

Опыт прямого численного моделирования турбулентности на суперкомпьютерах*

К.В. Беляев¹, А.В. Гарбарук¹, М.Х. Стрелец¹, М.Л. Шур¹, P.R. Spalart²

¹Санкт-Петербургский политехнический университет, Россия

²Boeing Commercial Airplanes, USA

Прямое численное моделирование (DNS), т.е. 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 практическим 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. Это демонстрируется на примере успешного применения DNS для расчета трансзвукового обтекания цилиндра с утолщением, представляющего большой интерес для гражданской авиации.

Ключевые слова: Прямое численное моделирование, турбулентность, массивно-параллельные вычисления, взаимодействие скачка уплотнения с пограничным слоем

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), т. е. 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 его применение к расчету реальных течений требует огромных вычислительных ресурсов, что объясняется исключительно широким спектром пространственно-временных масштабов турбулентности, требующих точного разрешения в рамках данного подхода при высоких числах Рейнольдса, характерных для большинства таких течений. Например, даже по весьма оптимистичным оценкам темпов роста мощности компьютеров, DNS обтекания самолета или автомобиля станет возможным лишь в конце текущего или в начале следующего 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 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 на крейсерском режиме полета ($M=0.65 - 0.9$). Кроме того, данное явление имеет непосредствен-

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

ное отношение к так называемому трансзвуковому “бафтингу” крыла, то есть к потере устойчивости обтекающего крыла стационарного потока. 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, возможность которых открывается DNS, имеют не только большой теоретический интерес, но и важное практическое значение для авиационной промышленности.

Выполненный в данной работе расчет соответствует условиям эксперимента [2], проведенного 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 шестом месте в рейтинге суперкомпьютеров (соответствующие ресурсы были предоставлены авторам в рамках программы INCITE 2015 министерства энергетики США), и на гетерогенном кластере Торнадо Суперкомпьютерного центра «Политехнический» (159 место в рейтинге). При этом в обоих случаях использовалась массивно-параллельная версия вычислительного кода Numerical Turbulence Simulation (NTS код), 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 (NTS - Numerical Turbulence Simulation), данный код предназначен для расчета турбулентных течений. Он обеспечивает возможность расчета как стационарных, так и нестационарных течений в широком диапазоне числа 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), успешно использовался ранее для DNS [3] и в настоящее время считается одним из наиболее надежных и экономичных исследовательских CFD кодов для аэродинамических приложений. Остановимся кратко на используемых в нем 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 используется неявный метод релаксации Гаусса-Зейделя по плоскостям.

2.2. Параллелизация алгоритма

В коде используется так называемая гибридная концепция параллелизации Message Passing Interface (MPI) / Open Multi Processing (Open MP). Это подразумевает использование 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 использованием 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 использует каких-либо других библиотек, кроме стандартных библиотек MPI и OpenMP.

Для эффективного использования ресурсов 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 (см. рис. 1).

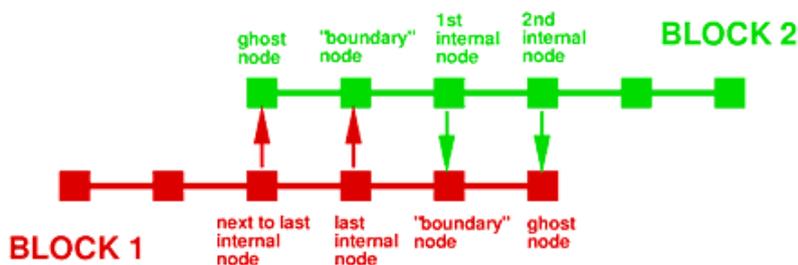


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая перекрытие искусственных сеточных блоков в NTS коде

Оптимальный размер сеточных блоков составляет 50 000-100 000 ячеек (дальнейшее уменьшение размеров блока приводит к снижению эффективности параллелизации). Следует также отметить, что для эффективной работы кода на суперкомпьютерах в нем реализована параллелизация не только вычислительной части (“солвера”), но и процедур ввода и вывода. При этом с учетом ограниченности размеров памяти на некоторых компьютерах каждый MPI процесс осуществляет запись данных в отдельный файл. Наконец, в коде параллелизованы также все операции на этапах пре- и пост-процессинга, начиная с построения сетки. Это необходимо, поскольку память существующих компьютеров недостаточна для размещения не только результатов расчетов на сетках с размерами более 50 миллионов ячеек, но даже самих таких 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 около 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 около 20 раз при использовании 30 OpenMP процессов, то есть приблизительно 67% от идеального.

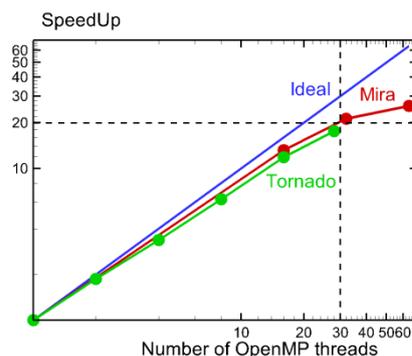


Рис. 2 Ускорения вычислений по сравнению со скалярным (без OpenMP параллелизации) быстродействием в зависимости от числа OpenMP процессов на кластерах Mira и Торнадо

Для оценки эффективности MPI параллелизации были проведены расчеты, в которых увеличение размера задачи сопровождалось пропорциональным увеличением количества используемых вычислительных узлов кластера, то есть осуществлялось с сохранением вычислительной нагрузки на узел (так называемый weak scalability test). При этом из-за большого различия количества вычислительных узлов в кластерах Mira и Tornado (49 152 на Mira и 712 на Торнадо) описанный тест был выполнен с использованием от 512 до 16 384 узлов на Mira и от 4 до 512 узлов на Торнадо. Результаты этих расчетов представлены в таблице 1 и на рис. 3. Видно, что при максимальном использовавшемся для каждого кластера числе вычислительных узлов, эффективность MPI параллелизации остается достаточно высокой (не опускается ниже ~70%).

Таблица 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	
Mira	Торнадо	Mira	Торнадо
512	16	1.0	1.0
1024	32	0.95	0.99
2048	64	0.875	0.98
4096	128	0.82	0.94
8192	256	0.78	0.89
16384	512	0.71	0.82

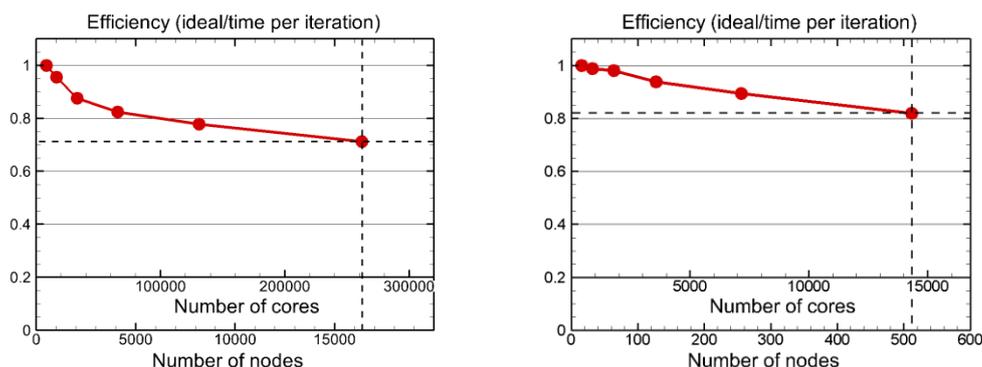


Рис. 3. Зависимость эффективности MPI параллелизации NTS кода от числа вычислительных узлов и ядер (weak scaling test) на кластерах Mira (слева) и Торнадо (справа)

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.

4. Описание основного DNS расчета и его результаты

4.1. Размер задачи, использовавшиеся 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 миллиарда узлов. Кроме того, из-за необходимости перекрытия искусственных сеточных блоков (см. раздел 2.2) ее размер был увеличен до 8.7 миллиардов 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 MiGa использовалось 16 384 узлов с 16 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 были задействованы 586 узлов, каждый из которых имеет 28 ядер Intel Xeon E5-2697v3 (2.60 GHz), то есть 16 408 ядер (каждый из узлов имеет 64 GB RAM).

Проведенные в процессе расчетов измерения показали, что время, затрачиваемое на проведение одной итерации, составляет 2.4 с и 7.2 с на MiGa и Торнадо соответственно. 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 MiGa. При этом полные затраты ресурсов составили 61 440 000 ядро-часов (267 астрономических часов) на MiGa 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 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 и фрагмент визуализации результатов DNS в форме мгновенной изоповерхности величины закрутки потока (второе собственное число тензора градиента скорости λ_2), раскрашенной величиной продольной скорости. Из рисунка 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.

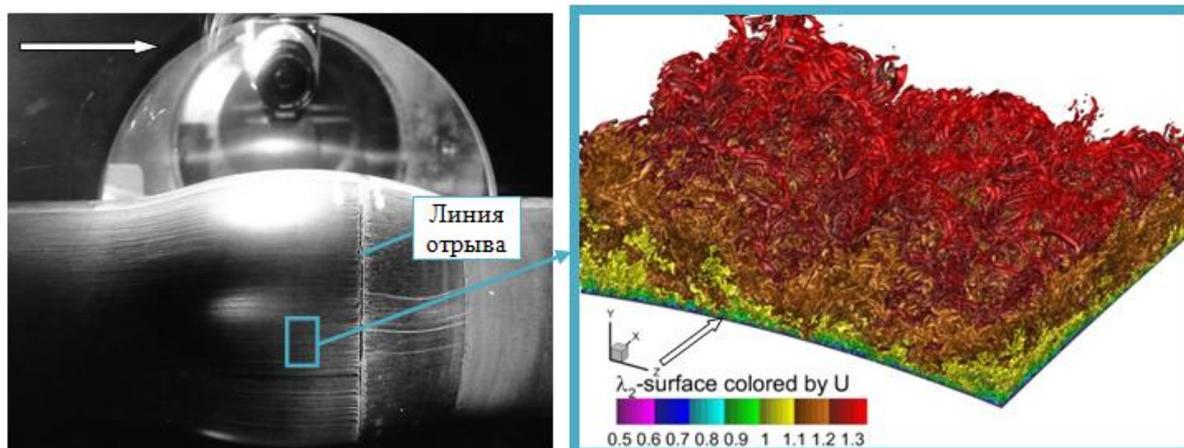


Рис. 4. Фотография экспериментальной визуализации потока с помощью метода масляной пленки (слева) и фрагмент мгновенной изоповерхности величины закрутки потока в области миделя утолщения, раскрашенной в соответствии с величиной продольной составляющей вектора скорости. Стрелками указано направление потока

На 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 ее 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 вторая – изменение структуру турбулентности в пограничном слое по мере удаления от стенки.

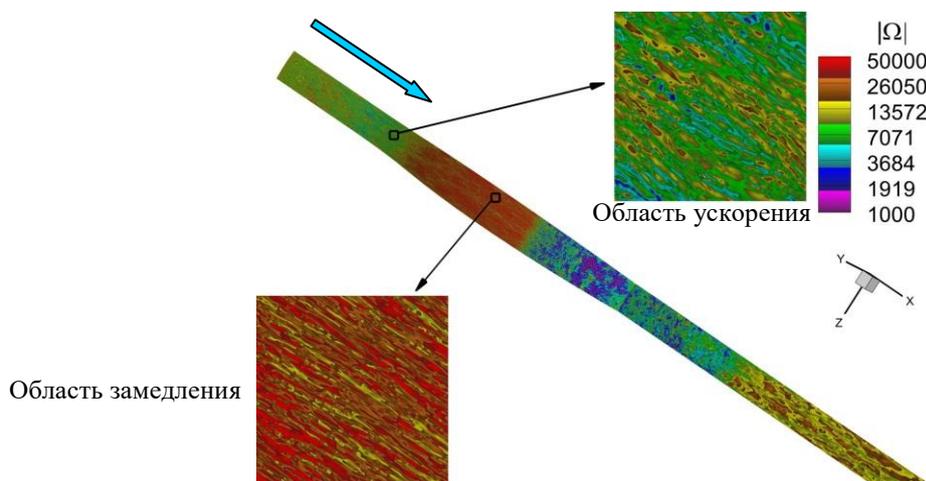


Рис. 5. Мгновенное поле модуля вектора завихренности на поверхности модели

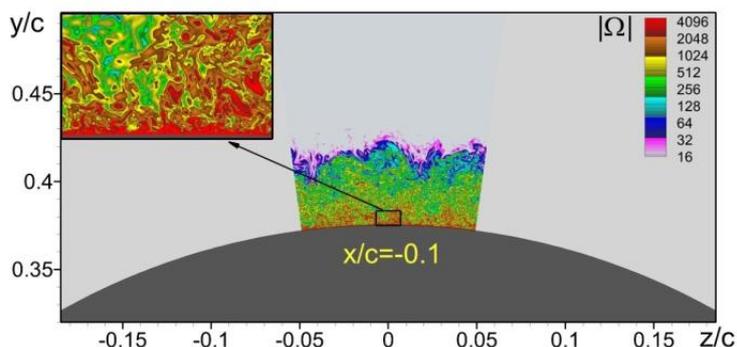


Рис. 6. Мгновенное поле модуля вектора завихренности в поперечном сечении, расположенном вверх по потоку от утолщения ($x/c=-0.1$)

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

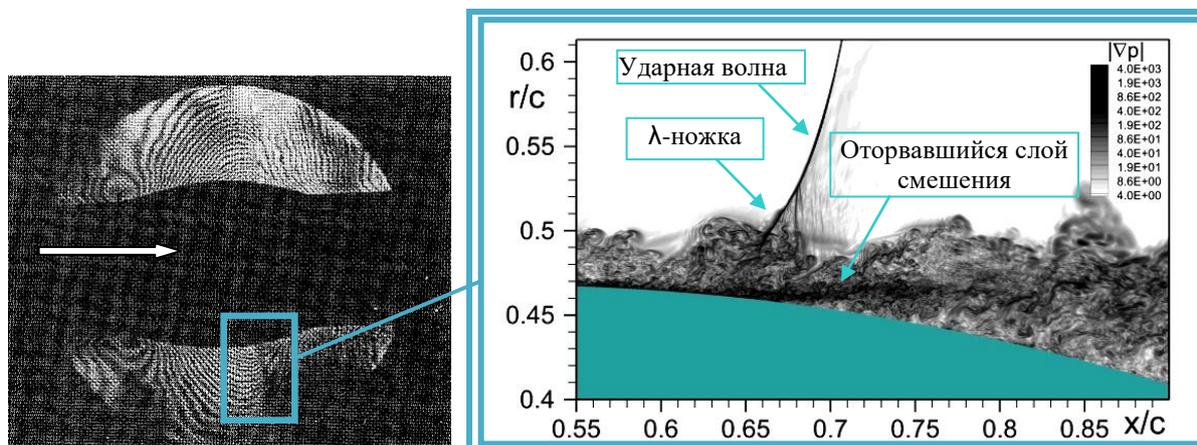


Fig. 7. Голографическая интерферограмма обтекания утолщения [2] (слева) и мгновенное поле модуля градиента давления из DNS

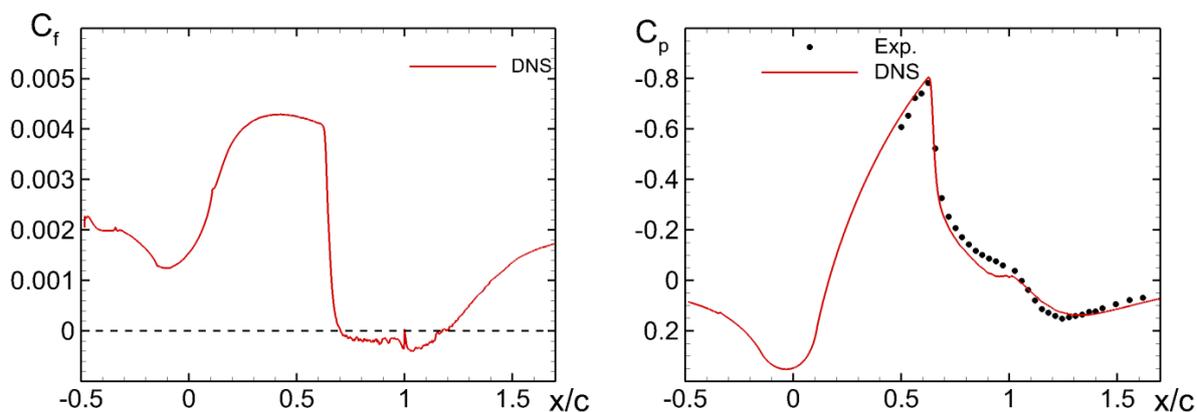


Рис. 8. Продольные распределения коэффициентов поверхностного трения (слева) и давления (справа) на поверхности модели

Наконец, на рис. 8 представлены распределения коэффициентов трения $C_f = 2\tau_w/(\rho U_\infty^2)$ и давления $C_p = 2(p_w - p_\infty)/(\rho U_\infty^2)$ вдоль поверхности модели и сравнение последнего с соответствующим распределением, измеренным в экспериментах [2] (коэффициент трения в экспериментах не измерялся). Хорошее согласование результатов DNS с экспериментом свидетельствует о высокой точности выполненных расчетов, с одной стороны, и служит независимым подтверждением корректности нестандартной постановки эксперимента [2], с другой.

5. Заключение

В работе описан 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.

Продемонстрировано, что современные компьютеры обеспечивают возможность успешного применения DNS для расчета весьма сложных турбулентных течений, представляющих не только теоретический, но и непосредственный практический интерес, несмотря на необходимость использования для этого огромных расчетных сеток (размер сетки в рассмотренной задаче составлял 8.7 миллиардов узлов). При этом показана высокая эффективность гибридной MPI - OpenMP концепции параллелизации неявных алгоритмов численного интегрирования нестационарных трехмерных уравнений Навье-Стокса для сжимаемого газа на обоих использованных компьютерах. Кроме того, установлено, что при решении рассматриваемой задачи реальная производительность кластера Торнадо (159-е место в мировом рейтинге суперкомпьютеров) в расчете на один вычислительный узел превышает производительность кластера Mira (6-е место) 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 полуэмпирических моделей турбулентности для осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса, которые служат в настоящее время основным расчетным инструментом при проектировании пассажирских самолетов.

References

1. Spalart P. R. "Strategies for turbulence modeling and simulations", Int. J. Heat Fluid Flow, 2000, v. 21, pp. 252–263.
2. Bachalo, W. D., Johnson, D. A. "Transonic, Turbulent Boundary-Layer Separation Generated on an Axisymmetric Flow Model", AIAA J., 1986, v. 24, No. 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", Int. J. Heat and Fluid Flow, 2006, v. 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", 7th Symposium on Over-set Composite Grids & Solution Technology, Huntington Beach, California, 2004. http://cfcd.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, v. 43, pp. 357–372.