

Codici di calcolo per la termofluidodinamica: descrizione e utilizzo di STAR-CD

Anthony Massobrio¹, Paolo Ramieri²

1 Computational Dynamics Italy, Bologna

2 CILEA, Segrate (MI)

Abstract

Si vuole fornire una descrizione delle potenzialità ed una guida pratica all'utilizzo del codice di calcolo per la termofluidodinamica STAR-CD sulle macchine per il supercalcolo del CILEA

Keywords: Software, fluidodinamica, applicativi CFD

STAR-CD: una breve presentazione

STAR-CD è un potente strumento di analisi termofluidodinamica (CFD) prodotto e distribuito da Computational Dynamics Ltd., società che è parte del CD Adapco Group.

STAR-CD è dedicato alla simulazione numerica in due o tre dimensioni di flussi turbolenti chimicamente reattivi per le principali applicazioni industriali, energetiche, ambientali e biomediche ed è utilizzato sia in fase di sviluppo prodotto che di ricerca. Ecco un elenco di alcune delle numerose applicazioni di STAR-CD:

- nel settore energetico: turbine a gas, turbine a vapore, raffreddamento di reattori nucleari, scambiatori di calore;
- nel settore ambientale: tecnologia marina (piattaforme petrolifere, erosione costiera), sicurezza (*fire hazard* e/o dispersione inquinanti in tunnels, miniere, aeroporti), dispersione di inquinanti in atmosfera, applicazioni idrogeologiche;
- nel settore *automotive*/ferroviario/*heavy duty*: aerodinamica esterna, condizionamento abitacolo, atomizzazione e combustione, condotti di aspirazione e scarico, convertitori catalitici (con reazioni di catalisi eterogenea), *fuel cells*, circuiti di raffreddamento, flusso aria nel sottocofano;
- nel settore del processo chimico: combustione nelle fornaci, flusso di fluidi criogenici, reazioni catalitiche;

- nel settore aerospaziale: condizionamento abitacolo, turbine a gas, aerodinamica esterna.

Le possibilità offerte da STAR-CD si estendono anche ai flussi multifase, all'aeroacustica e all'interazione fluido-struttura.

I fluidi possono essere comprimibili o meno, newtoniani o non-newtoniani, ed il trasporto di calore avviene con tutte le modalità possibili, compreso anche il trasporto di calore coniugato. All'interno del dominio di calcolo si possono avere solidi trasparenti alla radiazione.



Le griglie di calcolo possono essere raffinate in modo arbitrario e movimentate sia mediante sistemi di riferimento multipli che mediante rotazione relativa di parti della mesh rispetto ad altre (*sliding interfaces*). Inoltre è sempre possibile la classica movimentazione della

mesh mediante distorsione dinamica secondo una legge prescritta dall'utente.

STAR-CD si interfaccia con il CAD mediante i formati standard STL e IGES, ha un'interfaccia diretta con SOLIDWORKS e dialoga direttamente con i principali modellatori per elementi finiti (Hypermesh, Patran, ICEM, ANSYS, I-DEAS). Si tratta pertanto dello strumento ideale per l'integrazione della CFD in un ambiente CAD o CADCAE.

STAR-CD dialoga inoltre con i principali strumenti specifici per l'analisi termofluidodinamica, chimicamente reattiva: Flowmaster, Wave, GTPower, Chemkin.

Il solutore STAR-CD è disponibile anche in versione vettoriale e parallela, entrambe installate al CILEA rispettivamente sul calcolatore vettoriale NEC SX/5 e sul cluster HP. Il solutore STAR-HPC (High Parallel Computing) è altamente scalabile ed è la soluzione ideale per quanti devono gestire modelli di grandi dimensioni o simulazioni non stazionarie.

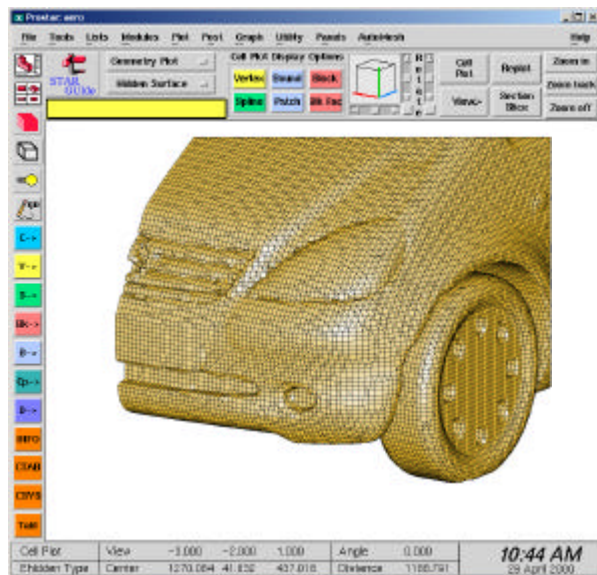
Il meshatore automatico Pro*am

Oltre al solutore a volumi finiti STAR-CD, la Computational Dynamics sviluppa e distribuisce anche il pre/post processore e meshatore automatico Pro*am, anch'esso installato al CILEA e dotato di una interfaccia grafica *user-friendly* ma che non esclude da parte dell'utente la possibilità di programmare delle macro.

Le mesh di calcolo possono essere di tipo strutturato o non strutturato, esaedriche, tetraedriche o di tipo trimmato: queste ultime sono celle che costituiscono una caratteristica propria di Pro*am.

Come usare STAR-CD al CILEA

Vengono ora illustrate le modalità per utilizza-



re STAR-CD sulle macchine per il supercalcolo del CILEA. Per prima cosa è necessario possedere un emulatore di terminale grafico (tipicamente X-WIN se si utilizza Windows oppure XTERM se ci si trova su una piattaforma di tipo UNIX).

Una volta collegati al cluster del CILEA, la cui macchina principale è vic20.cilea.it (un server HP V2500 con 20 processori PA-RISC 8500), occorre digitare il comando:

```
starcd -int
```

per accedere all'interfaccia grafica di STAR-CD, ovvero al meshatore automatico Pro*am descritto in precedenza e che permette anche di effettuare tutte le necessarie operazioni di pre e post-processing. Dall'interfaccia grafica di Pro*am, tramite lo strumento STARGUIde, è possibile attraversare le varie fasi di generazione della griglia di calcolo, di applicazione delle condizioni iniziali ed al contorno, di scelta degli algoritmi di calcolo più indicati e dei modelli fisici utili alla soluzione del problema in esame.

Fatto questo è necessario effettuare una scelta tra la versione vettoriale e quella parallela del solutore: in base ai numerosi benchmarks effettuati, il consiglio è quello di utilizzare il solutore vettoriale su singolo processore sulla macchina NEC oppure il solutore parallelo su otto CPUs sul cluster HP in quanto queste due possibilità forniscono circa le stesse prestazioni in termini di tempo per effettuare il calcolo.

Solutore Vettoriale su NEC

Per utilizzare la soluzione a singolo processore vettoriale su macchina NEC è necessario digitare la linea di comando:

```
solu vector
```

nell'apposito modulo dell'interfaccia grafica di Pro*am: così facendo si seleziona il solutore vettoriale. Solo dopo aver compiuto questa operazione sarà possibile salvare il file contenente la geometria del problema (*.geom) e il file contenente tutte le impostazioni relative al dominio di calcolo del problema in esame (*.prob).

L'utente è ora pronto a lanciare la sua simulazione sulla piattaforma di calcolo del CILEA. Per fare questo è necessario digitare il seguente comando dalla directory in cui si trovano i files relativi al problema:

```
necstar -i <casename> -d/-s [-u]
```

dove "casename" indica il nome che l'utente ha assegnato al caso, la scelta tra le opzioni "-d" e "-s" indica se si vuole effettuare il calcolo in doppia o in singola precisione mentre l'opzione "-u" deve essere indicata solo se si utilizzano user subroutines.

Da notare che la directory di lavoro (situata in una delle sottodirectories dell'area riservata all'utente) deve contenere tutti e solo i files necessari all'esecuzione dell'analisi in quanto l'intero contenuto della directory in questione viene copiata nell'area di scratch della macchina NEC (nick.cilea.it). Inoltre la procedura di lancio si occupa di generare automaticamente l'eseguibile vettoriale star.exe e, al termine dell'esecuzione, di copiare i files ottenuti nella directory da cui è stato lanciato il caso e di cancellare la directory temporanea di lavoro.

Per seguire l'andamento dell'esecuzione sulla macchina NEC, digitare i seguenti comandi:

```
cd /scratch_nick/<userid><jobid>
(per spostarsi nella directory di lavoro)
```

```
tail <jobid>.log
(per visualizzare l'andamento del job)
```

Informazioni sul job in corso:

```
qstatnec
(per vedere lo stato dei propri job su NEC)
```

```
qdelnec <request id>
(per interrompere il job specificato).
```

Solutore parallelo su cluster HP

Un'altra soluzione per ridurre i tempi di calcolo è quella di utilizzare il solutore parallelo STAR-HPC. Per lanciare un'esecuzione sul cluster HP in questa modalità, salvare i files *.geom e *.prob dopo aver digitato il comando:

```
solu scalar
```

nell'apposito modulo dell'interfaccia grafica del pre-postprocessore Pro*am. In seguito si deve aprire l'interfaccia grafica di STAR-HPC con il comando:

```
starhpc -int
```

ed effettuare le operazioni indicate di seguito.

Aprire il menu:

FILE → Open ProHPC information file

Selezionare come Directory Location:

Current directory

Premendo il pulsante con il disegno della cartellina si noterà la presenza di tre files:

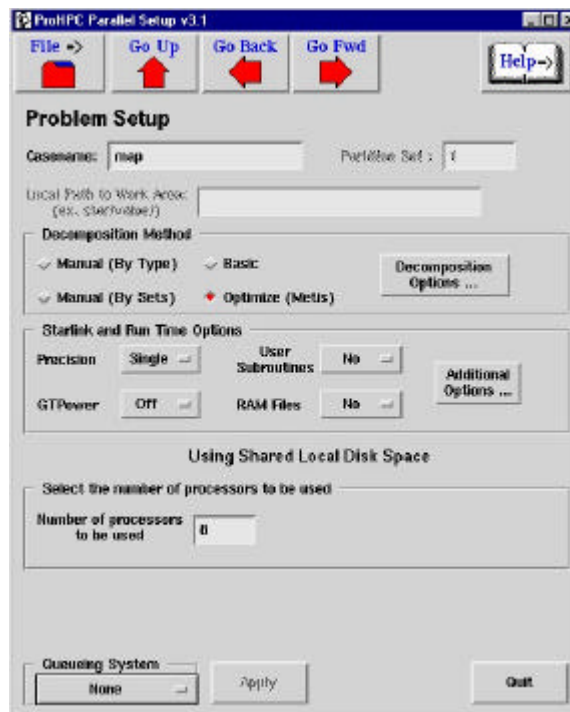
```
parallel-vic20.inf
```

```
parallel-vic23.inf
```

```
parallel-vic24.inf
```

ovvero un file per ogni macchina del cluster HP. Ora è necessario selezionare, modificare e salvare ognuno di questi files, attuando in tutti le stesse modifiche secondo il seguente schema:

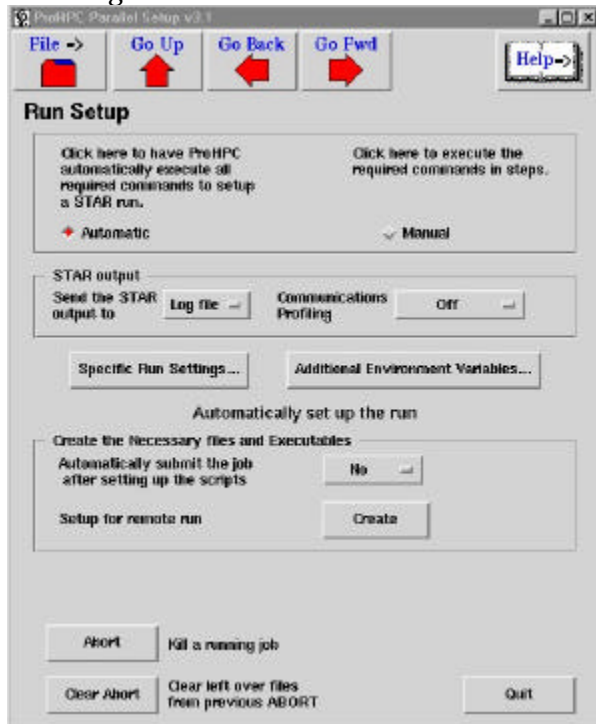
- selezionare il primo dei tre files;
- aprire il menu "problem setup";
- indicare il nome del caso in esame, il numero di CPUs che si intendono utilizzare (con un massimo pari a otto), se il calcolo dovrà essere effettuato in singola o doppia precisione e se verranno utilizzate user subroutines;
- non modificare gli altri parametri, premere "apply" e tornare al menu principale con il pulsante "go up";
- salvare le modifiche con il comando:
FILE → Save ProHPC information file
- ripetere la stessa procedura per i due files *.inf rimanenti.



La compilazione, invece, verrà effettuata dopo aver aperto nuovamente il file parallel-

vic20.inf nel modo visto in precedenza e seguendo queste istruzioni:

- aprire il menu "run setup";
- selezionare la modalità di decomposizione automatica della griglia;
- indicare "no" dove viene richiesto se sottomettere subito il job ("automatically submit...");
- premere il pulsante "create" per decomporre la griglia di calcolo e generare l'eseguibile.



La griglia viene così decomposta in tanti sottodomini di calcolo quanti sono i processori che si intendono usare; viene inoltre generato l'eseguibile per l'ambiente di calcolo parallelo. Una volta usciti dall'interfaccia grafica (premendo "quit"), lanciare l'eseguibile con il comando:

```
starhpc -i <casename> -t <#CPUs>
```

con la stessa avvertenza vista in precedenza di lanciare l'esecuzione da una directory contenente tutti e solo i files necessari. Per seguire l'andamento del job lanciato in modalità parallela occorre spostarsi nella directory contenente i files relativi al job in questione (che si trova in una delle tre aree di lavoro del cluster HP (/scratch, /scratch_vic23 o /scratch_vic24) e visualizzare il contenuto del file *.log come vi-

sto in precedenza. Al termine del job, i files verranno copiati automaticamente nella directory da cui è stato lanciata l'esecuzione mentre la directory temporanea di lavoro verrà rimossa.

Informazioni sui job in corso:

```
bjobs
```

(per vedere lo stato dei propri job su HP)

```
bkill <jobid>
```

(per interrompere il job specificato)

Riferimenti su STAR-CD

Computational Dynamics (Italy)

Via Ferrarese, 3

40128 Bologna

tel. 051-4198675

e-mail: info@cd-italy.com

web: www.cd-italy.com

www.cd.co.uk

www.adapco-online.com

Riferimenti al CILEA

Per ulteriori informazioni sulle applicazioni e sui servizi per il supercalcolo offerti dal CILEA è possibile contattare:

- *Ing. G. Meloni*, responsabile dei sistemi di calcolo del CILEA (e-mail: meloni@cilea.it);

- *Ing. G. Bottoni*, coordinatore dell'unità produttiva per la promozione e il supporto del Calcolo ad Alte Prestazioni (e-mail: bottoni@cilea.it);

- *Dott. M. Cremonesi*, referente per lo sviluppo e l'ottimizzazione di codici per il calcolo intensivo (e-mail: cremonesi@cilea.it);

- *Dott.ssa M. Fiorentini*, referente per i prodotti per la chimica e per la visualizzazione grafica (e-mail: fiorentini@cilea.it);

- *Ing. D. Fugazza*, referente per i prodotti per l'analisi strutturale (e-mail: fugazza@cilea.it);

- *Dott. P. Ramieri*, referente per i prodotti per la fluidodinamica (e-mail: ramieri@cilea.it).