版求解器架构更新

- ◆ 内存消耗缩减
- ◆ 载荷平衡改进
- ◆ 数据结构优化
- ◆ 后处理文件格式更新



CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

◆边界层网格

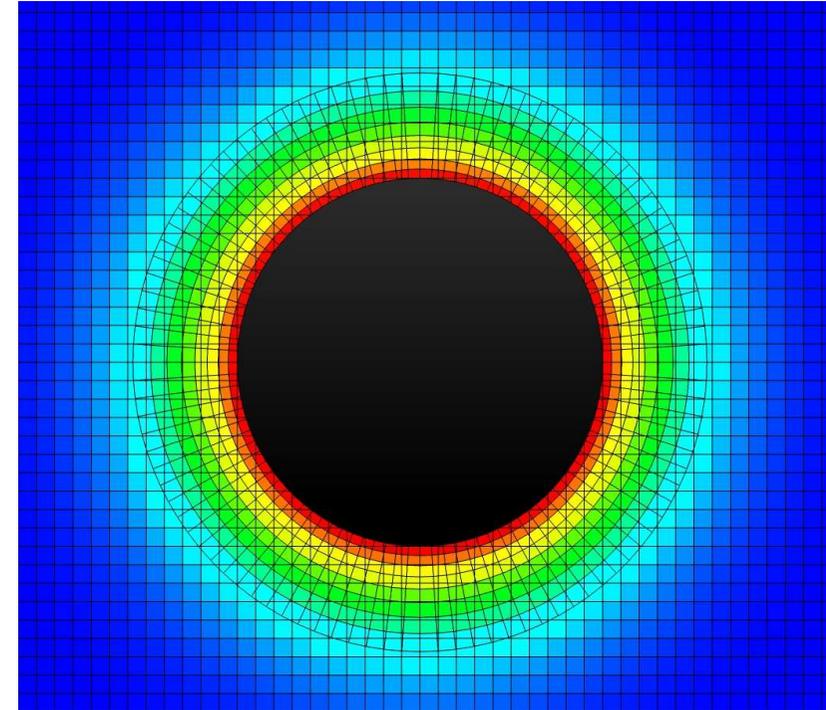
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

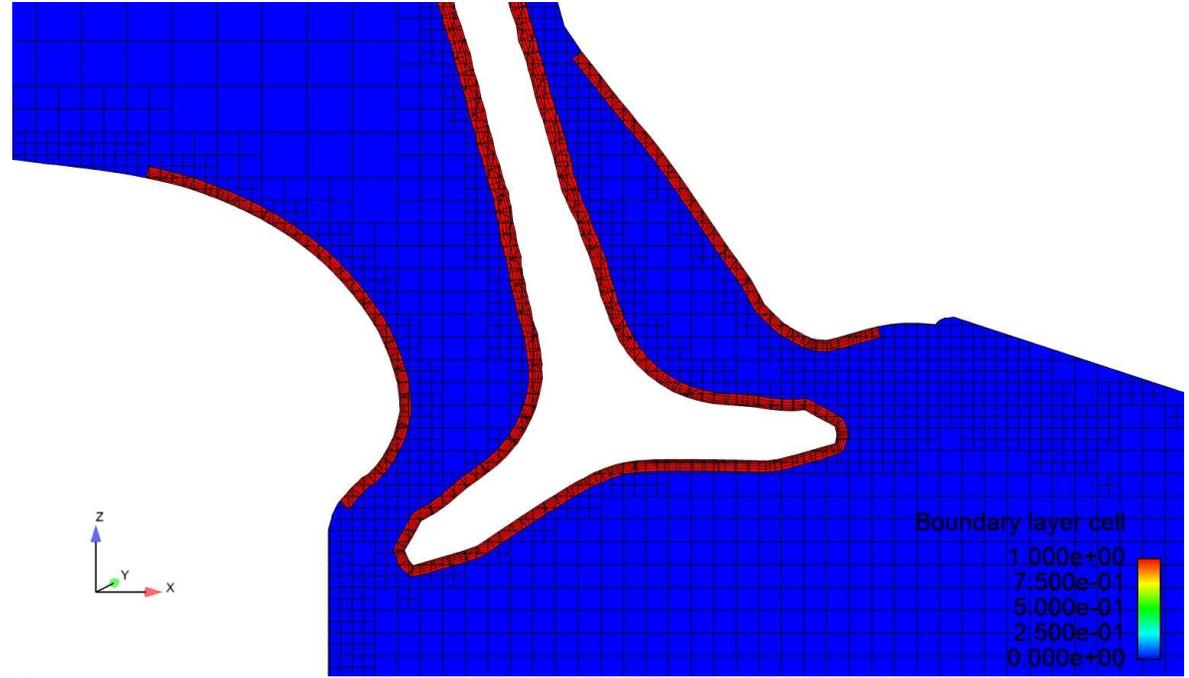
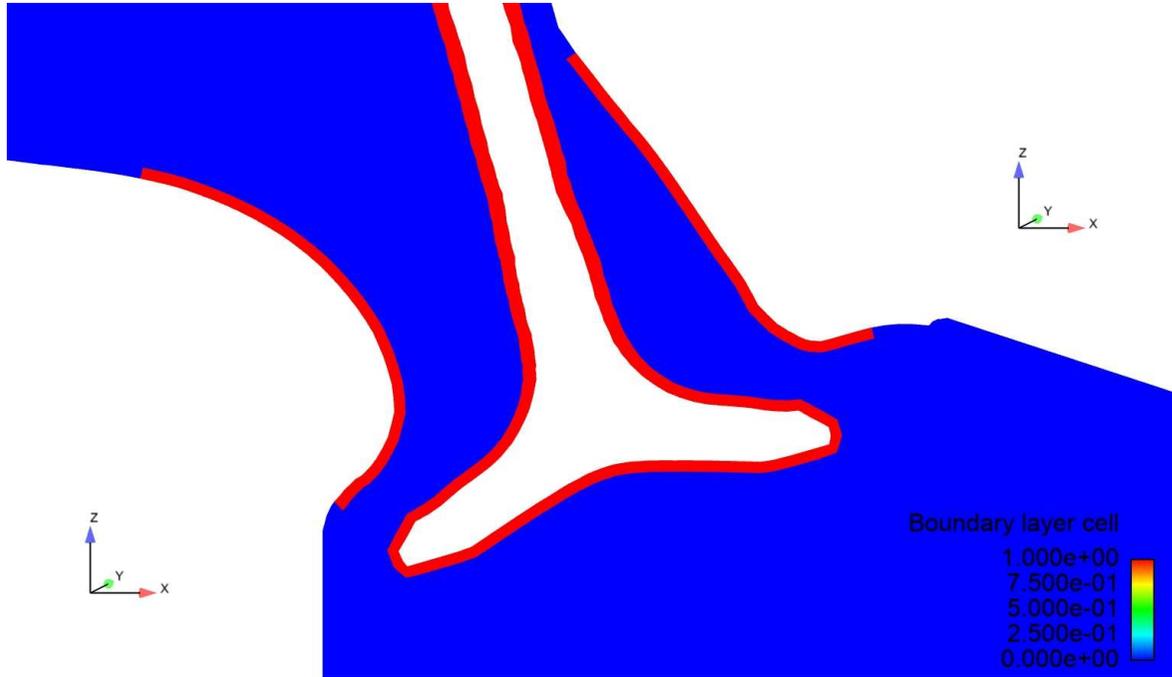
- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

边界层网格

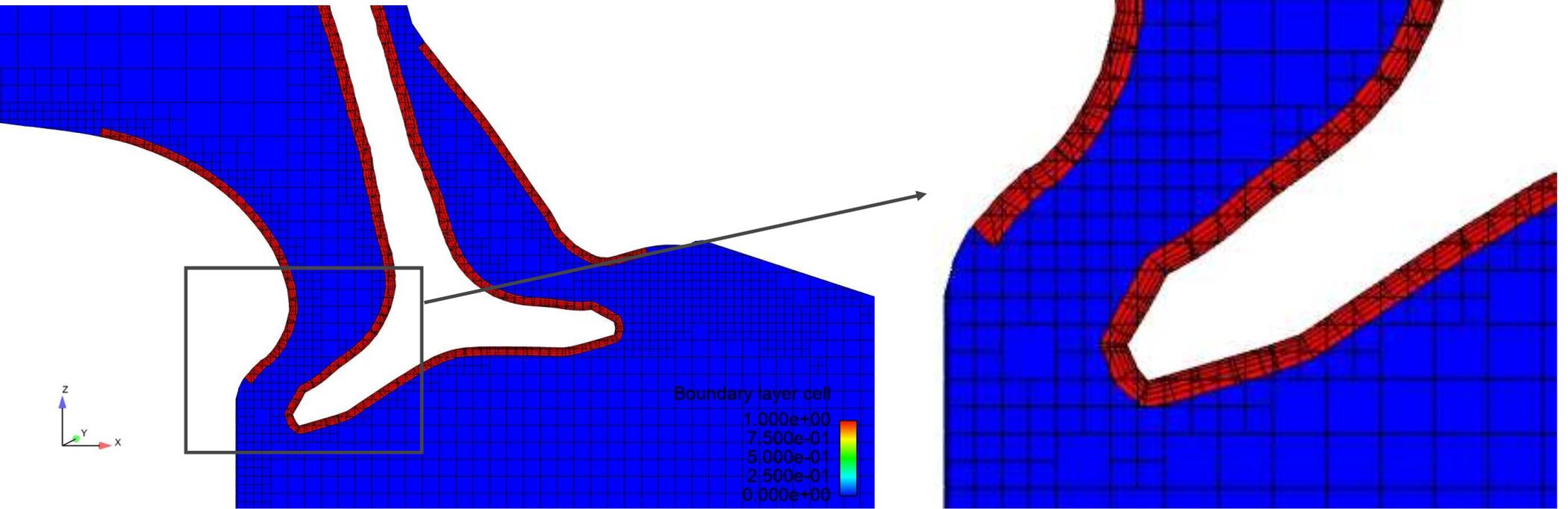
- ◆ 边界层网格的实施利用了CONVERGE本身的特性
 - ◆ Cell pairing
 - ◆ Partial children
 - ◆ FLOW THROUGH interfaces
- ◆ 边界层网格在计算过程中自动创建
- ◆ 用户自行指定网格尺寸参数和相关自适应参数
- ◆ **不属于**重叠网格(overset mesh)——网格在界面处自然过渡到主体正交网格



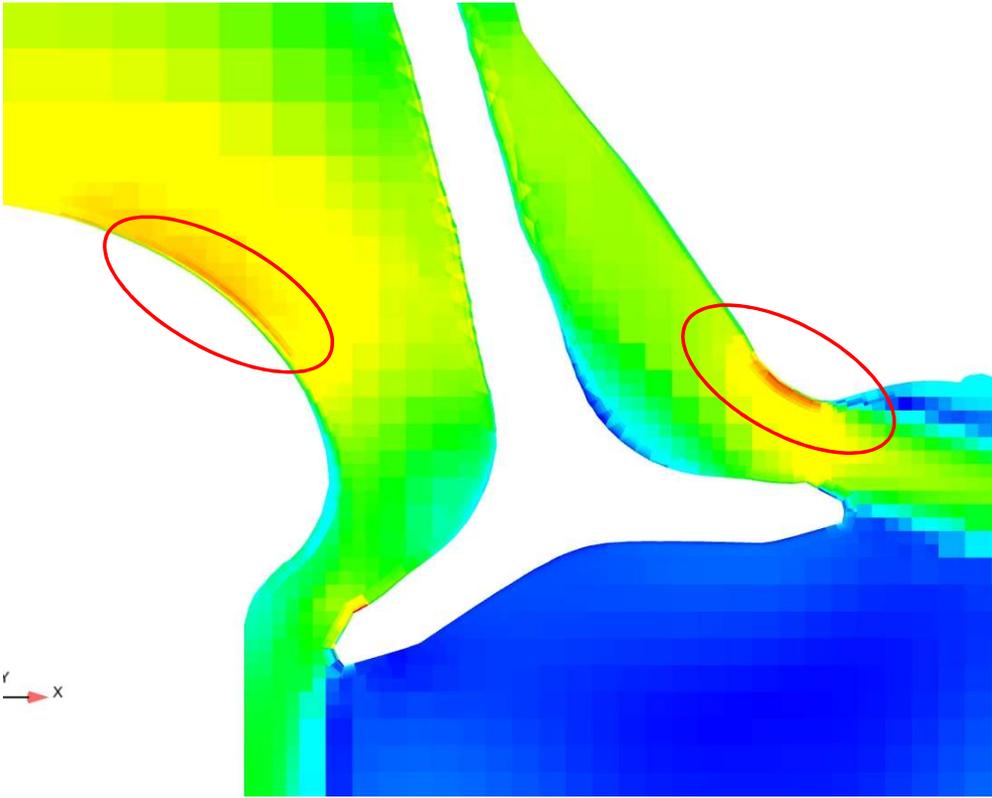
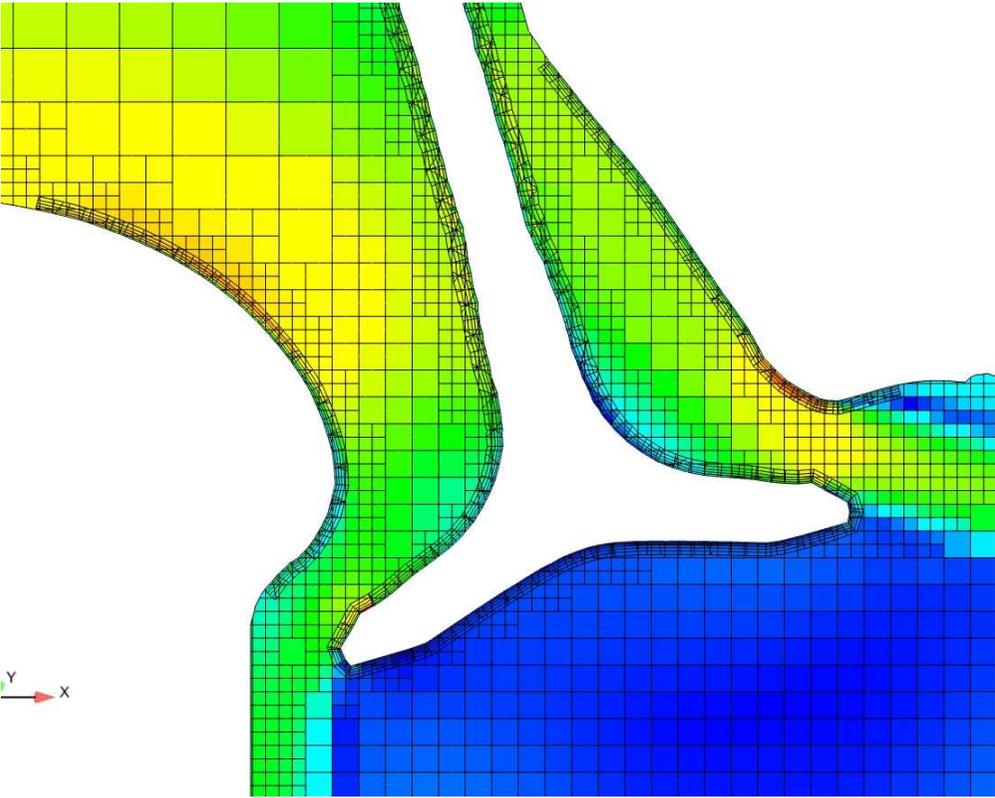
稳态气道案例



稳态气道案例



稳态气道案例：速度场



CONVERGE3.0新功能

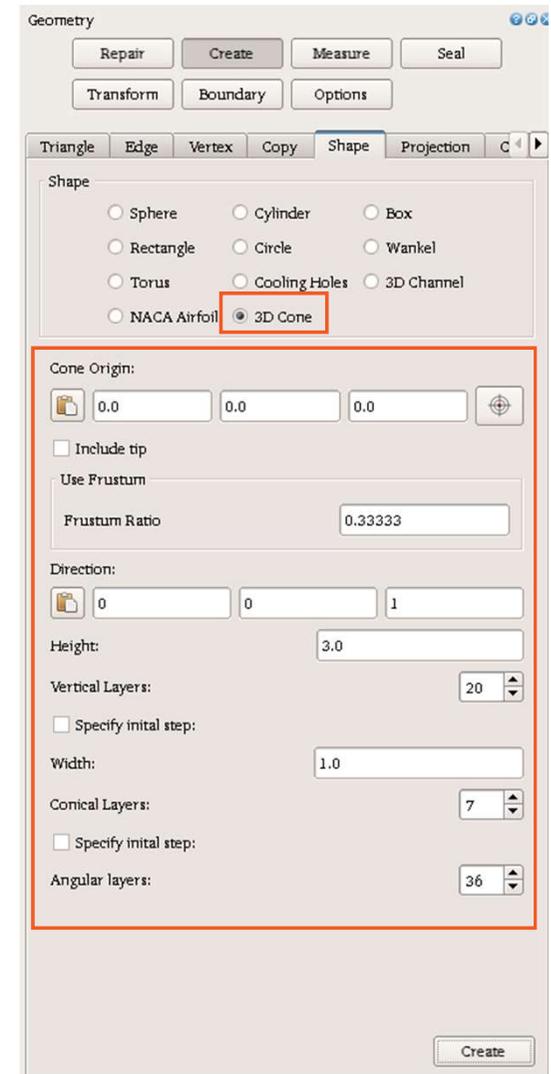
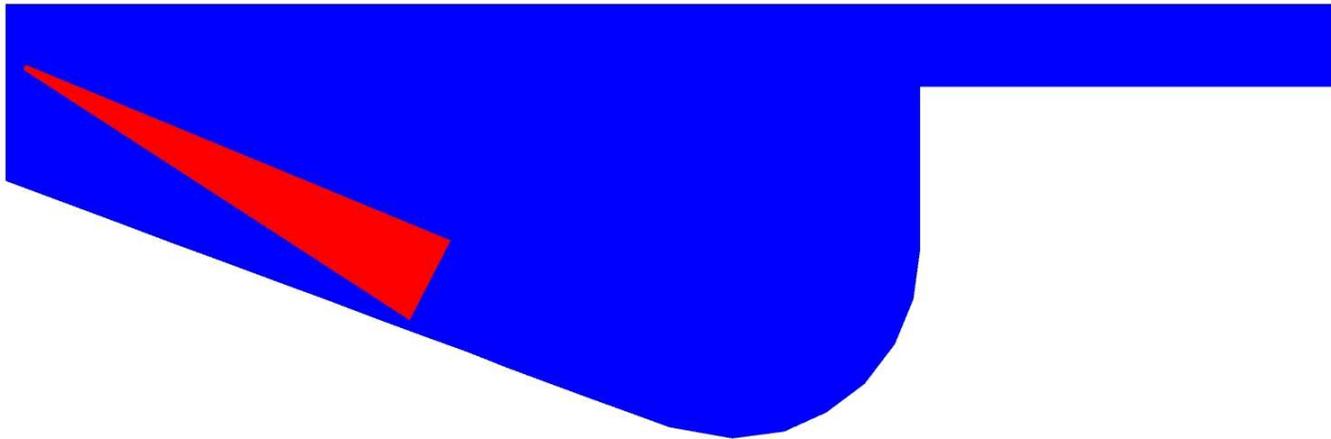
3.0版主要新功能

- ◆边界层网格
- ◆**嵌入网格(Inlayed mesh)**
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

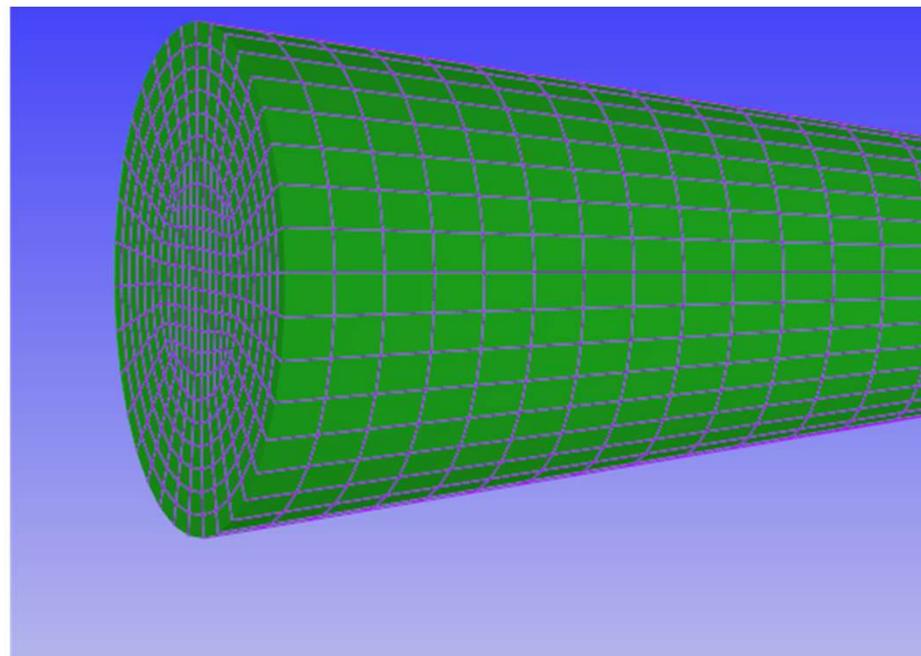
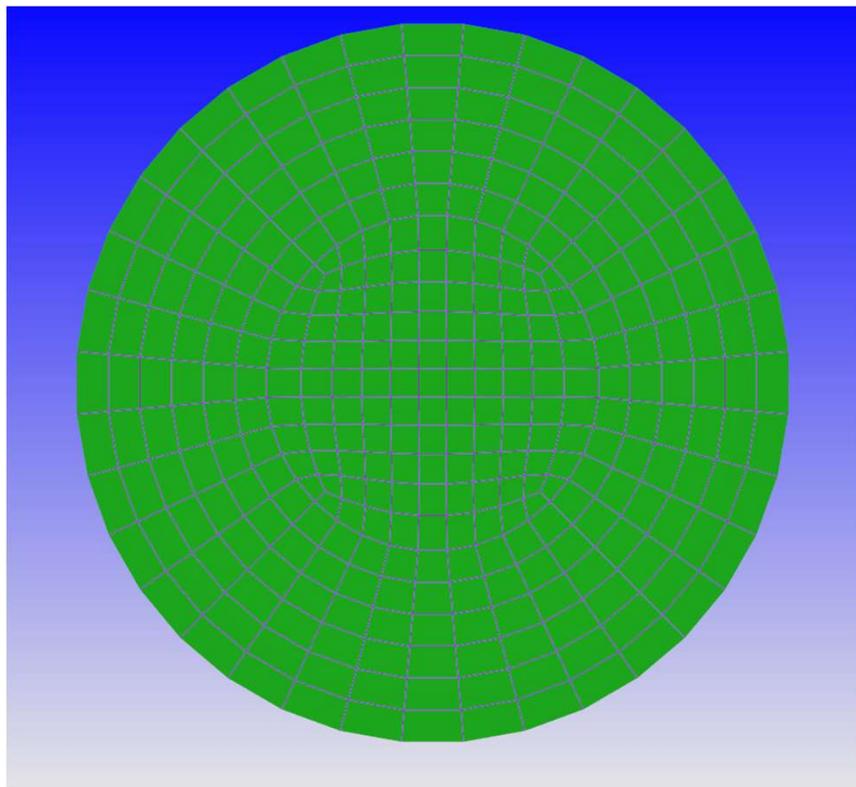
3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

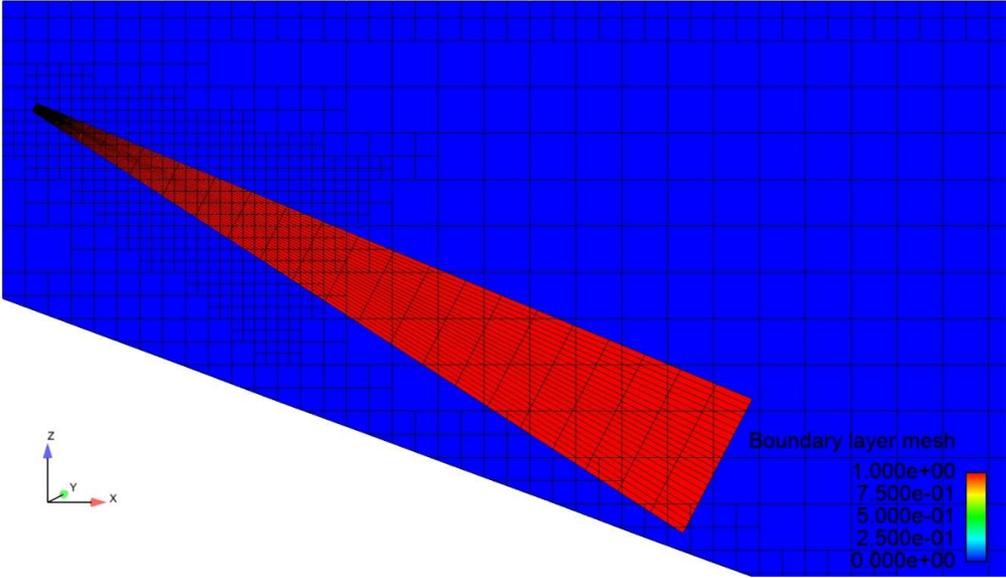
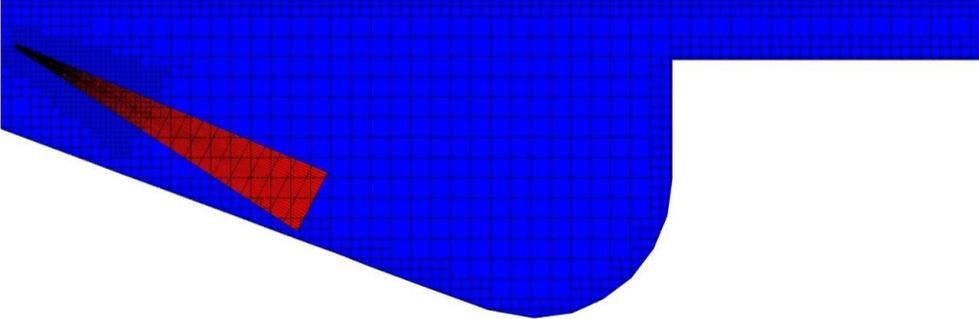
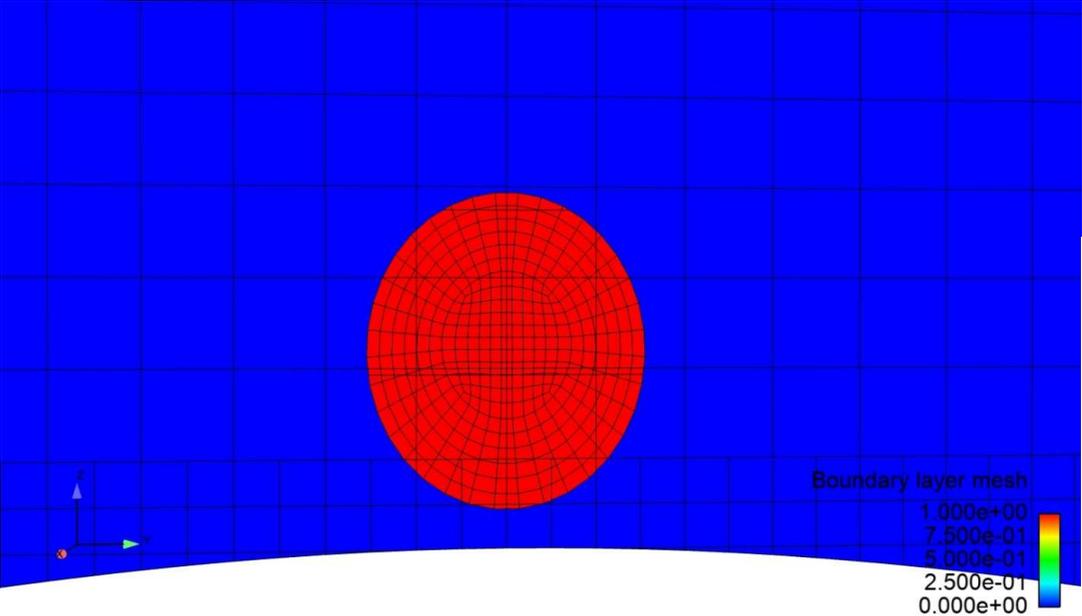
嵌入网格：喷雾锥



嵌入网格：喷雾椎



嵌入网格：喷雾锥



CONVERGE3.0新功能

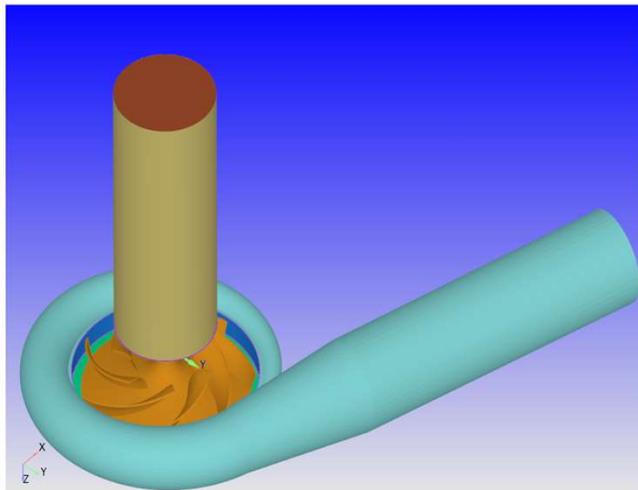
3.0版主要新功能

- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆**MRF模型改进**
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

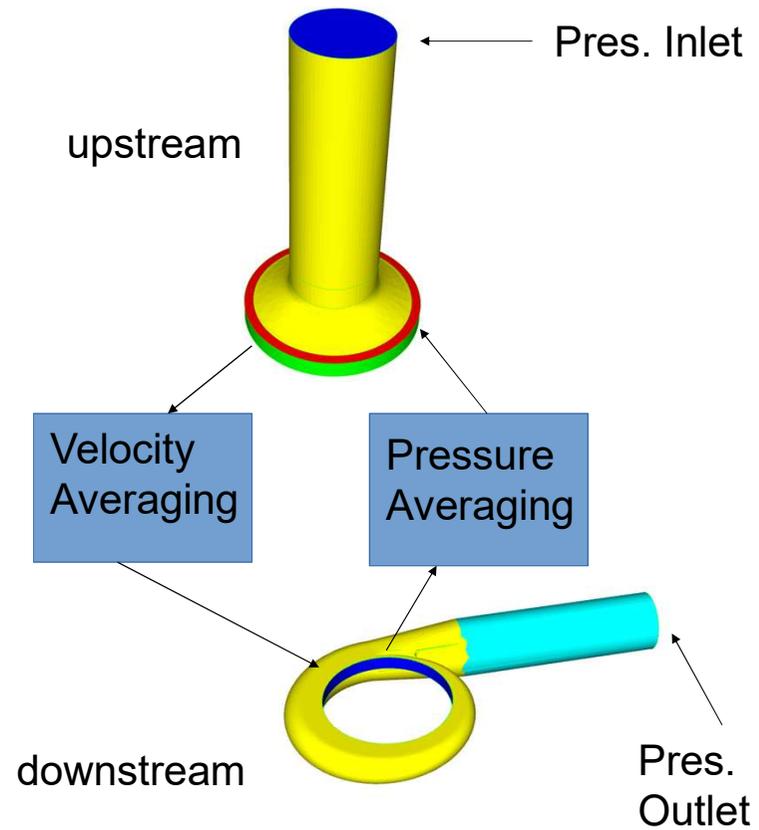
3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

MRF模型改进: Mixing Plane MRF (1/3)

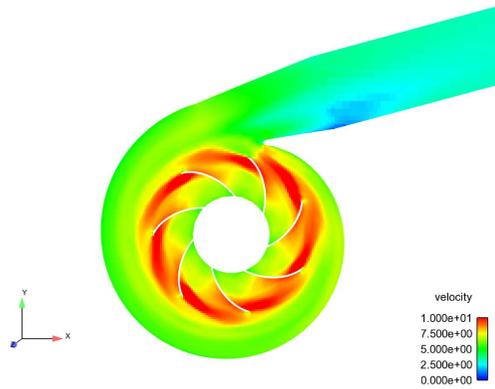


水泵涡轮案例(4500rpm)



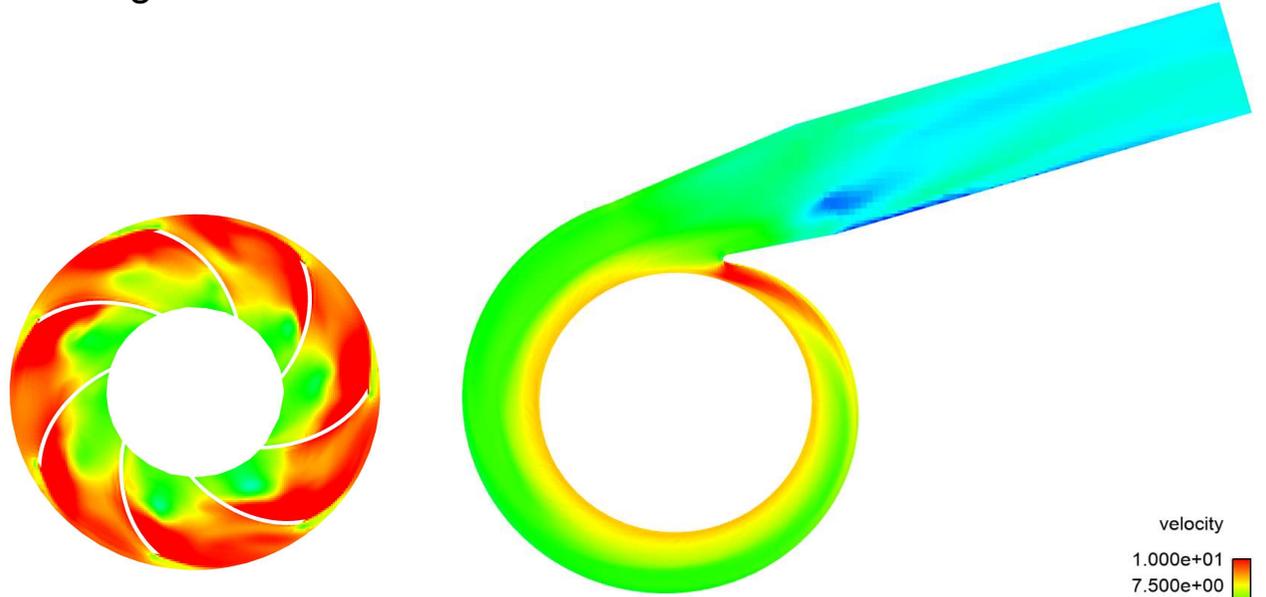
MRF模型改进: Mixing Plane MRF (2/3)

Moving Transient



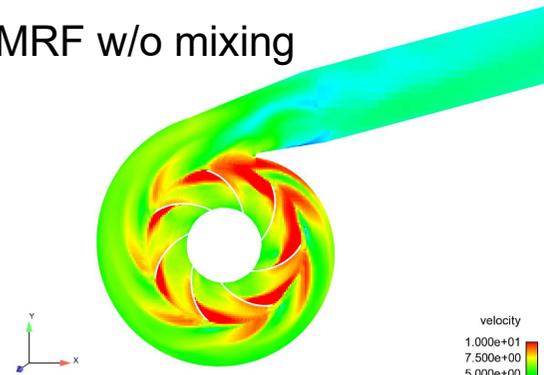
velocity
1.000e+01
7.500e+00
5.000e+00
2.500e+00
0.000e+00

Mixing Plane Method



velocity
1.000e+01
7.500e+00
5.000e+00
2.500e+00
0.000e+00

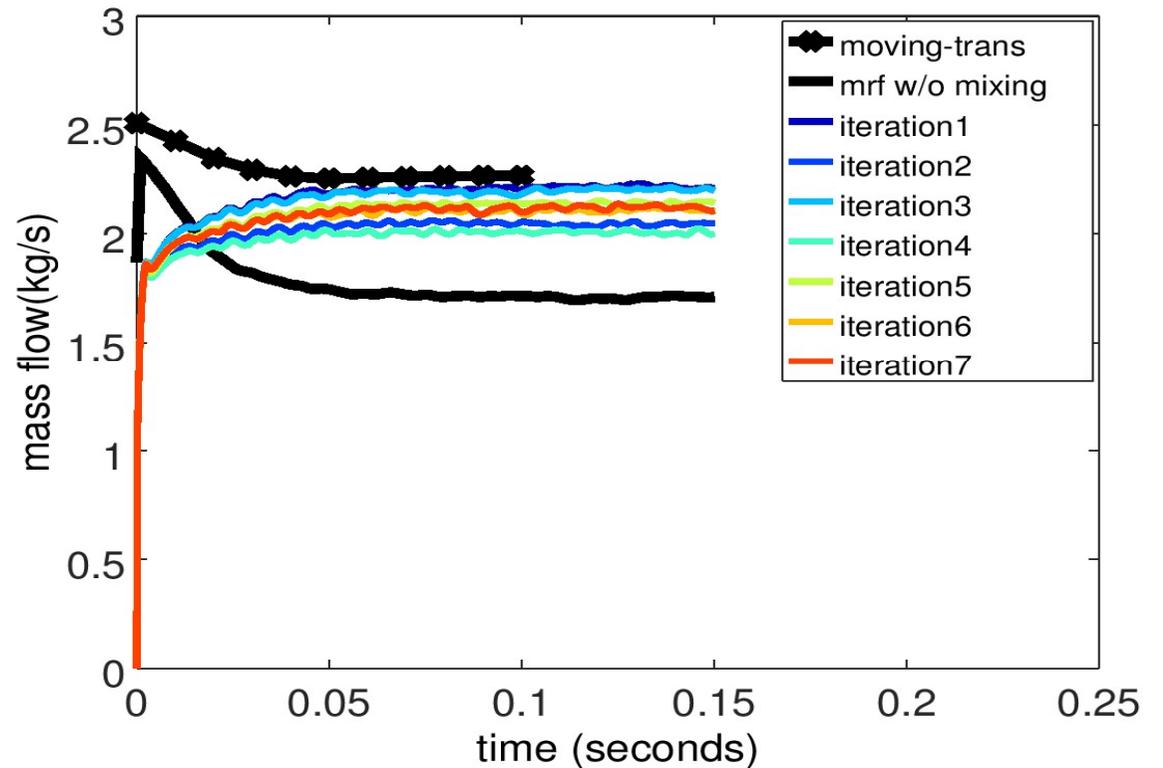
MRF w/o mixing



velocity
1.000e+01
7.500e+00
5.000e+00
2.500e+00
0.000e+00

MRF模型改进: Mixing Plane MRF (3/3)

- ◆ 当前测试 模型采用离散区间耦合算法(discrete interval coupling)
 - ◆ 边界条件profile每隔一段时间更新
 - ◆ 这种方式效率较低, 但无须对求解器构架进行修改。
 - ◆ 最终将实现每一步耦合。
- ◆ 相比常规MRF, 改进的MRF宏观流量和速度场更接近瞬态结果。



CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

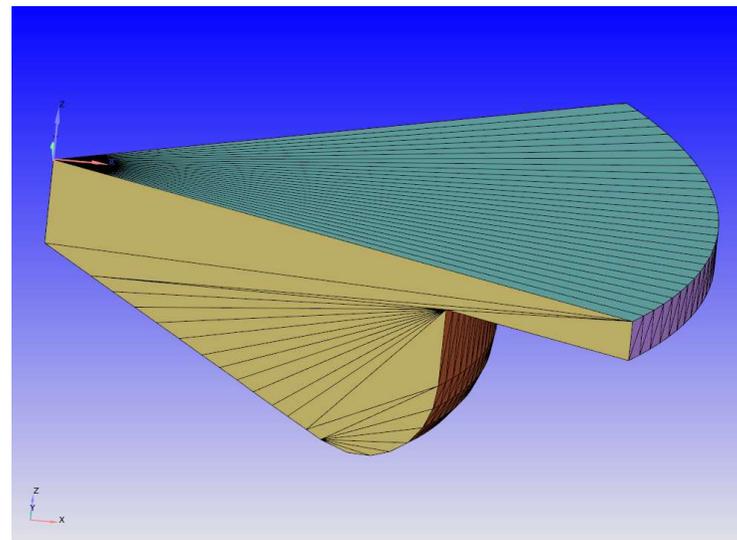
- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆**通用周期性边界**
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

通用周期性边界

- ◆ 当前的周期性边界非常受限
 - ◆ 所有周期性边界只能有一个变换坐标系
 - ◆ 周期性边界必须在一个平面内
 - ◆ 周期性边界对必须关于x-z平面对称
- ◆ 新的周期性边界更加灵活
 - ◆ 边界几何无须在一个平面内
 - ◆ 可以与其它部件相交(如燃气轮机叶片)
 - ◆ 支持任意方向
 - ◆ 支持任意个数周期性边界对和变换坐标系个数



CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

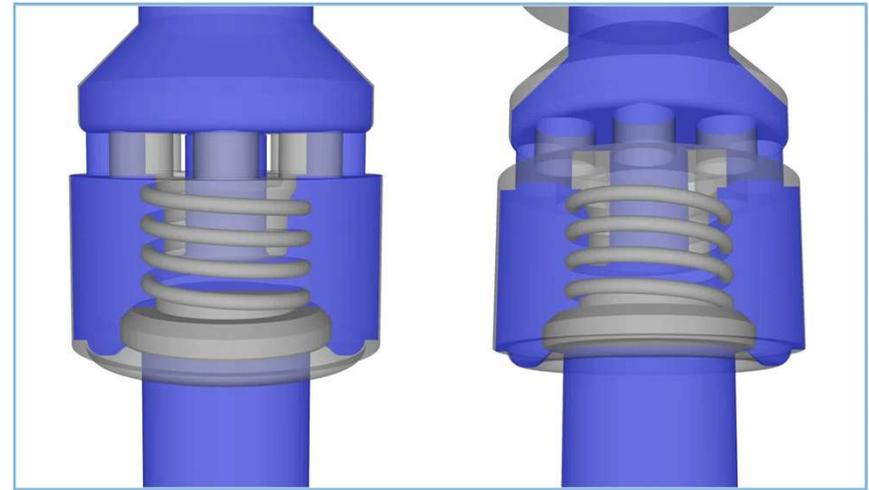
- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆**求解器性能提升**
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

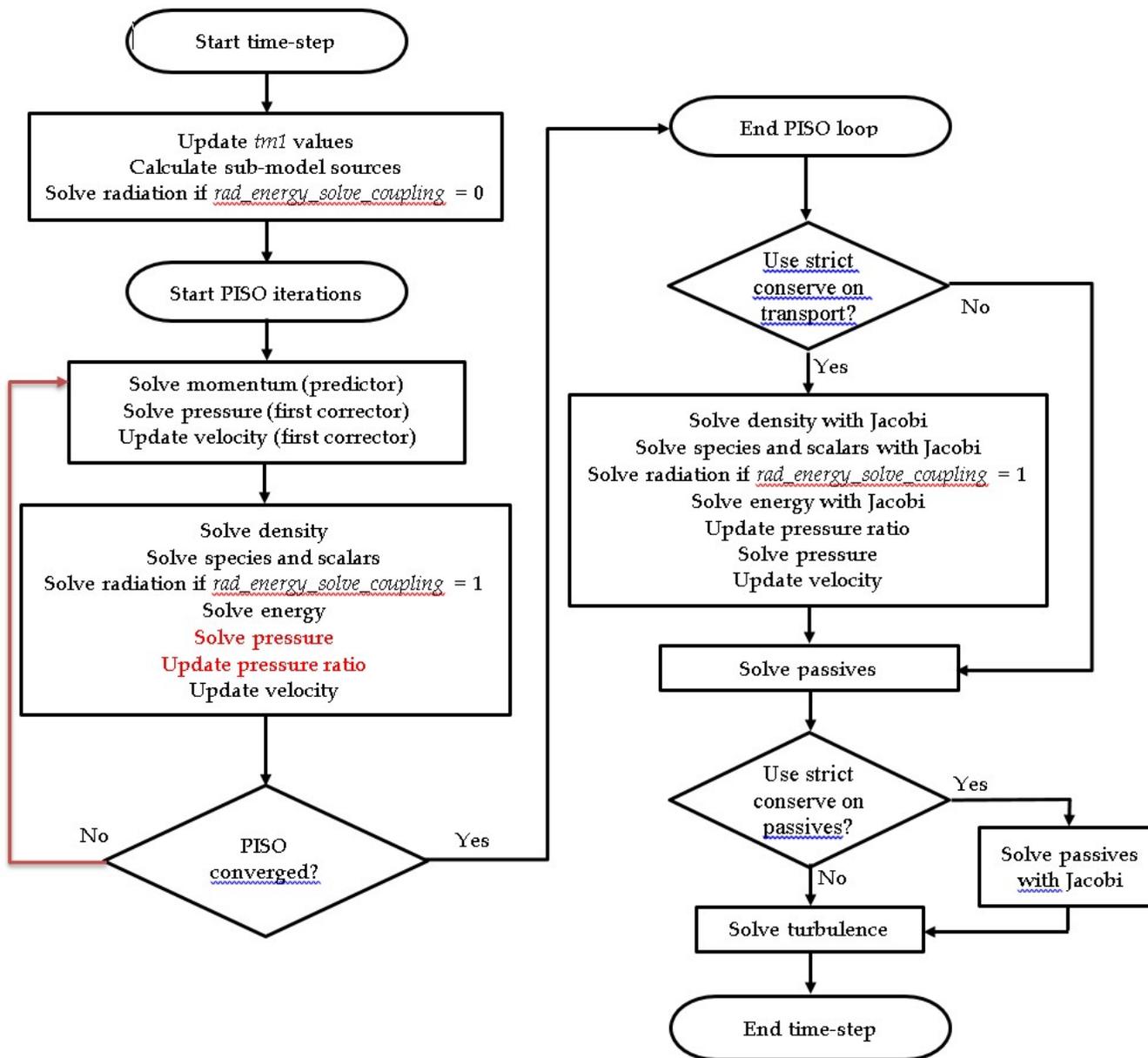
Native BICGSTAB 线性求解器

- ◆ Does not require building a matrix
- ◆ 无须构建矩阵
- ◆ Typically faster than HYPRE-BICGSTAB interface due to less overhead
- ◆ 由于中间消耗少，通常快于HYPRE-BICGSTAB
- ◆ OpenMPI threaded versions of SOR and BICGSTAB
- ◆ 新增对OpenMPI支持
- ◆ Several advanced preconditioner options created for BICGSTAB solver
- ◆ 新增数个高级preconditioner选项



PISO 修正: Tightly Coupled Momentum

- ◆ 原来的PISO在每个时间步的开始计算一步动量predictor step, 然后在每个Piso内部更新动量结果。
- ◆ 对大时间步长或高粘度的模型, 这种处理方式可能会不太稳定而发生recover (dt受限)
- ◆ 新PISO追加选项: 在PISO循环内部重新计算动量方程
- ◆ 对大时间步长和高粘度模型 (包括稳态问题) 计算更加稳定



CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆**尿素输运模型改进**
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

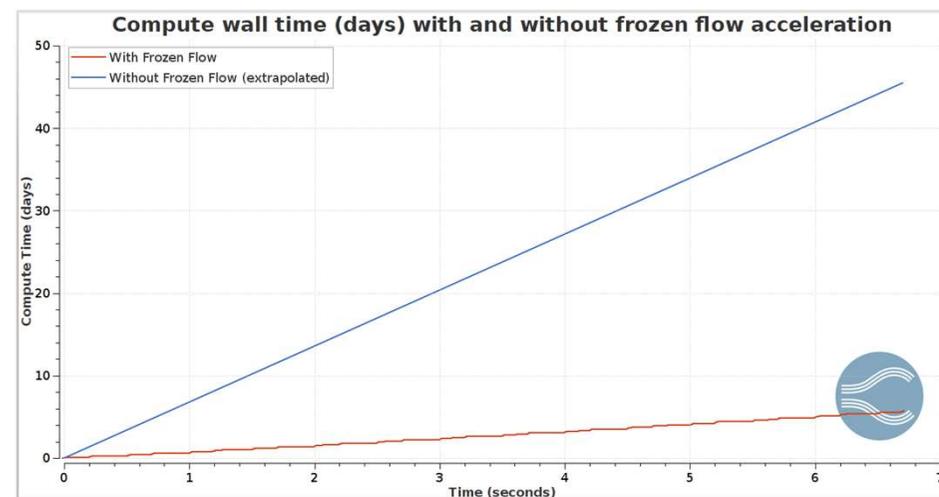
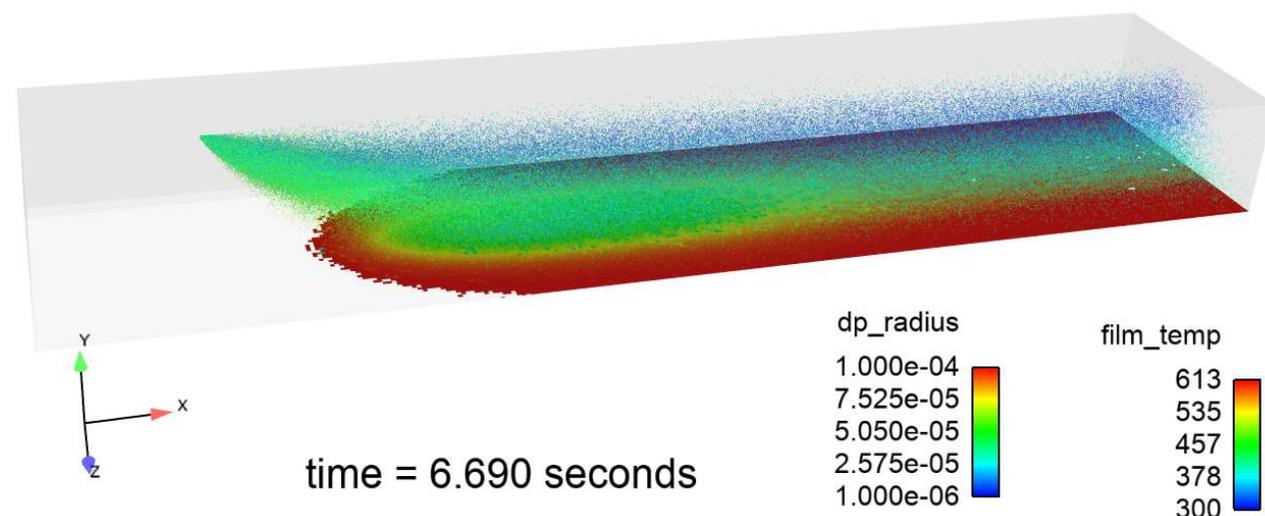
- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

流场冻结及Parcel合并特征

- ◆ 在尾气后处理中，尿素水溶液的喷射流量其实很小，因此流场所受喷雾的影响并不大
 - ◆ 在CONVERGE3.0尿素喷雾模型中，对spray / film / CHT进行时间精确求解，而流场仅周期性更新
 - ◆ 这种周期性冻结流场的方法可以大大加速液膜/尿素沉积等稳态结果的获得。
- ◆ 另外，连续喷雾脉冲形成的液膜持续堆积，会导致液膜追踪计算负荷增大
 - ◆ 对策：对液膜parcel进行合并，在保证液膜parcel的可靠物性的同时实现计算加速

基于Birkhold 喷雾实验的效果验证

- ◆ Birkhold 平板喷雾实验: 启用周期性流场冻结功能, 仅在每个喷雾脉宽内进行很短时间的流场计算, 结果实现了喷雾轨迹和液膜温度的良好预测。
- ◆ 同时实现8倍的速度提升, 计算时间从45.5天缩短到5.6天



CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆**RSM 湍流模型追加**
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

RSM 湍流模型

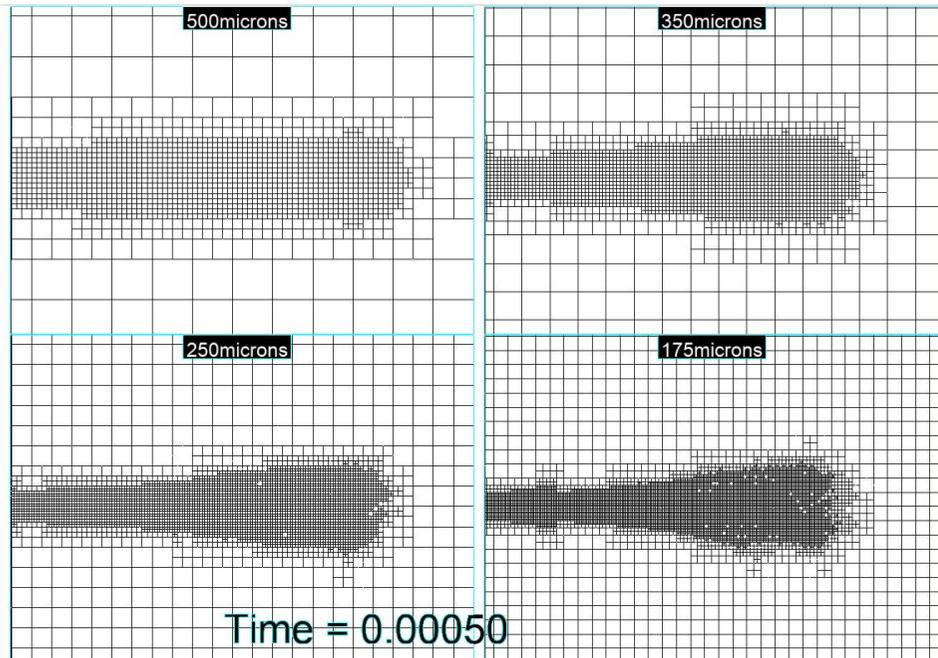
- ◆ 3.0版本中增加RSM(雷诺应力模型)
- ◆ 计算时间略有增加，这是由于增加了新的输运方程。
- ◆ 在预测喷雾气相贯穿距方面精度有显著提升

测试模型: ECN Spray A

ECN Spray Case	Vaporizing Spray	Reacting Spray
Fuel	Dodecane	Dodecane
Ambient Composition	0% O2	15% O2
Ambient Temperature	900	900
Ambient gas density	22.8 Kg/m ³	22.8 Kg/m ³
Injection pressure	150Mpa	150Mpa
Fuel Temperature	363K	363K
Nozzle diameter	90micron	90micron
Injection duration	1.5	1.5
Mass injected	3.5mg	3.5mg

RSM 喷雾计算网格策略

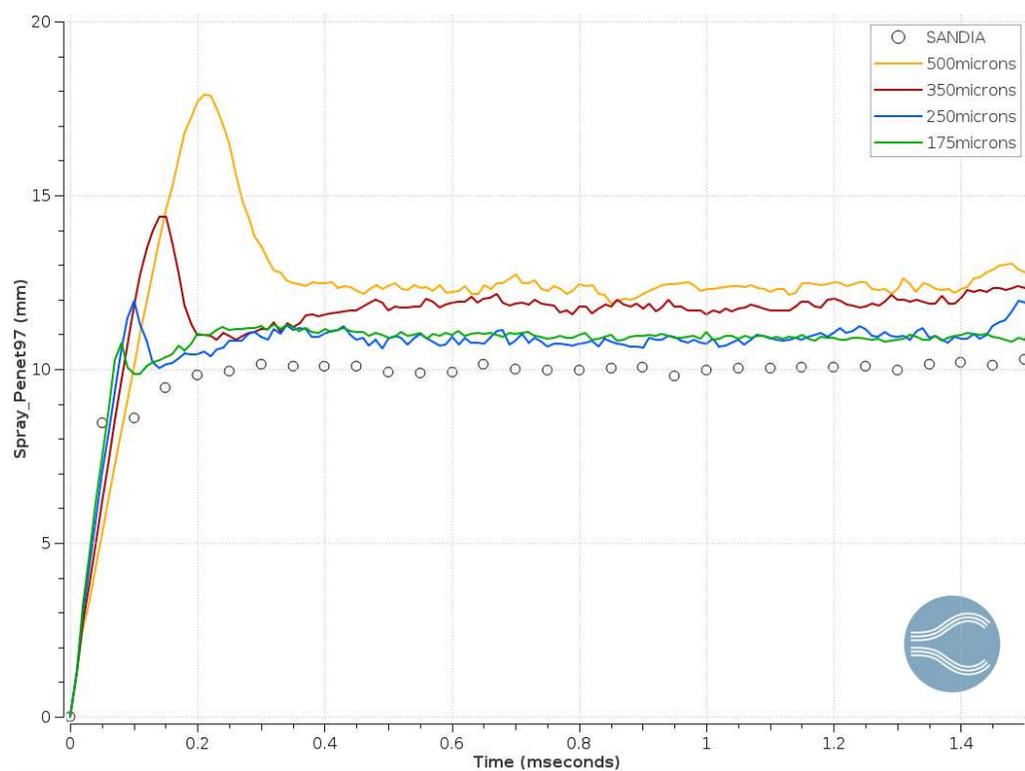
- Nozzle embedding = embed scale 3
- Velocity AMR = embed scale 3
- Temperature AMR = embed scale 3 (reacting case only)



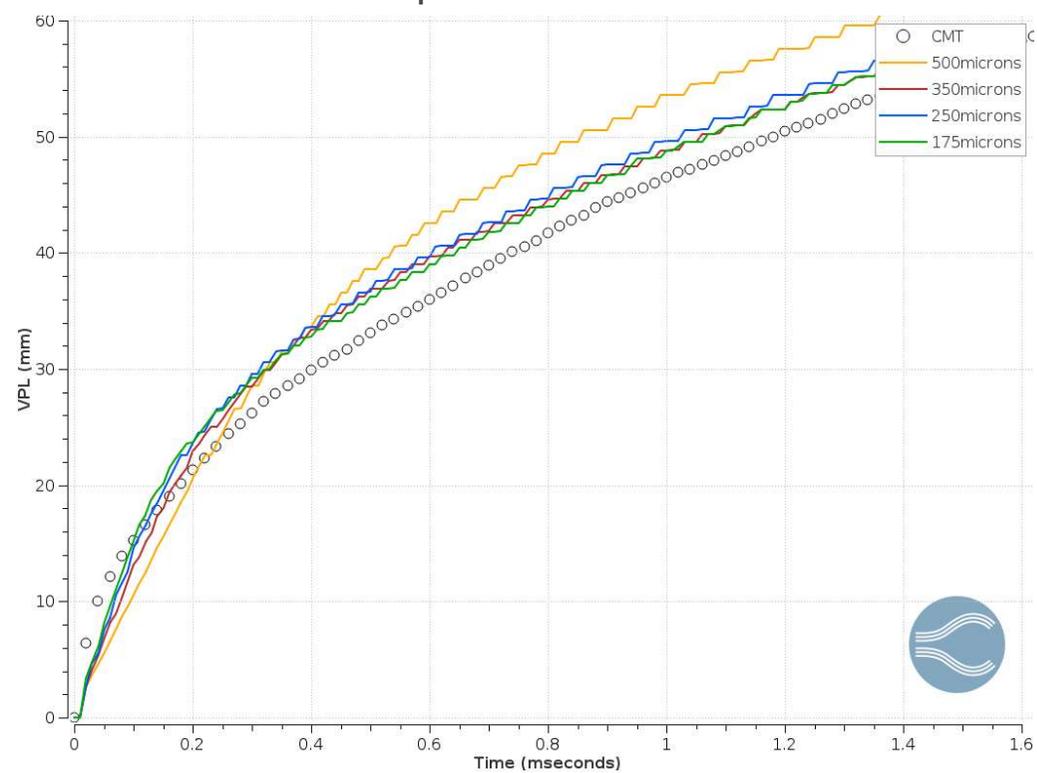
Min. cell size	Basegrid	Number of parcels
500microns	4.0mm	128,000
350microns	2.8mm	350,000
250microns	2.0mm	512,000
175microns	1.4mm	1,400,000

RSM 喷雾计算结果

Liquid Penetration



Vapor Penetration



CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆**YAML 格式输入文件**

3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

YAML 格式输入文件

- ◆ 标准化格式
- ◆ 可方便通过脚本语言(如Python)进行修改
- ◆ 提升高低不同版本间的逆向兼容性
- ◆ 更灵活的语法解析，易于处理失效特征

```
version: 3.0
filename: inputs
---
surface_filename:          surface.dat
mechanism_filename:       mech.dat
thermodynamic_filename:   therm.dat
simulation_control:
  crank_flag:              false
  start_time:              -490.0
  end_time:                180.0
  restart_flag:            false
  restart_number:          0
  map_flag:                false
  check_grid_motion_flag:  0
  parallel_scale:          -4
  load_cyc:                100
  reread_input:            true
  random_seed:             0
output_control:
  twrite:
    post:
      interval:            99999
    transfer:
      interval:            10.0
    files:
      interval:            0.0001
    restart:
      interval:            99999
  screen_print_level:      0
  num_restart_files:       1
  write_map_flag:          0
  wall_output_flag:        0
  transfer_flag:           0
  mixing_output_flag:      1
  species_output_flag:     1
  region_flow_flag:        2
```

CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

高性能计算面临的挑战

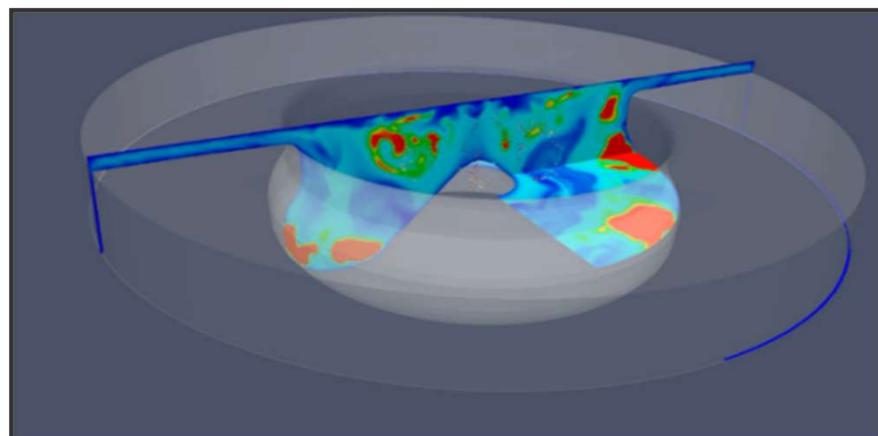
- ◆ 更小的单核内存配置
 - ◆ 模型设置必须是完全的scalable
- ◆ 更慢的时钟速度
 - ◆ 超算平台的性能通常是用每瓦电能支持的浮点运算次数来评价。
- ◆ 仅在有限数量节点上进行I/O处理
- ◆ 对无序指令的低容忍度
 - ◆ 矢量化再次变得重要



美国橡树岭国家实验室泰坦超算平台

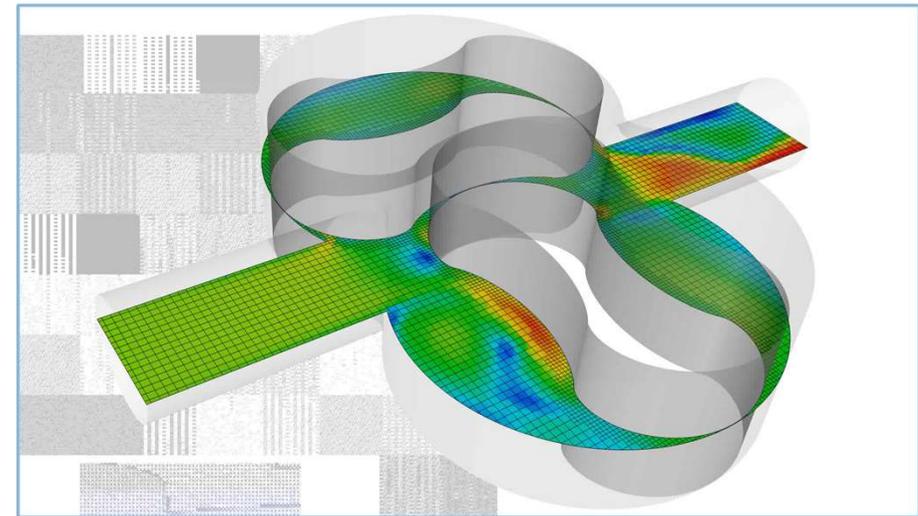
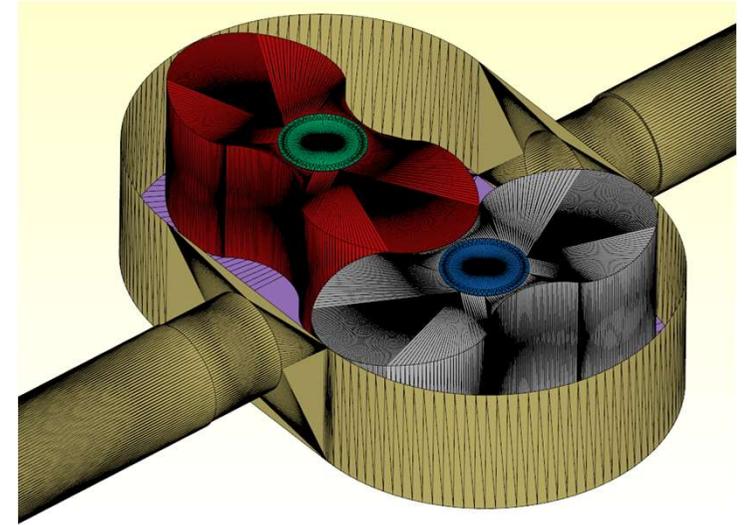
CONVERGE v3.0合作开发伙伴

- ◆ 阿贡国家实验室
- ◆ Argonne National Lab
- ◆ 橡树岭国家实验室
- ◆ Oak Ridge National Lab
- ◆ 劳伦斯利弗莫尔国家实验室
- ◆ Lawrence Livermore National Lab
- ◆ 法国石油与新能源研究院(IFPEN)
- ◆ 英特尔(Intel)
- ◆ 英伟达(NVIDIA)



CSI CONVERGE软件开发原则

- ◆ Always ask "Does it scale?"
- ◆ 总是确保新开发的功能scalable
- ◆ Automate whenever possible
- ◆ 在可能的情况下尽量实现自动操作
- ◆ Always maintain a working version of the code
 - Often more difficult on the implementation step
 - Makes testing and debugging significantly easier
- ◆ 总是维持一个工作版本
 - ◆ 在实施阶段通常更加困难
 - ◆ 但这样操作软件测试和debugging更加容易
- ◆ Whenever practical, keep code flow the same
- ◆ 在可行的情况下，尽量保持软件的继承性。



CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

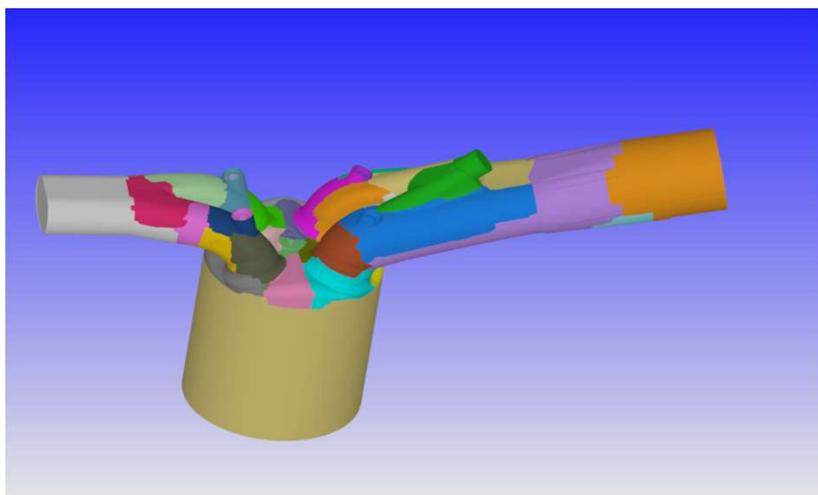
- ◆**内存消耗缩减**
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

当前版本(2.4)内存局限

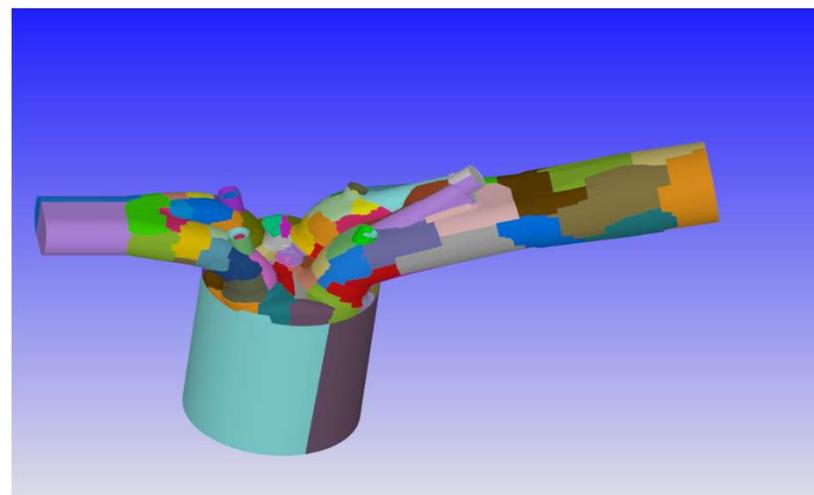
- ◆ 当前的CONVERGE版本将几何表面信息和并行映射信息存储在每个cpu上
 - ◆ 使得所有的cpu上需要一个固定的内存消耗
 - ◆ 使用大量核数的模型通常被划分为更多的parallel blocks，因此每个核上需要更大的固定内存消耗
- ◆ 对100个核并行计算的模型，固定内存消耗不是一个大问题
- ◆ 对1000个核并行计算的模型，固定内存可能是致命的
- ◆ 这些问题在3.0中会得到妥善的解决。

分布式表面存储

将表面分配到各个cpu，使得存储几何所需内存可以实现scale.



48 Partitions



128 Partitions

CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlayed mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆**载荷平衡改进**
- ◆数据结构优化
- ◆后处理文件格式更新

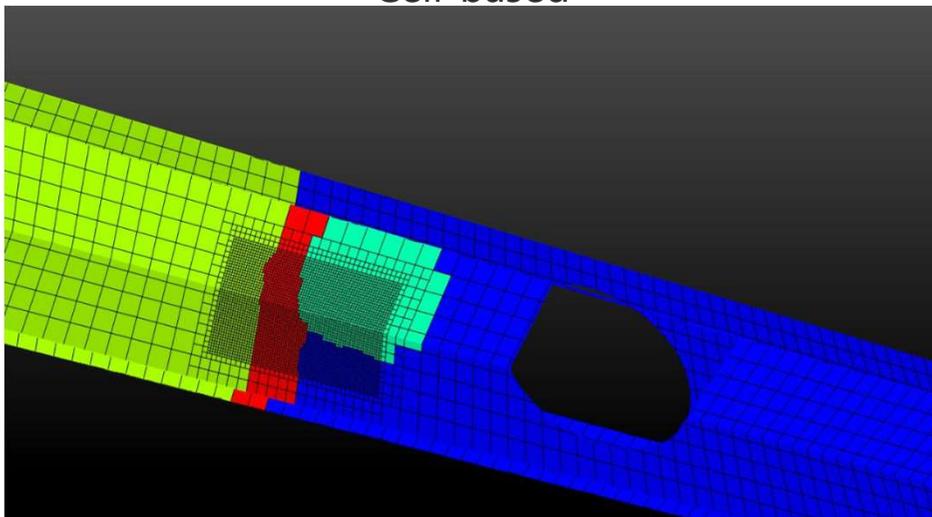
基于网格的载荷平衡 (1/2)

- ◆ 在当前CONVERGE版本(2.4)中，计算域分区是基于Block进行，Block的尺寸通常比计算网格粗一些
 - ◆ 对于一些embedding加密级数较高的case可能导致载荷分布不平均
- ◆ 从3.0起将直接基于计算网格进行载荷分配
 - ◆ 这种分配方式可以对任何模型都实现良好的载荷平衡，即使对某些Embedding或AMR加密级数很高的模型。
- ◆ 无须在每个cpu上存储并行映射表(parallel map)
 - ◆ 无固定内存消耗
- ◆ 自动检测载荷平衡需求
 - ◆ 无需用户设置载荷平衡相关参数

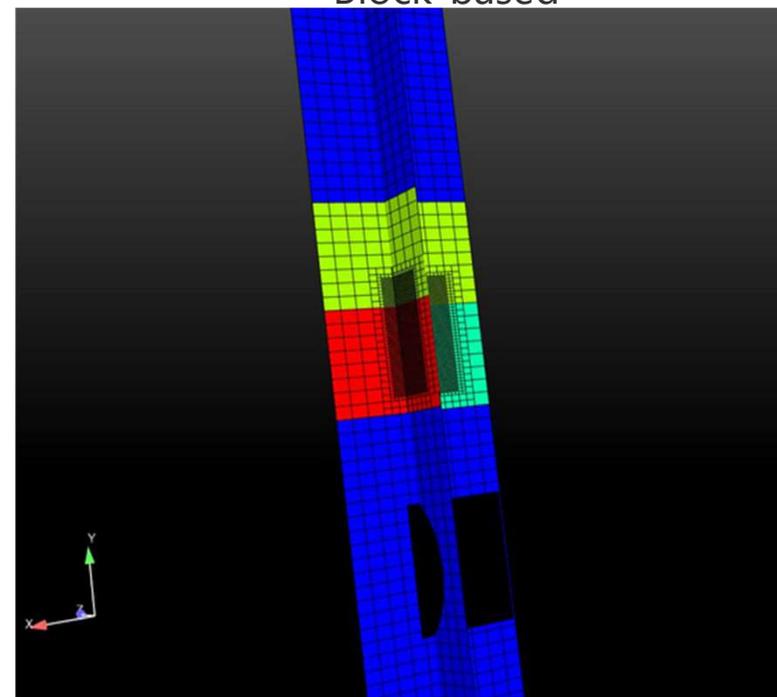
基于网格的载荷平衡(2/2)

Processor	Block-based partitioning	Cell-based partitioning
1	11346	25684
2	46874	24542
3	25057	26332
4	19951	24094

Cell-based



Block-based



CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

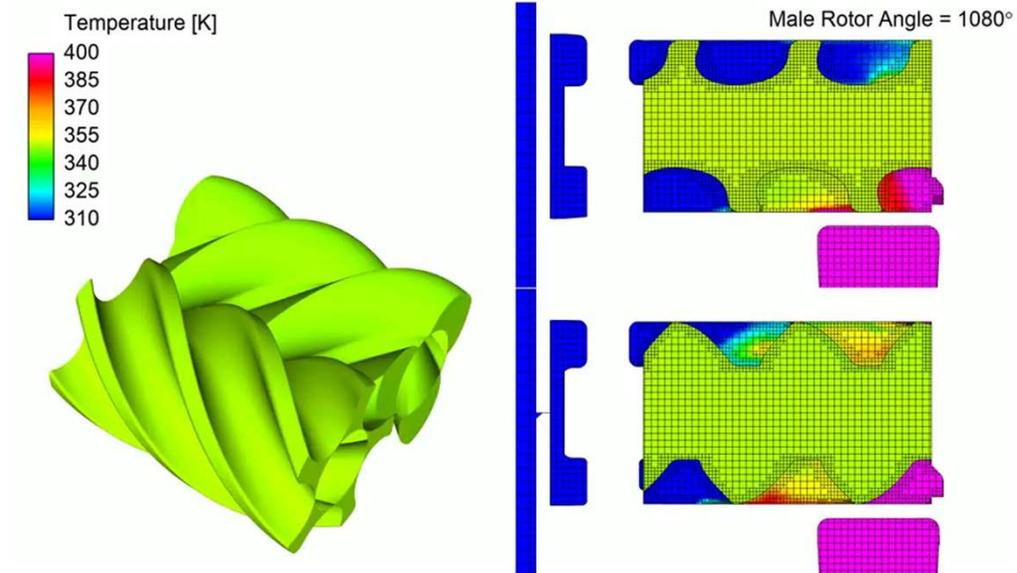
- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆**数据结构优化**
- ◆后处理文件格式更新

数据结构重新设计

- ◆ 面向对象设计原则Object oriented focus
- ◆ 改善scalability
- ◆ 多种MPI/Threading支持
- ◆ 更小的内存消耗足迹
- ◆ 矢量化算子(Vectorized operators)
- ◆ 提升快速添加新功能的灵活性
- ◆ 提升UDF易用性



CONVERGE3.0新功能

3.0版主要新功能

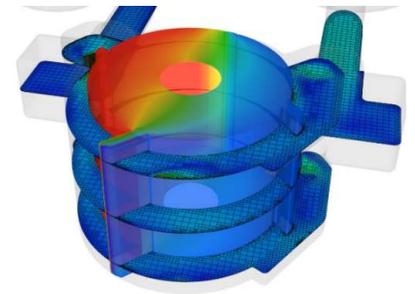
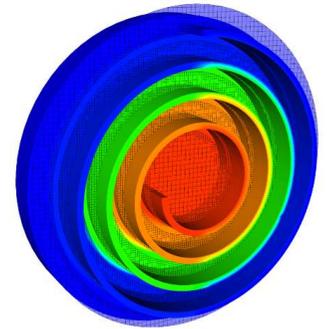
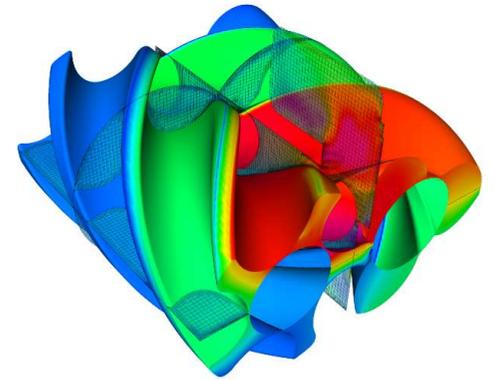
- ◆边界层网格
- ◆嵌入网格(Inlaid mesh)
- ◆通用周期性边界
- ◆求解器性能提升
- ◆MRF模型改进
- ◆尿素输运模型改进
- ◆RSM 湍流模型追加
- ◆YAML 格式输入文件

3.0版求解器架构更新

- ◆内存消耗缩减
- ◆载荷平衡改进
- ◆数据结构优化
- ◆**后处理文件格式更新**

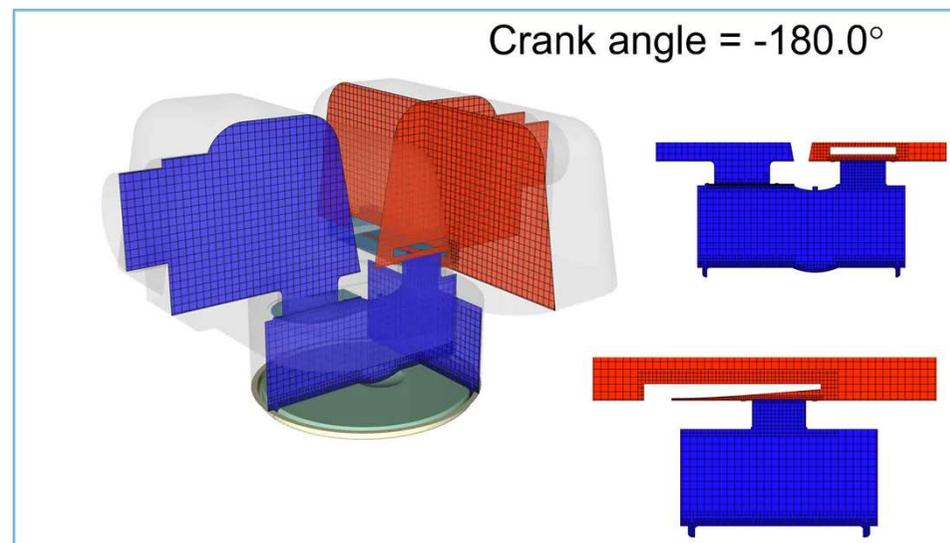
大型结果文件

- ◆ Post, restart, 和 map 文件将以HDF5格式存储
- ◆ 这是HPC业界标准格式，性能和scalability经过长久验证
- ◆ 内置标准的HDF5工具来查看/编辑这些二进制结果文件 (map/restart/post)
- ◆ 对大多数后处理工具，不再需要post_convert操作
- ◆ 可方便通过一些MPI I/O 技巧来优化硬件性能



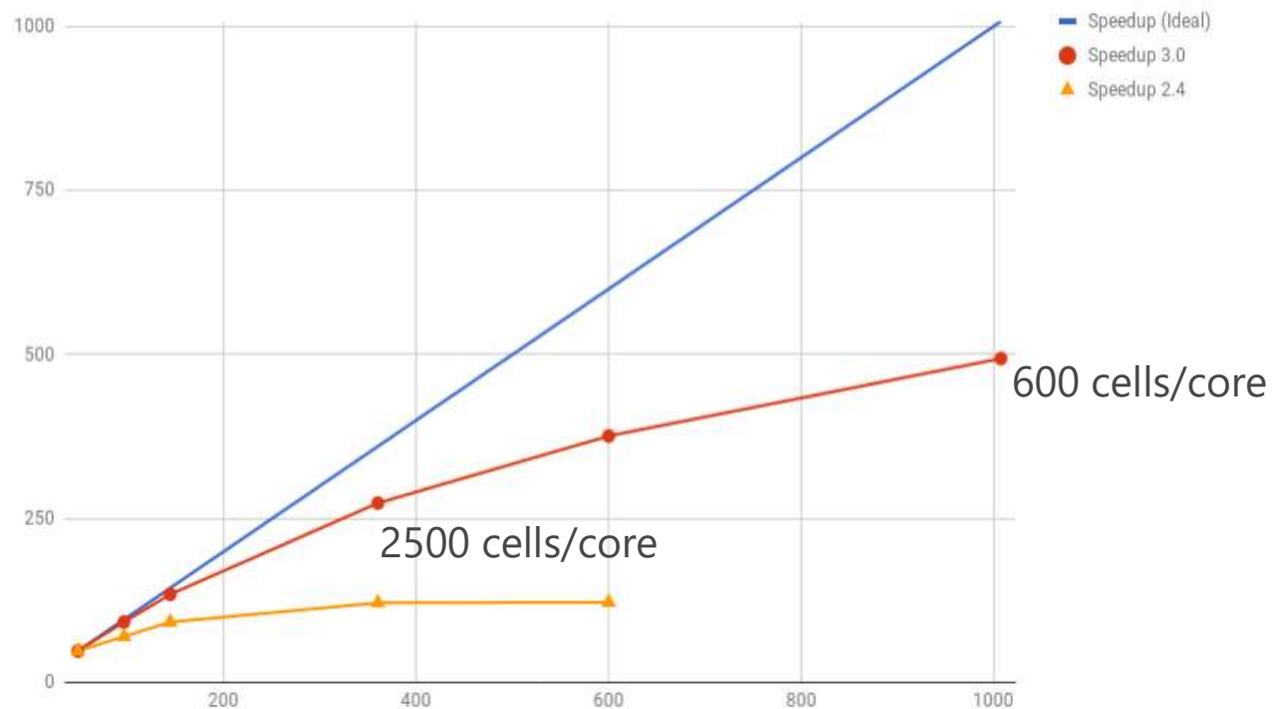
提升用户体验

- ◆ 完成UDF API升级
- ◆ 简化了面向对象API
- ◆ 采用Doxygen标准改善了软件手册的使用性
- ◆ 改善了UDF范例代码的可读性
- ◆ 改善了兼容性（重编译需求更少）
- ◆ 对数据结构和算子进行了无缝优化
- ◆ 支持多种编程语言（Fortran, Python）



CONVERGE3.0并行效率内测结果

- ◆ 测试模型：无运动边界模型
- ◆ 网格数：60万
- ◆ 单核网格数2500时仍具有优良的加速比
- ◆ 即使单核网格数降到600时计算仍在加速



CONVERGE3.0预计发布时间

June 2018