



РОСАТОМ

Р И **РФФИ**

Р Ф Я Ц
ВНИИЭФ

Проект № 13-07-12079-офи_м

ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

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

Козелков Андрей Сергеевич

*Шагалиев Р.М., Дерюгин Ю.Н., Курулин В.В.,
Ялозо А.В., Лашкин С.В.*

При сотрудничестве с

БГТУ «Военмех» им. Д.Ф. Устинова

Емельянов В.Н.,

Волков К.Н.,

Гидродинамика в промышленных приложениях

Вязкие несжимаемые течения

Решение уравнений
Навье-Стокса с
расщеплением
(Segregate Solver)

- Гидравлика систем;
- Течения теплоносителей;
- Аэродинамика автомобилей;
- Системы кондиционирования
- Свободные поверхности;
- ...

- Метод SIMPLE;
- Метод PISO;
- Метод SIMPLER;
- Метод SIMPLEC;
- Метод Couple Simple;
- ...

Эффективное использование
- неструктурированные сетки,
состоящие из многогранников
произвольной формы

Типовые расчетные сетки для промышленных задач

- Стационарная турбулентная гидродинамика ~ 20-100 млн.,
- Нестационарные и пульсационные течения ~ от 50 млн.,

Типовые параметры расчетов

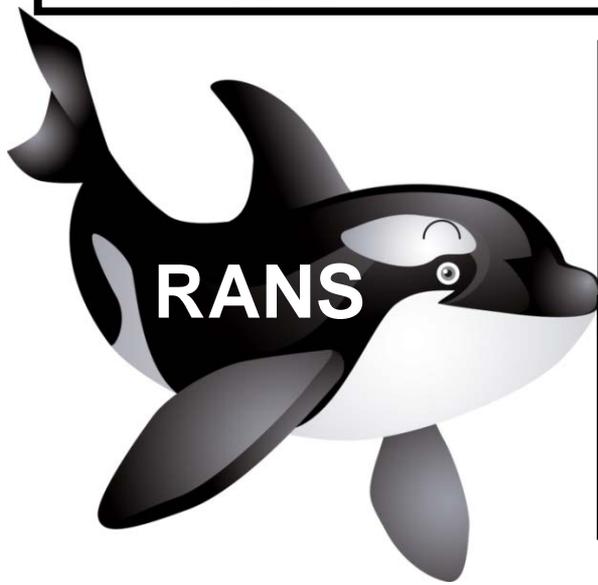
- Среднее время счета стационарной задачи ~ от 24 ч.
- Среднее время счета нестационарной задачи ~ от 200 ч.

Гидродинамика в промышленных приложениях

Основные проблемы

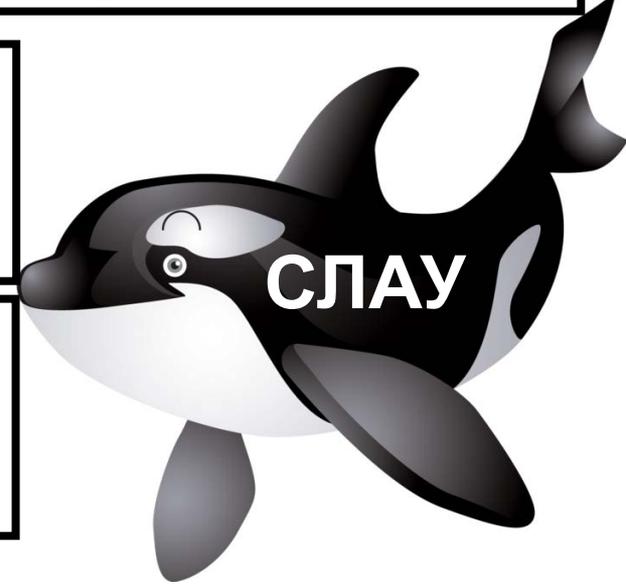
Турбулентность

Скорость счета



Неявные схемы, не накладывающие жесткие ограничения на шаг по времени

RANS модели турбулентности – осреднение по всему масштабу



Что нужно?

- Эффективный итерационный решатель СЛАУ
- Вихреразрезающие модели турбулентности

Актуально

- Многофазная гидродинамика (векторный решатель СЛАУ)
- Иные модели с плохо обусловленными матрицами СЛАУ
- Иные турбулентные течения

Скорость счета

Основная проблема:

Эффективный параллельный итерационный решатель для СЛАУ

Профилировка шага SIMPLE

Решение СЛАУ: сетка 60 млн.

Неструктурированные сетки,
состоящих из многогранников
произвольной формы

Метод Гаусса-Зейделя

Цифра может
варьироваться, но не
существенно

94,2%

Плохо обусловленная матрица
дискретной системы:
итерационные решатели – просто
не работают или дают очень
медленную скорость сходимости

Function	CPU Time:Self
LogosCFD::GaussSeidel::solve	52.5%
LogosCFD::lduMatrix::residual	38.1%
LogosCFD::lduMatrix::gSumMag	3.6%
memcpy	2.0%
LogosCFD::fvBaseMethods::GradientGauss	0.9%
fastzero_I	0.4%
LogosCFD::fvBaseMethods::DiffusionFluxVelocity	0.3%
LogosCFD::fvBaseMethods::InterpolateBoundaryFace	0.3%
_exp_pentium4	0.2%
LogosCFD::logosSimple::CalcStep3	0.2%
LogosCFD::logosSimple::CalcStep2	0.2%
_math_exit	0.2%
LogosCFD::lduMatrix::negSumDiag	0.1%
LogosCFD::Temperature::EffectiveViscosity	0.1%
_write_nolock	0.1%
LogosCFD::fvBaseMethods::ConvectionFluxScalar	0.1%
free	0.1%
LogosCFD::fvBaseMethods::RelaxMatrix	0.1%
_checkTOS_withFB	0.1%
LogosCFD::lduMatrix::sumA	0.1%
LogosCFD::fvBaseMethods::DiffusionFluxScalar	0.1%
LogosCFD::TurbulenceSmagorinsky::CaclulateTurbulentViscosity	0.1%
LogosCFD::logosSimple::CalcStep	0.1%
LogosCFD::fvBaseMethods::ConvectionFluxVelocity	0.1%
sqrt	0.1%
Selected:	94.2%

Неявная дискретизация

Мировой опыт - многосеточный метод



Индустриальные приложения:

- **Непосредственное решение СЛАУ;**
 - **Использование в качестве предобуславливателя;**
 - **Начальная инициализация расчетной области;**
- 

Использование в индустриальных пакетах программ:

- **Увеличение общей скорости решения;**
 - **Устойчивая сходимость;**
 - **Линейная зависимость времени счета от степени дискретизации;**
 - **Улучшенная масштабируемость;**
 - **Робастность;**
- 

Использование в индустриальных пакетах программ:

- **Одна из важнейших составляющих **коммерческого успеха;****
- 

!!! Публикации по теме ограничены !!!

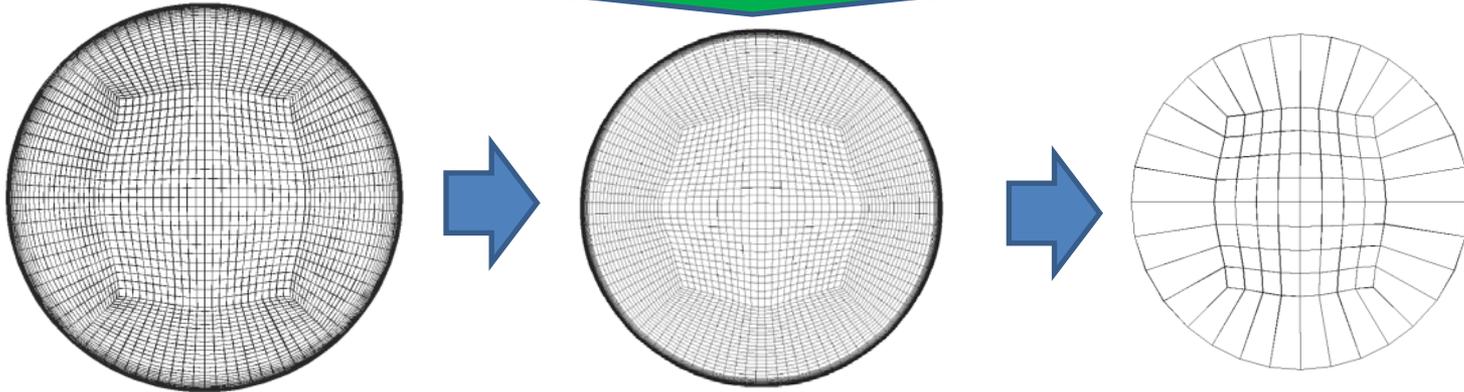
Многосеточный метод

Алгебраический (AMG)

Формирование иерархии сеток на матричном уровне
(не требует перестроения сетки)

Геометрический (GMG)

Иерархия сеток создается при помощи слияния контрольных объемов



Самое большое преимущество AMG:
Простота построения сеточных уровней

Индустриальные приложения:
➤ **Алгебраический метод решения СЛАУ**

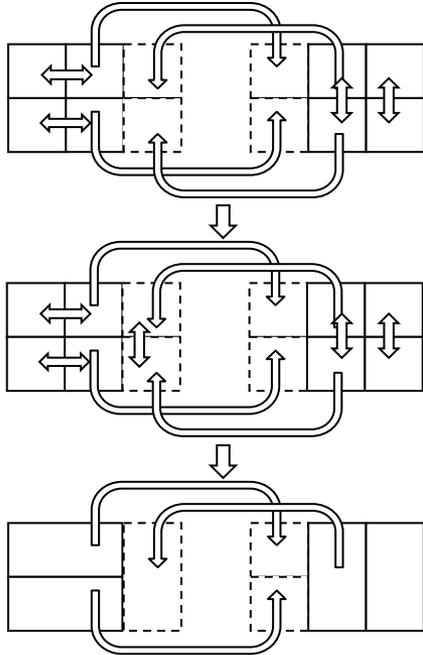
Проблема масштабируемого использования:
➤ **Небольшой размер матриц на грубых уровнях**
➤ **Время, затраченное на обмены, заметно превосходит время, затраченное на вычисления.**

Формирование глобального уровня

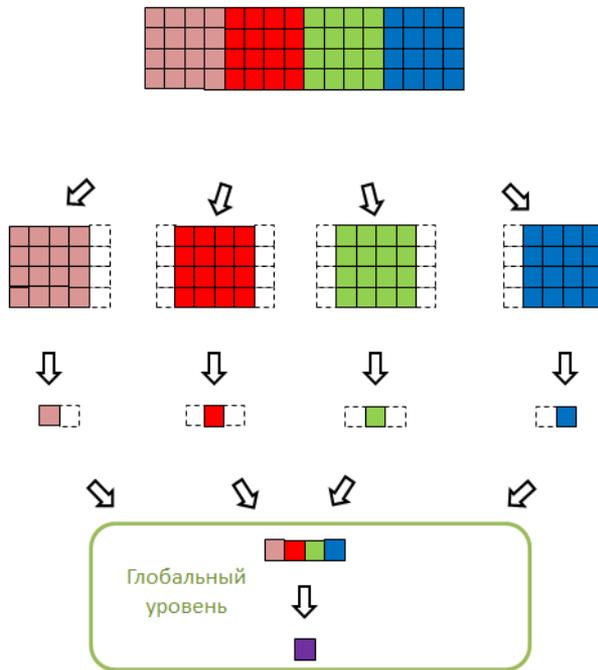
Алгоритм масштабируемого использования:

➤ **МКО – Гранево-ячеечный формат представления данных**

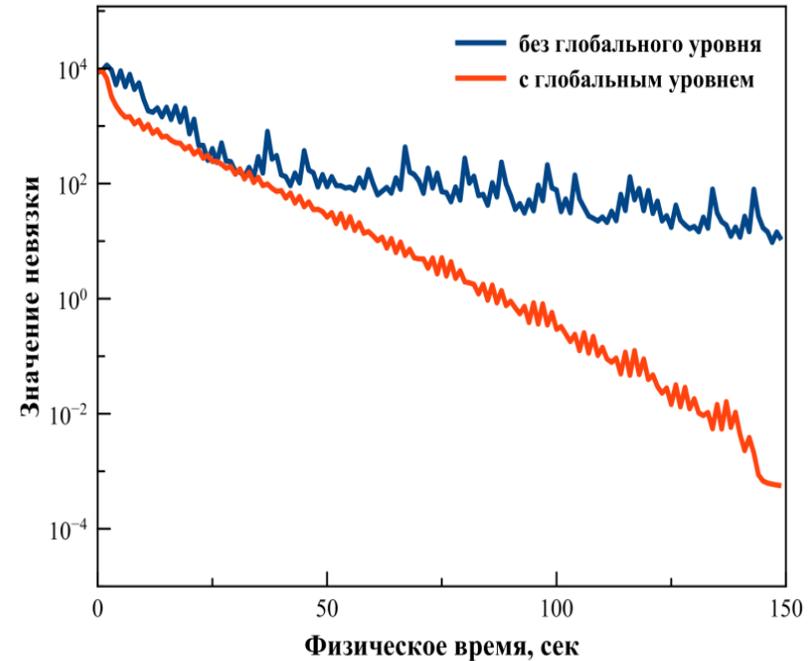
Огрубление ячеек в параллельном режиме



Формирование глобального уровня



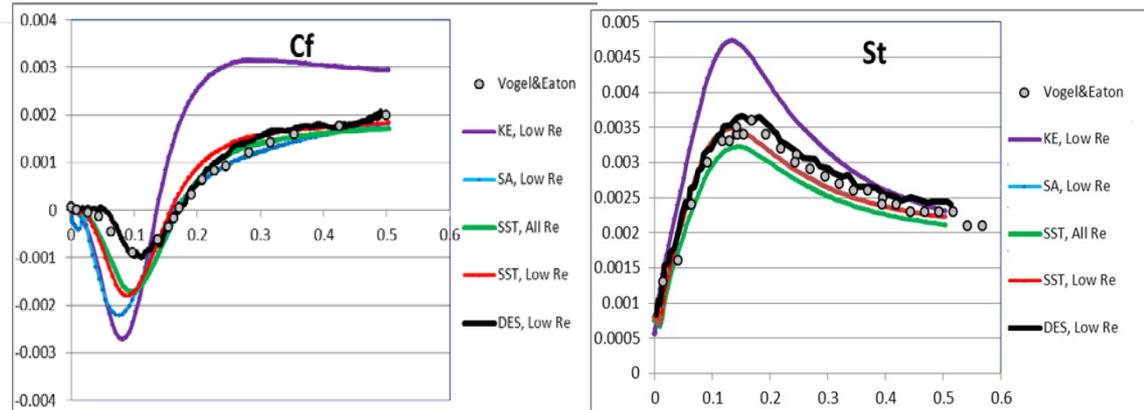
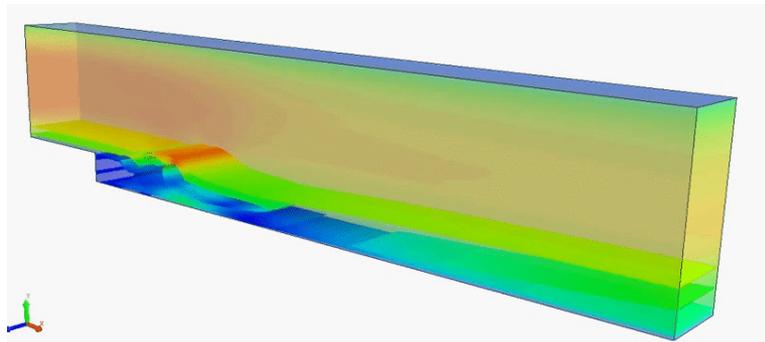
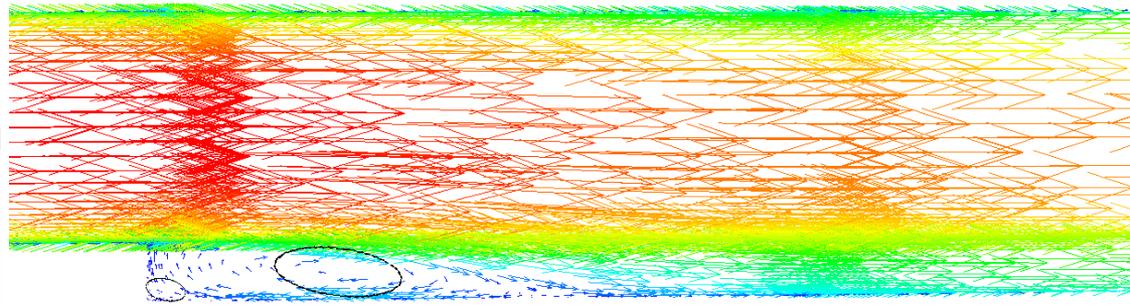
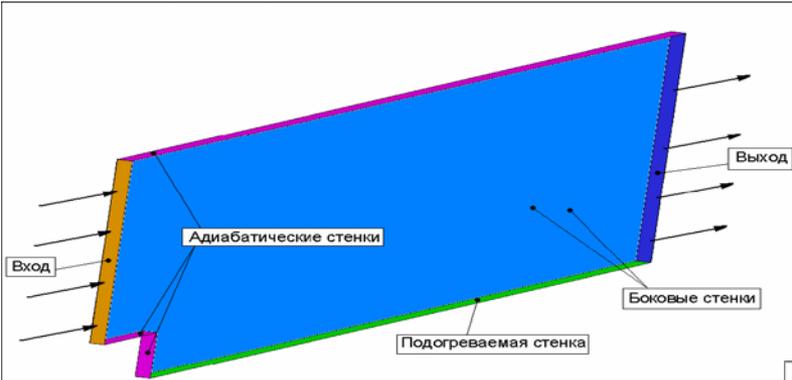
Падение невязки



Турбулентное течение в круглой трубе

Решатель СЛАУ	Сетка 1 (40000)		Сетка 2 (800000)		Сетка 3 (1500000)	
	Число итераций	Время решения (сек)	Число итераций	Время решения(сек)	Число итераций	Время решения (сек)
AMG	461	20.66	590	565	1168	3828
Сопряженные градиенты	489	62.57	549	16113	1168	158742

Турбулентное течение за обратным подогреваемым уступом



Расчетная сетка 14 млн.

Количество процессов	AMG с глобальным уровнем		AMG без глобального уровня		Метод сопряженных градиентов	
	время (сек)	число итераций	время (сек)	число итераций	время (сек)	число итераций
100	15927	6642	223623	5909	67519	5738
250	7888	6237	98444	5962	31177	5661
500	5695	6569	62181	5141	19006	5918
1000	5377	5853	63850	6935	9814	5737

Турбулентное течение за обратным подогреваемым уступом

Расчетная сетка 30 млн.

Количество процессов	AMG с глобальным уровнем		AMG без глобального уровня		Метод сопряженных градиентов	
	время (сек)	число итераций	время (сек)	число итераций	время (сек)	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



Применение многосеточного метода с алгоритмом глобального уровня ускоряет расчет индустриальных задач до 5(!!!) раз



Снижение эффективности при увеличении дискретизации



Необходима разработка специализированных алгоритмов для увеличения масштабируемости

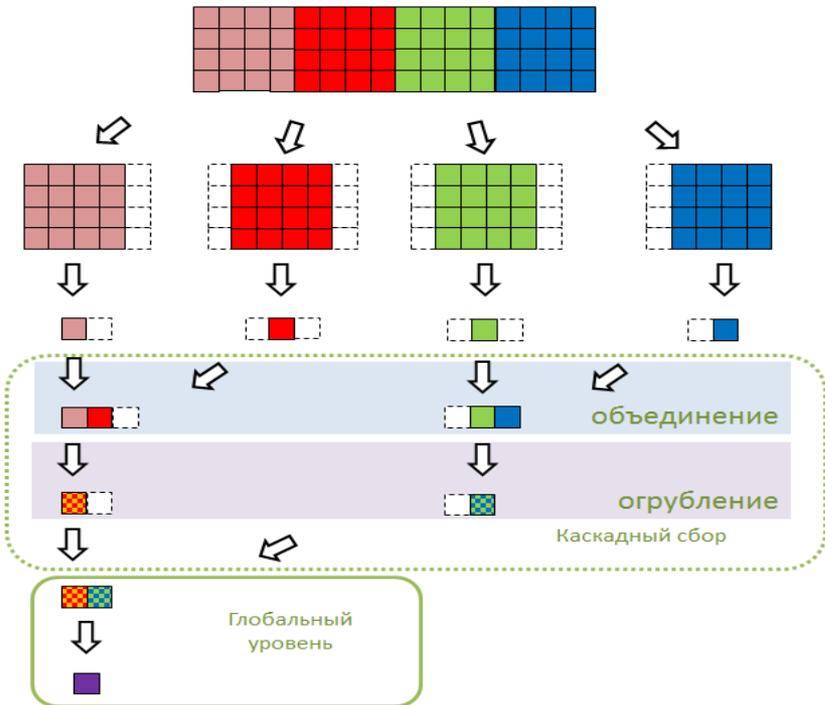
Индустриальное использование

На ближайшие три-пять лет данная реализация закрывает практически все потребности промышленных предприятий: 90% задач квазистационарные, 10% для простейших компоновок

Основная проблема:

- Неэффективная параллельная реализация для суперЭВМ петафлопсного класса
- Невозможно использование для сеток порядка 1 млрд.

Масштабируемость AMG – алгоритм каскадного сбора



Течение в круглой трубе

Процессы	Скалярный сбор 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

Каскадный сбор глобального уровня

Турбулентное течение за обратным подогреваемым уступом

Расчетная сетка 14 млн.

Процессы	Без глобального уровня		Скалярный сбор глобального уровня		Каскадный сбор глобального уровня	
	время решения, с	число итераций	время решения, с	число итераций	время решения, с	число итераций
100	15697	6272	13378	6113	11964	5397
250	7765	6981	3977	4484	4466	5581
500	4805	8500	2418	4629	2635	4452
1000	9129	8305	5377	5006	1171	4485
1500	17561	8693	6189	4592	1359	5675

Расчетная сетка 30 млн.

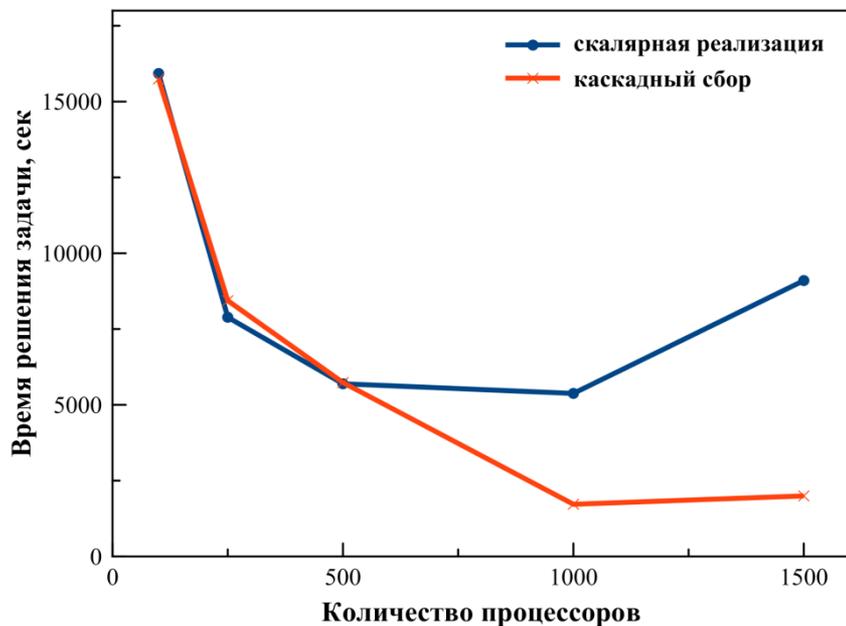
Процессы	Без глобального уровня		Скалярный сбор глобального уровня		Каскадный сбор глобального уровня	
	время решения, с	число итераций	время решения, с	число итераций	время решения, с	число итераций
125	34642	12135	31238	10482	33127	10828
250	18274	13127	17420	10853	18591	11057
500	16227	19253	11500	11241	11227	10142
1000	18394	21024	9382	9144	6263	9043
2000	25469	26043	17124	8463	8184	11240

Каскадный сбор глобального уровня

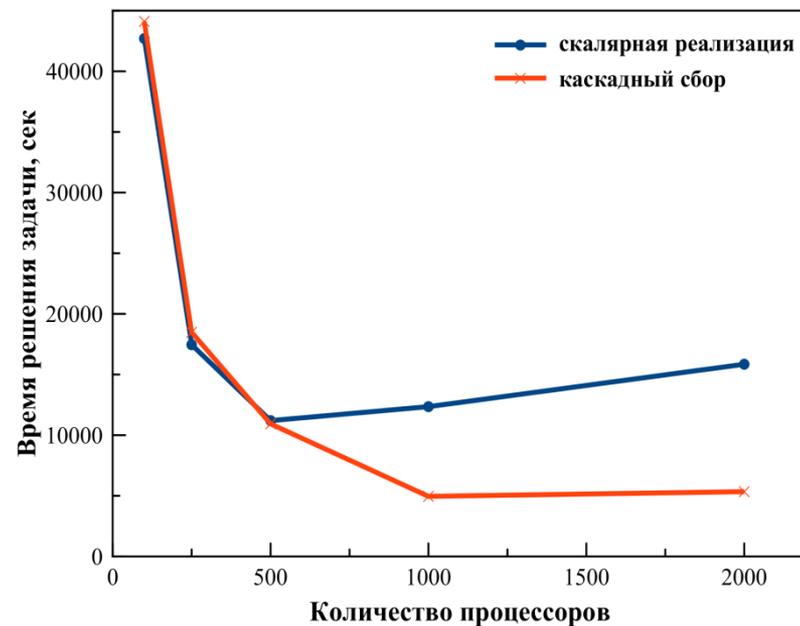
Турбулентное течение за обратным подогреваемым уступом

Производительность скалярного и каскадного алгоритмов построения глобального уровня

14 млн. ячеек



30 млн. ячеек

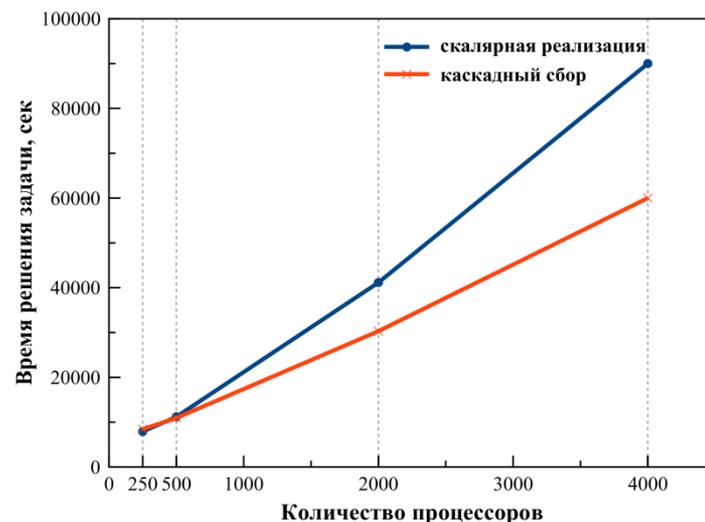
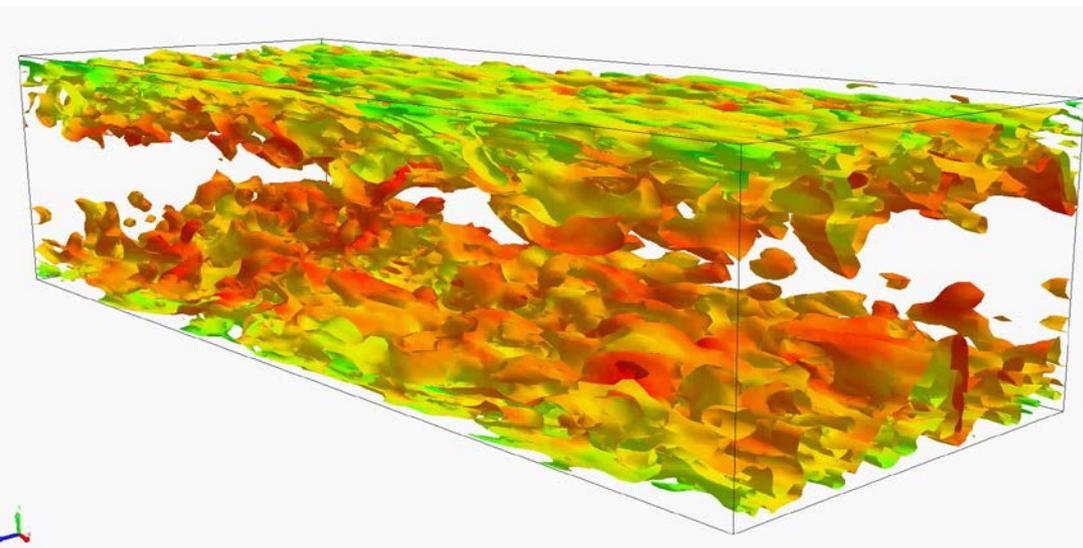


- Использование глобального уровня значительно увеличивает скорость сходимости задачи с увеличением количества процессоров;
- Алгоритм каскадного сбора обеспечивает существенное ускорение процедуры построения глобального уровня.

Каскадный сбор глобального уровня

Турбулентное течение в трубе квадратного сечения

Расчетная сетка 1 млрд. ячеек



	Время решения, с	Число итераций	Пик потребления памяти процессором, Мб	Среднее потребления памяти процессором, Мб	Общая потребляемая память, Мб
AMG без глобального уровня	9725	362	429	390	1560676
Скалярная реализация сбора глобального уровня	5707	347	954	393	1571095
Каскадный сбор глобального уровня	3338	351	468	396	1584771

Неявная дискретизация

Профилировка шага SIMPLE

Решение СЛАУ: сетка 60 млн.

Function	CPU Time:Self	Module
LogosCFD::Level::CalcResidual	16.7%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::Level::SmoothGaussSeidel	14.5%	Logos_SIMPLE5.exe
_write_nolock	11.4%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::Level::ScaleX	8.3%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::AMG::toRoot	6.5%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::fvmBaseMethods::GradientGauss	5.7%	Logos_SIMPLE5.exe
malloc	4.7%	Logos_SIMPLE5.exe
fastzero_I	3.5%	Logos_SIMPLE5.exe
free	3.4%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::Level::CalcChild2	2.6%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::Level::ProlongateCorrection	2.6%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::logosSimple::CalcStep3	1.7%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::Level::RestrictMatrix	1.4%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::GaussSeidel::solve	1.2%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::Level::RestrictResidual	1.2%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::lduMatrix::residual	1.1%	Logos_SIMPLE5.exe
fastcopy_I	1.0%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::AMG::norm1	1.0%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::fvmBaseMethods::DiffusionFluxVelocity	0.8%	Logos_SIMPLE5.exe
_math_exit	0.8%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::fvmBaseMethods::InterpolateBoundaryFace	0.7%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::Temperature::EffectiveViscosity	0.7%	Logos_SIMPLE5.exe
memcpy	0.7%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::fvmBaseMethods::GetMinMaxAvgValueCellInRegion	0.7%	Logos_SIMPLE5.exe
LogosCFD::TurbulenceSmagorinsky::CalculateTurbulentViscosity	0.6%	Logos_SIMPLE5.exe
Selected:	59.6%	

Неструктурированные сетки, состоящих из многогранников произвольной формы

Метод AMG с каскадным сбором глобального уровня

56,4%

Цифра может варьироваться, но не существенно

Многосеточная технология позволила на 30% сократить долю решения СЛАУ в общем шаге

Перспективы AMG

оптимизация сглаживателей, исследование «циклов» огрубления, ...

Турбулентность

Наиболее известные подходы:

- **RANS – моделирование**

Решение осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса

- **Прямое численное моделирование (DNS)**

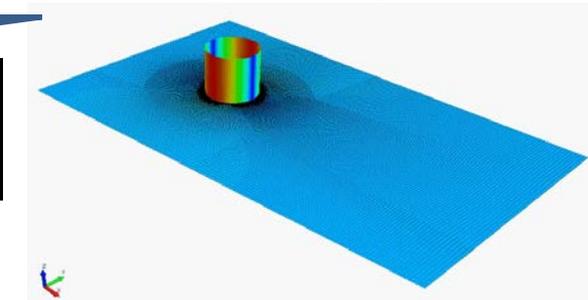
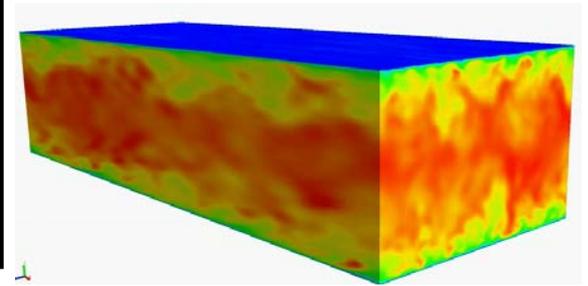
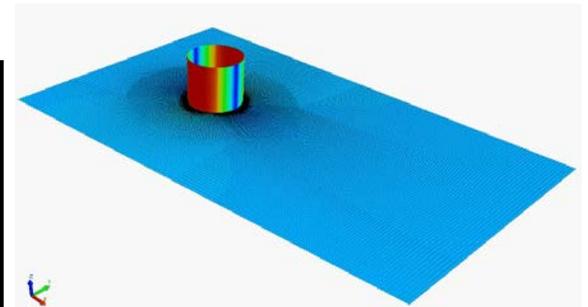
Решение уравнений НС во всем диапазоне пульсаций

- **Метод крупных вихрей (LES)**

Решение уравнений Навье-Стокса осредненных по пространству

- **Метод отсоединенных вихрей (DES)**

Гибридный подход (**RANS + LES**)



Spalart P R. “Strategies for turbulence modeling and simulations”, J. Heat Fluid Flow, 2000, v. 21, pp. 252–263.

Индустриальные задачи

DES

RANS в пограничном слое



LES в основной области

Метод	Сетка	Готовность
3D Steady RANS	10^7	1985
3D Unsteady RANS	10^7	1995
DES	10^8	2000
LES	$10^{11,5}$	2045
DNS	10^{16}	2080

Индустриальная вычислительная гидродинамика

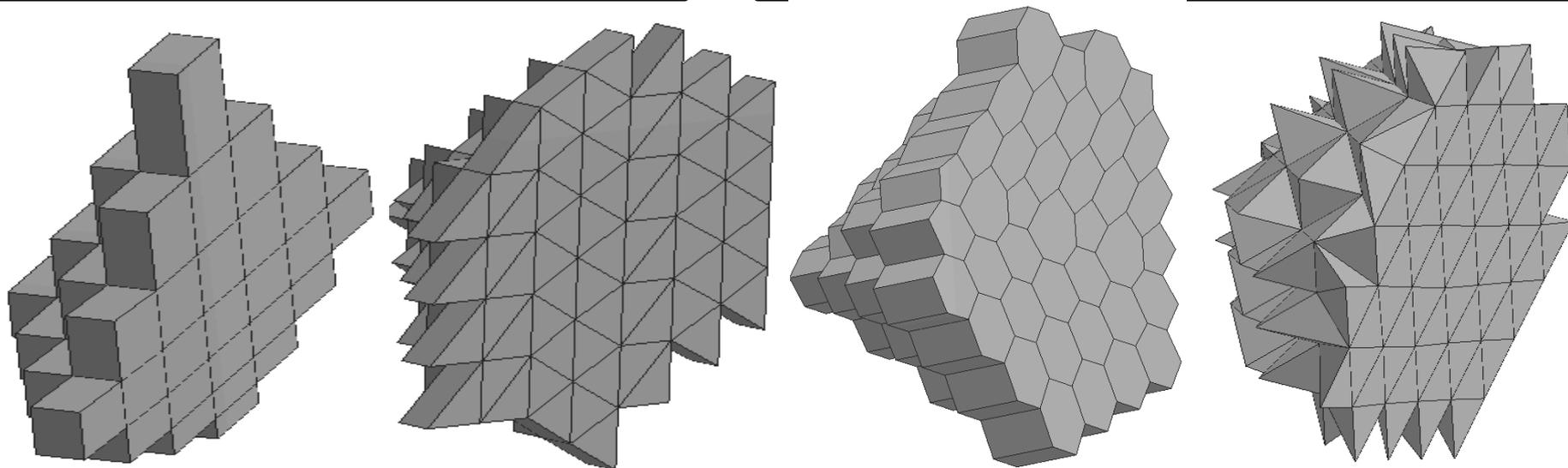
Основные проблемы модели DES

- Использование DES на сетках различного типа
- Расположение, масштаб и уровень разрешения зоны LES

DES на сетках различного типа

- Турбулентные структуры изотропны и трехмерны
- Конечно-объемные схемы менее диссипативны на кубических элементах

В области LES предпочтительна гексагональная изотропная сетка
(в промышленных задачах построение такой сетки трудоемкая и не всегда возможная задача)



В настоящее время практика использования DES основывается только на блочно-структурированных сетках и схемах высокого порядка точности

Индустриальная вычислительная гидродинамика

Метод отсоединенных вихрей DES: база RANS модели

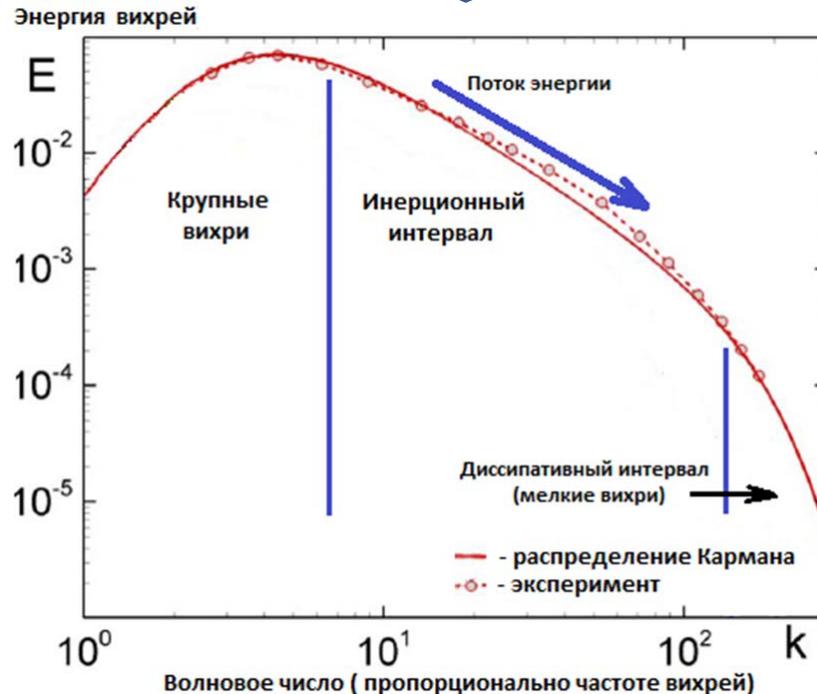
В формулировку на базе SST входят 2 константы: $C_{k\varepsilon}$, $C_{k\omega}$

Константы определяют работу модели DES в LES-области (влияют на величину подсеточной вязкости)

Их значения напрямую влияют на моделирование каскадной передачи энергии турбулентных вихрей

Значения $C_{k\varepsilon}$, $C_{k\omega}$ сильно зависят от используемой численной схемы*

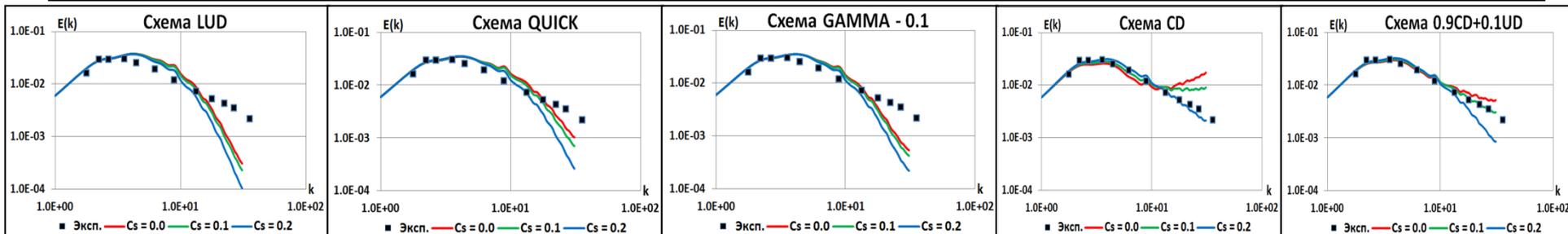
Необходима калибровка $C_{k\varepsilon}$, $C_{k\omega}$ для каждой отдельной численной схемы (!)



Индустриальная вычислительная гидродинамика

Задача о затухании изотропной турбулентности. Используется модель LES. Моделируется эволюция изотропной турбулентности в квадратной области.

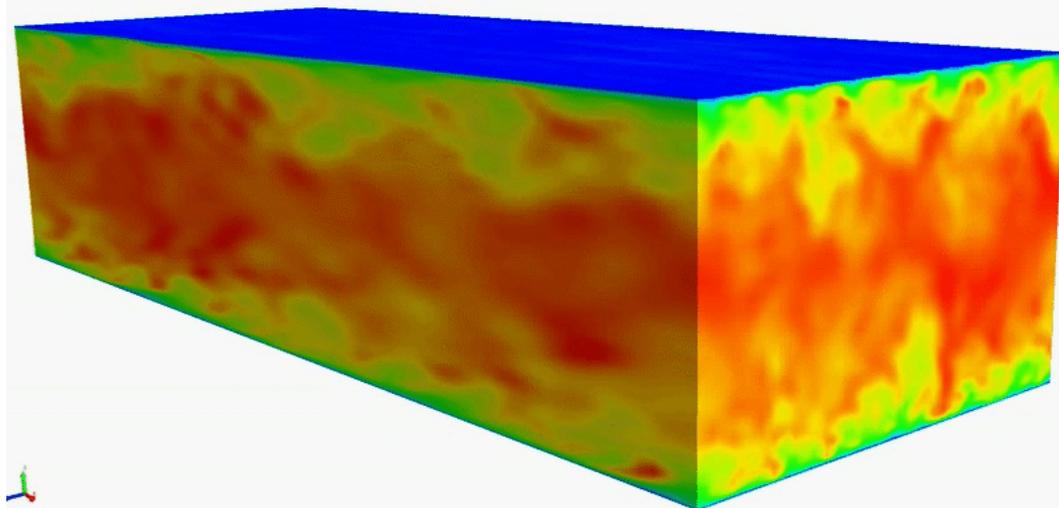
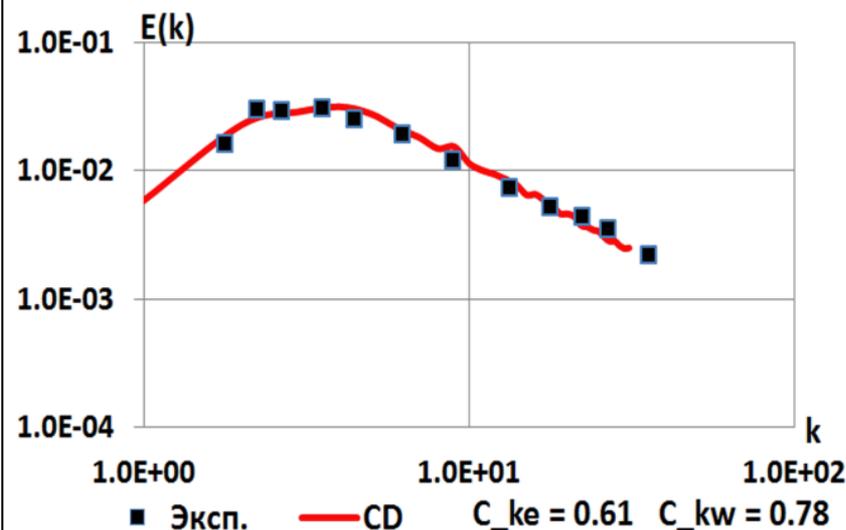
С экспериментом сравнивается результирующий энергетический спектр (время 0.87 и 2 сек.)



Схемы занижают энергию высокочастотной части спектра и даже при нулевой подсеточной вязкости не обеспечивают правильного описания каскадной передачи энергии

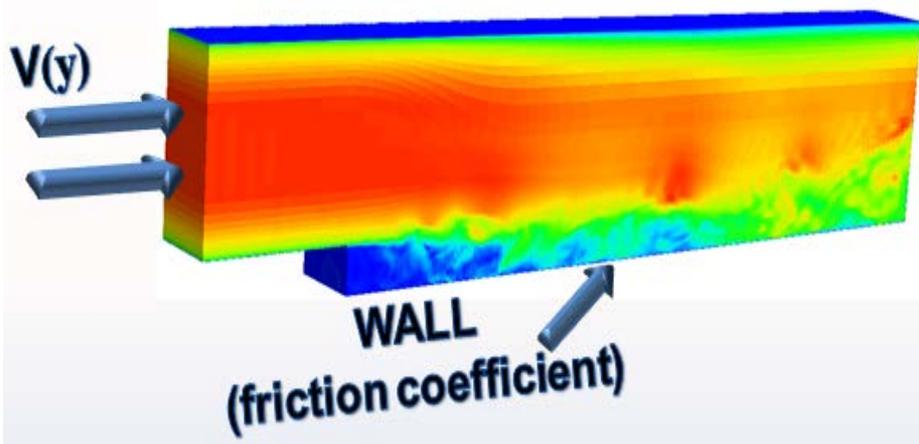
CD и 0.9CD+0.1UD правильно описывают результирующий энергетический спектр

Определили схемы – калибруем DES

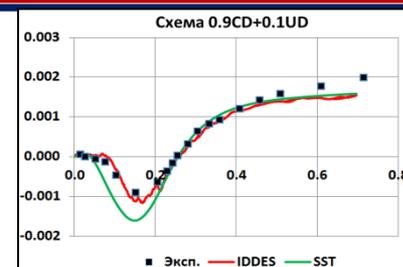
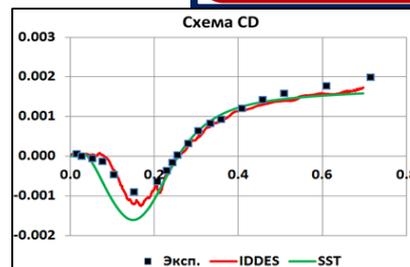


Индустриальная вычислительная гидродинамика

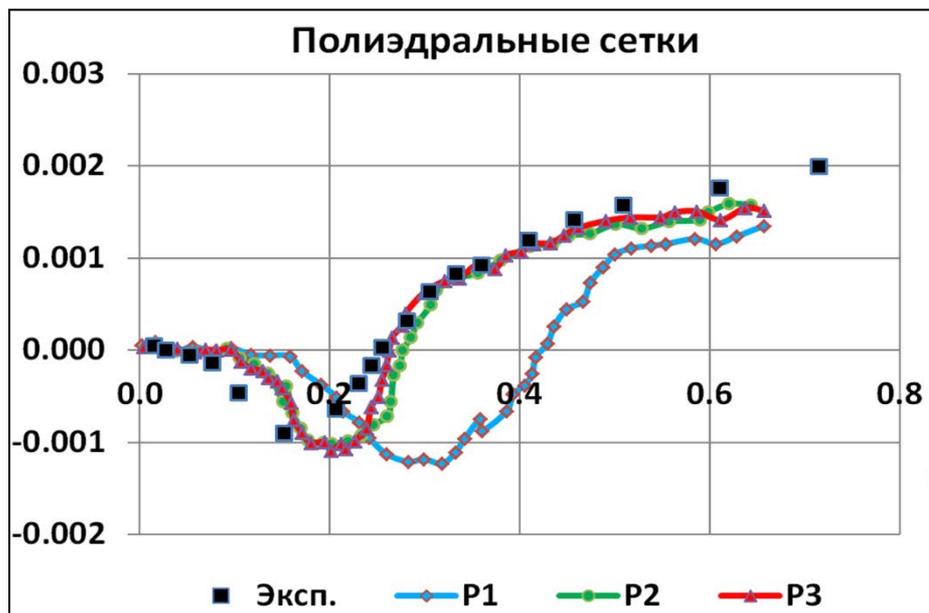
Обратный уступ: DES приводит к заметному улучшению результатов по сравнению с RANS



- Количество ячеек – **1.1 млн**
- Y^+ вблизи стенок – **менее 1**
- Характерный размер ячеек в основной области – **0.035 м**



Полиэдральные расчетные сетки

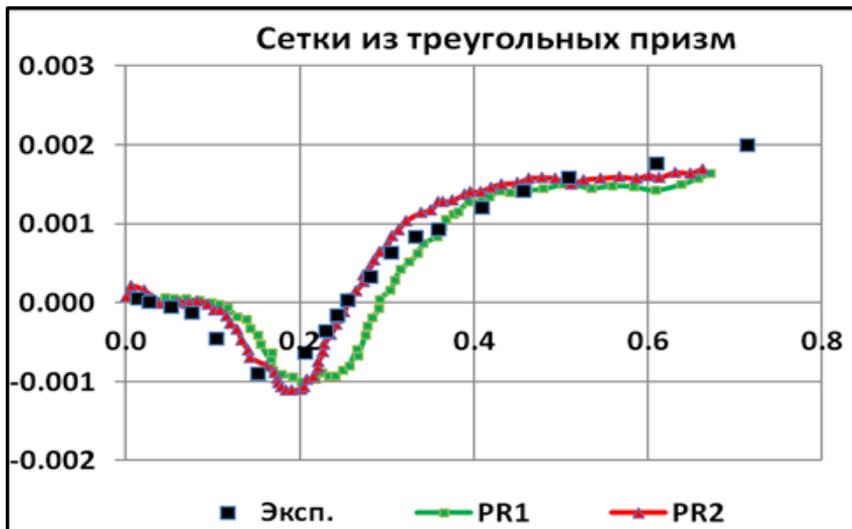


Сетка	Кол-во ячеек	Хар. раз., м
P1	1.2 млн	0.036
P2	2.0 млн	0.027
P3	3.2 млн	0.022

Приемлемый результат лишь на сетке **P3** с характерным размером в **1.5 раз** меньше чем на гексагональной.

Индустриальная вычислительная гидродинамика

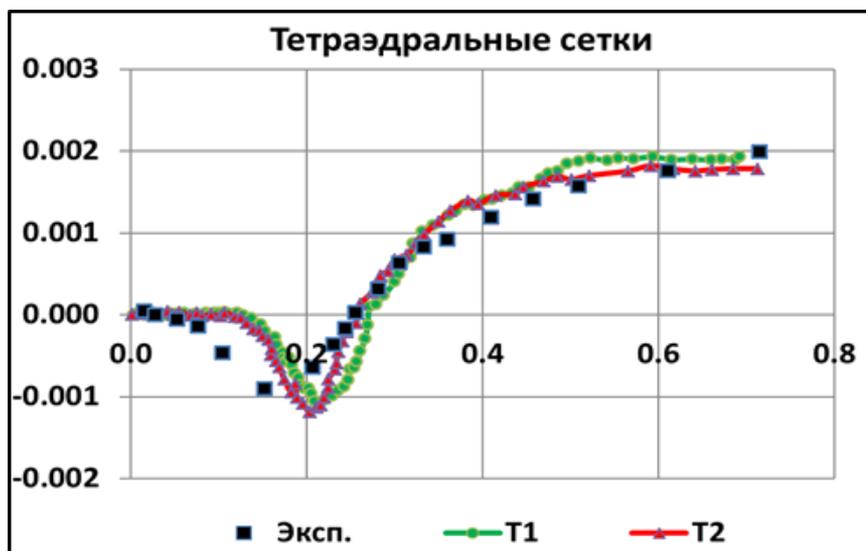
Сетка из треугольных призм



Сетка	Кол-во ячеек	Хар. разм., м
PR1	2.0 млн	0.036
PR2	4.0 млн	0.025

Приемлемый результат – сетка PR2 (характерный размер - **в 1.45 раз** меньше, кол-во ячеек – **в 4 раза** больше чем на гексагональной).

Сетка из тетраэдров



Сетка	Кол-во ячеек	Хар. разм., м
T1	3.8 млн	0.034
T2	6.2 млн	0.021

Приемлемый результат – сетка T2 (характерный размер - **в 1.7 раз** меньше, кол-во ячеек – **в 6 раза** больше чем на гексагональной).

Индустриальная вычислительная гидродинамика

Расчёт осредненных характеристик течения на произвольных сетках

0.9CD+0.1UD – центрально-разностная схема с противопоточной добавкой

Будет **СЛОЖНО** удержать такую степень противопоточности при ухудшении качества сетки и расчете нестационарных характеристик

Рекомендуемые сетки в области LES - шестигранники

Требования к сеткам для DES

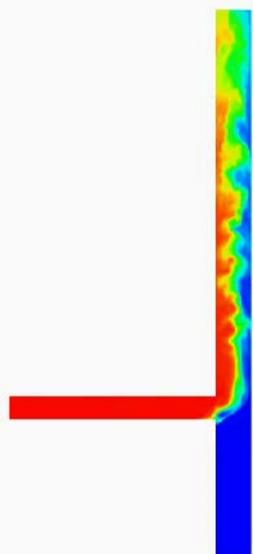
Характерные размеры ячеек оцениваем из условия разрешивания погранслоя

Безразмерная величина ячейки вдоль потока

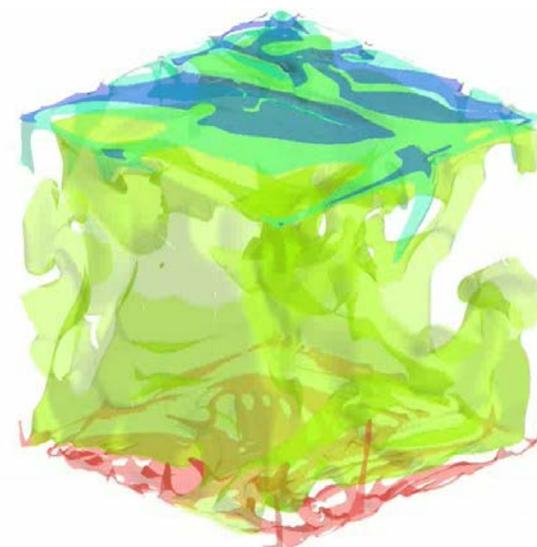
$$\Delta x^+ < 60, \Delta x^+ = \rho u_t \Delta x / \nu$$

Безразмерная величина ячейки поперек потока

$$\Delta y^+ < 25, \Delta y^+ = \rho u_t \Delta y / \nu$$



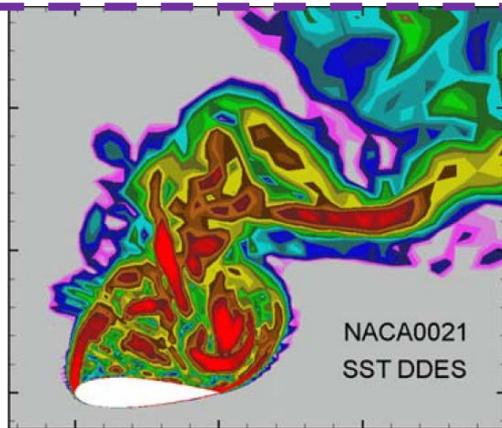
	Смешение теплоносителей	Течение в трубе с охлаждением
Число Re	$1,5 \cdot 10^4$	$1,5 \cdot 10^5$
Кол-во ячеек	~15-50 млн	~1 млрд.
Кол-во шагов по времени	~ $3 \cdot 10^4$	~ $3 \cdot 10^5$
Кол-во ядер	~300-1000	~15-20 тыс.
Время счета	~24-48 ч.	> 480 ч.



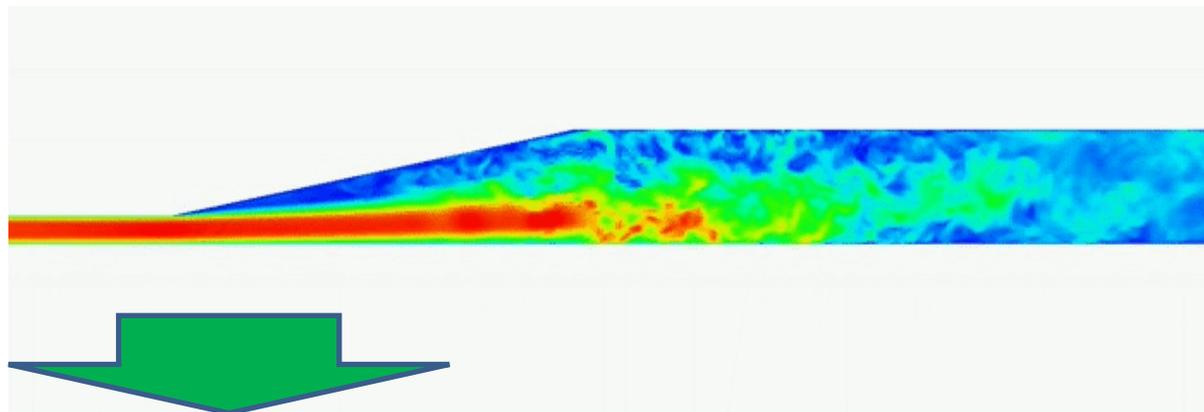
Индустриальная вычислительная гидродинамика

Применение DES в промышленных расчетах

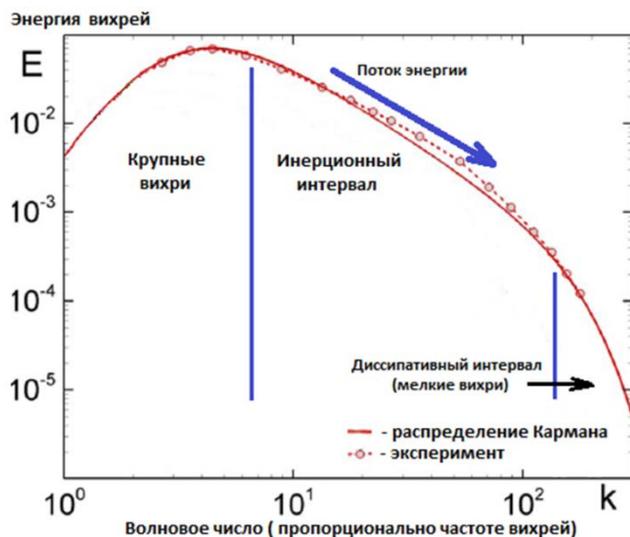
Внешняя аэродинамика –
Обширные отрывные зоны в
неограниченном пространстве



Внутренняя гидродинамика –
Ограниченное пространство – не развиваются
«большие» вихри



Выход: генерировать пульсации

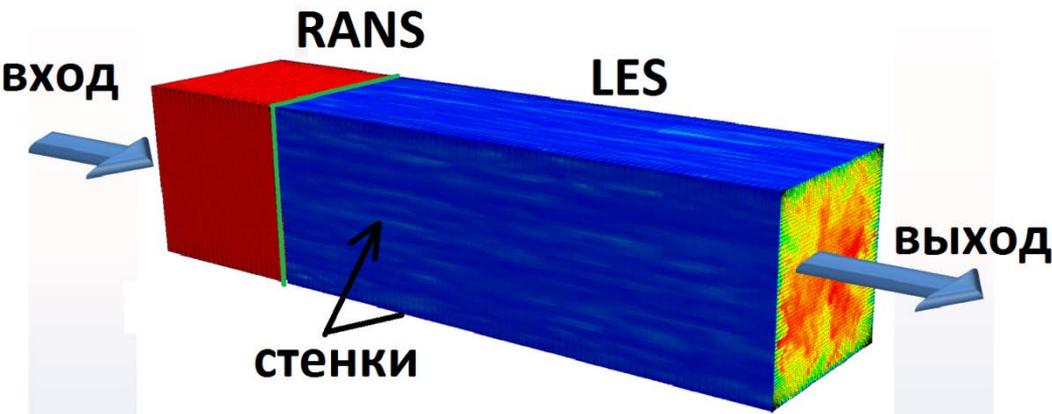


Восстановление частотного спектра
турбулентных пульсаций по RANS-решению

Генерация поля скорости, удовлетворяющему
заданному тензору напряжений Рейнольдса, и
найденному спектру

Тензор напряжений – точность генерации вихрей

Зональный RANS-LES



Двухстадийная технология:

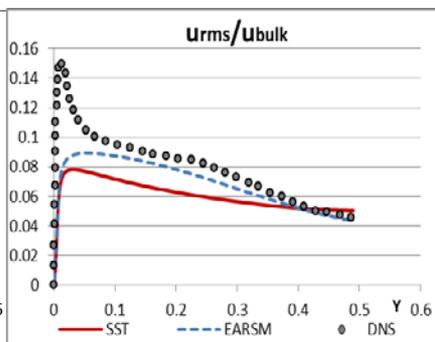
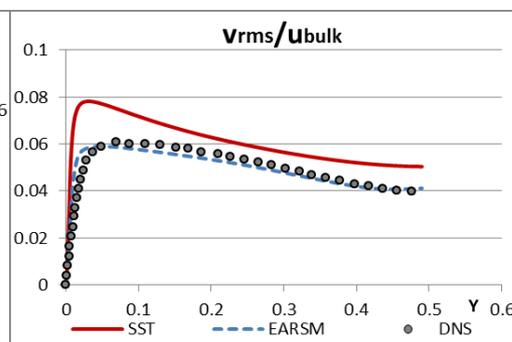
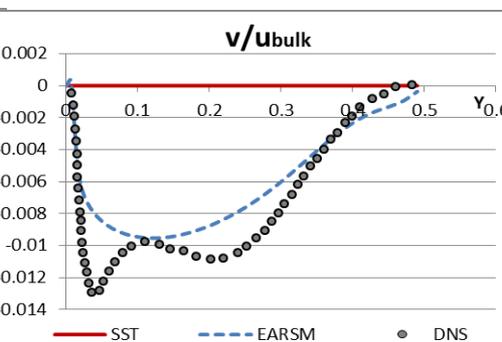
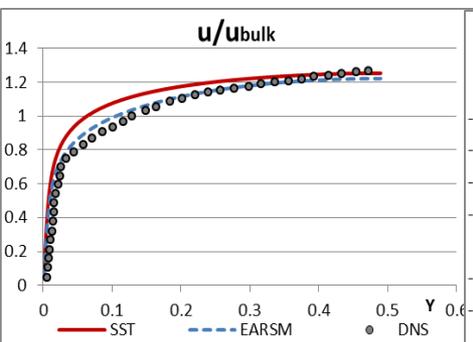
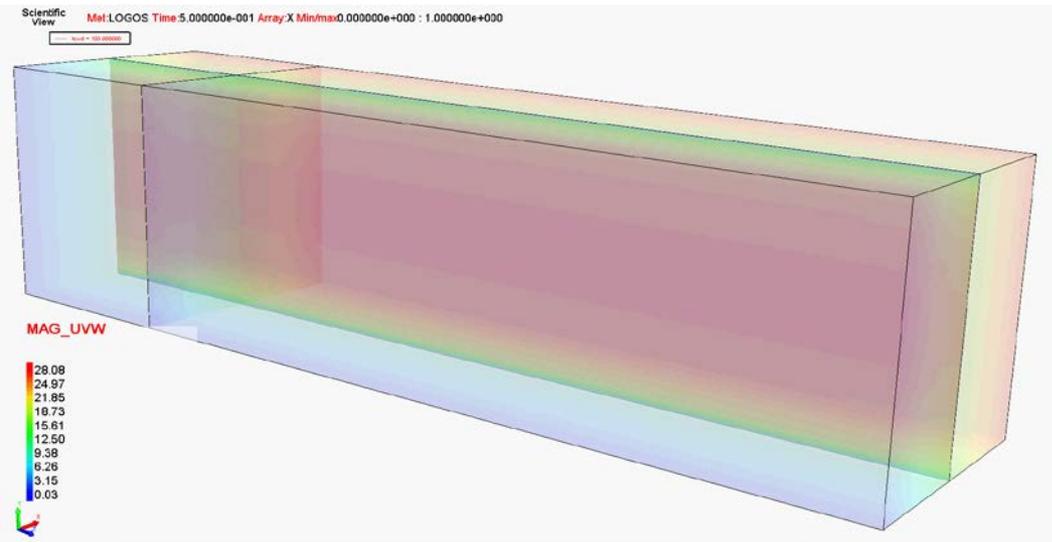
1. Стационарный RANS расчет
2. Нестационарный расчет с использованием RANS-LES

Проблема – опять RANS

1. Приближение Буссинеска
2. Хорошие результаты для изотропной турбулентности

Существенная погрешность в определении тензора рейнولدсовских напряжений

Выход:
Модели RSM

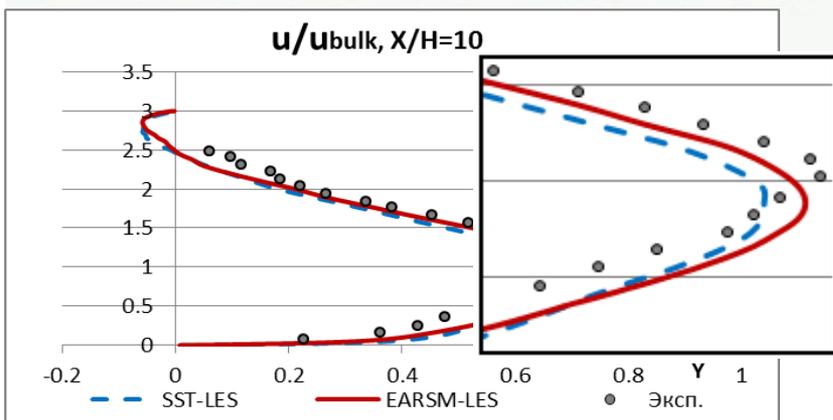
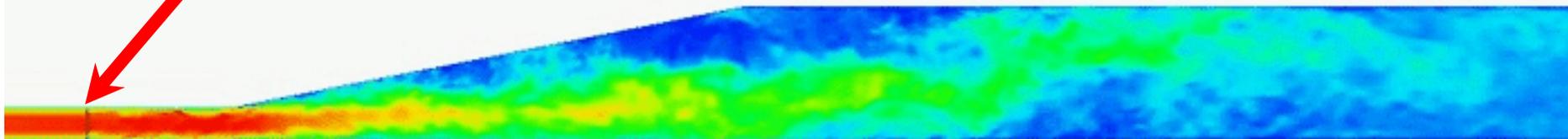


Индустриальная вычислительная гидродинамика

Применение DES в промышленных расчетах - асимметричный диффузор

Анизотропия течения жидкости с образованием обширной отрывной зоны

Генератор



Генерация вихрей в любой требуемой зоне

Перспективы RANS-LES

Увеличение точности предсказания пульсаций в выделенных зонах промышленных установок в приемлемые сроки

Индустриальная вычислительная гидродинамика

Исследование эффективности перспективных методов решения СЛАУ на большом числе процессоров – эффективные алгоритмы реализации, оптимизация сглаживателей, исследование «циклов» округления и схем интерполяции

Переработка вычислительных алгоритмов для процессоров новой архитектуры (со-процессоры) – выбор оптимальных структур хранения данных, векторизация алгоритмов

Внедрение в индустриальную практику альтернативных подходов для повышения точности моделирования турбулентности – применение моделей класса RSM (рейнольдсовых напряжений) – точное разрешение тензора рейнольдсовых напряжений – **дополнительная группа уравнений**

Внедрение в индустриальную практику зонального LES моделирования – требует эффективных генераторов синтетической турбулентности на входе в LES область и эффективных численных схем, применимых на произвольных неструктурированных сетках