

Опыт прямого численного моделирования турбулентности на суперкомпьютерах

К.В. Беляев, А.В. Гарбарук, М.Х. Стрелец, М.Л. Шур, Р.Р. Spalart

Прямое численное моделирование (*DNS*), то есть интегрирование нестационарных трехмерных уравнений Навье-Стокса, является наиболее строгим подходом в вычислительной аэродинамике и, в принципе, обеспечивает точное предсказание характеристик турбулентных потоков любой сложности. Однако использование *DNS* для решения практических задач (например, для расчета обтекания самолета или автомобиля) требует гигантских вычислительных ресурсов и даже по самым оптимистичным оценкам станет возможным лишь в конце XXI века. Тем не менее, некоторые важные задачи могут быть решены с помощью *DNS* уже сегодня. В предлагаемой статье это демонстрируется на примере успешного применения *DNS* для расчета трансзвукового обтекания цилиндра с утолщением, что представляет большой интерес для гражданской авиации.

Данное исследование выполнено с использованием компьютерных ресурсов *Argonne Leadership Computing Facility*, предоставленных авторам по гранту в рамках программы *INCITE 2015* Министерства энергетики США, и Суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета.

1. Введение

Турбулентные течения представляют собой наиболее распространенную в природе и технике форму движения жидкостей и газов, и надежный расчет их характеристик является исключительно важной задачей для авиации, ракетостроения, кораблестроения, энергомашиностроения (включая атомную энергетику), лазерной техники, химической технологии, экологии, медицины и многих других отраслей науки и техники. Наиболее строгим (основанным на “первых принципах” аэродинамики) подходом к решению этой задачи является так называемое **прямое численное моделирование** (*Direct Numerical Simulation* или *DNS* в англоязычной литературе), то есть численное интегрирование нестационарных трехмерных уравнений Навье-Стокса. Эти уравнения являются адекватной моделью произвольных течений газов и жидкостей в режиме сплошной среды, в связи с чем *DNS*, в принципе, может обеспечить точное предсказание характеристик турбулентных течений любой степени сложности. Однако применение *DNS* к расчету реальных течений требует огромных вычислительных ресурсов, что объясняется исключительно широким спектром пространственно-временных масштабов турбулентности, требующих точного решения в рамках данного подхода при высоких числах Рейнольдса, характерных для большинства

таких течений. Например, даже по весьма оптимистичным оценкам темпов роста мощности компьютеров, *DNS*-расчет обтекания самолета или автомобиля станет возможным лишь в конце текущего или в начале XXII века [1]. Тем не менее, наиболее мощные из существующих суперкомпьютеров позволяют уже сегодня проводить *DNS* некоторых течений, представляющих большой практический интерес.

В настоящей работе такая возможность продемонстрирована на примере *DNS*-расчета трансзвукового продольного обтекания цилиндра с осесимметричным утолщением. Это течение характеризуется формированием в потоке ударной волны (скачка уплотнения), которая взаимодействует с турбулентным пограничным слоем на поверхности цилиндра, в результате чего происходит его отрыв и последующее присоединение оторвавшегося слоя смещения к поверхности цилиндра. Именно такая картина течения наблюдается при обтекании пассажирских авиалайнеров в крейсерском режиме полета ($M = 0.65 \div 0.9$). Кроме того, данное явление имеет непосредственное отношение к так называемому трансзвуковому “бафтингу” крыла, то есть к потере устойчивости стационарного потока, обтекающего крыло. Бафтинг наблюдается даже при незначительных отклонениях числа Маха и угла атаки полета от крейсерских значений этих параметров и характеризуется возникновением интенсивных колебаний аэродинамической нагрузки на крыло, которые могут привести к его разрушению. В связи с этим изучение механизма взаимодействия скачка уплотнения с пограничным слоем и точное предсказание характеристик данного процесса, что становится возможным в случае применения *DNS*, имеют не только большой теоретический интерес, но и важное практическое значение для авиационной промышленности.

Выполненный авторами расчет соответствует условиям эксперимента [2], проводившегося в аэродинамической трубе исследовательского центра *NASA Ames*. Этот расчет проводился на двух суперкомпьютерах: на кластере *Mira (IBM Blue Gene/Q system)* Национальной лаборатории *Argonne* (США), находящемся на 9-м месте в рейтинге суперкомпьютеров *Top500*, и на гетерогенном кластере “Торнадо” Суперкомпьютерного центра “Политехнический” (226-е место в 48-м списке рейтинга *Top500* в ноябре 2016 года). При этом в обоих случаях использовалась массивно-параллельная версия вычислительного кода *Numerical Turbulence Simulation (NTS)*, разработанного в СПбПУ.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 дается краткое описание *NTS*-кода. В

разделе 3 обсуждаются результаты расчетов, иллюстрирующие эффективность его параллелизации на обоих компьютерах при решении рассматриваемой задачи. Наконец, в разделе 4 представлены некоторые результаты *DNS* рассматриваемого течения и их сопоставление с экспериментальными данными [2].

2. NTS-код

Как следует из его названия, данный код предназначен для расчета турбулентных течений. Код обеспечивает возможность расчета как стационарных, так и нестационарных течений в широком диапазоне числе Маха, включая предельный случай несжимаемой жидкости. Для моделирования турбулентности в коде реализованы различные подходы – в том числе, осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса (*RANS*), метод моделирования крупных вихрей (*LES*), гибридные *RANS-LES* методы и, наконец, *DNS*, а для описания течений около геометрически сложных объектов используются перекрывающиеся многоблочные сетки типа *Chimera*.

Код прошел всестороннее тестирование путем сопоставления полученных с его помощью решений с решениями других кодов (*CFL3D NASA*, *GGNS* и *BCFD* компании *Boeing*, *TAU DLR*, *ANSYS-CFX* и *ANSYS-FLUENT*) и успешно применялся ранее в *DNS*-расчетах [3]. В настоящее время он считается одним из наиболее надежных и экономичных исследовательских *CFD*-кодов для аэродинамических приложений.

Остановимся кратко на используемых в нём численном алгоритме решения сжимаемых уравнений Навье-Стокса и методах параллелизации вычислений (более полное описание *NTS*-кода содержится в [4]).

2.1. Численный алгоритм

При проведении *DNS* течений сжимаемого газа, к числу которых принадлежит течение, рассматриваемое в данной работе, численное решение нестационарных трехмерных уравнений Навье-Стокса проводится с использованием основанной на *MUSCL*-подходе неявной схемы расщепления разностей потоков типа *Roe* [5]. Дискретная форма уравнений получается методом конечных объемов. При этом пространственная аппроксимация невязких составляющих векторов потоков осуществляется с помощью симметричной схемы 4-го, а вязких составляющих – 2-го порядка точности. Интегрирование по времени проводится с использованием трехслойной схемы Эйлера 2-го порядка точности с внутренними итерациями по псевдовремени. Для решения полученной в результате системы дискретных уравнений применяется неявный метод релаксации Гаусса-Зейделя по плоскостям.

2.2. Параллелизация алгоритма

В коде применена так называемая гибридная концепция параллелизации *Message*

Passing Interface (MPI) / Open Multi Processing (Open MP). Это подразумевает привлечение как библиотеки *MPI* (технология распределенной памяти), так и *OMP*-инструкций параллелизации (технология общей памяти) для параллельных вычислений отдельных сеточных блоков или групп сеточных блоков. Кроме того, *OMP*-инструкции используются для дополнительной параллелизации вычислений внутри единичных сеточных блоков. Важным преимуществом данного подхода перед применением только *MPI*- или только *Open MP*-стратегий является его гибкость, то есть простота адаптации к компьютерам с различной архитектурой с учетом специфики рассматриваемой задачи путем соответствующего выбора управляющих входных параметров. Код написан на языке *FORTRAN-90* и не требует каких-либо других библиотек, кроме стандартных библиотек *MPI* и *OpenMP*.

Чтобы эффективно задействовать ресурсы суперкомпьютеров с большим числом вычислительных узлов/ядер, производится дополнительное (не связанное с геометрическими особенностями рассматриваемого течения) разбиение расчетной области на большое число сеточных блоков. При этом для сохранения порядка пространственной аппроксимации схемы на границах искусственных сеточных блоков используется перекрытие соседних блоков на три ячейки (рис. 1).

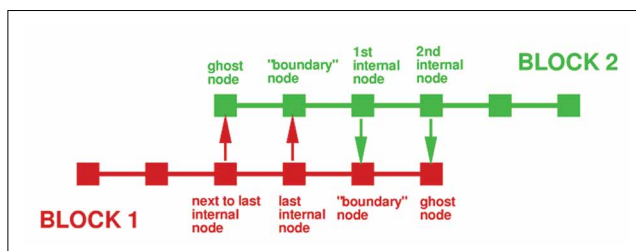


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая перекрытие искусственных сеточных блоков в *NTS*-коде

Оптимальный размер сеточных блоков составляет $50\,000 \div 100\,000$ ячеек (дальнейшее уменьшение размеров блока приводит к снижению эффективности параллелизации). Следует также отметить, что для эффективной работы кода на суперкомпьютерах в нём реализована параллелизация не только вычислительной части (солвера), но и процедур ввода и вывода. При этом, учитывая ограниченность размеров памяти на некоторых компьютерах, каждый *MPI*-процесс осуществляет запись данных в отдельный файл. Наконец, в коде параллелизованы все операции на этапах пре- и пост-процессинга, начиная с построения сетки. Это необходимо, поскольку память узлов существующих компьютеров недостаточна для размещения не только результатов расчетов на используемых в настоящей работе сетках (несколько миллиардов узлов), но даже самих этих сеток.

3. Эффективность параллелизации

В данном разделе приводятся результаты тестов, выполненных для оценки эффективности параллелизации вычислений, обеспечиваемой NTS-кодом на кластерах *Mira* и “Торнадо”.

Целью первого теста было определение эффективности *OpenMP*-параллелизации. Для этого были выполнены замеры времени расчета при использовании разного количества *OpenMP*-процессов, выполняющихся на одном вычислительном узле кластера. При этом размер сеточного блока составлял примерно 100 000 ячеек (как отмечалось выше, этот размер близок к оптимальному). Результаты данного теста показаны на рис. 2, из которого видно, что ускорение расчета примерно одинаково для обоих кластеров и составляет порядка 20-ти раз при использовании 30-ти *OpenMP*-процессов, то есть приблизительно 67% от идеального.

Для оценки эффективности *MPI*-параллелизации были проведены расчеты, в которых

Табл. 1. Зависимость относительного времени расчета одной итерации от числа задействованных вычислительных узлов кластера при постоянной вычислительной нагрузке на узел (*Weak-Scaling Parallel Performance Efficiency Test*)

Число вычислительных узлов		Относительное время расчета одной итерации	
<i>Mira</i>	“Торнадо”	<i>Mira</i>	“Торнадо”
512	16	1.0	1.00
1 024	32	0.95	0.99
2 048	64	0.875	0.98
4 096	128	0.82	0.94
8 192	256	0.78	0.89
16 384	512	0.71	0.82

увеличение размера задачи сопровождалось пропорциональным увеличением количества задействованных вычислительных узлов кластера, то есть осуществлялось с сохранением вычислительной нагрузки на узел (так называемый *Weak Scalability* тест). При этом, из-за большого различия количества вычислительных узлов в кластерах (*Mira* – 49 152; “Торнадо” – 712), описанный тест был выполнен с использованием от 512 до 16 384 узлов *Mira* и от 4 до 512 узлов “Торнадо”. Результаты этих расчетов представлены в табл. 1 и на рис. 3. Видно, что при максимальном использованном для каждого кластера числе вычислительных узлов, эффективность *MPI*-параллелизации остается достаточно высокой (не опускается ниже ~70%).

Таким образом, результаты тестирования свидетельствуют о том, что эффективность параллелизации вычислений в NTS-коде на обоих компьютерах является весьма высокой, что, собственно, и обеспечило возможность проведения с его помощью DNS рассматриваемого исключительно сложного течения за приемлемое время.

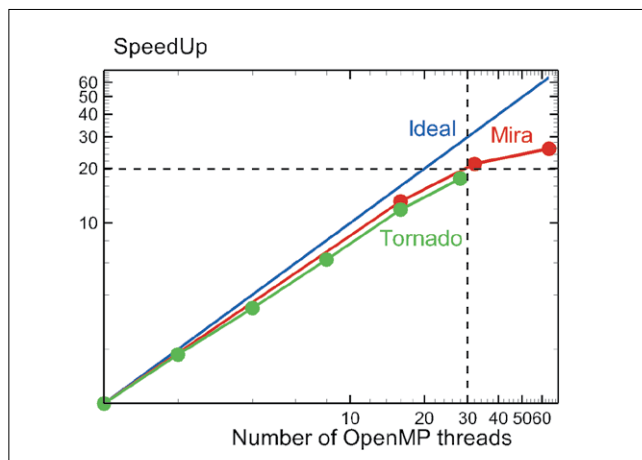


Рис. 2. Ускорение вычислений по сравнению со скалярным (без *OpenMP*-параллелизации) быстродействием в зависимости от числа *OpenMP*-процессов, полученное на кластерах *Mira* и “Торнадо”

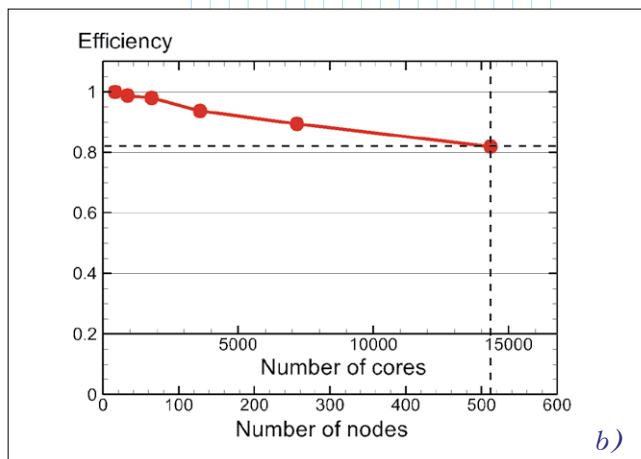
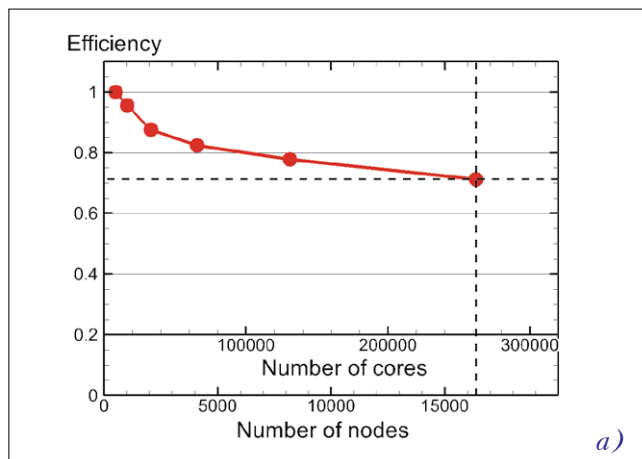


Рис. 3. Зависимость эффективности *MPI*-параллелизации NTS-кода от числа вычислительных узлов и ядер (*Weak Scaling Test*) на кластерах *Mira* (a) и “Торнадо” (b)

4. Описание основного DNS-расчета и его результаты

4.1. Размер задачи, задействованные вычислительные ресурсы и их производительность

Для проведения DNS рассматриваемого течения при условиях эксперимента [2] (число Маха набегающего на цилиндр потока $M_\infty = U_\infty / a_\infty = 0.875$ (a – скорость звука), число Рейнольдса $Re = \rho_\infty U_\infty c / \mu_\infty = 6.7 \cdot 10^6$ (ρ – плотность, μ – динамическая вязкость, c – длина осесимметричного утолщения на поверхности цилиндра), была построена сетка, удовлетворяющая требованиям, предъявляемым к DNS, то есть обеспечивающая разрешение всех пространственных масштабов турбулентности в рассматриваемом течении вплоть до длин порядка колмогоровского линейного масштаба. Размер этой сетки оказался равным $9602 \times 850 \times 1024$ ячеек в продольном (параллельном основному потоку), радиальном и азимутальном направлениях соответственно, то есть примерно 8.3 млрд. узлов. Кроме того, из-за необходимости перекрытия искусственных сеточных блоков (см. раздел 2.2), её размер был увеличен до 8.7 млрд. ячеек (отметим, что, насколько известно авторам, аэродинамические расчеты на столь больших сетках ранее в России не проводились).

Шаг интегрирования по времени также определялся на основе сопоставления с временным масштабом Колмогорова и был выбран равным $1.25 \cdot 10^{-4} (c/U_0)$, а полное физическое время расчета, необходимое для выхода решения на статистически установившийся режим и для накопления данных, достаточных для надежного определения статистики, составляет примерно $5 (c/U_0)$. Таким образом, для решения задачи необходимо совершить $4 \cdot 10^4$ шагов по времени или $4 \cdot 10^5$ итераций (на каждом шаге по времени выполнялось 10 итераций по псевдовремени).

При проведении описанного расчета на кластере *Mira* были задействованы 16 384 узла с 16-тью ядрами *Power PC A2* (1.6 GHz), то есть 262 144 ядра (каждый из этих узлов имеет 16 Gb RAM).

При проведении того же расчета на кластере “Торнадо” использовалось 586 узлов, каждый из которых имеет 28 ядер *Intel Xeon E5-2697v3* (2.60 GHz), то есть 16 408 ядер (по 64 Gb RAM у каждого узла).

Проведенные в процессе расчетов измерения показали, что время, затрачиваемое на проведение одной итерации, составляет 2.4 секунды на *Mira* и 7.2 секунды – на “Торнадо”. Таким образом, при решении рассматриваемой задачи с помощью NTS-кода реальная производительность кластера “Торнадо” в расчете на одно ядро и на один узел оказалась соответственно в 5.3 и 9.3 раза выше, чем у кластера *Mira*. При этом полные затраты ресурсов составили 61 440 000 ядро-часов (267 астрономических часов) на *Mira* и 11 500 000 ядро-часов (800 астрономических часов) на “Торнадо”.

4.2. Основные физические результаты расчетов

Ценность проведенных расчетов состоит, прежде всего, в том, что с их помощью получен огромный массив данных, существенным образом дополняющих экспериментальную базу данных [2]. Так, в эксперименте были выполнены измерения лишь некоторых параметров осредненного потока и его основных статистических характеристик (напряжений Рейнольдса), в то время в результате проведения DNS получена детальная информация о нестационарной вихревой структуре турбулентности – в том числе, позволяющая определить корреляционные моменты высших порядков, знание которых необходимо для построения моделей переноса Рейнольдсовых напряжений.

В качестве иллюстрации на рис. 4 показана фотография экспериментальной визуализации картины течения с помощью метода масляной пленки

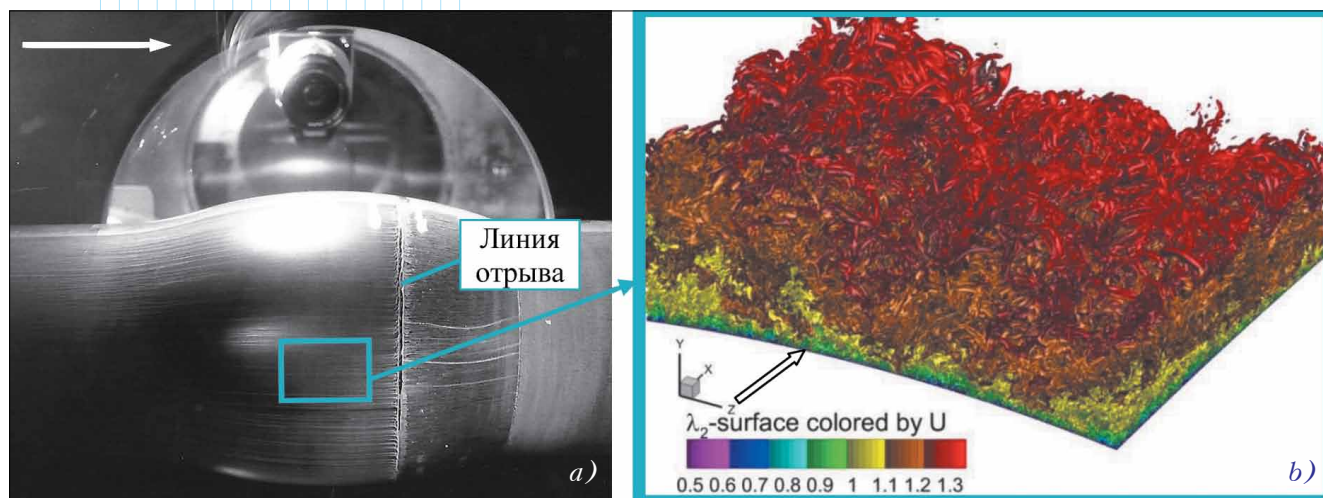


Рис. 4. Фотография экспериментальной визуализации потока с помощью метода масляной пленки (а) и фрагмент мгновенной изоповерхности величины закрутки потока в области миделя утолщения (б), раскрашенной в соответствии с величиной продольной составляющей вектора скорости.

Стрелками указано направление потока

и фрагмент визуализации результатов *DNS* в форме мгновенной изоповерхности величины закрутки потока (второе собственное число λ_2 тензора градиента скорости), раскрашенной величиной продольной скорости. Из рис. 4 видно, что экспериментальная визуализация, по существу, дает представление лишь о положении линии отрыва потока, обусловленного взаимодействием скачка уплотнения с турбулентным пограничным слоем на поверхности цилиндра, в то время как визуализация результатов *DNS* дает представление об исключительно сложной структуре турбулентности в пограничном слое, характеризующейся наличием вихревых структур с широким спектром пространственных масштабов и, таким образом, значительно дополняет эксперимент.

На иллюстрациях (рис. 5÷7) показаны другие формы визуализации результатов *DNS*, позволяющие судить о широких возможностях, открываемых данным подходом для изучения структуры турбулентности.

В частности, на рис. 5, 6 показаны мгновенные поля завихренности на поверхности обтекаемой модели и в её поперечном сечении, расположенном на небольшом расстоянии вверх по потоку от начала утолщения. Первый из них иллюстрирует эволюцию структуры турбулентности в пристеночной части потока при переходе из области ускорения потока, расположенной перед утолщением, к области его замедления при обтекании утолщения и к областям отрыва пограничного слоя и его последующего присоединения, а второй – изменение структуры турбулентности в пограничном слое по мере удаления от стенки.

На рис. 7 приведена фотография экспериментальной интерферограммы в области утолщения и мгновенное поле градиента давления в меридиональной плоскости в этой же области, полученное

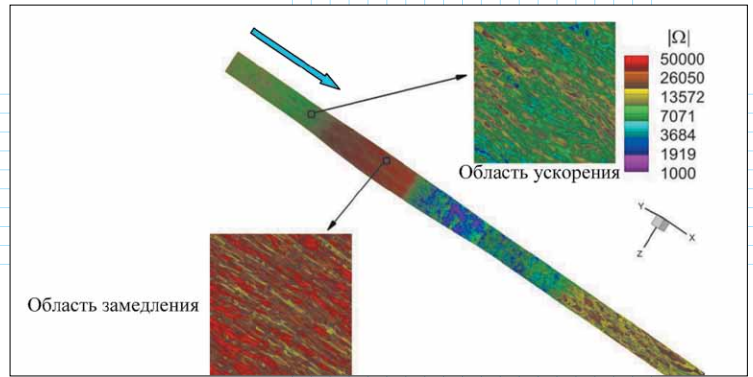


Рис. 5. Мгновенное поле модуля вектора завихренности на поверхности модели

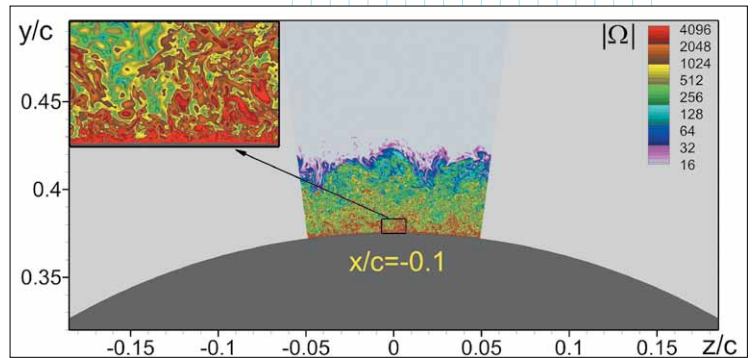


Рис. 6. Мгновенное поле модуля вектора завихренности в поперечном сечении, расположенном вверх по потоку от утолщения ($x/c = -0.1$)

в результате *DNS*. Из иллюстрации видно, что интерферограмма показывает только волновую картину течения, в то время как результаты *DNS* дают, наряду с этим, детальное представление о структуре турбулентности в области взаимодействия скачка уплотнения с пограничным слоем и в отрывной зоне за скачком, формирующейся в результате этого взаимодействия.

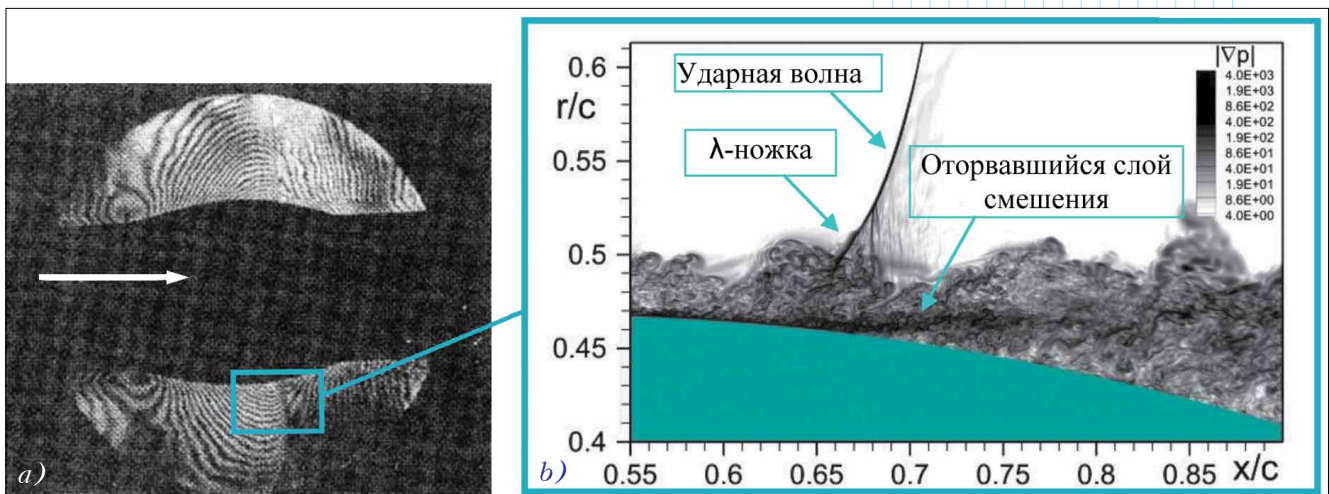


Рис. 7. Голографическая интерферограмма обтекания утолщения (а) и мгновенное поле модуля градиента давления из *DNS* (б)

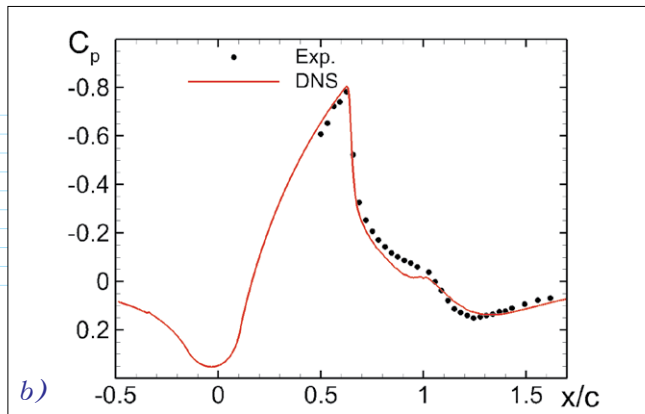
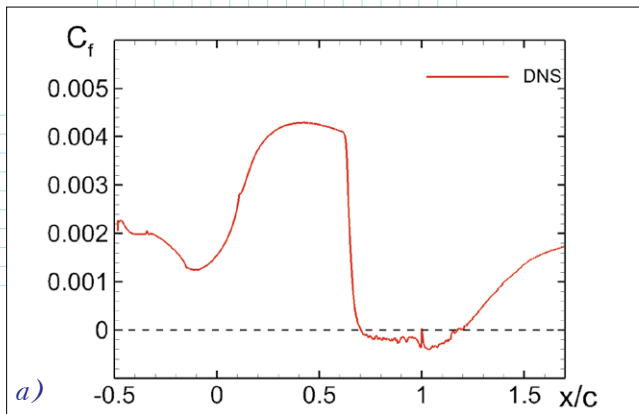


Рис. 8. Продольные распределения коэффициентов поверхностного трения (а) и давления (б) на поверхности модели

Наконец, на рис. 8 представлены картины распределения коэффициентов трения и давления вдоль поверхности модели; последнее сопоставлено с соответствующим распределением, измеренным в экспериментах [2] (коэффициент трения в экспериментах не измерялся). Хорошее согласование результатов *DNS* с экспериментом свидетельствует о высокой точности выполенных расчетов, с одной стороны, и служит независимым подтверждением корректности нестандартной постановки эксперимента [2] – с другой.

5. Заключение

Итак, мы рассмотрели опыт применения прямого численного моделирования (*DNS*) для расчета продольного обтекания цилиндра с осесимметричной выпуклостью трансзвуковым потоком на двух суперкомпьютерах (кластер *Mira* Национальной лаборатории *Argonne* (США) и кластер “Торнадо” Суперкомпьютерного центра “Политехнический”) с помощью вычислительного кода *NTS*, разработанного в Санкт-Петербургском политехническом университете. Основные выводы, которые можно сделать на основе проведенных исследований, состоят в следующем.

Современные компьютеры обеспечивают возможность успешного применения *DNS* для расчета весьма сложных турбулентных течений, представляющих не только теоретический, но и непосредственный практический интерес, несмотря на огромные размеры расчетных сеток (в рассмотренной задаче – 8.7 млрд. узлов). При этом гибридная *MPI – OpenMP* концепция параллелизации неявных алгоритмов численного интегрирования нестационарных трехмерных уравнений Навье-Стокса для сжимаемого газа показала высокую эффективность на обоих компьютерах. Кроме того, было установлено, что при решении рассматриваемой задачи реальная производительность кластера “Торнадо” в расчете на один вычислительный узел превышает производительность кластера *Mira* в 9.3 раза, а в расчете на одно ядро – в 5.3 раза.

С физической точки зрения, основная ценность проведенных расчетов состоит в получении огромного массива данных, существенным образом

дополняющих экспериментальную базу данных по рассматриваемому течению [2]. Полученная в результате комбинированная расчетно-экспериментальная база данных может использоваться как для детального изучения механизма взаимодействия скачка уплотнения с турбулентным пограничным слоем, представляющего большой интерес для гражданской авиации, так и для построения и калибровки полумпирических моделей турбулентности для осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса, которые служат в настоящее время основным расчетным инструментом при проектировании пассажирских самолетов. ☺

Литература

1. Spalart P.R. Strategies for turbulence modeling and simulations. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2000, vol. 21, pp. 252–263.
2. Bachalo W.D., Johnson D.A. Transonic, turbulent boundary-layer separation generated on an axisymmetric flow model. *AIAA Journal*, 1986, vol. 24, #3, pp. 437–443.
3. Spalart P.R., Strelets M., Travin A. Direct numerical simulation of large-eddy-break-up devices in a boundary layer. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2006, vol. 27, pp. 902–910.
4. Shur M., Strelets M., Travin A. High-order implicit multi-block Navier-Stokes code: Ten-year experience of application to RANS/DES/LES/DNS of turbulent flows. *The 7th Symposium on Overset Composite Grids & Solution Technology*. Huntington Beach (California, USA), 2004. http://cfd.spbstu.ru/agarbaruk/c/document_library/DLFE-42505.pdf
5. Roe P.L. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 1981, vol. 43, pp. 357–372.

Об авторах

Беляев К.В., Гарбарук А.В., Стрелец М.Х., Шур М.Л. – Санкт-Петербургский политехнический университет, Россия
 Spalart P.R. – Boeing Commercial Airplanes, USA