

УДК 519.634

Исследование потенциала суперкомпьютеров для масштабируемого численного моделирования задач гидродинамики в промышленных приложениях

**А. С. Козелков, Р. М. Шагалиев,
В. В. Курулин, А. В. Ялозо,
С. В. Лашкин**

В работе проводится анализ двух основных проблем на пути эффективного применения методов вычислительной гидродинамики в промышленных приложениях: моделирования турбулентности и ускорения расчетов. Приводятся результаты исследования потенциала применения вихреразрезающих подходов для моделирования турбулентности в промышленных приложениях при использовании произвольных неструктурированных расчетных сеток. Предложены алгоритмы ускорения масштабируемых высокопроизводительных вычислений, основанные на применении многосеточных технологий.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации НШ-6637.2016.5, а также при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-01-00267.

Введение

Быстрое развитие в последние десятилетия различных областей науки и техники явилось следствием колоссального прогресса в применении численных методов в исследовании гидродинамики жидкостей, как теоретической, так и экспериментальной. Вычислительная гидродинамика по своей полноте, разнообразию задач и, что особенно актуально, практическому применению выделилась в самостоятельную науку. Практическому внедрению вычислительной гидродинамики способствует бурный рост производительности вычислительной техники, введение в строй суперкомпьютеров терафлопного и даже петафлопного классов, а также серьезные успехи последних лет в области построения эффективных численных методов. Однако, несмотря на существенный прогресс в этой области, точное описание развития и предсказания характеристик многих гидродинамических процессов остается, скорее, исключением, чем правилом. В первую очередь, к таким процессам относятся турбулентность, горение, течения в анизотропных пористых средах, многофазные течения и другие. Усугубляет ситуацию и тот факт, что широкое практическое внедрение даже уже разработанных и математически обоснованных методов вычислительной гидродинамики возможно лишь при использовании в расчетах «качественных» расчетных сеток, состоящих из многогранников правильной формы.

Совершенствование вычислительных технологий идет по пути перехода от анализа отдельных конструктивных элементов к всеобъемлющему трехмерному анализу поведения технологических комплексов в целом. Достижения вычислительной гидродинамики позволяют уйти от расчета обособленных частей и включить в рассмотрение смежные области, а также специфические технологические особенности, которые влияют на эффективность работы промышленного изделия в целом. Требования, предъявляемые к процессу математического моделирования поведения промышленных изделий, не могли не сказаться на развитии методов вычислительной гидродинамики. В настоящее время все больший акцент делается на построении эффективных методов расчета на произвольных неструктурированных сетках, состоящих из многогранников произвольной формы.

Длительный опыт применения методов вычислительной гидродинамики в интересах решения индустриальных задач показал, что из всех нерешенных проблем наиболее важными с фундаментальной точки зрения являются турбулентность и время проведения расчета. Обе эти проблемы достаточно тесно связаны друг с другом.

В представленной статье детально анализируются обе проблемы и возможность их эффективного решения при использовании масштабируемых высокопроизводительных вычислений.

Турбулентность

Численное моделирование турбулентности опирается на несколько подходов, основанных на описании вихревых структур различных масштабов, среди которых выделяют три основных: прямое численное моделирование DNS [1] (Direct Numerical Simulation), моделирование крупных вихрей LES [2] (Large Eddy Simulation) и решение осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса RANS [3] (Reynolds–Averaged Navier–Stokes).

Наиболее применимыми на практике являются RANS модели турбулентности, которые характеризуются устойчивым итерационным процессом и приемлемыми результатами для большинства практически важных типов течений [3]. Однако они не являются универсальными и подходящими для решения широкого круга прикладных задач, и это накладывает определенные требования к их применимости на практике. Данного недостатка лишен «свободный от эмпиризма» DNS подход, применение которого на практике ограничено в виду потребности в огромных вычислительных ресурсах [4]. Альтернативой DNS является «практически свободный от эмпиризма» LES подход, применение которого требует определенного качества дискретных моделей, что проявляется в существенно более мелких сетках по сравнению с RANS. Особенно это характерно для областей вблизи твердых стенок, где вихревые структуры имеют сравнительно малые размеры, и требования к сеткам для LES довольно значительны [5].

Понимание того, что применение LES подхода возможно только в очень отдаленной перспективе, послужило толчком для создания альтернативных моделей. Широко распространено мнение, что в течение ближайших десятилетий на практике будут применяться RANS модели, а для моделирования крупных отрывных вихревых структур вдали от стенок, в силу намного меньших требований к вычислительным ресурсам по сравнению с DNS, можно использовать LES модели. Модели с использованием RANS и LES подходов получили название гибридных RANS-LES моделей [5, 6].

Исторически первой гибридной моделью является метод отсоединенных вихрей (DES) [6]. Исследованию применения DES подхода для моделирования турбулентных течений посвящено уже достаточно много работ [5–8]. Практика его применения в большей своей части сводится к расчетам на многоблочных структурированных сетках с применением схем высокого порядка

точности, вплоть до седьмого [8]. Использование сеток такого класса вызывает определенные проблемы при моделировании течений в промышленных конструкциях сложной геометрической конфигурации, где построение блочно-структурированной сетки возможно, но это неоправданно дорого и крайне неэффективно. При расчетах прикладных задач вычислительной гидродинамики все большее предпочтение отдается неструктурированным расчетным сеткам, состоящим из многогранников произвольной формы с выделением призматических пограничных слоев. Использование произвольной неструктурированной сетки приводит к ряду трудностей, одна из которых заключается в том, что на неструктурированной сетке заметно сужается круг доступных схем для дискретизации конвективных потоков. От свойств выбранной схемы дискретизации напрямую зависит качество DES моделирования: схема должна иметь малую диссипацию и обеспечивать устойчивость счета на произвольной неструктурированной сетке. Этот аспект является основополагающим для применения DES моделей в интересах решения промышленных задач.

Исследование применимости схем для использования DES моделей можно провести на задаче о течении за обратным уступом, которая является достаточно универсальным и общепризнанным тестом для оценки корректности моделирования турбулентных течений [9, 10]. Исследуемое течение содержит отрыв потока от поверхности канала и его последующее присоединение к нижней стенке, а применение DES для решения этой задачи приводит к заметному улучшению результатов по сравнению с RANS [11]. Технология моделирования для сеток всех типов одинаковая: сначала осуществляется стационарный расчет с использованием модели SST, далее производится нестационарный расчет задачи с использованием модели IDDES. Начальными условиями для нестационарного расчета выступают результирующие поля стационарного расчета.

Общее время моделирования нестационарного течения составляет 1 с, при этом за первые 0,5 с течение выходит на статистически установившийся режим, после чего в течение следующих 0,5 с накапливаются статистические данные для определения осредненных характеристик течения, по которым определяется коэффициент трения C_f вдоль нижней стенки.

Результаты расчета на блочно-структурированной сетке представлены на рис. 1. Результаты IDDES по отношению к RANS заметно ближе к эксперименту, с хорошей точностью предсказано положение точки присоединения вихря и минимальное и максимальное значения коэффициента трения. Этот результат будем считать эталонным и применять для сравнения с результатами, полученными на неструктурированных сетках.

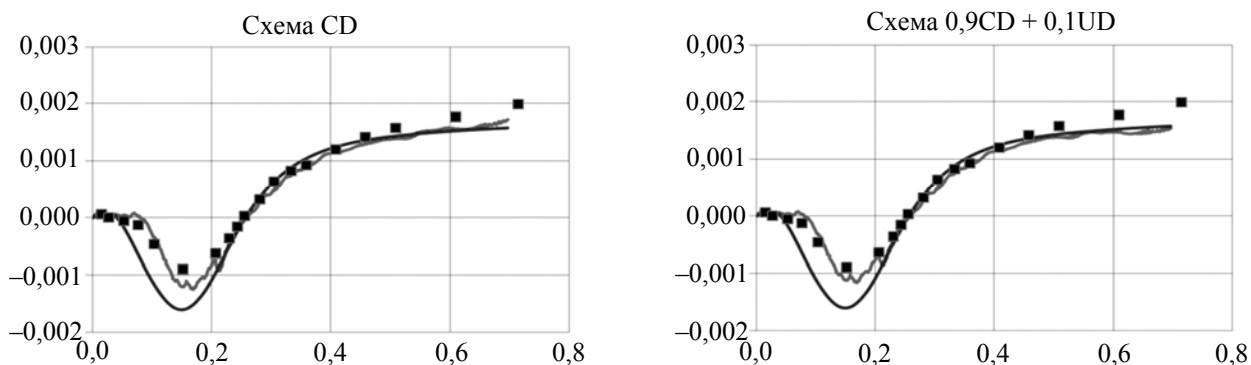


Рис. 1. Коэффициент трения на блочно-структурированной сетке:

■ – эксп., — — IDDES, — — SST

Для анализа эффективности DES-моделирования на полиэдральных и тетраэдральных сетках используются 7 расчетных сеток: 3 полиэдральных, 2 тетраэдральных и 2 сетки из треугольных призм. В табл. 1 приведены их основные характеристики.

Таблица 1

Характеристики неструктурированных сеток

№	Имя	Тип ячеек	Кол-во ячеек	Размер ячеек в области LES, м
1	P1	Полиэдры	1,2 млн	0,036
2	P2	Полиэдры	2,0 млн	0,027
3	P3	Полиэдры	3,2 млн	0,022
4	PR1	Треугольные призмы	2,0 млн	0,036
5	PR2	Треугольные призмы	4,0 млн	0,025
6	T1	Тетраэдры	3,8 млн	0,034
7	T2	Тетраэдры	6,2 млн	0,021

Результаты моделирования для неструктурированных сеток представлены на рис. 2. На полиэдральной расчетной сетке P1 хороших результатов получить не удалось – положение точки присоединения вихря сильно сдвинуто вниз по потоку. Данная сетка имеет характерный размер ячеек, сопоставимый с блочно-структурированной сеткой, однако полиэдральные элементы заметно повышают диссипативность схемы, и это плохо сказывается на точности моделирования вихрей в области LES. Эта проблема частично устраняется путем измельчения сетки: на сетке P2 положение точки присоединения ближе к его экспериментальному значению. На самой мелкой сетке P3 результаты лучше и приближаются к результатам, полученным на блочно-структурированной сетке.

Использование сеток, составленных из треугольных призм, дает схожую картину. Разрешения сетки PR1 не хватает для правильного описания течения в основной области, в то время как результаты, полученные на сетке PR2, состоящей из 4 млн ячеек и имеющей в 1,5 раза меньший характерный размер ячеек, схожи с результатами, полученными с помощью блочно-структурированной сетки в 1,05 млн ячеек (рис. 2,б).

При использовании тетраэдральных сеток приемлемый результат получается на сетке T2, которая содержит 6 млн ячеек с характерным размером, в 1,7 раза меньшим, чем на блочно-структурированной сетке (рис. 2,в). Результаты показывают, что использование в основной области неструктурированных сеток требует уменьшения характерного размера ячеек в основной области, что заметно повышает необходимое общее число ячеек. Для получения приемлемых результатов на полиэдральной сетке число ячеек в основной области должно быть как минимум в 2–3 раза больше, чем на гексагональной сетке, а характерный размер полиэдральных ячеек должен быть в 1,3 раза меньше, чем характерный размер шестигранников. Для сетки, составленной из треугольных призм, приемлемый результат был получен лишь на сетке, содержащей в 4 раза больше ячеек с характерным размером 0,025 м, что в 1,4 раза меньше, чем характерный размер ячеек блочно-структурированной сетки. Использование тетраэдральной сетки требует уменьшения характерного размера в 1,6 раза до 0,021 м. Чтобы обеспечить такой характерный размер тетраэдров в основной области, LES требуется около 6 млн расчетных ячеек, что в 6 раз больше, чем число ячеек на блочно-структурированной сетке. Более детальную оценку эффективности схем дискретизации конвективных потоков, а также рекомендуемые значения констант для des-моделей, можно найти в [8].

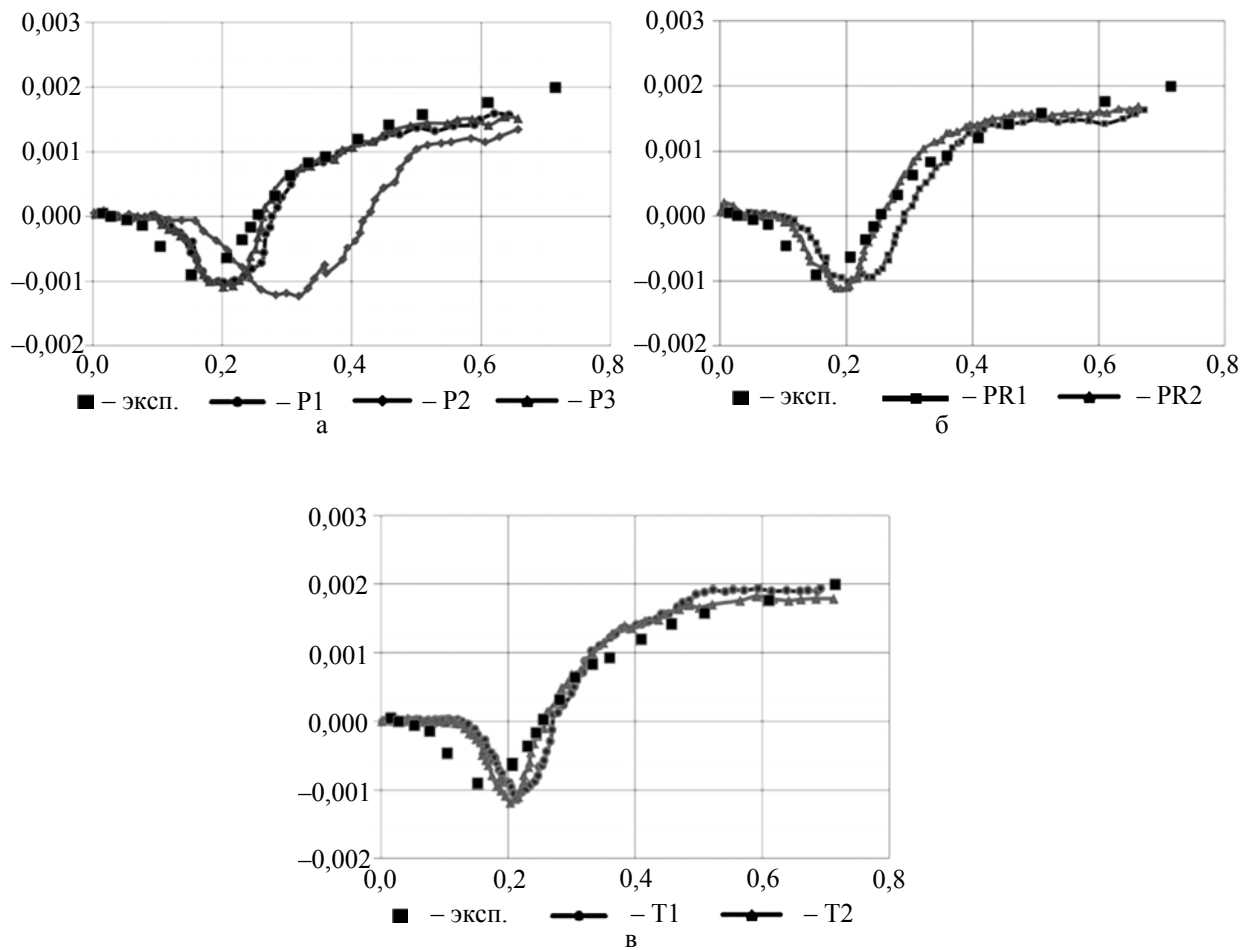


Рис. 2. Коэффициент трения: полиэдральные сетки P1–P3 (а), сетки из треугольных призм PR1-PR2 (б) и тетраэдральные сетки (в)

Необходимо сказать, что в данной задаче рассматривались лишь осредненные характеристики течения, а именно осредненный коэффициент трения. В случае расчета нестационарных характеристик течения использование неструктурированных сеток может потребовать дальнейшего уменьшения характерного размера ячеек. Расчетная область данной задачи не содержала регионов с «плохой» геометрией (острые кромки, плохо обтекаемые элементы) и регионов с сильно изменяющимися градиентами скоростей, поэтому схема $0,9CD + 0,1UD$ была вполне приемлемой для устойчивого счета. В других случаях ее применение не гарантирует устойчивости с такими коэффициентами смещения. Увеличение в формулировке разностной схемы доли «противопоточности» (до 20–30 %) не решает проблему, так как схема становится сильно диссипативной.

Основываясь на данном исследовании, можно сказать, что при использовании вихреразрешающих подходов и конечно-объемной технологии дискретизации оправданным является использование лишь преимущественно шестигранных расчетных сеток. Оценка необходимого характерного размера расчетных ячеек для моделирования конкретного течения с использованием модели DES является нетривиальной задачей [5]. В случае задач внутренней гидродинамики характерные размеры ячеек можно оценить из условия разрешения (mat.) пограничного слоя. В работе [12]

показано, что безразмерная величина ячейки вдоль потока Δx^+ и поперек потока Δy^+ должна удовлетворять следующим требованиям: $\Delta x^+ < 60$, $\Delta y^+ < 25$; вблизи твердой стенки $\Delta y^+_{wall} < 1$, где

$$\Delta x^+ = \frac{\rho u_t \Delta x}{\nu}, \quad \Delta y^+ = \frac{\rho u_t \Delta y}{\nu}. \quad (1)$$

Здесь ρ – плотность среды, ν – кинематическая вязкость, u_t – безразмерная скорость в ближайшей точке твердой поверхности, Δx и Δy – характерный размер ячеек вдоль и поперек потока. Выполнение такого требования гарантирует получение правильного решения в пограничном слое и является общеупотребимым в задачах с использованием вихреразрешающих моделей турбулентности [12].

Для типичной задачи внутренней гидродинамики – задачи о смешении разнотемпературных теплоносителей [13] при числе Рейнольдса $Re = 1,5 \cdot 10^4$ – такие оценки дают примерно $15 \cdot 10^6$ ячеек расчетной сетки и $3 \cdot 10^4$ шагов по времени. Для турбулентного течения теплоносителя в трубе с охлаждением с числом $Re = 5 \cdot 10^5$ уже потребуется более $1 \cdot 10^9$ ячеек и не менее $1 \cdot 10^5$ шагов по времени.

При наличии больших зон отрыва (обтекание препятствий, уступов, крыловых профилей), а также в сложных геометрических конфигурациях подобный критерий может дать лишь очень грубую оценку необходимого сеточного разрешения и в этом случае для качественного использования вихреразрешающих моделей требуются расчеты на нескольких последовательно сгущающихся расчетных сетках [5]. Практика использования модели DES показывает, что для получения хороших результатов в задаче обтекания упрощенной модели автомобиля [14] необходимо порядка $5 \cdot 10^6$ ячеек. В случае обтекания реальной сеточной модели автомобиля и измерения аэроакустических характеристик приемлемая расчетная сетка может легко превысить порог в миллиард ячеек. Для расчета задач такого класса нужны высокоэффективные численные методы решения систем линейных алгебраических уравнений и алгоритмы распараллеливания вычислений. Кроме того, что для использования метода DES нужны сетки достаточной дискретизации. Еще одной сложностью его использования в промышленных приложениях является то, что в этом методе область модели LES определяется автоматически по наличию турбулентных составляющих течения и характерному размеру сеточного разрешения [11]. Этот метод не содержит механизмов создания искусственных турбулентных пульсаций в поле скорости при переходе от RANS решения к LES, данные пульсации образуются естественными условиями в процессе течения жидкости. Это приводит к появлению переходных зон, где уже функционирует модель LES, но характерного турбулентного контента в ней еще недостаточно [15]. При расчете течений с большими отрывными областями такие зоны малы и не приводят к заметному ухудшению решения, однако в задачах с небольшими областями отрыва, характерными, например, для внутренних течений, наличие переходных зон может существенно ухудшить качество DES-моделирования [15].

Данного недостатка лишен зонный RANS-LES подход с применением явной, искусственной генерации турбулентных флуктуаций скорости на входных границах LES области [16, 17]. Параметрами для генерации подобных флуктуаций выступают скорость и компоненты тензора напряжений Рейнольдса, полученные из RANS решения, а в качестве генератора используются специализированные алгоритмы [16–18]. В большинстве работ в качестве базовой используется модель RANS SST [18]. В задачах с существенно ассиметричными зонами такие модели дают существенную погрешность в определении тензора рейнольдсовских напряжений [19], что на границе областей RANS–LES приводит к погрешностям в генерации турбулентных пульсаций. Недостаточная точность в генерации пульсаций, в свою очередь, приводит к увеличению за границей RANS–LES

переходной зоны, что при расчете задач требует дополнительного увеличения области LES и, следовательно, увеличения количества ячеек в расчетной сетке. Выходом здесь является использование моделей класса RSM [19]. В работе [20] приводится алгоритм, основанный на модели EARSM, позволяющий увеличить точность расчета для данного подхода. На рис. 3 показаны мгновенные поля скорости, полученные по модели EARSM-LES и модели DES, при расчете течения в прямоугольном несимметричном диффузоре, в котором появляется анизотропия гидродинамических характеристик.

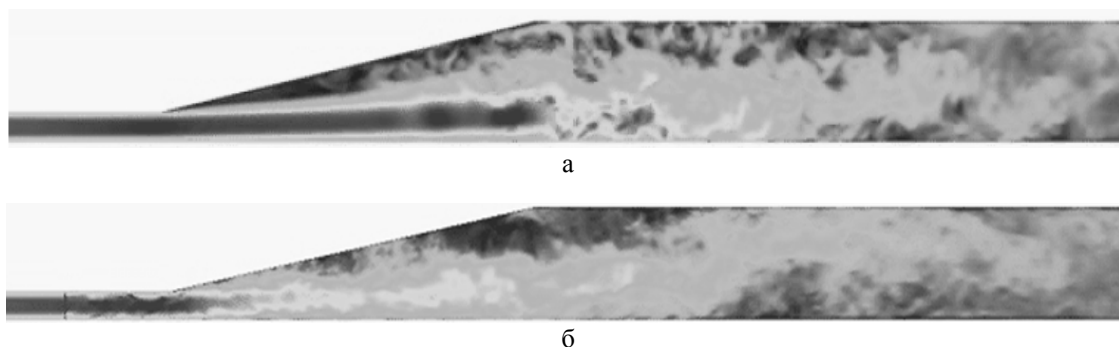


Рис. 3. Мгновенные поля скорости, полученные с использованием моделей DES (а) и EARSM–LES с генератором синтетической турбулентности (б)

Из рисунков видно, что модель DES затягивает турбулизацию потока, что приводит к большой погрешности в профиле осредненной скорости. Кроме того, вследствие отрицательного градиента давления в канале образуется обширная отрывная зона, нахождение положения и формы которой, в свою очередь, является непростой задачей. В работе [20] показано, что при использовании явной генерации турбулентного контента структура течения меняется в нужную сторону и профиль скорости становится ближе к экспериментальным данным (рис. 4). Вместе с этим увеличивается точность расчета благодаря использованию в качестве базовой модели EARSM.

Зонный RANS–LES подход оказывается достаточно эффективным при расчете с любым размером области отрыва [21]. Использование данной технологии в промышленных расчетах позволит выделить требуемые для уточнения расчетных характеристик зоны и применить в них генератор синтетической турбулентности, который совместно с моделью EARSM позволит при гораздо меньших вычислительных ресурсах более точно смоделировать рассматриваемое течение.

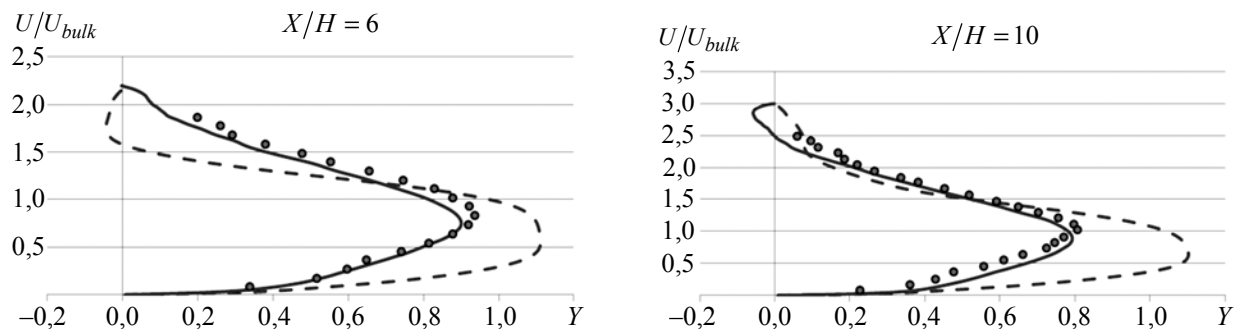


Рис. 4. Профили продольной скорости: --- DES, — EARSM–LES, ● – эксп.

Скорость счета

Средняя расчетная сетка, применяемая в настоящее время на практике для решения задач вычислительной гидро-, аэродинамики в промышленных приложениях с использованием RANS моделей турбулентности, составляет порядка 50–100 млн ячеек, а среднее время расчета до установления в зависимости от задачи – более суток. Для использования численных методов при проектировании современных промышленных изделий потребуется решать несколько постановок задач с несколькими десятками вариантов параметров потока. Скорость счета здесь играет очень большую роль. И, естественно, ситуацию здесь усугубляет тот факт, что для разрешения вихревых структур различных масштабов с использованием LES и DES моделей турбулентности потребуются не только более качественные сетки, но и более продолжительное время счета.

Большая часть течений, моделируемых на практике, решается в «квазистационарном» режиме, для которого предпочтительно использование неявных схем дискретизации. Применение неявных схем снимает ограничения на шаг интегрирования по времени, который выбирается, исходя из соображений необходимой точности вычислений. Неявная дискретизация уравнений Навье–Стокса порождает систему разностных уравнений, которая решается тем или иным итерационным методом. Выбор подходящего итерационного метода и его реализация во многом определяют общую эффективность вычислительного алгоритма.

В большинстве практических задач дискретизация уравнений Навье–Стокса дает систему разностных уравнений с плохо обусловленной матрицей. Число обусловленности для большинства задач составляет $10^7 - 10^8$, а для некоторых течений приближается к 10^{10} [21]. Это является причиной того, что наиболее затратным этапом является решение матрицы СЛАУ, которое при использовании классических итерационных методов занимает около 90 % вычислительного времени расчетного шага. При этом классические итерационные методы либо перестают работать, либо дают очень медленную скорость сходимости. Одним из универсальных методов решения систем разностных уравнений является многосеточный метод [22], основанный на использовании последовательности вложенных сеток и операторов перехода от одной сетки к другой. Данный метод в будущем будет основным при решении промышленных задач, однако при решении плохо обусловленных матриц он требует аккуратной и оптимальной реализации. В литературе описывается достаточно большое число реализаций алгебраических многосеточных методов, многие из которых имеют открытый исходный код, как, например, BoomerAMG. Обзор алгебраических многосеточных методов приводится в работе [23]. Однако его реализация на системах петафлопного класса требует специфических алгоритмов распараллеливания, особенно в многосвязных областях.

При распараллеливании многосеточного метода огрубление матриц при переходе от уровня к уровню происходит независимо на каждом MPI-процессе [24]. Процесс огрубления в параллельном режиме порождает две проблемы. Во-первых, огрубление останавливается в случае, если на каждом процессе осталось по одной ячейке. Во-вторых, на грубых уровнях, где размерность матриц невелика, время, затрачиваемое на межпроцессорные обмены, из-за латентности коммуникационной среды начинает многократно превосходить время, затрачиваемое на вычисления. Для решения данных проблем в [21] предложено выполнять сбор всех матриц небольшого размера на одном процессе, формировать из них глобальный уровень и продолжать огрубление и решение в последовательном режиме (рис. 5,а).

Использование глобального уровня позволяет не только завершить процесс огрубления полностью в параллельном случае, но и, из-за хранения глобального уровня на одном процессе, удается избежать накладных расходов из-за избыточных межпроцессорных обменов при обработке уровней с самыми грубыми сетками.

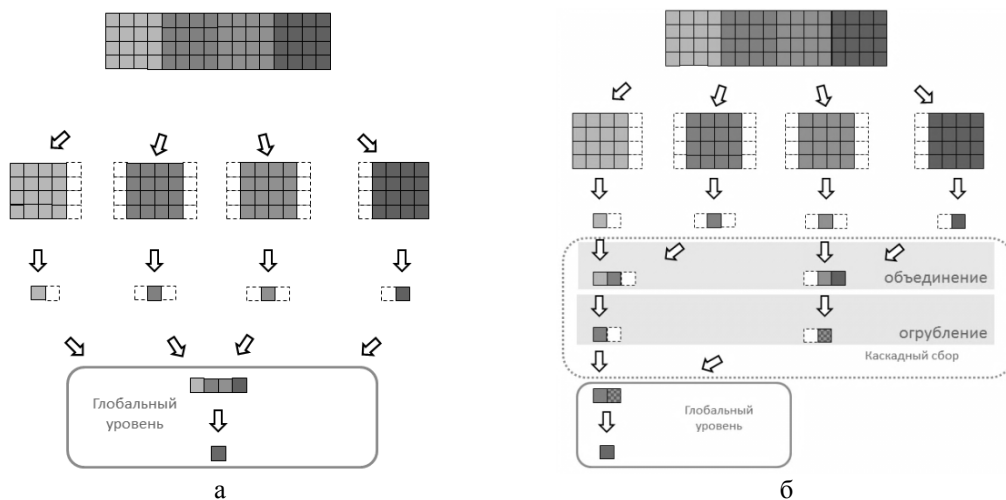


Рис. 5. Формирование глобального уровня (а) и его каскадный сбор (б)

Для анализа эффективности предложенного алгоритма рассмотрим стационарное изотермическое турбулентное течение вязкой несжимаемой жидкости в прямолинейной гладкой круглой трубе [25], соответствующее числу Рейнольдса 10000 на трех различных сеточных моделях, соответствующих 40000, 800000 и 1500000 ячеек. Для каждой из представленных моделей задача решалась в двух постановках с использованием двух методов решения СЛАУ: предобусловленным методом сопряженных градиентов (PCG) и алгебраическим многосеточным методом с агрегативным способом огрубления (AMG). Решение задачи проводилось в параллельном режиме, и для всех вариантов количество процессоров равнялось двенадцати. Результаты решения давления для матриц представлены в табл. 2.

Таблица 2

Полное время решения задачи (в секундах) и число итераций

Решатель СЛАУ	Сетка 1 (40000)		Сетка 2 (800000)		Сетка 3 (1500000)	
	Число итераций	Время решения	Число итераций	Время решения	Число итераций	Время решения
AMG	461	20,66	590	565	1168	3828
PCG	489	62,57	549	16113	1168	158742

Из представленных результатов видно, что время решения задачи при использовании метода сопряженных градиентов для самой грубой сеточной модели увеличилось в 3 раза. Время решения данной задачи для самой подробной сеточной модели с использованием метода сопряженных градиентов составило более чем в 40 раз больше времени по сравнению с AMG. Отметим здесь, что эти цифры не являются характерными для данного класса задач, а зависят от многих факторов, таких как структура течения, сложность сеточной модели, накладываемые граничные условия и т. д. Опыт практического применения многосеточного метода для решения задач вычислительной гидродинамики показывает, что среднее время увеличения скорости счета по сравнению с методом сопряженных градиентов составляет 4–6 раз, хотя и эти цифры не являются характерными и зависят от типа рассматриваемой задачи.

Чтобы показать преимущество использования глобального уровня, было выбрано три различных постановки, отличающихся между собой количеством используемых MPI-процессов. Для численных экспериментов было выбрано процессоров 6, 12 и 24. Задача решалась в двух вариациях:

с решателем AMG без использования глобального уровня (AMG1) и с использованием глобального уровня (AMG2). Время решения и число итераций до сходимости решения задачи представлено в табл. 3.

Таблица 3

Полное время решения задачи (секунды) и число итераций

Решатель СЛАУ	6 процессов		12 процессов		24 процесса	
	Число итераций	Время решения	Число итераций	Время решения	Число итераций	Время решения
AMG1	1425	647	1377	365	1397	238
AMG2	1469	552	1402	233	1442	104

Из представленных результатов видно, что время решения при использовании решателя с глобальным уровнем уменьшается на 24 процессах более чем в два раза, хотя на 6 процессах это значение равно 1,2 раза. Видна тенденция нелинейного увеличения физического времени счета с увеличением числа процессов. Это обусловлено, в первую очередь, временем, необходимым для передачи сообщений межпроцессорного взаимодействия MPI. Такая тенденция прослеживается во всех задачах гидродинамики, и единственным способом решения данной проблемы является сбор глобальной матрицы и решение ее в последовательном режиме.

Наиболее ярко различие между применением классических и многосеточных технологий решения СЛАУ проявляется при решении задач, составляющих десятки миллионов счетных ячеек, где время счета каждой отдельной задачи может различаться на несколько часов, а то и десятков. В качестве демонстрации такого преимущества приведем решение задачи течения в канале за обратным уступом, представленной в разделе «Турбулентность». Результаты решения задачи на разном количестве процессов на сетке в 30 млн ячеек представлены в табл. 4.

Таблица 4

Результаты решения задачи обтекания обратного уступа

Количество процессов	AMG2		AMG1		PCG	
	Время решения, с	Число итераций	Время решения, с	Число итераций	Время решения, с	Число итераций
100	42701	10295	176973	10179	177169	10414
250	17458	9886	126147	10240	83461	10719
500	11199	9882	72190	10211	54799	9998
1000	12352	10368	75130	10355	23787	10009
2000	15848	10001	95201	9611	19858	10172

Из результатов расчетов следует, что использование глобального уровня в многосеточном методе позволяет значительно сократить время решения задачи. Кроме того, многосеточный метод с глобальным уровнем по времени решения является более предпочтительным, чем метод сопряженных градиентов. Тем не менее следует отметить, что метод сопряженных градиентов лучше масштабируется на большом числе процессов. Это связано с тем, что решение на глобальном уровне является этапом, выполняющимся в последовательном режиме, и, следовательно, ухудшает масштабируемость. Этот аспект также скажется на ограниченности алгоритма при использовании масштабных сеток в сотни миллионов ячеек. Это хорошо видно из табл. 5 для расчета задачи на 2000 процессорах. В этом расчете время для AMG и PCG практически сопоставимы, и эта тенденция будет сохраняться при увеличении количества процессоров, но все же эффективность распараллеливания будет зависеть от сложности геометрии и конкретной физической постановки задачи.

На наш взгляд, в ближайшей перспективе, 3–5 лет, данный алгоритм закроет все потребности в масштабируемых численных вычислениях в интересах решения индустриальных задач. Его можно эффективно использовать на сетках вплоть до 500 млн ячеек. Однако при расширении класса решаемых задач вычислительной гидродинамики, включая усложняющиеся модели для горения и многофазности с использованием свободных от эмпиризма моделей турбулентности, этого алгоритма будет явно недостаточно.

Дискретные модели большой размерности, состоящие из десятков и сотен миллионов ячеек, необходимо решать с использованием тысяч или нескольких десятков тысяч процессоров. Поэтому данный алгоритм становится самым узким местом ввиду плохой масштабируемости: при определенном размере решаемой задачи памяти узла, на котором расположен основной процессор, может просто не хватить для построения глобального уровня. Выходом здесь является применение алгоритма каскадных уровней для постепенного уменьшения числа процессов, участвующих в счете, но сохранения при этом преимуществ глобального уровня. Алгоритм каскадных уровней представлен в [21]. Он включает в себя этап разбиения на пары всего исходного набора остаточных после огрубления матриц и выполнение их попарного объединения. На втором этапе операция повторяется до тех пор, пока не будет получена общая матрица грубого уровня (рис. 5, б).

Само по себе объединение уровней, помимо формирования информации о новом уровне, содержит в себе процедуру переопределения информации о межпроцессорных обменах, которая также требует затрат какой-то части процессорного времени. Кроме того, параллельная процедура огрубления каскадного уровня требует введения дополнительных межпроцессорных обменов, которые в случае со скалярной реализацией сбора глобального уровня отсутствуют. Основным преимуществом каскадной схемы суммирования является наличие масштабируемости алгоритма. При этом фактически снимается ограничение на максимальный размер решаемой задачи из-за возможной нехватки памяти узла, на котором производится формирование глобального уровня. Кроме того, увеличивается скорость построения глобального уровня, поскольку его составные части формируются и огрубляются независимо друг от друга. Результаты применения данного алгоритма для расчета турбулентного течения в круглой трубе представлены в табл. 5.

Таблица 5

Результаты вычислительного эксперимента в круглой трубе

Количество процессов	Скалярная реализация сбора глобального уровня		Каскадный сбор глобального уровня	
	Время построения, с	Время решения, с	Время построения, с	Время решения, с
100	0,003	0,019	0,001	0,026
250	0,025	0,021	0,002	0,104
500	0,099	0,069	0,003	0,137
1000	0,294	0,128	0,004	0,198
1500	0,573	0,550	0,005	0,226

На небольшом процессорном поле время построения глобального уровня составляет незначительную часть от общего времени шага, и, несмотря на то, что каскадное построение во всех случаях работает быстрее, это ускорение нивелируется на фоне общего времени решения СЛАУ. В то же время, при увеличении процессорного поля до нескольких сотен, видно, что каскадный сбор дает существенное ускорение общего решения СЛАУ, поскольку в данном случае скалярный алгоритм сгенерирует относительно большую матрицу глобального уровня, огрубление и решение которой проводится в последовательном режиме и требует значительных затрат времени.

Решение задачи обтекания обратного подогреваемого уступа на расчетной сетке 14 млн дает цифры, представленные в табл. 6.

Таблица 6

Течение за обратным уступом на сетке в 14 млн ячеек

Количество процессов	Скалярная реализация сбора глобального уровня		Каскадный сбор глобального уровня	
	Время решения, с	Число итераций	Время решения, с	Число итераций
100	13378	6113	11964	5397
250	3977	4484	4466	5581
500	2418	4629	2635	4452
1000	3657	5006	1171	4485
1500	6189	4592	1359	5675

По результатам расчетов, во-первых, можно сделать вывод, что использование процедуры построения глобального уровня дает значительное преимущество по скорости сходимости многосеточного метода, а следовательно, и общему времени решения задачи, причем данный эффект усиливается с увеличением процессорного поля. Так, для тестовых расчетов на 1000 и 1500 процессорах использование скалярной реализации алгоритма построения глобального уровня позволило уменьшить общее время решения задачи примерно в 3 раза. Во-вторых, каскадный алгоритм построения глобального уровня дает лучшую производительность по сравнению со скалярной процедурой построения глобального уровня на большом количестве процессоров. Для наглядности (рис. 6) приводятся только результаты, полученные с использованием скалярной версии алгоритма сбора глобального уровня и каскадной версии, реализованной в рамках данной работы. Для сетки в 30 млн ячеек результаты сведены в табл. 7.

Таблица 7

Течение за обратным уступом на сетке в 30 млн ячеек

Количество процессов	Скалярная реализация сбора глобального уровня		Каскадный сбор глобального уровня	
	Время решения, с	Число итераций	Время решения, с	Число итераций
125	31238	10482	33127	10828
250	17420	10853	18591	11057
500	11500	11241	11227	10142
1000	9382	9144	6263	9043
2000	17124	8463	8184	11240

Сравнение производительности скалярного и каскадного алгоритмов построения глобального уровня приводятся на рис. 6.

Как видно из полученных результатов, использование глобального уровня значительно увеличивает скорость сходимости задачи с увеличением количества процессоров. При использовании 1000 процессоров скалярная процедура построения глобального уровня дает общее ускорение решения задачи примерно в 2 раза. Алгоритм каскадного сбора обеспечивает существенное ускорение процедуры построения глобального уровня. При измельчении задачи менее чем по ~60 тыс. расчетных ячеек на процессор (при использовании более 500 процессоров) имеем значительное и возрастающее преимущество по производительности алгоритма каскадного сбора глобального уровня.

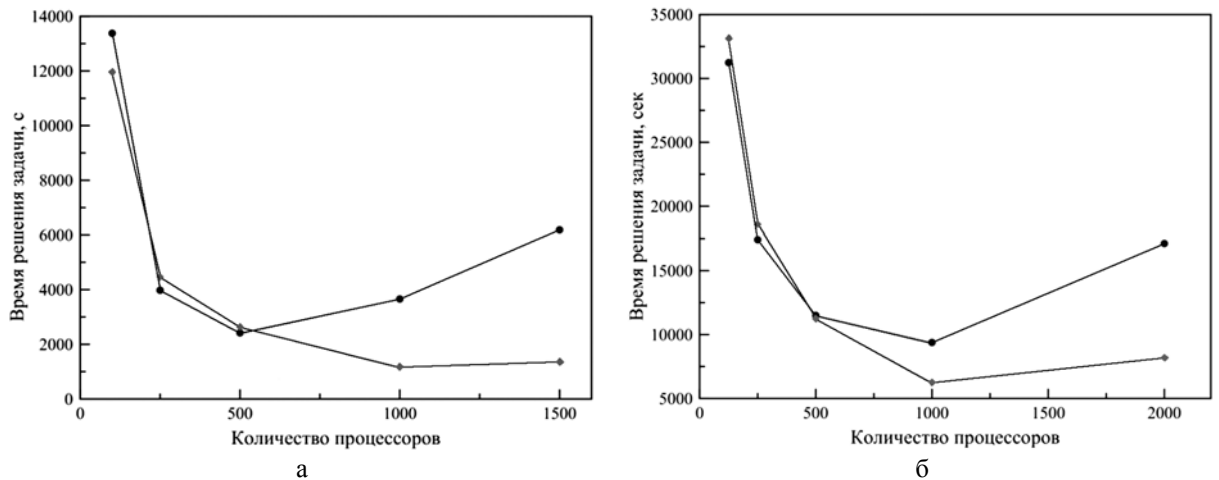


Рис. 6. Сравнение производительности скалярного (—●—) и каскадного (---◆---) алгоритмов на задаче размером 14 млн ячеек (а) и 30 млн ячеек (б)

Использование глобального уровня положительно сказывается на общей производительности многосеточного метода. При этом использование каскадного алгоритма дает еще большую производительность по сравнению со скалярной процедурой построения глобального уровня. Причем получаемое ускорение растет с увеличением количества процессоров, используемых для решения задачи. Однако в ряде случаев алгоритм каскадного сбора дает несущественное замедление производительности по сравнению со скалярной процедурой построения глобального уровня. Это обусловлено наличием дополнительных межпроцессорных обменов при построении и последующем огрублении иерархии каскадных уровней.

Все расчеты в данной статье выполнены в пакете программ ЛОГОС. Пакет программ ЛОГОС успешно прошел верификацию и показал достаточно хорошие результаты на серии различных гидродинамических задач [20, 21, 26], включая расчеты турбулентных и нестационарных течений [27, 28], а также волн цунами космогенного [29, 30] и оползневое происхождения [31, 32].

В настоящее время пакет программ ЛОГОС базируется на передовых научно-технических решениях и охватывает значительный спектр (до 80 %) задач аэро-, гидро-, газодинамики, тепло-массопереноса и прочности, решаемых на предприятиях промышленности. Пакет ЛОГОС передан для опытной эксплуатации на несколько десятков предприятий таких отраслей, как авиастроение, атомная энергетика, автомобильная промышленность, судостроение и космическая промышленность [33–36] и успешно используется для решения различных классов промышленно-ориентированных задач. Внедрение пакета программ ЛОГОС уже позволило достичь важных результатов по оптимизации конструкторских решений в интересах повышения тактико-технических характеристик и ресурса оборудования, а также сокращения полномасштабных экспериментальных исследований за счет их замены виртуальным аналогом, намного менее затратным по времени и ресурсам и гораздо более информативным.

Заключение

В статье дана оценка применимости современных подходов к моделированию турбулентных течений в промышленных приложениях. Описана технология применения зонного RANS–LES подхода совместно с моделью EARSM, позволяющая при гораздо меньших вычислительных ресурсах более точно моделировать турбулентные течения. Для эффективного применения многосеточных технологий предложены специализированные алгоритмы ускорения, основанные на «каскадном» сборе данных с процессоров и глобальном уровне.

Список литературы

1. Mozer D., Kim J., Mansour N. N. DNS of Turbulent Channel Flow // *Phys. Fluids*. 1999. Vol. 11. P. 943–945.
2. Lesieur M. *Turbulence in Fluids* // Springer, Netherlands. 2008.
3. Волков К. Н., Емельянов В. Н. Течения и теплообмен в каналах и вращающихся полостях. – М.: Физматлит, 2010.
4. Spalart P. R. Strategies for turbulence modeling and simulations // *Heat Fluid Flow*. 2000. Vol. 21. P. 252–263.
5. Spalart P. R. Young-Person’s guide to detached-eddy simulation grids // *Tech. Rep. NASA/CR-2001-211032*, NASA, Langley Research Center. 2001.
6. Travin A., Shur M., Strelets M., Spalart P. R. Physical and numerical upgrades in the detached-eddy simulation of complex turbulent flows // *Proceedings of Euromech Coll. Les of complex transitional and turbulent flows*. Munich, Germany. Kluwer, Dordrecht. 2002. Vol. 65. P. 239–254.
7. Revell A., Craft T., Laurence D. *Turbulence Modelling of Strongly Detached Unsteady Flows: The Circular Cylinder* // *Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, Springer, Berlin. 2008. Vol. 97. P. 279–288.
8. Козелков А. С., Курулин В. В., Тятюшкина Е. С., Пучкова О. Л. Моделирование турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости на неструктурированных сетках с использованием модели отсоединенных вихрей // *Математическое моделирование*. 2014. Т. 26, № 8. С. 81–96.
9. Зайков Л. А., Стрелец М. Х., Шур М. Л. Сравнение возможностей дифференциальных моделей турбулентности с одним и двумя уравнениями при расчете течений с отрывом и присоединением. Течение в каналах с обратным уступом // *Теплофизика высоких температур*. 1996. Т. 34, № 35. С. 724–736.
10. Vogel J. C., Eaton J. K. Combined Heat Transfer and Fluid Dynamic Measurements Downstream of a Backward-Facing Step // *Journal of Heat Transfer*. 1985. Vol. 107. P. 922–929.
11. Gritskevich M. S., Garbaruk A. V., Schütze J., Menter F. R. Development of DDES and IDDES Formulations for the $k-\omega$ Shear Stress Transport Model // *Flow, Turbulence and Combustion*. Springer, Netherlands. 2012. Vol. 88. P. 431–449.
12. Piomelli U., Balaras E. Wall-Layer Models for Large-Eddy Simulations // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 2002. Vol. 34, N 1. P. 349–374.
13. Odemark Y. et al. High-Cycle Thermal Fatigue in Mixing Tees: New Large-Eddy Simulations Validated Against New Data Obtained by PIV in the Vattenfall Experiment // *Proceedings of the 17th International Conference on Nuclear Engineering*. 2009. – Brussels, Belgium, 2009. P. 775–785.

14. Aljure D. E. et al. Flow and turbulent structures around simplified car models // *Computers & Fluids* 96. 2014. Vol. 96. P. 122–135.
15. Spalart P. R. Detached-Eddy Simulation // *Annual Rev. Fluid Mech.* 2009. Vol. 41, N 181. P. 202.
16. Jarrin N., Prosser R., Uribe J. et al. Reconstruction of turbulent fluctuations for hybrid RANS/LES simulations using a Synthetic-Eddy Method // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2009. Vol. 30, N 3. P. 435–442.
17. Адамьян Д. Ю. Эффективный метод генерации синтетической турбулентности на входных границах LES области в рамках комбинированных RANS-LES подходов к расчету турбулентных течений // *Математическое моделирование*. Т. 23, № 7. С. 3–19.
18. Menter F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // *AIAA Journal*. 1994. Vol. 32, N 8. P. 1598–1605.
19. Menter F. R., Garbaruk A. V., Egorov Y. Explicit algebraic Reynolds stress models for anisotropic wall-bounded flows // *Proc. of 3rd European Conference for Aero-Space Sciences (EUCASS), Versailles, July 6-9th, 2009.* – EDP Sciences France, Versailles, 2009.
20. Козелков А. С., Курулин В. В., Пучкова О. Л., Лашкин С. В. Моделирование турбулентных течений с использованием алгебраической модели рейнольдсовых напряжений с универсальными пристеночными функциями // *Вычислительная механика сплошных сред*. 2014. Т. 7, № 1. С. 40–51.
21. Козелков А. С., Шагалиев Р. М., Дерюгин Ю. Н., Курулин В. В., Ялозо А. В., Лашкин С. В. Исследование потенциала суперкомпьютеров для масштабируемого численного моделирования задач гидродинамики в промышленных приложениях // *Вычислительная математика и математическая физика*. 2016. Т. 56, № 8. С. 1524–1535.
22. Stuben K., Trottenberg U. Multigrid Methods: Fundamental Algorithms, Model Problem Analysis and Applications. Ser. Lecture Notes in Mathematics. Vol. 960 / Eds W. Hackbusch and U. Trottenberg. – Berlin: Springer. 1982. P. 1–176.
23. Волков К. Н., Дерюгин Ю. Н., Емельянов В. Н., Карпенко А. Г., Козелков А. С., Тетерина И. В. Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках. – М.: Физматлит, 2013.
24. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Лашкин С. В., Силаев Д. П., Симонов П. Г., Тятюшкина Е. С. Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС // *ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов*. 2013. Вып. 4. С. 44–56.
25. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Циберева Ю. А., Корнев А. В., Денисова О. В., Стрелец Д. Ю., Куркин А. А., Курулин В. В., Шарипова И. Л., Рубцова Д. П., Легчанов М. А., Тятюшкина Е. С., Лашкин С. В., Ялозо А. В., Яцевич С. В., Тарасова Н. В., Гинниятуллин Р. Р., Сизова М. А., Крутякова О. Л. Минимальный базис задач для валидации методов численного моделирования турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости // *Труды Нижегородского государственного технического университета им. П. Е. Алексеева*. 2014, № 4 (104). С. 21–69.
26. Волков К. Н., Дерюгин Ю. Н., Емельянов В. Н., Козелков А. С., Тетерина И. В. Алгебраический метод в задачах вычислительной физики // *Вычислительные методы и программирование*, 2014. Т. 15. С. 183–200.
27. Kozelkov A., Kurulin V., Emelyanov V., Tyatyushkina E., Volkov K. Comparison of convective flux discretization schemes in detached-eddy simulation of turbulent flows on unstructured meshes // *Journal of Scientific Computing*. 2016. Vol. 67. P. 176–191.

28. Козелков А. С., Курулин В. В. Численная схема для моделирования турбулентных течений несжимаемой жидкости с использованием вихреразрешающих подходов // Вычислительная математика и математическая физика. 2015. Т. 55, № 7. С. 135–146.
29. Козелков А. С., Куркин А. А., Пелиновский Е. Н., Курулин В. В., Тятюшкина Е. С. Моделирование возмущений в озере Чебаркуль при падении метеорита в 2013 году // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2015, № 6. С. 134–143.
30. Козелков А. С., Куркин А. А., Пелиновский Е. Н. Влияние угла входа тела в воду на высоты генерируемых волн // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2016, № 2. С. 166–176.
31. Kozelkov A. S., Kurkin A. A., Pelinovsky E. N., Tyatyushkina E. S., Kurulin V. V., Tarasova N. V. Landslide-type tsunami modelling based on the Navier-Stokes Equations // Science of tsunami Hazards, Journal of Tsunami Society International. 2016. Vol. 35, N 3. P. 106–144.
32. Козелков А. С. Методика численного моделирования цунами оползневой типа на основе уравнений Навье–Стокса // Вычислительная механика сплошных сред. 2016. Т. 9, № 2. С. 218–236.
33. Погосян М. А., Савельевских Е. П., Шагалиев Р. М., Стрелец Д. Ю., Козелков А. С., Корнев А. В. Применение суперкомпьютерных технологий в российской авиационной промышленности // Международная энциклопедия CALS. Авиационно-космическое машиностроение. – М.: ОАО «НИЦ АСК». 2015. С. 49–61, 608 с.
34. Betelin V. B., Shagaliev R. M., Aksenov S. V., Belyakov I. M., Deryuguin Yu. N., Kozelkov A. S., Korchazhkin D. A., Nikitin V. F., Sarazov A. V., Zelenskiy D. K., Mathematical simulation of hydrogen–oxygen combustion in rocket engines using LOGOS code // Acta Astronautica. 2014. Vol. 96. P. 53–64.
35. Погосян М. А., Савельевских Е. П., Шагалиев Р. М., Козелков А. С., Стрелец Д. Ю., Рябов А. А., Корнев А. В., Дерюгин Ю. Н., Спиридонов В. Ф., Циберев К. В. Применение отечественных суперкомпьютерных технологий для создания перспективных образцов авиационной техники // ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 2. С. 3–17.
36. Сафронов А. В., Дерюгин Ю. Н., Жучков Р. Н., Зеленский Д. К., Саразов А. В., Козелков А. С., Кудимов Н. Ф., Липницкий Ю. М., Панасенко А. В., Результаты валидации многофункционального пакета программ ЛОГОС при решении задач аэрогазодинамики старта и полета ракет-носителей // Матем. моделирование. 2014. Т. 26, № 9. С. 83–95.

Investigation of supercomputer capabilities for the scalable numerical simulation of computational fluid dynamics problems in industrial applications

A. S. Kozelkov, R. M. Shagaliev, V. V. Kurulin, A. V. Yalozo, S. V. Lashkin

Two main issues of the efficient usage of computational fluid dynamics (CFD) in industrial applications – simulation of turbulence and speedup of computations – are analyzed. Results of the investigation of potentials of the eddy-resolving approaches to turbulence simulation in industrial applications with the use of arbitrary unstructured grids are presented. Algorithms for speeding up the scalable high-performance computations based on multigrid technologies are proposed.