

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ УНИТАРНОЕ ПРЕДПРИЯТИЕ
РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР
ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

На правах рукописи



Лашкин Сергей Викторович

**ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТРЕХМЕРНОГО
ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЙ ВЯЗКОЙ
НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ НА ПРОИЗВОЛЬНЫХ
НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ**

Специальность 05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
А.С. Козелков

Саров – 2018

Содержание

ГЛАВА 1. ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГИДРОДИНАМИКИ НА НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ.....	12
1.1 Введение.....	12
1.2 Основные уравнения и описание алгоритма SIMPLE.....	14
1.3 Параллельная реализация алгоритма SIMPLE.....	33
1.4 Внедрение алгоритма SIMPLE в пакет программ ЛОГОС.....	44
1.5 Верификация алгоритма SIMPLE.....	57
1.6 Заключение.....	66
ГЛАВА 2. РЕАЛИЗАЦИЯ СОВМЕЩЕННОГО АЛГОРИТМА НА ПРОИЗВОЛЬНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ.....	67
2.1 Введение.....	67
2.2 Исследование эффективности алгоритма SIMPLE.....	70
2.3 Описание совмещенного алгоритма.....	81
2.4 Внедрение совмещенного алгоритма в пакет программ ЛОГОС.....	90
2.5 Верификация совмещенного алгоритма.....	96
2.6 Исследование эффективности совмещенного и разделенного алгоритма.....	102
2.7 Заключение.....	107
ГЛАВА 3. ПРИМЕНЕНИЕ СОВМЕЩЕННОГО АЛГОРИТМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОМЫШЛЕННО-ОРИЕНТИРОВАННЫХ ЗАДАЧ.....	108
3.1 Введение.....	108
3.2 Обобщение совмещенного алгоритма для моделирования течений в анизотропных пористых средах.....	109
3.3 Верификация совмещенного алгоритма для пористых сред.....	112
3.4 Применение совмещенного алгоритма для решения задач авиации.....	118
3.5 Применение совмещенного алгоритма для решения задач атомной энергетики.....	133
3.6 Заключение.....	149
Заключение.....	150
Работы автора по теме диссертации.....	151
Список литературы.....	155

Введение

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности

В настоящее время численное решение задач динамики жидкости предполагает использование двух основных подходов: решение полной системы уравнений Навье-Стокса [Weiss & Smith, 1995; Козелков и др., 2013a] и ее расщепление [Patankar, 1980; Ferziger & Peric, 2002]. Как первый, так и второй подходы адаптированы для моделирования широкого спектра задач: дозвуковые и сверхзвуковые течения, многофазные течения, течения в пористых средах, химическая кинетика и другие [Kaviany, 1991; Kolev, 2002; Moukalled et al., 2003; Costa et al., 2004; Леонов и др., 2013; Kozelkov et al. 2017]. Выбор того или иного подхода обусловлен моделируемыми физическими процессами и необходимой точностью получаемых результатов. Например, при решении сжимаемых транзвуковых и сверхзвуковых течений целесообразней выбирать алгоритмы первого подхода, а при решении слабосжимаемых и существенно дозвуковых - алгоритмы второго. Такая практика их использования обоснована. Решение полной системы уравнений Навье-Стокса является более затратным по памяти (используется блочная матрица) и времени (проблема «акустической жесткости» [Weiss & Smith, 1995; Blazek, 2001]), что делает использование такого подхода не рациональным при моделировании несжимаемых течений. С другой стороны использование расщепленной системы уравнений Навье-Стокса при решении транзвуковых и сверхзвуковых течений приводит к потере точности в областях ударных волн и волн разрежения [Козелков и др., 2013a].

В последние десятилетия появились различные модификации полного алгоритма, позволяющие считать несжимаемые течения с приемлемой скоростью сходимости [Weiss & Smith, 1995]. Однако при моделировании многофазных и многокомпонентных течений, для которых объем памяти для хранения полной системы уравнений Навье-Стокса возрастает экспоненциально росту количества неизвестных, предпочтительней использовать подход с расщепленной системой уравнений, так как он более эффективен с точки зрения использования памяти. При использовании расщепленной системы общее время решения задачи будет сопоставимо с временем решения полной системой, но при этом объем используемой памяти будет в разы меньше [Merkel et al., 1992]. Кроме того, при использовании такого подхода точность моделирования широкого класса задач вычислительной гидродинамики не будет уступать решению полной системы без расщепления, а специализированные методы перевязки уравнений сохранения движения и неразрывности позволят расширить диапазон моделируемых скоростей вплоть до

сверхзвуковых [Смирнов и Зайцев, 2004; Darwish et al., 2009; Mangani & Bianchini, 2010; Chen & Przekwas, 2010; Jareteg, 2012; Emans & Liebmann, 2013; Козелков и др., 2013b; Козелков и др., 2016].

Одним из методов решения расщепленной системы уравнений Навье-Стокса является известный алгоритм SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation) [Patankar, 1980]. Описанию данного алгоритма и его реализации посвящены сотни статей и десятки монографий (см. например [Ferziger & Peric, 2002; Флетчер, 1991]). Подавляющая их часть относится к исследованию и описанию последовательной версии алгоритма SIMPLE на блочно-структурированных сетках. Параллельная реализация данного алгоритма и ее особенности на неструктурированных сетках отражены крайне скудно или вовсе опускаются. В настоящее время, эффективная параллельная реализация алгоритма SIMPLE на многопроцессорных вычислительных системах, содержащих десятки тысяч процессорных ядер, весьма актуальна по причине все повышающихся требований к точности результатов и усложняющейся физики моделируемых процессов [Смирнов и Зайцев, 2004; Strelets, 2011; Козелков и др., 2013a]. К таким процессам можно отнести полномасштабные расчеты моделирования турбулентности с помощью вихреразрешающих подходов [Strelets, 2011; Козелков&Курулин, 2015; Козелков и др., 2014;], прямого численного моделирования [Курулин и Козелков, 2015], задачи акустики [Козелков и др. 2014a, Garbaruk et al., 2014] и другие. Численное моделирование подобного класса задач требует использования сеточных моделей, содержащих сотни миллионов и даже миллиарды расчетных ячеек, и огромного вычислительного поля, состоящего из десятков тысяч процессорных ядер. При этом календарное время счета может быть весьма и весьма существенным [Волков и др., 2013, Козелков и др., 2016a; Лашкин и др., 2016a]. Возможность решения такого рода задач полностью зависит от эффективной параллельной реализации алгоритма SIMPLE.

Кроме скорости решения, масштабируемые расчеты в промышленно-ориентированных приложениях требуют устойчивой сходимости итерационного алгоритма. Применение неструктурированных сеток в промышленных конструкциях сложной геометрической конфигурации является безальтернативным, поскольку построение блочно-структурированной сетки весьма трудозатратно и крайне неэффективно [Козелков и др., 2014a]. Более того, процесс устойчивой сходимости (в особенности на неструктурированных сетках) напрямую зависит от разрешения сеточной модели. В случае использования сетки с высоким разрешением достижение устойчивой сходимости - задача также нетривиальная, и зачастую неправильное задание счетных параметров (коэффициентов релаксации, настройки параметров решения СЛАУ и т.д.)

может привести к существенному замедлению скорости счета или вообще к расходимости итерационного процесса [Козелков и др., 2013b].

Повышение скорости и устойчивости сходимости возможно путем модификации алгоритма SIMPLE с помощью неявного совмещения полей скоростей и давления [Смирнов и Зайцев, 2004; Darwish et al., 2009; Mangani & Bianchini, 2010; Chen & Przekwas, 2010; Jareteg, 2012; Emans & Liebmann, 2013; Лашкин и др., 2016a]. Такое совмещение, присущее всем алгоритмам SIMPLE, позволит избавиться от внутреннего итерирования типа предиктор-корректор и, как следствие, приведет к существенному сокращению нелинейных итераций и уменьшению времени счета. Однако, как показано в работе [Лашкин и др., 2016a], в случае моделирования турбулентных неизотермических течений важно согласовывать нелинейные шаги совмещенного алгоритма, турбулентности и энергии, так как в противном случае подобная неявная модификация может значительно ухудшить процесс сходимости, вплоть до невозможности получения решения в приемлемые сроки. Поэтому, при решении широкого спектра производственных задач для достижения максимально эффективного использования совмещенного алгоритма необходимо правильно задавать параметры счета и настройки решателей СЛАУ.

Практика применения алгоритма SIMPLE в промышленно-ориентированных расчетах весьма широка и охватывает различные классы задач в самых разных отраслях промышленности. К таким задачам можно отнести численное моделирование активной зоны ядерного реактора, состоящей из сотен тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ), радиаторов автомобилей, теплообменников различной направленности, состоящих из большого количества трубных пучков [Ozden & Tari, 2010; Bhutta et al., 2012], течение через многообразные перфорированные пластины [Malavasi et al., 2012; Emrah, 2015], моделирование воздушных фильтров в автомобильной промышленности [Elnaz, 2012] и так далее. Проведение численного моделирования течений в такого рода сложных инженерных конструкциях требует построения сеточных моделей, размерность которых с учетом всех конструктивных особенностей изделия может составлять миллиарды ячеек [Молчанов и др., 2013], а численный эксперимент может занимать от одного до нескольких календарных месяцев. В таких случаях построение «полномасштабной» сеточной модели выливается в отдельную проблему, точно также как и обработка полученных результатов, содержащих огромные массивы данных.

Одним из подходов снижения вычислительных нагрузок служит подход с заменой повторяющихся структур приближением пористого тела. В этом случае уравнения Навье-Стокса модифицируются в известные уравнения Бринкмана-Форхгеймера [Costa et al.,

2004; Shavit et al., 2003; Ozden & Tari, 2010; Kozelkov et al. 2017] и позволяют численно моделировать течения как в областях, целиком занятых пористым телом, так и течения, содержащие граничащие подобласти свободной жидкости и пористого тела. Опыт применения этих уравнений продемонстрировал хорошую точность в описании течений в пористых средах.

В настоящее время, вопросы устойчивости при моделировании течений в пористых средах с использованием неструктурированных расчетных сеток становятся также весьма актуальными. Здесь устойчивость и скорость сходимости напрямую связаны с дискретизацией тензора сопротивления (обратный тензор проницаемости), который полностью определяет структуру течения и сопротивление пористой среды. В случае использования классического алгоритма SIMPLE дискретизация данного тензора происходит полу-неявно, по причине последовательного вычисления полей скорости. Такой способ дискретизации существенным образом понижает устойчивость расчета и скорость сходимости алгоритма. Это особенно актуально в случае нелинейной зависимости компонентов тензора от скорости течения в пористой среде (от числа Рейнольдса). В этом случае количество итераций неизбежно увеличивается за счет явного согласования полей скорости. Применение в этом случае совмещенного алгоритма позволит реализовать полностью неявную дискретизацию тензора сопротивления. Такая реализация не требует явного согласования полей скорости и, как следствие, дополнительно повысит скорость сходимости (уже к имеющейся), особенно при моделировании течений в анизотропных пористых средах [Kozelkov et al. 2017].

Ключевым инструментом, определяющим уровень развития и степень применения вычислительных технологий, является прикладное программное обеспечение для имитационного моделирования на супер-ЭВМ (CAE-системы). Определяющими факторами являются наполненность программного обеспечения современными физико-математическими моделями, математическими методиками и алгоритмами, степень детализации моделируемых объектов, эффективность использования вычислительных ядер супер-ЭВМ, уровень верификации и валидации моделей. По этой причине, для обеспечения практического использования, разработанные методы и алгоритмы необходимо всесторонне верифицировать и исследовать эффективность их применения на супер-ЭВМ петафлопсного класса. Кроме того, для эффективного численного моделирования промышленно-ориентированных задач важно провести этап адаптации разработанных методов и алгоритмов.

Вышеизложенные проблемы в настоящее время являются актуальными, и из всех приведенных фактов вытекает необходимость исследований, выполненных в настоящей диссертации.

Цели диссертационной работы

Основной целью диссертационной работы является разработка методов и алгоритмов повышения эффективности трехмерного численного моделирования турбулентных течений вязкой несжимаемой и слабосжимаемой жидкости, включая течения в анизотропных пористых средах на произвольных неструктурированных сетках с ориентацией на высокопараллельные вычислительные комплексы петафлопсного класса.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие задачи:

1. Разработать методику параллельной реализации классического и совмещенного алгоритма SIMPLE на неструктурированных сетках на основе алгебраического многосеточного метода AMG, учитывающей особенности распределенного хранения и решения СЛАУ на десятках тысяч процессоров. Провести верификацию и валидацию реализованных алгоритмов на примере решения характерных задач гидродинамики, описывающих турбулентные течения вязкой несжимаемой жидкости на произвольных неструктурированных сетках.
2. Исследовать эффективность реализованных алгоритмов при решении задач течений вязкой несжимаемой жидкости и газа в высокопараллельном режиме на произвольных трехмерных неструктурированных сетках. Определить оптимальные настройки для эффективного решения промышленно-ориентированных задач.
3. Разработать на базе совмещенного алгоритма SIMPLE метод решения уравнений Бринкмана-Форхгеймера для моделирования течений в анизотропных пористых средах с возможностью полностью неявной аппроксимации линейного тензора сопротивления. Провести верификацию и валидацию, а также исследовать эффективность разработанного метода.
4. Внедрить разработанные методы в общую структуру пакета программ ЛОГОС с учетом возможности моделирования многообластных сопряженных задач.
5. Провести адаптацию разработанных методов для решения промышленно-ориентированных задач атомной и авиационной отраслей промышленности.

Методы исследования и степень достоверности результатов

Обоснованность полученных теоретических результатов вытекает из использования современного математического аппарата механики жидкости и газа

(теория расщепления по физическим процессам, уравнение Пуассона, теория интегрирования уравнений движения жидкости, аппроксимация конвективных и диффузионных слагаемых) и сопоставления получаемых численных решений с уже описанными в литературе, а также экспериментальными и натурными данными. Хорошее согласие между результатами численных расчетов и натурными данными также свидетельствует об обоснованности полученных результатов.

Научная новизна

Научная новизна диссертационной работы определяется полученными оригинальными результатами, которые подтверждены серией вычислительных экспериментов, в том числе, на произвольных неструктурированных сетках. В частности:

1. Разработана методика параллельной реализации классического и совмещенного алгоритмов SIMPLE на основе алгебраического многосеточного метода AMG, учитывающая особенности распределенного хранения и решения СЛАУ на десятках тысяч процессоров.
2. Проведена верификация классического и совмещенного алгоритмов SIMPLE на примере решения характерных задач гидродинамики, описывающих турбулентные течения вязкой несжимаемой жидкости на произвольных неструктурированных сетках.
3. Исследована эффективность параллельной реализации классического и совмещенного алгоритмов SIMPLE и определены оптимальные настройки многосеточного метода AMG для эффективного использования при решении промышленно-ориентированных задач.
4. Разработан новый метод решения уравнений Бринкмана-Форхгеймера на базе совмещенного алгоритма SIMPLE для моделирования течений вязкой несжимаемой жидкости в анизотропных пористых средах с возможностью полностью неявной аппроксимации линейного тензора сопротивления.

Положения, выносимые на защиту

1. Методика распараллеливания разделенного и совмещенного алгоритмов SIMPLE на неструктурированных сетках с использованием алгебраического многосеточного метода (AMG), учитывающая особенности распределенного хранения и решения СЛАУ, и ее реализация в пакете программ ЛОГОС.

2. Результаты исследования эффективности разделенного и совмещенного алгоритмов SIMPLE на примере решения характерных задач гидродинамики, описывающих турбулентные течения вязкой несжимаемой жидкости на тысячах процессорных ядер.
3. Математическая модель решения уравнений Бринкмана-Форхгеймера на базе совмещенного алгоритма SIMPLE для моделирования течений вязкой несжимаемой жидкости в анизотропных пористых средах. Адекватность модели подтверждена серией численных экспериментов.
4. Результаты комплексного исследования совмещенного алгоритма SIMPLE для моделирования течений вязкой несжимаемой жидкости в пористых средах, а также его адаптация в пакете программ ЛОГОС для эффективного решения соответствующих промышленно-ориентированных задач авиационной и атомной промышленности.
5. Комплекс программ для моделирования турбулентных неизотермических течений вязкой несжимаемой жидкости, в том числе в пористых средах и его внедрение в пакет программ ЛОГОС.

Теоретическая и практическая значимость работы

Полученные теоретические и практические результаты по разработке и реализации численных методов решения системы уравнений Навье-Стокса могут быть применены при решении промышленно-ориентированных задач высокотехнологичных отраслей промышленности и задач по основной тематике ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ». Предложенные методы позволят эффективно использовать вычислительные системы, состоящие из десятков тысяч процессоров, при счете задач на произвольных неструктурированных сетках, состоящих из сотен миллионов расчетных ячеек.

Все разработки, выполненные в рамках настоящей работы, реализованы на базе пакета программ ЛОГОС - отечественного программного обеспечения для инженерного анализа [СВ-СВ12, СЖ1, СЖ2, ТК1-ТК7, ПП1, СР1-СР3]. Уже в настоящее время пакет программ ЛОГОС используют более 40 предприятий России. С 2014 года в состав пакета ЛОГОС входят алгоритмы, схемы и решения, представленные в диссертации, которые используются для решения промышленных задач для таких отраслей промышленности, как авиастроение, атомная энергетика, автомобилестроение [СВ1-СВ12, СЖ1-СЖ2].

Полученные результаты использовались в следующих российских исследовательских проектах:

- РФФИ проект офи_м, № 13-0712079: «Исследование потенциала суперкомпьютеров для масштабируемого численного моделирования задач газо- и гидродинамики в

индустриальных приложениях», а также проект №16-01-00267 «Развитие вычислительных технологий, направленных на решение фундаментальных задач и прогнозирование последствий астероидно-кометного воздействия на водную среду (2016-2018 гг.)»;

- ГК 14.514.12.0002 с Министерством образования РФ: «Численное исследование нестационарных отрывных турбулентных течений и генерируемых ими акустических полей для нужд авиационной промышленности»;
- Проект «Развитие суперкомпьютеров и грид-технологий» (2010-2012 гг.), одобренный на заседании Комиссии при Президенте Российской Федерации по модернизации и технологическому развитию экономики;
- Федеральная целевая программа «Ядерные энерготехнологии нового поколения на период 2010 - 2015 годов и на перспективу до 2020 года»;
- Проект «Разработка отечественного программного обеспечения», утвержденный постановлением Правительства Российской Федерации №993 от 30.09.2016;
- Грант Президента Российской Федерации по государственной поддержке научных исследований молодых российских ученых-докторов наук МД-4874.2018.9 (грант руководителя);
- Грант государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации НШ-2685.2018.5;
- РФФИ № 16-01-00267 «Развитие вычислительных технологий, направленных на решение фундаментальных задач и прогнозирование последствий астероидно-кометного воздействия на водную среду»;
- РФФИ № 17-05-00067 «Новые аналитические решения в нелинейной динамике прибрежной зоны моря, тестированные численным моделированием»;
- Государственное задание в сфере научной деятельности № 5.5176.2017/8.9 "Новые тенденции в физике цунами: от одномерных к трехмерным моделям".

Данные проекты выполнялись при активном участии диссертанта.

Апробация работы

Основные результаты диссертации были представлены на всероссийских и международных конференциях, таких как международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование» (г. Саров, 2011 г., 2012 г., 2014 г.), Всероссийская конференция-школа молодых исследователей «Современные проблемы математического моделирования» (п. Абрау-Дюрсо, 2013 г.), научная конференция МФТИ

(г. Долгопрудный, 2013 г.), научно-техническая конференция «Молодежь в науке» (г. Саров, 2012 г., 2014 г.), молодежная научно-инновационная школа «Математика и математическое моделирование» (г. Саров, 2011 г.), конференция «XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики» (г. Казань, 2015 г.), 9-я МНТК «Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭР» ОКБ «ГИДРОПРЕСС», (г. Подольск, 2015), Третий национальный суперкомпьютерный форум (г. Переславль-Залесский 24–27 ноября 2014 г.), а также на семинарах Нижегородского государственного технического университета им. Р.Е. Алексеева, Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, Балтийского государственного технического университета «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Института теоретической и математической физики ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ».

Публикации

Основные положения диссертации представлены в 25 публикациях, из них 12 статей в журналах, включенных в список ВАК и/или входящих в мировые индексы цитирования (SCOPUS, Web of Science), 7 работ в трудах конференций. Получено 3 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Личный вклад автора

Научным руководителем сформулирована задача и цели диссертационного исследования. Под руководством научного руководителя реализована параллельная версия алгоритма SIMPLE на произвольных неструктурированных сетках. На базе алгоритма SIMPLE автором диссертационной работы реализован совмещенный алгоритм в рамках единой матрицы системы уравнений скорости и давления. Автором лично исследована эффективность алгоритма, проведена верификация и определен набор оптимальных настроечных параметров для эффективного использования на системах петафлопсного класса. На базе совмещенного алгоритма автором реализован метод решения уравнений Бринкмана-Форхгеймера для моделирования течений в анизотропных пористых средах. С соавторами проведена его верификация и адаптация к промышленным задачам.

Автор выражает бесконечную благодарность своему научному руководителю – доктору физико-математических наук, начальнику отдела ИТМФ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» Козелкову Андрею Сергеевичу. Автору приятно поблагодарить всех соавторов, а также коллег института теоретической и математической физики ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» за сотрудничество и помощь.

ГЛАВА 1. ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГИДРОДИНАМИКИ НА НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ

1.1 Введение

В настоящее время задачи промышленности диктуют необходимость численного расчета все более и более сложных конструктивных изделий, состоящих из десятков сборных элементов, моделирующих разномасштабные и сопряженные физические процессы, в самые короткие сроки. Моделирование подобного класса задач основывается на численном решении системы уравнений Навье-Стокса, описывающих течения вязких несжимаемых и сжимаемых жидкостей и газов. Одним из численных алгоритмов решения уравнений Навье-Стокса является алгоритм SIMPLE, реализация которого должна учитывать особенности моделирования на произвольных неструктурированных сетках и возможность его выполнения на системах петафлопсного класса.

Корректная реализация алгоритма SIMPLE на неортогональных неструктурированных сетках подразумевает изменение способов вычисления основных расчетных параметров: градиентов расчетных величин, поправки Рхи-Чоу [Rhie & Chow, 1983], массового, объемного и диффузионного потоков. Помимо этого необходимо использование неортогональной коррекции в уравнениях неразрывности, движения, энергии, турбулентности и многокомпонентности, а также при решении многофазных задач с плавучестью и гравитацией. Игнорирование этих фактов в исходных вычислительных процедурах гарантированно приведет к неудовлетворительным результатам или к расходимости решения [Jasak, 1996].

Эффективная реализация вычислительных алгоритмов на системах петафлопсного класса, которые в настоящее время становятся все более доступными [Козелков и др., 2016а], позволит сократить времена счета полномасштабных задач за счет более рационального (эффективного) использования вычислительных ресурсов. Стоит подчеркнуть, что показатель эффективности для параллельных алгоритмов является основной величиной и в практических расчетах желательно придерживаться значений не ниже 60% (показывает общее время загрузки процессора), так как в противном случае это приведет к неоправданному простоем вычислительных ресурсов, увеличению времени счета и как следствие к удорожанию вычислительного эксперимента.

При адаптации алгоритмов вычислительной гидродинамики к высокопроизводительным системам возникают два аспекта. Первый аспект заключается в распараллеливании алгоритма, который включает в себя способ декомпозиции модели и

организацию межпроцессных обменов. В диссертации описана декомпозиция, основанная на использовании фиктивных ячеек. Такая декомпозиция дает возможность применять произвольные схемы высокого порядка и значительно упрощает написание вычислительных процедур. В качестве формата хранения распределенной сеточной модели используется гранично-ячеечный формат, а для хранения и решения распределенных СЛАУ - формат LDU [Козелков и др., 2013b; Голубев и др., 2013]. Важно отметить, что данные форматы имеют прямую связь, что позволяет за счет наличия фиктивных ячеек сократить число межпроцессных обменов и количество избыточных операций копирования при согласовании форматов [Лашкин и др., 2016b]. Такой подход наиболее эффективен при конечно-объемной дискретизации, являющийся самым оптимальным при использовании неструктурированных сеток.

Второй аспект заключается в повышении эффективности решения СЛАУ. Он возникает при дискретизации системы уравнений Навье-Стокса неявными методами. Здесь самым эффективным способом решения СЛАУ является многосеточный метод [Vanek et al., 1996; Brandt, 1982; Saad, 2003], который широко используется при решении промышленно-ориентированных задач. Однако, большое число настроечных параметров (тип цикла, тип сглаживателя, количество итераций сглаживателя, глобальный уровень и так далее) приводит к вопросам его оптимального (эффективного) использования. В большинстве случаев, подбор оптимальных параметров многосеточного решателя является индивидуальной задачей, но как показывает вычислительная практика, существуют универсальные настройки для конкретных классов задач, например, несжимаемые или сжимаемые течения. В случае неудовлетворительного подбора настроек многосеточного решателя возможно замедление решения СЛАУ и, соответственно, вычислительного алгоритма до нескольких раз [Лашкин и др., 2016b].

Данная глава посвящена изучению вопроса эффективной параллельной реализации алгоритма SIMPLE на неструктурированных сетках. В параграфе 1.2 представлено описание алгоритма SIMPLE для численного решения уравнений Навье-Стокса на произвольных неструктурированных сетках. В параграфе 1.3 представлено описание организации пакета программ ЛОГОС и адаптации алгоритма SIMPLE к программной структуре пакета программ ЛОГОС. В параграфе 1.4 описана параллельная реализация алгоритма SIMPLE. В параграфе 1.5 приведены результаты верификации реализованного метода на серии численных экспериментов моделирования турбулентных течений вязкой несжимаемой и слабосжимаемой жидкости на структурированных и неструктурированных сетках. В заключении суммированы результаты к главе.

1.2 Основные уравнения и описание алгоритма SIMPLE

Уравнения гидродинамики

Нестационарные трехмерные турбулентные течения вязкого теплопроводного сжимаемого газа описываются системой уравнений, включающей уравнения неразрывности, Навье-Стокса и энергии (законы сохранения массы, импульса и энергии). В случае осреднения данной системы по Рейнольдсу [Ferziger & Peric, 2002], ее можно записать в неконсервативной (полу-дивергентной) форме:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = -\nabla p, \\ \frac{\partial (\rho H)}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} H) - \nabla \cdot \mathbf{q} = \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}). \end{cases} \quad (1)$$

В системе (1) используются общепринятые обозначения: ρ - плотность моделируемой среды, t - время, $\mathbf{u} = \{u, v, w\}$ - вектор скорости осредненного течения в трехмерной декартовой системе координат, $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_\mu + \boldsymbol{\tau}_t$ - сумма молекулярной и турбулентной (тензор рейнольдсовских напряжений) составляющих вязкой части тензора напряжений, p - давление, $H = h + \frac{1}{2}|\mathbf{u}|^2$ - полная энтальпия, $h = \int_{T_{ref}}^T C_p dT$ - статическая энтальпия, C_p - теплоемкость при постоянном давлении, T - температура, $\mathbf{q} = \mathbf{q}_\mu + \mathbf{q}_t$ - сумма молекулярной и турбулентной составляющих вектора плотности теплового потока. Вычисление компонентов вязкой части тензора напряжений с учетом гипотезы Буссинеска:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_\mu &= \mu_l \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \mathbf{I} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right), \\ \boldsymbol{\tau}_t &= \mu_t \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \mathbf{I} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right) - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I}, \end{aligned} \quad (2)$$

где μ_l - молекулярная вязкость, μ_t - турбулентная вязкость, вычисляемая согласно заданной RANS модели турбулентности, $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ - тензор скоростей деформации, k - кинетическая энергия турбулентности, \mathbf{I} - единичный тензор второго ранга, $\nabla \mathbf{u}$ - в трехмерной декартовой системе координат представляет собой тензор второго ранга, состоящий из градиентов трех компонент скоростей:

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y}, \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x}, \frac{\partial w}{\partial y}, \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

и верхний индекс T - транспонированный тензор.

Молекулярные и турбулентные компоненты вектора плотности теплового потока вычисляются согласно следующим равенствам:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_\mu &= -\kappa \nabla T, \\ \mathbf{q}_t &= \frac{C_p \mu_t}{Pr_t}, \end{aligned} \quad (4)$$

где κ - коэффициент теплопроводности, Pr_t - турбулентный аналог числа Прандтля.

Для вычисления турбулентной вязкости μ_t используются RANS модели турбулентности, обеспечивающие приемлемые показатели ресурсоемкости, сроки получения результатов, а также экспериментальную и эмпирическую достоверность результатов [Козелков и др., 2014с]. Среди многообразия RANS моделей хорошо зарекомендовала себя на практике модель SST Ментера [(Menter, 1992; Menter et al., 2003)].

В модели SST Ментера $k-\varepsilon$ модель сформулирована в терминах $k-\omega$ и ориентирована на разрешение мелкомасштабной турбулентности во внешней области потока, а модель $k-\omega$ предназначена для описания крупномасштабной турбулентности и используется в пограничном слое. Объединение этих моделей воедино осуществляется с помощью специальной функции, которая обеспечивает близость суммарной модели к модели $k-\varepsilon$ вдали от твердых стенок и к модели $k-\omega$ в пристеночной области потока. В общем виде уравнения для модели турбулентности SST записываются в виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} k) = \nabla \cdot (\Gamma_k \nabla k) + G_k - Y_k, \\ \frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \omega) = \nabla \cdot (\Gamma_\omega \nabla \omega) + G_\omega - Y_\omega, \end{cases} \quad (5)$$

где k - кинетическая энергия турбулентности, ω - скорость диссипации, $\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}$ и $\Gamma_\omega = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega}$ - эффективные коэффициенты диффузии, G_k и G_ω - генерационные слагаемые, Y_k и Y_ω - диссипативные слагаемые для уравнений переноса

величин k и ω соответственно. Подробное описание модели турбулентности и способы вычисления всех слагаемых, входящих в исходные уравнения, приведено в [Menter, 1992].

В исследованиях диссертации данная модель является единственной и используется совместно с универсальными пристеночными функциями [Grotjans & Menter, 1998], которые позволяют получать приемлемое по точности решение при произвольном сеточном разрешении внутри пограничного слоя. Метод использования универсальных пристеночных функций, обеспечивающий устойчивый счет внутри пограничного слоя и приемлемые результаты моделирования на произвольных неструктурированных сетках с различным уровнем сгущения вблизи твердой поверхности, разработан при активном участии диссертанта и представлен в [Козелков и др., 2013а; Козелков и др., 2014b].

Таким образом, система уравнений (1) с учетом системы (5) описывает турбулентные течения вязкой, теплопроводной сжимаемой и несжимаемой среды. При описании численных алгоритмов в диссертации данная система является основной и применяется при решении всех численных экспериментов. Далее перейдем к описанию методов дискретизации и решения данной системы уравнений.

Методы решения уравнений гидродинамики

Для решения системы дифференциальных уравнений (1) в основном используют три подхода: методы конечных разностей, элементов и объемов [Jasak, 1996, Versteeg & Malalasekera, 1995; Ferziger & Peric, 2002]. Кратко представим плюсы и минусы данных подходов.

В методе конечных разностей слагаемые, входящие в уравнения, достаточно просто и наглядно заменяются их дискретными аналогами, что дает возможность построить схемы высокого порядка точности. Однако эффективность метода проявляется только при использовании на структурированных сетках.

Основная идея метода конечных элементов заключается в разбиении области на конечное количество элементов (подобластей), в каждом из которых определяется своя базисная функция (функция формы). Однако, количество элементов, для которых существуют базисные функции, резко ограничено, и в случае использования сеточной модели, состоящей из ячеек с произвольным количеством граней, использование метода не представляется возможным. В случае же определения базисных функций для всех элементов возникает сложность при описании тонких пограничных слоев, что делает данный метод не универсальным и применимым лишь для определенного вида конечно-элементных неструктурированных сеток.

Метод конечных (контрольных) объемов – это численный метод интегрирования систем дифференциальных уравнений, который обладает хорошими консервативными свойствами и допускает дискретизацию сложных вычислительных областей, состоящих из ячеек произвольной формы и размера. Ячейки сетки (контрольные объемы) должны полностью заполнять расчетную область без зазоров и наложений. Каких-либо ограничений у данного метода нет и, поэтому, если при выборе метода дискретизации уравнений (1) основываться на возможности счета на произвольных неструктурированных сетках, то оптимальным методом дискретизации уравнений является метод конечных объемов.

Процесс дискретизации методом конечных объемов состоит из двух основных этапов. На первом этапе осуществляется пространственная дискретизация расчетной области, а на втором - составление (решение) дискретного аналога дифференциальных уравнений (1). Этап дискретизации разбивает вычислительную область на конечное число контрольных объемов, полностью ее заполняющих. В итоге дискретная сеточная модель должна содержать описание координат узлов, граней, ячеек и способы их формирования. Дополнительной информацией служит количество и тип граничных условий, которые формируются после построения сеточной модели и являются неотъемлемой частью процесса дискретизации. Иллюстрация примеров контрольных объемов представлена на рисунке 1.

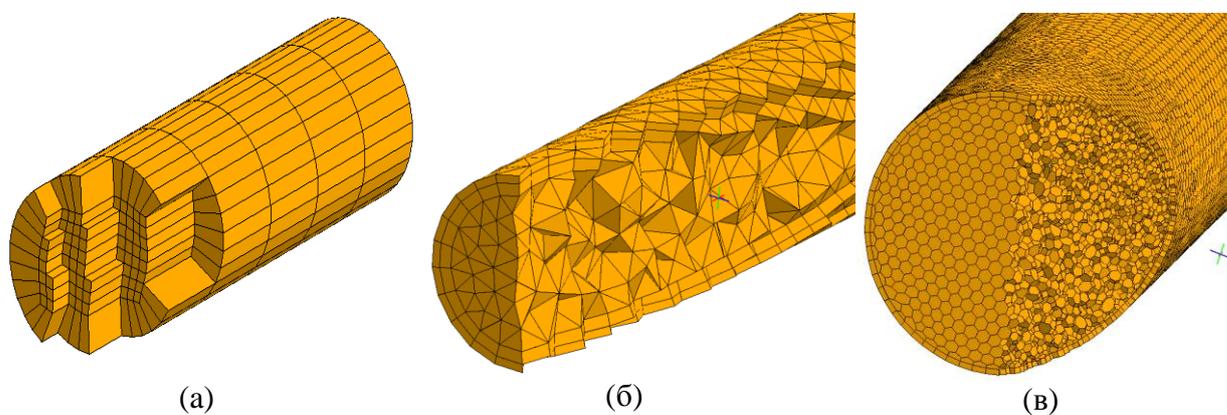


Рис. 1 - Иллюстрация заполнения расчетной области контрольными объемами, (а) – структурированная сеточная модель, (б) и (в) – неструктурированные сеточные модели с призматическим пограничным слоем, состоящие из тетраэдров (б) и полиэдров (в)

При реализации второго этапа метода контрольных объемов важным фактором является формат представления сеточной модели в численном алгоритме. Вариантов представления и сохранения сеточной модели, достаточно много [Smith, 2006]. Например, ячеечное представление не является оптимальным с точки зрения реализации вычислительных алгоритмов, так как основные соотношения в методе контрольных объемов записаны относительно потоков через грань. По этой причине для хранения

сеточной модели наиболее удобно и эффективно использовать граниво-ячеечный формат [Козелков и др., 2013b; Голубев и др. 2013; Козелков и др., 2016a], основные особенности которого приведены ниже.

Помимо основных массивов представления сеточной модели граниво-ячеечный формат дополняется двумя массивами хранения индексов ячеек для каждой грани, то есть внутренняя грань всегда разделяет две ячейки P и N (Рис. 2). При этом должно соблюдаться правило: локальный номер ячейки P строго меньше номера ячейки N и направление вектора единичной нормали \mathbf{n}_f грани f должно быть строго от ячейки P к ячейке N . Для граничной грани внешняя нормаль всегда смотрит «наружу». Соблюдение данных правил является обязательным.

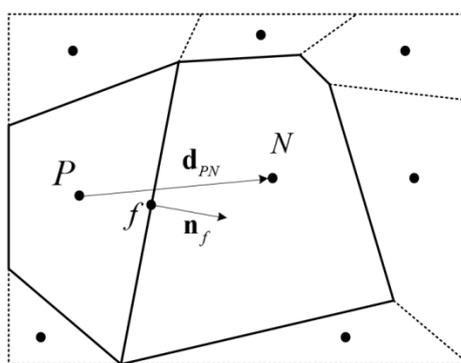


Рис. 2 - Иллюстрация двух соседних контрольных объемов P и N . f - грань, разделяющая ячейки P и N , \mathbf{d}_{PN} - вектор, соединяющий центры контрольных объемов, \mathbf{n}_f - единичная нормаль к грани f

Большим плюсом такого представления является то, что при построении численной схемы вычисление потоков через внутреннюю грань осуществляется всегда с использованием двух ячеек и за один цикл по грани формируются сразу две строки матрицы P и N , что, несомненно, повышает эффективность. В случае же ячеечного представления сеточных данных за один цикл можно сформировать только одну строку матрицы. Другим преимуществом является прямая совместимость с форматом LDU (Lower-Diagonal-Upper) хранения матрицы [Козелков и др., 2013b; Голубев и др., 2013], что позволяет эффективно организовать вычислительные процедуры, в особенности при организации межпроцессных обменов. Более подробное описание формата LDU будет приведено ниже.

Итак, используя граниво-ячеечное представление сеточной модели, рассмотрим второй этап дискретизации методом контрольных объемов на примере дифференциального уравнения переноса скалярной величины φ :

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t}}_{\text{нестационарное слагаемое}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varphi)}_{\text{конвективное слагаемое}} - \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma \nabla \varphi)}_{\text{диффузионное слагаемое}} = \underbrace{Q}_{\text{источник}}, \quad (6)$$

где Γ - коэффициент диффузии, Q - источниковое слагаемое.

Процесс получения дискретного аналога подразумевает интегрирование исходного уравнения по пространству и времени. Начнем с интегрирования по пространству. Для этого выделим из произвольной неструктурированной сетки (Рис. 1) произвольный контрольный объем P , изображенный на рисунке 2 (обратите внимание, что описание процесса аппроксимации происходит на двумерном шаблоне ячейки P , но все ниже следующие уравнения справедливы для трехмерного случая). Проинтегрируем выражение по выделенному объему и перейдем к интегралам по поверхности для конвективного и диффузионного слагаемых. В итоге интегральная форма уравнения переноса скалярной величины (6) имеет вид:

$$\int_{V_P} \frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} dV_P + \int_S \rho \varphi (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS - \int_S \Gamma (\nabla \varphi \cdot \mathbf{n}) dS = \int_{V_P} Q dV_P, \quad (7)$$

где V_P - объем ячейки P . Применяв теорему о среднем (среднее значение по объему - значение в центре ячейки, среднее значение на грани - значение в центре грани) получим пространственный полу-дискретный аналог дифференциального уравнения (6) на конечно-объемной сетке:

$$\int_{V_P} \frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} dV_P + \sum_{f=face(P)} \rho_f \varphi_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f) - \sum_{f=face(P)} \Gamma_f (\nabla \varphi_f \cdot \mathbf{S}_f) = \int_{V_P} Q dV_P, \quad (8)$$

где $\mathbf{S}_f = S_f \mathbf{n}_f$ - векторная площадь грани, S_f - площадь грани f . Здесь суммирование осуществляется по всем граням $f = face(P)$, формирующим контрольный объем P , и по внутренним и по внешним. В случае наличия внешних граней, исходя из определения гранево-ячеечного формата, описанного выше, для конвективного и диффузионного слагаемого получим следующую сумму:

$$\begin{aligned} \sum_{f=face(P)} \rho_f \varphi_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f) &= \sum_{f=inface(P)} \rho_f \varphi_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f) - \sum_{f=outface(P)} \rho_f \varphi_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f), \\ \sum_{f=face(P)} \Gamma_f (\nabla \varphi_f \cdot \mathbf{S}_f) &= \sum_{f=inface(P)} \Gamma_f (\nabla \varphi_f \cdot \mathbf{S}_f) - \sum_{f=outface(P)} \Gamma_f (\nabla \varphi_f \cdot \mathbf{S}_f), \end{aligned} \quad (9)$$

где $f = inface(P)$ - суммирование по всем внутренним граням, а $f = outface(P)$ - по всем внешним граням. Все значения неизвестных величин: ρ_f , φ_f , \mathbf{u}_f и Γ_f с нижним

индексом f , относятся к центру грани f и могут вычисляться по любой из известных схем [Ferziger & Peric, 2002; Козелков и др., 2014а; Курулин и Козелков, 2015].

Дискретизация конвективного слагаемого может быть осуществлена с использованием различных схем. В данной работе при проведении численных экспериментов в основном используются три схемы: UD (противопоточная схема первого порядка), LUD (противопоточная градиентная схема с линейной интерполяцией второго порядка) и CD (центрально-разностная схема второго порядка).

Схема UD - схема первого порядка, устойчивая на неструктурированных сетках, но обладает большой численной диффузией [Jasak, 1996]:

$$\varphi_f^{ud} = \begin{cases} \varphi_P, & (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f) \geq 0 \\ \varphi_N, & (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f) < 0 \end{cases} \quad (10)$$

Схема LUD подобная схеме UD, но использует реконструкцию величины на грань с линейной интерполяцией [Jasak, 1996]:

$$\varphi_f^{lud} = \begin{cases} \varphi_P + \nabla \varphi_P \cdot \mathbf{d}_{Pf}, & (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f) \geq 0 \\ \varphi_N + \nabla \varphi_N \cdot \mathbf{d}_{Nf}, & (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f) < 0 \end{cases} \quad (11)$$

Схема CD - наименее диссипативная схема, однако она неустойчива [Jasak, 1996; Козелков и др., 2014а; Курули и Козелков, 2015], и при наличии больших градиентов использование схемы приводит к осцилляциям в поле решения [Ferziger & Peric, 2002; Jasak, 1996]:

$$\varphi_f^{cd} = \lambda \varphi_P + (1 - \lambda) \varphi_N, \quad (12)$$

где $\lambda = \frac{|\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{d}_{Nf}|}{|\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{d}_{Nf}| + |\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{d}_{Pf}|}$ - геометрический интерполяционный фактор,

использующий в качестве весов кратчайшее расстояние (перпендикуляр к грани) между центром контрольного объема и гранью.

Диффузионное слагаемое содержит градиент $\nabla \varphi_f$, при вычислении которого необходимо учитывать сонаправленность векторов \mathbf{d}_{PN} и \mathbf{n}_f , определяющую ортогональность сеточной модели. Если вектора сонаправлены, то сетка ортогональная и в этом случае:

$$\nabla \varphi_f = \frac{(\varphi_N - \varphi_P)}{\mathbf{d}_{PN}}. \quad (13)$$

Для неортогональной сеточной модели, когда направление нормали не совпадает с направлением вектора \mathbf{d}_{PN} , значение градиента на грани должно вычисляться с учетом поправки на неортогональность. Например, так:

$$\nabla \varphi_f = (\varphi_N - \varphi_P) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}} + \overline{\nabla \varphi_f} - (\overline{\nabla \varphi_f} \cdot \mathbf{d}_{PN}) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}}, \quad (14)$$

где $\overline{\nabla \varphi_f} = \lambda \nabla \varphi_P + (1 - \lambda) \nabla \varphi_N$ - осредненная величина градиента на грани. Данный способ вычисления градиента по направлению называется «релаксация сверху» [Jasak, 1996] и является основным методом, используемым в диссертации при адаптации вычислительных алгоритмов к произвольным неструктурированным сеткам при дискретизации диффузионных слагаемых. Существуют и другие методы вычисления градиента на грани с учетом неортогональности, описание которых представлено в [Jasak, 1996].

В свою очередь градиент в центре контрольного объема $\nabla \varphi_P$ можно вычислить по известному интерполяционному алгоритму Грина-Гаусса [Ferziger & Peric, 2002]:

$$\nabla \varphi_P = \frac{1}{V_P} \sum_{f=\text{face}(P)} \varphi_f \mathbf{S}_f, \quad (15)$$

где $\varphi_f = \lambda \varphi_P + (1 - \lambda) \varphi_N$ - значение величины φ на грани по центрально-разностной схеме (CD).

Дискретизация объемного источника выполняется следующим образом [Ferziger & Peric, 2002]:

$$\int_{V_P} Q dV_P = Q V_P. \quad (16)$$

В случае моделирования нестационарных течений необходимо выполнить интегрирование исходной системы по времени. Учитывая, что объем ячейки не изменяется по времени, получим [Jasak, 1996]:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} \right)_P V_P + \sum_{f=\text{face}(P)} \rho_f \varphi_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f) - \sum_{f=\text{face}(P)} \Gamma_f (\nabla \varphi_f \cdot \mathbf{S}_f) \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} Q V_P dt, \quad (17)$$

где Δt - шаг по времени. Данное уравнение является полу-дискретным аналогом уравнения переноса (6).

Учитывая, что производная первого порядка по времени:

$$\left(\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} \right)_P = \frac{\rho_P^n \varphi_P^n - \rho_P^o \varphi_P^o}{\Delta t}, \quad (18)$$

и применяя неявную схему Эйлера, получим окончательный вид полного дискретного аналога дифференциального уравнения переноса скалярной величины (6):

$$\frac{\rho_P^n \varphi_P^n - \rho_P^o \varphi_P^o}{\Delta t} V_P + \sum_{f=\text{face}(P)} \rho_f \varphi_f^n (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f) - \sum_{f=\text{face}(P)} \Gamma_f (\nabla \varphi_f^n \cdot \mathbf{S}_f) = Q V_P, \quad (19)$$

которое удобнее представить в виде алгебраической формы:

$$a_p \varphi_P + \sum_{F=nb(P)} a_F \varphi_F = b_p^o \quad (20)$$

или

$$\varphi_P + \sum_{N=nb(P)} A_N \varphi_N = B_P^o, \text{ где } A_N = \frac{a_N}{a_p} \text{ и } B_P^o = \frac{b_p^o}{a_p}. \quad (21)$$

Здесь a_p - диагональный коэффициент, a_N - недиагональный коэффициент и b_p^o - правая часть. Суммирование $N = nb(P)$ осуществляется по всем соседним ячейкам N контрольного объема P .

Алгебраическое уравнение (21) с учетом граничных условий составляется для каждого контрольного объема, находящегося в расчетной области (Рис. 1), и в результате формируется система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), которая решается любыми итерационными методами (Гаусса-Зейделя, сопряженных градиентов, Якоби и так далее), в том числе алгебраическим многосеточным методом [Saad, 2003].

В результате описанный алгоритм дискретизации исходных уравнений методом конечных объемов применим для всех дифференциальных уравнений, в том числе и для системы уравнений Навье-Стокса, на основе которой в следующем параграфе приведем вывод и основные итерационные шаги алгоритма SIMPLE.

Описание алгоритма SIMPLE

Исторически алгоритм SIMPLE разрабатывался исключительно для моделирования течений несжимаемых сред, поскольку именно при решении подобного класса течений возникали основные трудности. Связано это с тем, что решение системы уравнений (1) возможно только при моделировании течений, для которых определены уравнения состояния, связывающие между собой основные термодинамические свойства: давление, плотность и температуру. Например, при моделировании идеального газа уравнение состояния [Лойцянский, 1973]:

$$p = \frac{\rho R}{M} T, \quad (22)$$

где R - универсальная газовая постоянная, M - молекулярный вес вещества. В этом случае уравнение неразрывности можно решать как относительно плотности, так и относительно давления, обеспечивая при этом связь уравнений неразрывности и движения.

Однако, при попытке моделирования «практически» несжимаемых сред, (например, вода) для которых также определены уравнения состояния, возникают непреодолимые трудности, суть которых заключается в стремящейся к бесконечности скорости звука при незначительном изменении плотности моделируемой среды. Такая ситуация приводит к «урезанию» шага по времени и в общем случае к невозможности получения решения в приемлемые сроки [Weiss & Smith, 1995].

При моделировании несжимаемых течений уравнение состояния имеет вид:

$$\rho = \rho_{ref}, \quad (23)$$

где ρ_{ref} - плотность среды при нормальных условиях.

Здесь возникает проблема, связанная с невозможностью решения уравнения неразрывности, которое в этом случае не содержит каких либо изменяемых величин (давление, плотность или температуру), то есть не имеет прямой связи с уравнением состояния [Ferziger & Peric, 2002]. В этом случае уравнение неразрывности имеет вид:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (24)$$

При этом уравнение движения остается в прежнем виде.

Получается, что общее решение данной системы «напрямую» невозможно, и для решения данной неоднозначности существует достаточно много подходов [Issa, 1985; Darwish & Moukalled, 2000; Peric, 2002;]. Наиболее универсальным является алгоритм SIMPLE [Patankar, 1980; Ferziger & Peric, 2002], в котором для уравнения неразрывности вводят известную поправку Рхи-Чоу [Rhie & Chow, 1983], содержащую поле давления. Механизм получения данной поправки на основании уравнений неразрывности и движения приведен во второй главе диссертации.

Стоит отметить, что в случае решения сжимаемых течений с использованием алгоритма SIMPLE, поправка Рхи-Чоу остается, хотя и не является обязательной, так как в этом случае можно использовать алгоритмы, основанные на решении полной системы уравнений Навье-Стокса [Weiss & Smith, 1995; Козелков и др., 2014a].

Ниже, опираясь на работы [Ferziger & Peric, 2002; Darwish et al., 2009], приведем описание вывода алгоритма SIMPLE для моделирования вязких несжимаемых течений.

Особое внимание уделим формированию коэффициентов матрицы в случае произвольных неструктурированных сеток.

Применяя описанный выше метод контрольных объемов к уравнению сохранения количества движения (второе уравнения системы (1)), получим алгебраическую форму:

$$\mathbf{u}_P^n + \sum_{N=nb(P)} \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N^n = \mathbf{B}_P^n - \mathbf{D}_P \nabla p_P^n, \text{ где } \mathbf{D}_P = \begin{bmatrix} V_P/a_P^u & 0 & 0 \\ 0 & V_P/a_P^v & 0 \\ 0 & 0 & V_P/a_P^w \end{bmatrix}. \quad (25)$$

Уравнение неразрывности в этом случае запишем в виде полу-дискретного аналога:

$$\sum_{f=face(P)} m_f = \sum_{f=face(P)} \rho_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f) = 0. \quad (26)$$

Решение «напрямую» уравнения (25) невозможно, так как давление не выражается явным образом. Поэтому в алгоритме SIMPLE «расщепляют» исходные величины, согласовывая их в дальнейшем на каждом итерационном шаге:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^n &= \mathbf{u}^* + \mathbf{u}', \\ p^n &= p^{n-1} + p', \end{aligned} \quad (27)$$

где \mathbf{u}' и p' - поля приращений скорости и давления соответственно, индекс n соответствует решению, получаемому на новой итерации, $n-1$ - решению, получаемому на предыдущей итерации, \mathbf{u}^* - предварительное поле скорости.

С учетом (27) уравнение неразрывности перепишем в виде:

$$\sum_{f=face(P)} (m_f^* + m_f') = \sum_{f=face(P)} \rho_f (\mathbf{u}_f^* \cdot \mathbf{S}_f) + \sum_{f=face(P)} \rho_f (\mathbf{u}_f' \cdot \mathbf{S}_f) = 0. \quad (28)$$

Соответственно, уравнение (25) с учетом замены \mathbf{u}_P^n на \mathbf{u}_P^* и ∇p_P^n на ∇p_P^{n-1} :

$$\mathbf{u}_P^* + \sum_{N=nb(P)} \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N^* = \mathbf{B}_P^n - \mathbf{D}_P \nabla p_P^{n-1}. \quad (29)$$

Теперь решение данного уравнения возможно с любым распределением поля давления, но полученное предварительное поле скорости \mathbf{u}^* не будет удовлетворять уравнению неразрывности (28), так как неизвестна величина поправки скорости \mathbf{u}' , которую можно получить путем вычитания уравнения (29) из (25):

$$\mathbf{u}_P' + \sum_{N=nb(P)} \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N' = -\mathbf{D}_P \nabla p_P'. \quad (30)$$

Учитывая, что алгебраическое уравнение для скорости на грани составляется аналогичным образом, получим:

$$\mathbf{u}'_f + \sum_{f=nb(P)} \mathbf{A}_f \mathbf{u}'_f = -\mathbf{D}_f \nabla p'_f, \quad (31)$$

но с другой стороны величину поправки скорости на грани можно вычислить с использованием коррекции Рхи-Чоу:

$$\mathbf{u}'_f = \overline{\mathbf{u}'_f} - \mathbf{D}_f \left(\nabla p'_f - \overline{\nabla p'_f} \right). \quad (32)$$

Здесь черта сверху означает осреднение величины на грани с использованием одной из известных схем, например, $\overline{\mathbf{u}'_f} = \lambda \mathbf{u}'_p + (1-\lambda) \mathbf{u}'_N$. В итоге, сопоставляя уравнения (31) и (32), получим уравнение для поправки скорости на грани:

$$\mathbf{u}'_f = \overline{\mathbf{D}_f} \nabla p'_f - \overline{\sum_{f=face(P)} \mathbf{A}_f \mathbf{u}'_f}, \quad (33)$$

и, следовательно, дискретный аналог уравнения для поправки массового потока:

$$\sum_{f=nb(P)} m'_f = - \sum_{f=nb(P)} \rho_f \left(\left(\overline{\mathbf{D}_f} \cdot \nabla p'_f \right) \cdot \mathbf{S}_f \right) + \overline{\sum_{f=nb(P)} \rho_f \left(\left(\mathbf{A}_f \cdot \mathbf{u}'_f \right) \cdot \mathbf{S}_f \right)} \quad (34)$$

Последнее слагаемое в системе, согласно определению алгоритма SIMPLE не учитывается, в виду невозможности его вычисления на новом итерационном шаге [Patankar, 1980]. В некоторых подобных алгоритмах (SIMPLEC, SIMPLEM и другие) используют приближения с предыдущего итерационного шага [Darwish & Moukalled, 2000].

Поступая аналогичным образом, величина скорости \mathbf{u}^* на грани, с коррекцией Рхи-Чоу, запишется в виде:

$$\mathbf{u}^*_f = \overline{\mathbf{u}^*_f} - \overline{\mathbf{D}_f} \left(\nabla p^n_f - \overline{\nabla p^n_f} \right), \quad (35)$$

и подставляя уравнения (35) в (28), получим окончательный дискретный аналог уравнения для поправки давления:

$$\begin{aligned} \sum_{f=face(P)} m_f &= \sum_{f=face(P)} \rho_f \overline{\mathbf{u}^*_f} \cdot \mathbf{S}_f - \sum_{f=face(P)} \rho_f \overline{\mathbf{D}_f} \left(\left(\nabla p^{n-1}_f - \overline{\nabla p^{n-1}_f} \right) \cdot \mathbf{S}_f \right) \\ &- \sum_{f=face(P)} \rho_f \overline{\mathbf{D}_f} \left(\nabla p'_f \cdot \mathbf{S}_f \right) = 0. \end{aligned} \quad (36)$$

На последнем шаге, после нахождения поправки давления, ищется поправка скорости в каждой ячейке:

$$\mathbf{u}'_p = \mathbf{D}_p \nabla p'_p \quad (37)$$

В результате согласно методу контрольных объемов, система алгебраических уравнений в окончательной форме записывается в виде:

$$\begin{cases} a_p^u u_p^* + \sum_{N=nb(P)} a_N^u u_N^* = b_p^u, \\ a_p^v v_p^* + \sum_{N=nb(P)} a_N^v v_N^* = b_p^v, \\ a_p^w w_p^* + \sum_{N=nb(P)} a_N^w w_N^* = b_p^w, \\ a_p^{p'} p_p' + \sum_{N=nb(P)} a_N^{p'} p_N' = b_p^{p'}. \end{cases} \quad (38)$$

Для повышения устойчивости алгоритма SIMPLE необходимо использовать механизмы релаксации. В этом случае после решения системы линейных уравнений применяют процедуру верхней релаксации:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_p^n &= \alpha_u \mathbf{u}_p^n + (1 - \alpha_u) \mathbf{u}_p^{n-1}, \\ p_p^n &= p_p^{n-1} + \alpha_p p_p', \end{aligned} \quad (39)$$

где α_u и α_p - коэффициенты релаксации для скорости и давления соответственно, находящиеся в диапазоне $0 < \alpha_u \leq 1$ и $0 < \alpha_p \leq 1$. Экспериментальным путем установлено, что для описанного алгоритма SIMPLE оптимальными с точки зрения скорости сходимости и устойчивости расчета являются значения коэффициентов $\alpha_u = 0.7$ и $\alpha_p = 0.3$, что совпадает с результатами других авторов [(Флетчер, 1991; Ferziger & Peric, 2002)]. В большинстве случаев для уравнения движения желательнее использовать матричную форму релаксации или процедуру нижней релаксации, что повышает обусловленность матрицы. Пример использования нижней релаксации для алгоритма SIMPLE приведен во второй главе диссертации.

Схожее описание алгоритма SIMPLE приведено в большинстве работ [Флетчер, 1991; Patankar, 1980; Darwish & Moukalled, 2000; Ferziger & Peric, 2002]. Помимо исходного алгоритма SIMPLE существует и множество других вариаций подобных вычислительных процедур, например, SIMPLER, SIMPLEC, SIMPLEM, сравнительный анализ которых приведен в работе [Darwish & Moukalled, 2000]. Очень важно отметить, что все попытки модификации алгоритма SIMPLE направлены в основном на повышение скорости сходимости алгоритма. При этом устойчивость алгоритма, как правило, ухудшается, хотя и позволяет получать решение за более короткое время. Забегая вперед, отметим, что наиболее успешным в этом направлении стал совмещенный алгоритм SIMPLE (COUPLED), преимущество которого по скорости сходимости может достигать 4-5 раз, при этом устойчивость расчета остается на прежнем уровне [Darwish et al., 2009]. Описанию алгоритма COUPLED посвящена вторая глава диссертации.

В случае использования произвольных неструктурированных сеток необходимо особое внимание уделять процессу формирования матричных коэффициентов, так как данный фактор является ключевым при счете на неортогональных сетках. Исходные дифференциальные уравнения (1) содержат градиенты компонент скорости и давления, вычисляемые с учетом неортогональной коррекции:

$$\begin{aligned}
\nabla u_f &= (u_N - u_P) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}} + \overline{\nabla u_f} - (\overline{\nabla u_f} \cdot \mathbf{d}_{PN}) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}}, \\
\nabla v_f &= (v_N - v_P) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}} + \overline{\nabla v_f} - (\overline{\nabla v_f} \cdot \mathbf{d}_{PN}) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}}, \\
\nabla w_f &= (w_N - w_P) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}} + \overline{\nabla w_f} - (\overline{\nabla w_f} \cdot \mathbf{d}_{PN}) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}}, \\
\nabla p_f &= (p_N - p_P) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}} + \overline{\nabla p_f} - (\overline{\nabla p_f} \cdot \mathbf{d}_{PN}) \frac{\mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}},
\end{aligned} \tag{40}$$

Далее остановимся на выводе коэффициентов алгебраических уравнений (38) для алгоритма SIMPLE. Для этого суммируем информацию из работ по описанию алгоритма SIMPLE и работ по использованию методов неортогональной коррекции [Jasak, 1996; Darwish et al., 2009].

Для анализа возьмем случай ламинарного стационарного течения с использованием схем первого порядка точности при дискретизации конвективного слагаемого [Ferziger & Peric, 2002]. Тогда для векторного уравнения количества движения конвективные и диффузионные коэффициенты с учетом неортогональной коррекции запишутся в следующем виде:

$$\begin{aligned}
a_N^u &+ = -\mu_f S_f^* + \min(m_f, 0), \\
a_N^v &+ = -\mu_f S_f^* + \min(m_f, 0), \\
a_N^w &+ = -\mu_f S_f^* + \min(m_f, 0), \\
a_P^u &= - \sum_{N=nb(P)} a_N^u, \quad a_P^v = - \sum_{N=nb(P)} a_N^v, \quad a_P^w = - \sum_{N=nb(P)} a_N^w, \\
b_P^u &+ = \sum_{f=iface(P)} \left[\mu_{eff} \left(\overline{\nabla u_f} \cdot \mathbf{S}_f + \overline{\nabla u_f^T} \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\overline{\nabla u_f} \cdot \mathbf{d}_{PN}) \right) \right], \\
b_P^v &+ = \sum_{f=iface(P)} \left[\mu_{eff} \left(\overline{\nabla v_f} \cdot \mathbf{S}_f + \overline{\nabla v_f^T} \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\overline{\nabla v_f} \cdot \mathbf{d}_{PN}) \right) \right], \\
b_P^w &+ = \sum_{f=iface(P)} \left[\mu_{eff} \left(\overline{\nabla w_f} \cdot \mathbf{S}_f + \overline{\nabla w_f^T} \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\overline{\nabla w_f} \cdot \mathbf{d}_{PN}) \right) \right],
\end{aligned} \tag{41}$$

где $S_f^* = \frac{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_f}{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}}$ - референсная площадь, $\mu_{eff} = \mu_t + \mu_i$ - сумма молекулярной и

турбулентной вязкости на грани. Напомним, что уравнения для трех компонент скорости u_p^* , v_p^* , w_p^* решаются последовательно. После их решения составляется уравнение для поправки давления (36), для которого коэффициенты матрицы СЛАУ вычисляются так:

$$\begin{aligned} a_N^{p'} &= -\rho_f S_f^* \overline{D_f}, \\ a_p^{p'} &= -\sum_{N=nb(P)} a_N^{p'}, \\ b_p^{p'} &= \sum_{f=nb(P)} m_f^*, \\ b_p^{p'} &= \sum_{f=iface(P)} \rho_f S_f^* \overline{D_f} (p_P - p_N) + \rho_f S_f^* \overline{D_f} (\overline{\nabla p_P} \cdot \mathbf{d}_{Pf} - \overline{\nabla p_N} \cdot \mathbf{d}_{Nf}), \end{aligned} \quad (42)$$

где $\overline{D_f} = \frac{V_f}{a_f}$, $V_f = \lambda V_P + (1-\lambda)V_N$ - референсный объем, $a_f = \frac{\lambda}{a_P} + \frac{(1-\lambda)}{a_N}$ -

усредненная обратная величина диагонали уравнения движения, $a_p = \frac{1}{3}(a_p^{u^*} + a_p^{v^*} + a_p^{w^*})$ и

$a_N = \frac{1}{3}(a_N^{u^*} + a_N^{v^*} + a_N^{w^*})$ - среднее арифметическое трех диагоналей уравнения движения.

Формирование матричных коэффициентов для внутренних граней на этом завершается.

Формирование граничных условий

Далее опишем формирование коэффициентов для учета граничных условий. Задание граничных условий необходимо для замыкания и решения системы уравнений (1). Ввиду того, что два уравнения системы (1) жестко связаны между собой через поправку Рхи-Чоу, на одной границе достаточно определять граничные условия лишь для одного уравнения, но в целом граничные условия должны быть определены для всех уравнений. Например, если в задаче две границы, то на одной из них необходимо замкнуть уравнение движения, а на другой уравнение неразрывности (других вариантов нет).

Изначально численные граничные условия представлены тремя вариантами: постоянная величина, градиент величины и смешанное граничное условие (граничные условия первого, второго и третьего рода). Для граничного условия первого рода в уравнении движения необходимо определять величины трех компонент скоростей, а для уравнения неразрывности - давление. Однако, данный подход не позволяет задавать реальную физическую границу. Например, для границы «полное давление» задают полное

давление и направление потока, а не величины скорости и статического давления. По этой причине вводят понятие физических граничных условий, для которых величины скорости и давления рассчитываются на каждом итерационном шаге исходя из задаваемых величин. Такой механизм более универсален и позволяет задавать граничные условия в соответствии с физическими границами.

Рассмотрим процесс формирования коэффициентов матрицы в зависимости от типа физических граничных условий.

Вход: заданные компоненты скорости

Входное граничное условие предполагает задание только трех компонент скорости для уравнения движения. По этой причине дискретизация конвективного слагаемого и массового потока возможна только явным образом. Дискретизация диффузионного слагаемого и градиента давления происходит неявно аналогично внутренним граням:

$$\begin{aligned}
 a_p^u &+ \mu_p S_f^* - \min(m_f, 0), \\
 a_p^v &+ \mu_p S_f^* - \min(m_f, 0), \\
 a_p^w &+ \mu_p S_f^* - \min(m_f, 0), \\
 b_p^u &+ \sum_{f=\text{outface}(P)} \left[\mu_p (\nabla u_p \cdot \mathbf{S}_f + \nabla u_p^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla u_p \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right] - u_{inlet} \min(m_f, 0), \\
 b_p^v &+ \sum_{f=\text{outface}(P)} \left[\mu_p (\nabla v_p \cdot \mathbf{S}_f + \nabla v_p^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla v_p \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right] - v_{inlet} \min(m_f, 0), \\
 b_p^w &+ \sum_{f=\text{outface}(P)} \left[\mu_p (\nabla w_p \cdot \mathbf{S}_f + \nabla w_p^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla w_p \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right] - w_{inlet} \min(m_f, 0),
 \end{aligned} \tag{43}$$

где u_{inlet} , v_{inlet} и w_{inlet} - заданные компоненты скорости.

Выход: заданный расход

Для несжимаемых течений существует возможность задания выходного граничного условия в виде рассчитанного массового расхода, равного суммарной входной массе. Такой подход требует задания базового (референсного) давления, так как в случае его отсутствия получается неопределенная матрица, имеющая бесконечное множество решений (детерминант равен нулю). Задание референсного давления возможно выбором произвольной базовой ячейки с заданным давлением и последующим учетом во всей модели, либо матричным способом с явным определением решения в базовой ячейке. В любом случае вычисление коэффициентов полностью аналогично входному граничному условию с учетом того, что u_{outlet} , v_{outlet} и w_{outlet} - высчитываются программными средствами, исходя из заданных скоростей на входе.

Выход: заданное статическое давление

Другим универсальным вариантом для выходного граничного условия является заданное статическое давление, подходящее как для сжимаемого, так и несжимаемого течения. Такой подход хотя и не гарантирует равенства входного и выходного потоков массы, но позволяет избежать решения неопределенной матрицы. Реализация конвективного слагаемого и градиента давления в уравнении движения происходит явно:

$$\begin{aligned} a_p^u &= a_p^v = a_p^w = \mu_f S_f^* - \min(m_f, 0), \\ b_p^u &= \sum_{f=\text{ouface}(P)} \left[\mu_P (\nabla u_P \cdot \mathbf{S}_f + \nabla u_P^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla u_P \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right], \\ b_p^v &= \sum_{f=\text{ouface}(P)} \left[\mu_P (\nabla v_P \cdot \mathbf{S}_f + \nabla v_P^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla v_P \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right], \\ b_p^w &= \sum_{f=\text{ouface}(P)} \left[\mu_P (\nabla w_P \cdot \mathbf{S}_f + \nabla w_P^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla w_P \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right]. \end{aligned} \quad (44)$$

Как и для внутренних граней, используется поправка Рхи-Чоу, применяемая для уравнения неразрывности:

$$\begin{aligned} a_N^{p'} &= -\rho_f S_f^* \overline{D_f}, \\ b_p^{p'} &= - \sum_{f=\text{ouface}(P)} m_f^*, \\ b_p^{p'} &= \sum_{f=\text{ouface}(P)} \rho_f S_f^* D_P (p_f - p_P) + \rho_f S_f^* D_P (\nabla p_P \cdot \mathbf{d}_{Pf}). \end{aligned} \quad (45)$$

Необходимо отметить, что данное граничное условие может использоваться, как и входное.

Стенка без проскальзывания

Для дискретизации исходных уравнений на стенке без проскальзывания в разделенном алгоритме SIMPLE используется известный механизм отложенной коррекции [Ferziger & Peric, 2002], приводящий к одинаковости диагональных коэффициентов всех трех СЛАУ скоростей. Альтернативным подходом служит вариант, который обеспечивает неявный учет компонент скоростей, за счет чего обеспечивается незначительное повышение скорости сходимости [Darwish et al., 2009].

Сила поверхностного трения вычисляется исходя из равенства:

$$\mathbf{F} = \boldsymbol{\tau}_w \cdot \mathbf{S}_f, \quad (46)$$

где $\boldsymbol{\tau}_w = \mu \frac{\mathbf{u}_t - \mathbf{u}_w}{\mathbf{d}_{pf}}$ - тензор вязких напряжений на стенке, $\mathbf{u}_t = \mathbf{u}_p - (\mathbf{u}_p \cdot \mathbf{n}_w) \mathbf{n}_w$ - тангенциальная компонента скорости в ячейке (скорость параллельная стенке), \mathbf{n}_w - внешняя нормаль к стенке, \mathbf{u}_w - скорость движения стенки.

Таким образом, коэффициенты для пристенной ячейки задаются следующими равенствами:

$$\begin{aligned}
 a_p^u &= \mu_f^* S_f^* \left(1 - (n_w^x)^2 \right), \\
 a_p^v &= \mu_f^* S_f^* \left(1 - (n_w^y)^2 \right), \\
 a_p^w &= \mu_f^* S_f^* \left(1 - (n_w^z)^2 \right), \\
 b_p^u &= u_p \mu_f S_f^* n_w^x n_w^y + u_p \mu_f S_f^* n_w^x n_w^z + u_w \mu_f S_f^*, \\
 b_p^v &= v_p \mu_f S_f^* n_w^y n_w^x + v_p \mu_f S_f^* n_w^y n_w^z + v_w \mu_f S_f^*, \\
 b_p^w &= w_p \mu_f S_f^* n_w^z n_w^x + w_p \mu_f S_f^* n_w^z n_w^y + w_w \mu_f S_f^*.
 \end{aligned} \tag{47}$$

Данное граничное условие не предполагает изменения коэффициентов для уравнения неразрывности.

Стенка с проскальзыванием

Реализация граничного условия «стенка с проскальзыванием» аналогична реализации граничного условия «стенка без проскальзывания» с учетом равенства касательного напряжения нулю ($\boldsymbol{\tau}_w = 0$). Скорость движения стенки не задается и равна тангенциальной компоненте скорости в приграничной ячейке. Давление и любые другие скалярные величины приравниваются значениям в приграничной ячейке.

Итерационная процедура алгоритма SIMPLE

Реализацию, представленных выше шагов, можно записать в виде следующей «полуявной» итерационной процедуры алгоритма SIMPLE [Ferziger & Peric, 2002]:

1. Вычисляются градиенты величин трех компонент скорости и давления, согласно формуле (15).
2. Формируются коэффициенты матрицы уравнения сохранения количества движения (29). Решается СЛАУ для вычисления предварительного поля скорости \mathbf{u}^* , не удовлетворяющего уравнению неразрывности. При использовании релаксации поле для скорости вычисляется согласно (39);

3. Вычисляются предварительные массовые потоки на гранях контрольного объема

$$m_f^* = \rho S_f (\mathbf{u}_f^* \cdot \mathbf{n}_f);$$
4. Формируются коэффициенты матрицы для уравнения неразрывности; вычисляется поле приращения давления на основании уравнения (36). Применяется процедура нижней релаксации для поля давления согласно (39);
5. Вычисляется градиент приращения давления и корректируется массовый поток на гранях $m_f = m_f^* + m_f'$, который удовлетворяет исходному уравнению неразрывности;
6. Корректируется поле скорости в ячейке по уравнению (37);
7. Проверяются условия выхода (например, по величине невязки расчетных полей) и при необходимости происходит возврат к шагу 1.

Данную итерационную процедуру можно представить в виде блок-схемы



Рис. 3 - Блок-схема работы алгоритма SIMPLE

В результате выполнения данных шагов получаются четыре системы линейных алгебраических уравнений (38): три системы для трех компонент скорости и одна для приращения давления. Решение дополнительных уравнений, например, уравнений энергии или турбулентности, соответственно, увеличивает общее число СЛАУ.

Описанный выше подход к реализации алгоритма SIMPLE позволяет моделировать ламинарные стационарные несжимаемые течения на произвольных неструктурированных сетках, что будет продемонстрировано ниже при его верификации. Однако, в случае

использования сеточных моделей, размерность которых может достигать миллиарда ячеек, актуальность данной реализации ставится под вопрос, так как в этом случае необходима параллельная реализация алгоритма SIMPLE с возможностью счета на тысячах процессорных ядер и при этом с высокой эффективностью. Обзор литературы показывает, что механизмы распараллеливания не раскрыты должным образом, и каждый разработчик самостоятельно разрабатывает параллельные варианты вычислительных алгоритмов [Degani and Fox, 1996; Wang et al., 2013]. Хотя и существуют публикации, в которых делаются попытки формализовать параллельную реализацию, но по большей части они поверхностны, не раскрывают всех «секретов» распараллеливания, и не затрагивают особенностей связи форматов хранения сеточной модели и параллельных решателей СЛАУ.

1.3 Параллельная реализация алгоритма SIMPLE

Большинство практических задач вычислительной гидродинамики требует для своего решения построения сеточных моделей, размерность которых приближается к миллиарду контрольных объемов (ячеек) [Молчанов и др., 2013]. Более того, повышенные требования к производительности и памяти обуславливаются сложнейшими нелинейными моделями среды, описываемыми дифференциальными уравнениями в частных производных (уравнения Эйлера или Навье-Стокса), пространственным характером задачи и нестационарностью протекающих процессов. Для решения таких задач в как можно более короткие сроки необходимы ресурсы высоко-параллельных супер-ЭВМ. В данном параграфе остановимся на описании параллельной реализации алгоритма SIMPLE с учетом фиктивных ячеек и возможностью счета на тысячах вычислительных ядер. Подробно рассмотрим вопросы решения параллельных СЛАУ и формата хранения и их связь с гранево-ячеечным представлением сеточной модели. Эффективность предложенного варианта проверена на серии численных экспериментов, приведенных во второй главе.

Для организации счета на высокопараллельных супер-ЭВМ требуется адаптация вычислительных алгоритмов для выполнения их в параллельном, независимом друг от друга режиме. В настоящее время существуют механизмы распараллеливания, основанные на общей и распределенной памяти (MPI). Особенности механизмов и способов распараллеливания на общей памяти с использованием технологии OpenMP приведены в [Антонов, 2009]. Реализация вычислительных алгоритмов на распределенной памяти подразумевает обязательное использование коммуникационных библиотек MPI,

являющихся верхним уровнем распараллеливания. Примером свободно распространяемой MPI-библиотеки, является `mvarpich` [Snir et al., 1996].

Для использования библиотеки MPI на первом этапе расчетную область, дискретизированную на контрольные объемы, разбивают на отдельные локальные фрагменты, каждый из которых сопоставляют со своим MPI-процессом (или в некоторых случаях можно говорить ядром процессора). Как правило, данный этап реализуется с использованием свободно распространяемых библиотек: PT-Scotch, ParMetis, Chaco и другие [Hendrickson & Leland, 1995]. На следующем этапе организуют правила межпроцессных (межфрагментных) обменов, причем сами обмены используют функции библиотеки MPI, позволяющие организовывать как коллективные операции, так и обмены между отдельными процессами (фрагментами). Как правило, именно от эффективной реализации второго этапа зависит эффективность вычислительного алгоритма в целом. Например, модификация форматов хранения сеточной модели и решателя СЛАУ, с возможностью поддержки параллельного формата, может позволить минимизировать число межпроцессорных обменов, а учет «мест» межпроцессных обменов повысит эффективность реализации алгоритма.

Ниже наглядно продемонстрируем этапы построения параллельной версии вычислительного алгоритма SIMPLE с использованием конечно-объемного подхода на основе фиктивных ячеек, а также способы хранения и решения СЛАУ в параллельном режиме.

Распараллеливание конечно-объемного метода с учетом фиктивных ячеек

Использование метода конечных объемов подразумевает этап восстановления всех физических величин, участвующих в расчете (скорость, давление, температура и других), а также массового потока на гранях, разделяющих контрольные объемы. Для вычисления значений на гранях применяются различные схемы дискретизации, точность которых ограничена лишь собственными возможностями и устойчивостью. Например, известная линейная схема второго порядка точности [Ferziger & Peric, 2002] для определения произвольной скалярной величины φ_f на смежной грани контрольных объемов P и N (Рис. 4) записывается в виде:

$$\varphi_f = \lambda \varphi_P + (1 - \lambda) \varphi_N, \quad (48)$$

где λ - геометрический интерполяционный фактор (см. описание выше).

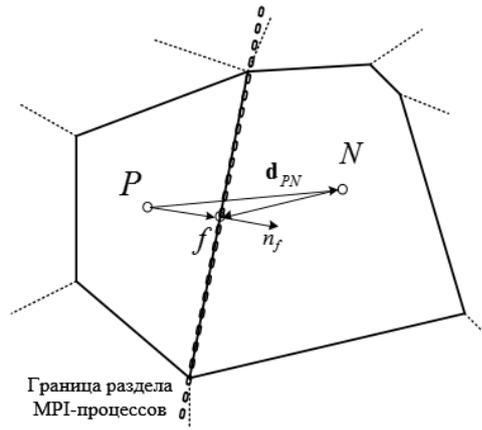


Рис. 4 - Два соседних контрольных объема P и N . f - смежная грань, \mathbf{d}_{PN} - вектор, соединяющий центры контрольных объемов, \mathbf{d}_{Pf} и \mathbf{d}_{Nf} - вектора, соединяющие центры контрольных объемов P и N с центром грани f , \mathbf{n}_f - вектор нормали к смежной грани

Понятно, что применение схемы второго порядка точности требует знания значений φ_P и φ_N в контрольных объемах P и N . Вычислить φ_f в последовательном режиме не составляет труда. В параллельном же случае, при попадании грани на границу раздела MPI-процессов значение φ_f найти невозможно, поскольку образующие грань ячейки P и N физически принадлежат разным MPI-процессам (Рис. 4). Существует два варианта решения данной проблемы. Первый - ввести понятие «обменных» граней f' и их «специальную» обработку в расчетных алгоритмах, что вводит дополнительные сложности при разработке численных схем, так как требуется написание отдельных (по сравнению с последовательным вариантом) циклов обработки. Например, чтобы вычислить значение упомянутого выше φ_f , необходимо вначале сохранить значение смежной ячейки в обменной грани f' , затем произвести межпроцессорный обмен между фиктивными гранями соседних MPI-процессов, и только потом рассчитать величину φ_f на расчетной грани f , причем такая последовательность необходима для каждой из искомых величин. Но наиболее существенным недостатком такого подхода является невозможность расширения сеточного шаблона для использования схем третьего и выше порядка точности, так как информация об оппозитных ячейках попросту недоступна. Подобная схема используется в OpenFOAM [Greenshields, 2016]. Второй вариант учета перехода от одного MPI-процесса к другому заключается в следующем — вводится слой фиктивных ячеек P' и N' таким образом, что они становятся прообразами счетных ячеек соседних MPI-процессов, и организуются MPI-обмены между фиктивными и счетными ячейками (Рис. 5).

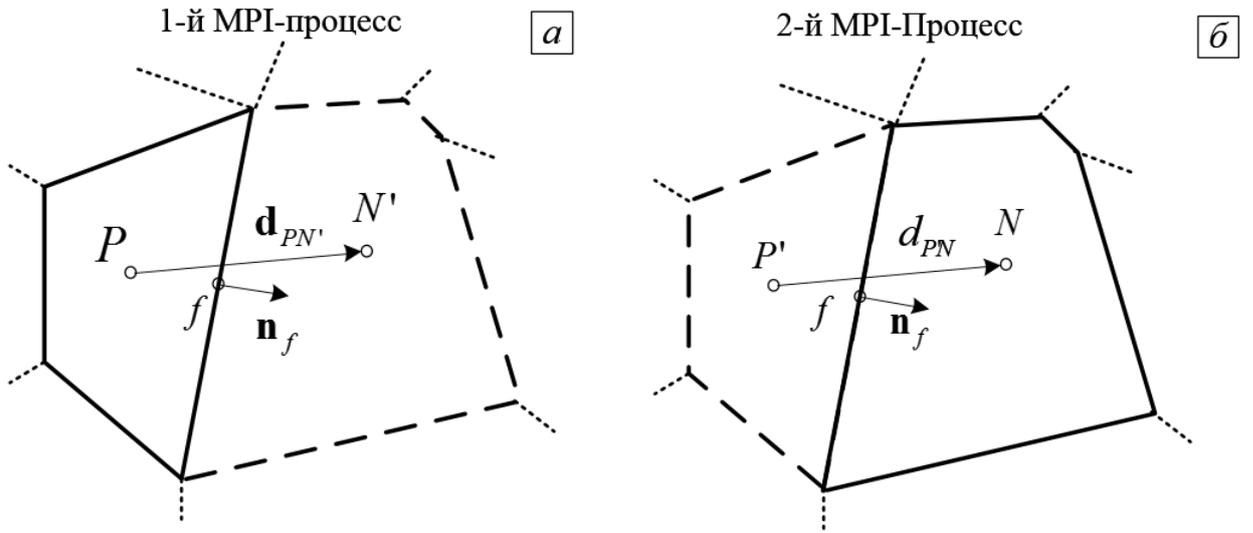


Рис. 5 - Фиктивные ячейки (выделены пунктиром) на соседних процессах: на 1-м (а); на 2-м (б)

В этом случае, согласно равенству (48), выражения для величины φ_f на разных процессах запишутся в виде:

$$\begin{aligned} (\varphi_f)_{1\text{процесс}} &= \lambda\varphi_P + (1-\lambda)\varphi_{N'}, \\ (\varphi_f)_{2\text{процесс}} &= \lambda\varphi_{P'} + (1-\lambda)\varphi_N. \end{aligned} \quad (49)$$

При условии $\mathbf{d}_{PN'} = \mathbf{d}_{P'N}$, согласно геометрическому равенству ячеек P и P' , N и N' , получаем $(\varphi_f)_{1\text{процесс}} = (\varphi_f)_{2\text{процесс}}$. При этом расчетные алгоритмы остаются неизменными, так как грань f считается внутренней и обрабатывается таким же образом, как и все остальные внутренние грани. Другим преимуществом данного подхода является возможность расширения слоя фиктивных ячеек путем формирования следующего слоя ячеек P'' и N'' , причем количество дополнительных слоев может быть произвольным. Такая возможность позволяет расширить сеточный шаблон и применять схемы произвольного порядка точности, ограниченные лишь числом слоев фиктивных ячеек (необходимо отметить, что схемы выше третьего порядка точности требуют знания индексов оппозитных ячеек и в большинстве случаев это возможно только в структурированных сеточных моделях). Именно такой вариант используется при параллельном счете задач, приведенных в диссертации, и полностью адаптирован к произвольным неструктурированным сеткам.

Рассмотрим процесс формирования одного слоя фиктивных ячеек P' и N' более детально и условно выделим три основных этапа. На первом этапе выполняем декомпозицию расчетной области на домены (один домен для каждого MPI-процесса), при этом каждая расчетная ячейка отображается на конкретный MPI-процесс (Рис. 6).

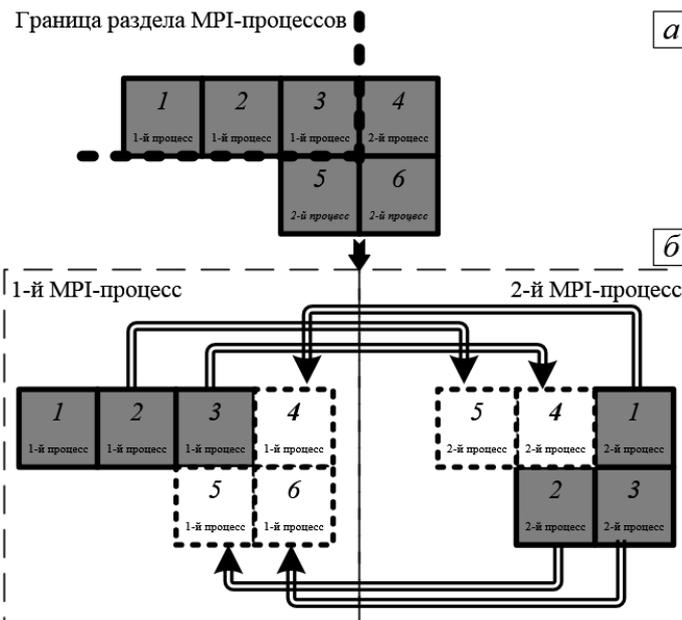


Рис. 6 - Расчетная область, состоящая из шести контрольных объемов (а); формирование фиктивных ячеек при декомпозиции области с помощью программного комплекса Chaco (б); стрелками обозначены направления пересылки между процессами значений расчетных величин

На данном этапе используются общепринятые подходы, и в случае декомпозиции неструктурированной многогранной сетки считается её отображение, тем или иным образом, на неориентированный граф. Задача оптимального разбиения произвольного графа на части является NP-полной [Якобовский, 2004], то есть задачей, решение которой требует времени, полиномиально зависящего от размера входных данных, что приводит к экспоненциальному росту объема вычислений с увеличением размерности графа и ограничивает практическую полезность точных методов, основанных на динамическом программировании [Евстигнеев, 1985]. Уже при числе вершин графа порядка «ста» точное решение задачи разбиения графа в общем случае за обозримое время не находится [Якобовский, 2004]. Возникает необходимость в привлечении различных эвристических алгоритмов, широко практикуемых при разбиении графов. В этом случае наиболее привлекательны, с точки зрения правовых ограничений, алгоритмы из программного комплекса Chaco [Hendrickson & Leland, 1995], свободно распространяемого по лицензии GNU LGPL, что позволяет использовать его в любых коммерческих программах без раскрытия исходных текстов. Именно данный программный комплекс служил для декомпозиции ниже приведенных задач. Как было сказано выше, результат данного этапа - это сформированный список ячеек, принадлежащих тому или иному MPI-процессу (Рис. 6).

Наиболее важный, второй этап, включает создание слоя фиктивных ячеек. Алгоритм при этом реализуется таким образом, что количество слоев может задаваться произвольно, и второй слой фиктивных ячеек образуется на основе первого, третий слой –

на основе второго и так далее. В списке фиктивных ячеек учитывается узловое соседство (соседство через узлы сеточной модели), то есть статус фиктивной ячейки определяется по наличию общих с расчетной ячейкой узлов.

Хранение сеточной модели осуществляется с использованием гранево-ячеечного представления, описанного выше. Такой способ, без ограничений на параллельность, открывает путь к геометрическим схемам восстановления величин на гранях, например, не по значениям в центрах ячеек, а по значениям в узлах (при этом значение в узле вычисляется по всем узлам из окружающих контрольных объемов, а значение на грани - по формирующим ее узлам). В случае формирования фиктивных ячеек через смежные грани применение подобных схем в параллельном режиме становится невозможным. Хотя узловое соседство и увеличивает объем информации при межпроцессных обменах, однако, гарантирует универсальность при параллельном использовании произвольных геометрических схем.

Продемонстрируем декомпозицию расчетной области, состоящей из шести контрольных объемов-ячеек (Рис. 6). На рисунке изображен случай, когда на разных процессах количество фиктивных и счетных ячеек не совпадает. Часть рисунка *ба* включает границу раздела MPI-процессов. Видно, что на 1-м процессе, согласно межпроцессной линии, в декомпозиции участвуют ячейки 2 и 3. Соответственно слой фиктивных ячеек для 1-го процесса содержит все ячейки со смежными узлами, то есть ячейки с глобальными номерами 4, 5, 6, со стороны 2-го процесса — фиктивные ячейки 2 и 3. Таким образом, объем пересылаемой информации между процессами не всегда равномерный, но, как будет показано ниже, это практически не влияет на эффективность параллельной реализации.

На заключительном этапе фиктивные ячейки сортируются по номерам процессов-«соседей» и добавляются в конец списка основных счетных ячеек. Результаты сохраняются в соответствующих файлах декомпозиции для каждого процесса и содержат информацию о сеточном домене (списки узлов, граней, счетных и фиктивных ячеек) и формальные правила приема и передачи межпроцессных сообщений.

На основании правил третьего этапа, при необходимости, осуществляются межпроцессные обмены. Для обмена расчетными величинами на этапах итерационного цикла вызываются асинхронные MPI-функции приема и передачи сообщений (личный опыт, показывает, что использование синхронных функций обмена приводит к общему замедлению счета на 5÷10%), которые присутствуют в процедуре, производящей обмен массивами данных со всеми соседними MPI-процессами одновременно. Если номер текущего процесса больше, чем номер соседнего процесса, то сначала происходит

посылка данных, а потом прием; при обратном соотношении номеров процессов направление обмена меняется на противоположное. Процедура передачи, содержащая целочисленные, вещественные и векторные данные, ассоциированные с ячеечными массивами, рассылает информацию из граничных расчетных ячеек каждого процесса в фиктивные ячейки всех соседних MPI-процессов (Рис. 6). Механизм обмена ячеечными массивами одинаков вне зависимости от числа процессов.

Необходимо отметить, что все этапы декомпозиции реализованы в последовательном режиме и делаются один раз для каждой задачи с передачей необходимой информации в распределенные по процессам файлы. Это позволяет значительно сократить время повторного счета задач, для которых информация о декомпозиции берется из ранее сохраненных файлов.

Описание параллельной итерационной процедуры SIMPLE

С учетом вышеизложенного алгоритма параллельная версия вычислительной процедуры SIMPLE отличается от исходной последовательной версии только включением межпроцессных обменов:

1. Вычисляются градиенты трех компонент скоростей и давления с межпроцессными обменами компонентами градиентов величин;
2. Решается уравнение сохранения количества движения для счетных и фиктивных ячеек для вычисления предварительного поля вектора скорости, распределенного по процессам. Межпроцессные обмены массивами скоростей выполняются на каждой итерации линейного решателя до сходимости;
3. Вычисляются массовые потоки на гранях контрольного объема. Данные для вычисления потока на гранях, разделяющих счетную и фиктивную ячейки, берутся из фиктивных ячеек, информация в которых появилась после межпроцессных обменов на шаге 1;
4. Вычисляется поле приращения давления на основании уравнения (36) для счетных и фиктивных ячеек. Межпроцессные обмены производятся аналогично шагу 2 на каждой итерации линейного решателя;
5. Вычисляется градиент приращения давления и пересчитывается массовый поток на гранях, удовлетворяющий исходному уравнению неразрывности. Межпроцессные обмены градиентом приращения давления и подправленным полем скорости;
6. Корректируется поле скорости в ячейке по уравнению (37);
7. Проверяется условие выхода (например, по величине невязки расчетных полей) и при необходимости происходит возврат к шагу 1.

В случае наличия дополнительных уравнений происходит увеличение количества межпроцессных обменов ячеечными массивами соответствующих полей, и обмены осуществляются на каждом итерационном шаге алгоритма SIMPLE, а также при решении соответствующих СЛАУ в количестве, равном количеству внутренних итераций, необходимых для сходимости.

Итерационные шаги алгоритма SIMPLE используют решатели СЛАУ для трех компонент скорости и давления. В зависимости от задачи и метода решения СЛАУ количество внутренних линейных итераций может варьироваться от одной до десятков тысяч, что негативно сказывается на общей эффективности алгоритма. По этой причине эффективность реализации алгоритма SIMPLE напрямую зависит от эффективности реализации решателей СЛАУ, что и будет рассмотрено ниже.

Параллельная организация решения СЛАУ

Как было показано в работе [Козелков и др., 2013b] в алгоритме SIMPLE матрица СЛАУ для давления часто не имеет строгого диагонального преобладания, и ее число обусловленности может достигать величины $10^7 \div 10^9$, что затрудняет решение СЛАУ итерационными методами [Saad, 2003] в подпространствах Крылова и требует затрат более 90% времени на расчетном шаге. В программном комплексе ЛОГОС для решения наиболее сложной СЛАУ для давления используется алгебраический многосеточный метод (AMG), детали реализации которого подробно изложены в [Brandt, 1982; Vanek et al., 1996], а для решения СЛАУ для скоростей и турбулентных параметров - симметричный решатель Гаусса-Зейделя.

Основная идея многосеточного метода заключается в иерархическом построении и сохранении последовательности вложенных грубых матриц СЛАУ и операторов произвольного перехода от одной матрицы СЛАУ к другой. В зависимости от параметров огрубления количество этих грубых матриц (уровней) может быть произвольным. Процесс решения начинается с исходной СЛАУ (с 0-го уровня) и последующей интерполяции найденного решения и невязки на более грубые уровни. При достижении самого грубого уровня процесс интерполяции решения и невязки начинается в обратном направлении. Такая итерационная процедура позволяет значительно сократить количество внутренних итераций до момента получения необходимой точности решения.

Рассмотрим основные шаги алгебраического метода решения СЛАУ на классической задаче:

$$A_h x_h = b_h, \tag{50}$$

где A_h - начальная исходная матрица размером $n \times n$, x_h и b_h - вектор неизвестных и правая часть системы уравнений соответственно размером n , нижний индекс h указывает на принадлежность уравнений к подробной сетке.

Оператор интерполяции P с грубой сетки H на подробную сетку h позволяет представить матрицу A_H на грубой сетке в виде:

$$A_H = RA_h P, \quad (51)$$

где $R = P^T$ - оператор интерполяции с подробной сетки на более грубую сетку. Шаг коррекции решения:

$$x_h^{new} = x_h^{old} + P e_H. \quad (52)$$

Коррекция решения e_H является точным решением уравнения:

$$A_H e_H = r_H, \quad (53)$$

в котором $r_H = R r_h$ - невязка на грубом уровне и $r_h = b_h - A_h x_h^{old}$ - невязка на самом подробном уровне.

Таким образом, одна итерация многосеточного метода, со схемой коррекции решения, включает последовательность шагов:

1. Выполнение n итераций предварительного сглаживания решения на сетке h при помощи сглаживателя Гаусса-Зейделя (54) (см. описание ниже);
2. Вычисление невязки $r_h = b_h - A_h x_h^{old}$ на текущем уровне;
3. Нахождение приближенного решения $A_H e_H = r_H$ на грубой сетке. Для этого рекурсивно делается γ циклов многосеточного метода;
4. Интерполяция подправленного e_H на подробную сетку и коррекция решения на подробной сетке $x_h^{new} = x_h^{old} + P e_H$;
5. Осуществление n - итераций заключительного сглаживания решения на подробной сетке для подавления ошибки интерполяции.

В зависимости от числа γ рекурсивных вызовов метода на каждом сеточном уровне выделяют различные типы циклов. При $\gamma = 1$ получается V-цикл, а при $\gamma = 2$ - W-цикл. Если на каждом уровне рекурсивно сначала вызывать один W-цикл, а затем V-цикл, получим F-цикл. Использование того или иного типа цикла (V, W и F -цикл), как показано в работе [Козелков и др., 2013b], влияет на скорость сходимости и устойчивость решения.

Важным фактором эффективной реализации многосеточного решателя является сглаживатель. В данной работе роль основного сглаживателя выполняет симметричный метод Гаусса-Зейделя [Saad, 2003]:

$$\left. \begin{aligned} x_i^{new} &= \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^{old}}{a_{ii}}, \\ b_j &= b_j - a_{ji} x_i^{old}, j \in i-1, \dots, N \end{aligned} \right\} i \in 1, \dots, N \quad (54)$$

Итерационная процедура многосеточного решателя совместно со сглаживателем Гаусса-Зейделя позволяют значительно сокращать время решения СЛАУ давления в итерационном алгоритме SIMPLE, что продемонстрировано в [Козелков и др., 2013b; Голубев и др., 2013].

Основная счетная нагрузка в последовательном и параллельном вариантах многосеточного решателя ложится на создание грубых уровней и на итерационный вызов вычислительной процедуры сглаживателя. Если параллельное построение грубых уровней обсуждено в [Козелков и др., 2013b; Козелков и др., 2016a], то осуществление параллельных итераций сглаживателем освещено достаточно слабо. Существенным плюсом при введении фиктивных ячеек является возможность избавиться от дополнительных обменов при матрично-векторных операциях. Покажем это на примере. Для этого рассмотрим более подробно распределенное хранение матрицы. Для хранения матрицы используется формат LDU. Отдельно хранятся диагональ D , верхняя треугольная U и нижняя треугольная L части матрицы. Соответственно матрица A представляется в виде: $A = L + D + U$. Три массива являются одномерными и содержат значения элементов матрицы. Массив, хранящий диагональ, индексируется номером соответствующей ячейки. Два других массива индексируются номерами ячеек, которые определены в дополнительных массивах IP и uP , хранящих строки и столбцы матрицы соответственно. Заметим, что как и для гранично-ячеечного представления, номер ячейки IP всегда меньше номера uP . Упорядочение массивов представлено на рисунке 7.

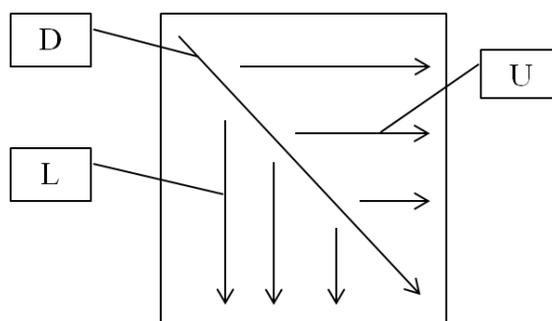


Рис. 7 – Представление формата LDU

Прямое сходство массивов IP и uP с гранено-ячеечным представлением сеточной модели не требует дополнительного выделения памяти для массивов и обеспечивает прямую связь форматов хранения сеточной модели и матрицы СЛАУ.

Эффективная параллельная реализация на представленной структуре данных предполагает построение матрицы каждым MPI-процессом как для счетных, так и фиктивных ячеек. На рисунке 8 показаны портреты матрицы СЛАУ, созданные для уравнения неразрывности на восьми ячейках расчетной области при двух процессных вариантах. Межпроцессная граница разделяет при этом ячейки под номерами 2 и 3, 6 и 7.

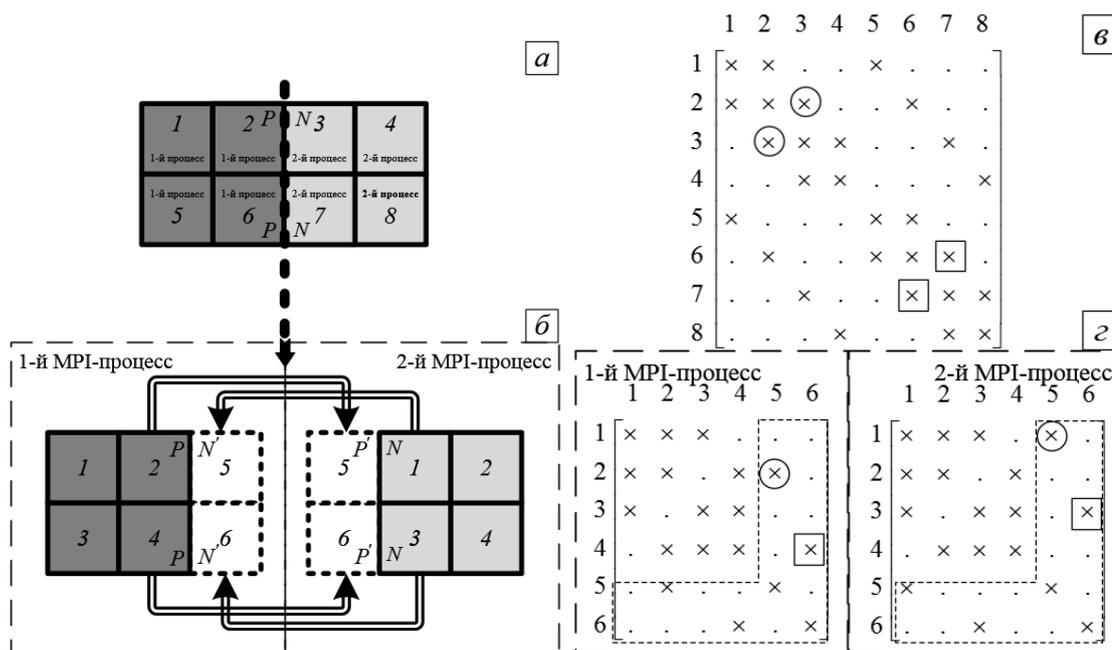


Рис. 8 - Пример декомпозиции сеточной модели (а), (б) и портреты матриц СЛАУ в однопроцессорном (в) и двухпроцессорном (г) вариантах; элементы фиктивной матрицы выделены пунктиром, символы означают: «x» - наличие связи между ячейками (см. номера строк и столбцов), символ «•» - отсутствие связи; элементы матрицы на 1-м и 2-м процессах, взятые в кружки и квадратики, равны между собой соответственно

Найденные при линеаризации уравнений внедиагональные коэффициенты матрицы, отвечающие за связь между ячейками, выделены в виде одинаковых фигур. Введение фиктивных ячеек гарантирует равенство коэффициентов (49), и поэтому операция умножения локальных матриц на локальные части распределенного вектора приводит к глобальному вектору, в точности такому же, как на одном процессе.

Предложенный подход открывает путь, например, в многосеточном решателе СЛАУ, имеющем в основе сглаживатель Гаусса–Зейделя, к использованию только одного межпроцессного обмена для каждой внутренней итерации, то есть при вычислении значений x^{n+1} и b в прямом и обратном ходах, а также при определении невязки $r = b - Ax$ межпроцессные обмены отсутствуют. В итоге сглаживателю методом Гаусса–

Зейделя потребуется только один межпроцессный обмен информацией о фиктивном фрагменте вектора неизвестных x^{n+1} в конце единичной внутренней итерации.

Также можно утверждать, что данный подход к параллельному решению СЛАУ позволяет избавиться от дополнительного межпроцессного обмена данными о фиктивном фрагменте вектора неизвестных при «получении» решения из решателя СЛАУ, так как этот обмен уже произошел непосредственно в линейном решателе.

Таким образом, показаны основные шаги реализации параллельного алгоритма SIMPLE для расчета вязких несжимаемых течений с возможностью счета в высокопараллельном режиме, а также формат хранения и решения СЛАУ, позволяющий минимизировать число межпроцессорных обменов. Во второй главе диссертации приведем показатели эффективности счета в высокопараллельном режиме с учетом оптимальных настроек многосеточного решателя СЛАУ.

Для успешного применения алгоритма SIMPLE при счете вязких несжимаемых течений и его использования на предприятиях промышленности, было необходимо его внедрить в пакет программ ЛОГОС. Данное внедрение происходило при определяющем участии диссертанта и приведено в следующем параграфе.

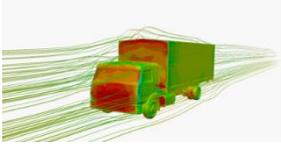
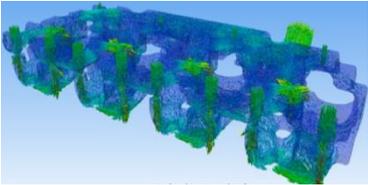
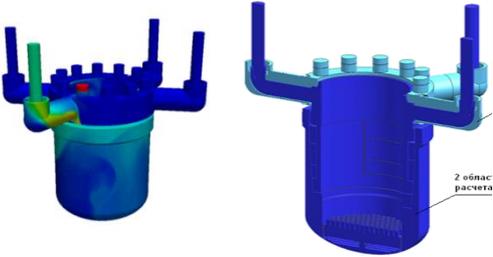
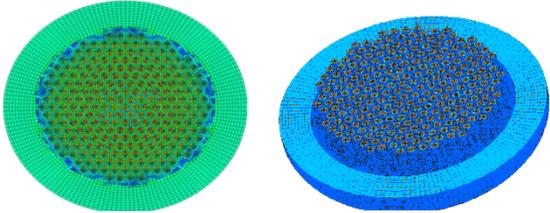
1.4 Внедрение алгоритма SIMPLE в пакет программ ЛОГОС

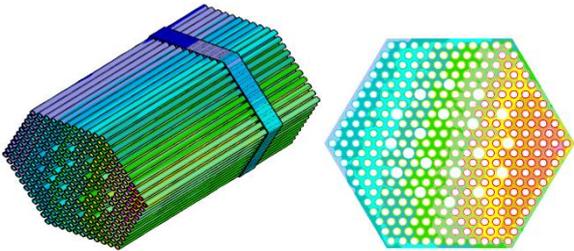
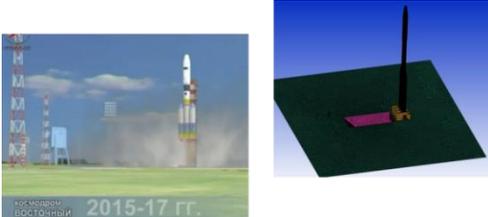
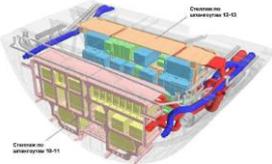
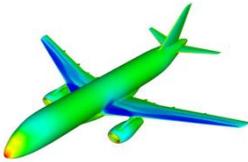
В 2010-2012 гг. в рамках проекта «Развитие суперкомпьютеров и грид-технологий», утвержденного Комиссией при Президенте РФ по модернизации и технологическому развитию экономики России в ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» было создано отечественное программное обеспечение для имитационного моделирования широкого круга физических процессов. Основным пакетом программ, разработанным в рамках проекта, является пакет программ ЛОГОС, предназначенный для решения сопряженных трехмерных задач конвективного теплопереноса, аэродинамики и гидродинамики на суперЭВМ. Пакет программ ЛОГОС позволяет рассчитывать течения вязкого сжимаемого и несжимаемого газа с учетом турбулентного перемешивания, процессы распространения тепла в твердом теле и течения в анизотропных пористых средах. Для решения задач применяются явные и неявные, конечно-объемные и конечно-элементные методы.

Пакет программ ЛОГОС базируется на передовых научно-технических решениях и охватывает значительный спектр (до 80%) задач аэро-, гидро-, газодинамики, теплопереноса и прочности, решаемых на предприятиях промышленности и ОПК. Ввиду того, что все промышленные изделия обладают сложной геометрической конфигурацией (таблица 1), основное требование, предъявляемое к пакету программ ЛОГОС помимо массового параллелизма, - это возможность устойчивого и точного

расчета на произвольных неструктурированных сетках, состоящих из многогранников произвольной формы.

Таблица 1 – Некоторые классы задач, решаемые пакетом программ ЛОГОС в интересах отраслей промышленности РФ

Автомобильная промышленность (ОАО "КАМАЗ")		
Название задачи	Используемые модели турбулентности	Иллюстрация
Определение аэродинамических характеристик магистрального тягача	SST, DES SST, IDDES SST	
Расчёт течения охладителя в монолитной рубашке охлаждения блока цилиндров двигателя автомобиля	k-ε, k-ω, SST	
Моделирование газодинамики впускного канала с клапанами блока цилиндров двигателя автомобиля КАМАЗ	k-ε, k-ω, SST	
Атомная энергетика (ОАО «ОКБМ АФРИКАНТОВ»)		
Моделирование турбулентного смешения неизотермических потоков в напорной камере РУ	LES, SST, IDDES	
Мультифизическое моделирование РУ, основанное на связи ЛОГОС и одномерных теплогидравлических кодов	LES, SST, DDES	

<p>Моделирование ТВС с заданным энерговыделением для оптимизации проточного тракта и конструкции ТВС в целом</p>	<p>LES, SST DES</p>	
<p>Ракетно-космическая промышленность</p>		
<p>Расчет ветровых нагрузок ракеты на стартовом комплексе</p>	<p>k-ε, k-ω, SST</p>	
<p>Моделирование течения реального газа в турбине ТНАГ</p>	<p>k-ε, k-ω, SST</p>	
<p>Авиационная промышленность (ОАО Компания «Сухой»)</p>		
<p>Расчет температурных полей в отсеках оборудования самолета</p>	<p>SST, DDES</p>	
<p>Моделирование гидравлических и топливных систем летательных аппаратов</p>	<p>SST</p>	

Это требование сказалось как на методах реализации численных схем при дискретизации исходных уравнений, так и на организации исходного кода пакета программ ЛОГОС. Особенности применения и реализации численных схем на произвольных неструктурированных сетках будут рассмотрены в следующих параграфах диссертации. Здесь приведем особенности организации структуры хранения данных применительно к алгоритму SIMPLE.

При проектировании пакета программ ЛОГОС использовался объектно-ориентированный подход (ООП) [(Страуструп, 2002; Подбельский и Фомин, 2004)]. Основные его принципы: введение собственных типов данных (классов), сокрытие деталей реализации внутри объекта данных (инкапсуляция), возможность многократного использования кода благодаря наследованию. Основываясь на данных принципах, программная реализация пакета программ ЛОГОС представлена в виде структурных блоков со строго определённым набором правил взаимодействия.

Основные блоки, реализованные в пакете программ ЛОГОС: **«Ядро»**, **«Свойство метода»**, **«Решатели СЛАУ»** и **«Память метода»**. Блок **«Ядро»** содержит информацию о расчётной сетке, граничных условиях и информацию для межпроцессорных обменов. Второй блок **«Свойство метода»** - содержит всю информацию, связанную со свойствами моделируемой среды, и реализует возможность счета многокомпонентных и многофазных сжимаемых и несжимаемых течений. **«Решатели СЛАУ»** - это третий структурный блок, представляющий из себя полностью независимый модуль решателей СЛАУ. И последний блок **«Память метода»** - содержит рабочие массивы и переменные, необходимые для реализации численных алгоритмов решения уравнений математической физики, например, системы уравнений Навье-Стокса (1). Описанную структуру можно представить в виде блок-схемы, представленной на рисунке 9.

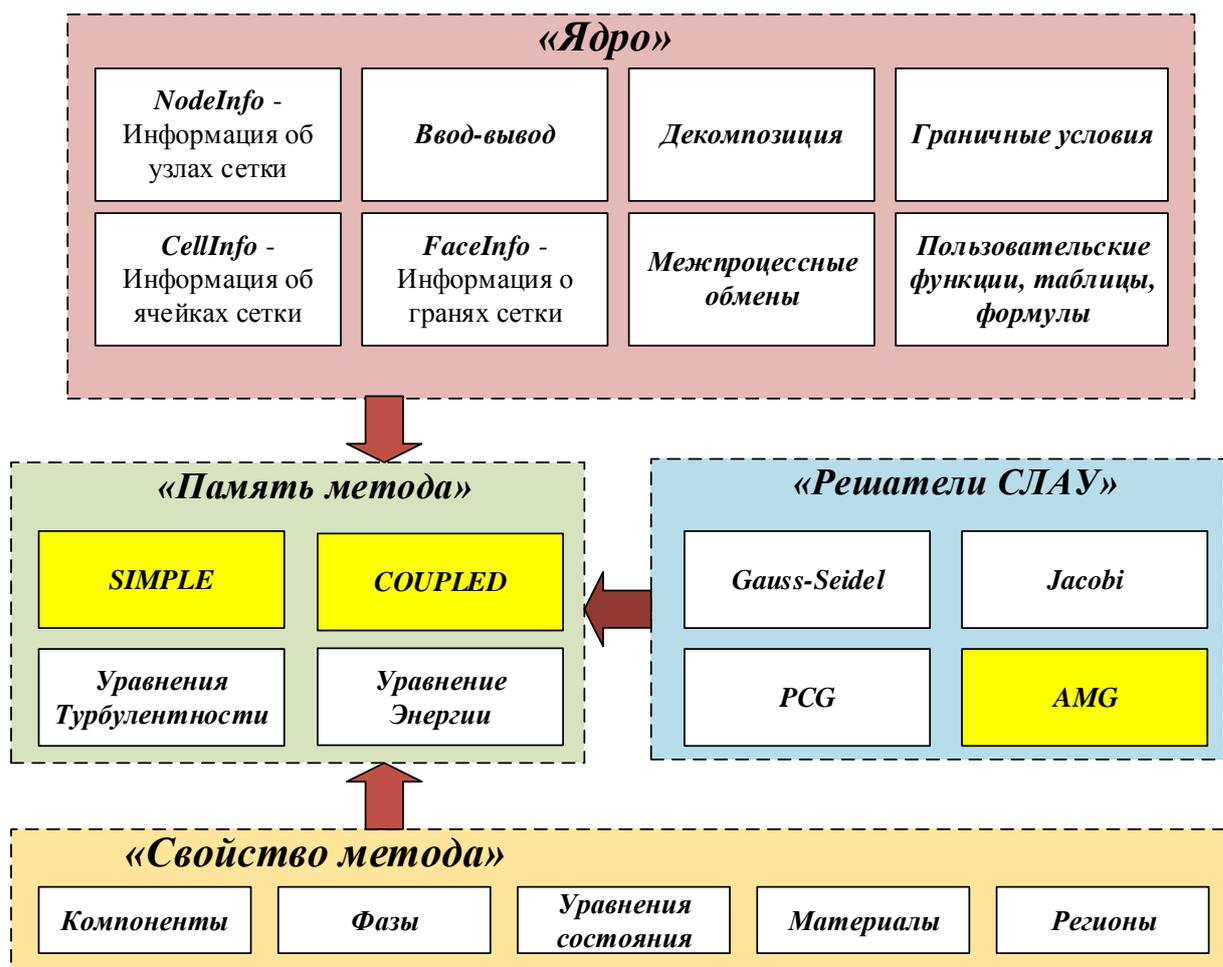


Рис. 9 – Блок схема структурных блоков пакета программ ЛОГОС

Как видно, организация структурных блоков пакета программ ЛОГОС содержит основу, позволяющую реализовывать различные вычислительные алгоритмы численного решения уравнений механики сплошных сред. При использовании такого подхода весь «сопутствующий» функционал (параллельность, ввод-вывод, свойства материалов и так далее) реализован в соответствующих структурных блоках, что позволяет разработчику полностью сосредоточиться на написании вычислительных алгоритмов.

Далее подробнее рассмотрим каждый из структурных блоков.

Ядро

Блок «*Ядро*» является основным блоком при работе с сеточными моделями и ориентирован, прежде всего, на неструктурированные сетки, в которых ячейки представляют собой произвольные многогранники (Рис. 10). Для представления расчетной сетки используются следующие элементы: узел расчётной сетки, грань ячейки и ячейка. Для описания топологии связей объектов сетки используется граниво-ячеечная модель, в которой ведущую роль играют грани ячеек и которая является наиболее оптимальным способом реализации конечно-объемного метода [Козелков и др., 2013b].

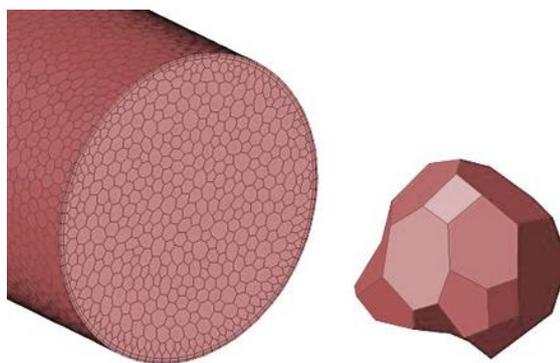


Рис. 10 - Произвольная неструктурированная сетка с выделением призматического пограничного слоя

Помимо счета на неструктурированных сетках блок «*Ядро*» может работать с гибридными сеточными моделями, как правило, состоящими из структурированных и неструктурированных сеточных областей. Для этого автоматически выделяются структурированные области, состоящие только из правильных шестигранных ячеек. Области маркируются и в них используются схемы высокого порядка точности, например, третьего или четвертого. Детали данного механизма подробно описаны в [Козелков и др., 2014]. В диссертации для всех численных экспериментов используются общие алгоритмы для произвольных неструктурированных сеток.

Хранение сеточной модели осуществляется в текстовом файле «**.ngem*» [Smith, 2006]. Данный файл содержит описание произвольной неструктурированной сетки относительно грани расчетной ячейки.

Начальная информация о параметрах расчета, свойствах моделируемого вещества и граничных условиях содержится в файле «**.yaml*», созданном на основе общедоступной библиотеки YAML [Супрунов, 2008]. Данная библиотека определяет скриптовый индексируемый язык, позволяющий создавать пользовательские словари, очереди и списки, что обеспечивает применение данной библиотеки в качестве основного инструмента создания файла начальной постановки. Визуальное формирование данного файла происходит с помощью пользовательского интерфейса ПреПостПроцессора [Анищенко и др., 2014].

Декомпозиция расчетной области осуществляется в программном комплексе Chaco (свободно распространяемый под лицензией GNU LGPL) [Hendrickson & Leland, 1995], внедренном в пакет программ ЛОГОС. Межпроцессорное взаимодействие осуществляется с использованием общедоступной библиотеки Mvapiх [Snir et al., 1996]. Детали реализации межпроцессорных обменов и механизм декомпозиции будут описаны в следующих главах диссертации.

Вывод расчетных величин осуществляется в файлы библиотеки EFR [Потехин и др., 2008]. Библиотека предоставляет собой единый функциональный интерфейс для работы с файловыми данными в параллельном режиме и позволяет сохранять все необходимые результаты полномасштабных расчетов.

Для пользовательских формул задействована библиотека `muParser`, предназначенная для «парсинга» (разбора) математических выражений в текстовом виде. Данная библиотека анализирует формулы и представляет их в виде быстрого «байт-кода», используемого для вычисления зависимых величин в процессе счета. Помимо этого, блок содержит набор интерфейсных функций для расчета геометрических параметров сеточной модели (площади граней, объемы ячеек, вектора расстояний и т.д.), функции для межпроцессорных обменов скалярными и векторными величинами.

В итоге можно констатировать, что данный функциональный блок является «сердцем» пакета программ ЛОГОС и от его эффективной реализации зависит эффективность работы всего пакета программ в целом.

Решатели СЛАУ

Структурный блок *«Решатели СЛАУ»* содержит набор итерационных алгоритмов решения СЛАУ. На данный момент реализовано несколько решателей: алгебраический многосеточный с агрегативным способом огрубления, симметричный Гаусс-Зейдель, метод сопряженных градиентов и Якоби [Saad, 2003]. Прежде всего, данный блок ориентирован на решение блочных систем линейных уравнений с произвольным размером блока. Такая возможность обеспечивается путем замены стандартных операций умножения и деления на соответствующие матрично-векторные операции. В случае решения скалярных систем размер блока приравнивается к единице.

Основным методом решения СЛАУ является алгебраический многосеточный метод, детали реализации которого приведены в [Козелков и др., 2013b, Волков и др., 2013]. В следующих главах диссертации приводится подробное описание параллельной реализации основных шагов многосеточного решателя, особенностей блочной реализации, а также настроечных параметров решателя для обеспечения наиболее эффективного счета.

Свойство метода

Блок *«Свойство метода»* реализует одну из ключевых особенностей пакета программ ЛОГОС - возможность счета многообластных задач с выделенными областями (регионами), в которых моделируются различные физические процессы.

Особенности реализации данного блока для счета многообластной задачи можно рассмотреть на примере задачи сопряженного теплообмена. При построении сеточной модели пользователь интерактивно выделяет «**FLUID**» и «**SOLID**» регионы, путем определения типа ячеек для каждой области (Рис. 10):

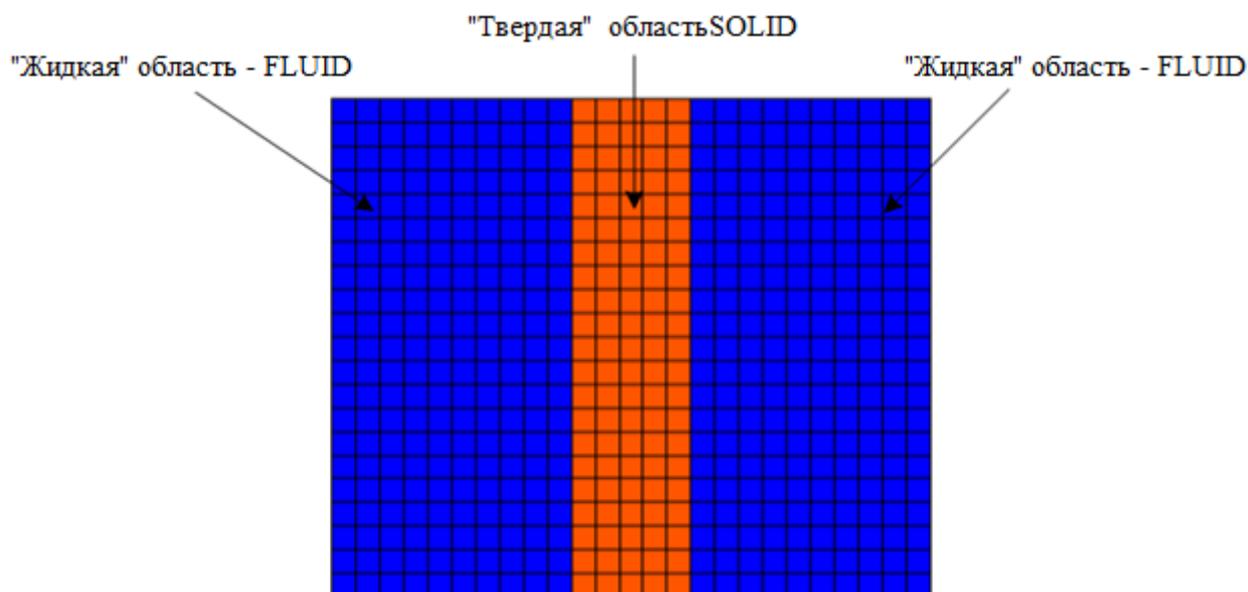


Рис. 11 – Выделение регионов

В файле начальных данных «*.yaml» задаются соответствующие материалы для каждого региона и тип интерфейса взаимодействия: явный или неявный. Для корректной обработки, вновь созданных регионов, в пакете программ ЛОГОС происходит автоматическое выделение интерфейсных границ между «**FLUID**» и «**SOLID**» регионами. В случае неявной связи между границами портрет матрицы расширяется путем добавления недиагональных коэффициентов, обеспечивающих связь интерфейсов. На этом этап подготовки заканчивается.

Вся дальнейшая организация вычислений происходит в блоке «*Память метода*» и заключается в построении итеративных циклов обработки интерфейсных граней таким образом, чтобы обеспечить неявную или явную связь между ними. Важно отметить, что «**SOLID**» регионы не участвуют в формировании матриц для уравнения движения и неразрывности.

Аналогичный принцип используется и при организации подхода при счете подобных многообластных задач, например, задачи с пористым телом, RANS-LES переходы и так далее. Подробное изложение технологии применения RANS-LES методов представлено в [Козелков и др., 2013а, Козелков и др. 2015], а адаптация данной технологии для расчета промышленных задач в рамках пакета программ ЛОГОС выполнялась при непосредственном участии диссертанта.

Важно подчеркнуть, что для подобного рода задач, помимо специализированной обработки интерфейсных граней, требуется сформировать две матрицы СЛАУ. Первая матрица формируется только для «**FLUID**» области, вторая для общей «**FLUID-SOLID**» области. Это необходимо для обеспечения корректного решения уравнений неразрывности и движения во «**FLUID**» области и уравнения энергии во «**FLUID-SOLID**» области. Такой подход является более затратным по памяти, но данные затраты невелики, так как память выделяется только для индексации матричных элементов, а сами элементы хранятся в одних и тех же массивах. Другой подход с использованием одной матрицы сразу для двух областей, помимо дополнительных накладных расходов по формированию коэффициентов матрицы, требует и больше времени решения, так как происходит решение в «**SOLID**» областях, для которых скорости и давление формально не определены (равны нулю).

В дополнение можно отметить, что блок «*Свойство метода*» хранит теплофизические свойства моделируемых веществ, уравнения состояния для однокомпонентных и многокомпонентных материалов, пользовательские функции, таблицы, параметры межфазных взаимодействий и другие.

С учетом выше изложенного можно утверждать, что функциональная база пакета программ ЛОГОС позволяет объединять регионы путем учета явной или неявной связи, формировать соответствующие матрицы СЛАУ, как для отдельных регионов, так и для всей модели в целом, расширяя при этом возможности по внедрению специфичных физико-математических моделей.

Технология многообластного взаимодействия в рамках алгоритма SIMPLE реализована непосредственно диссертантом.

Память метода

«*Память метода*» - основной структурный блок, содержащий исходные коды различных численных алгоритмов для решения уравнений математической физики, например, алгоритмы решения уравнений Навье-Стокса или уравнений турбулентности. Данный блок имеет доступ ко всем алгоритмам и методам блоков: «*Ядро*», «*Свойство метода*» и «*Решатели СЛАУ*», что обеспечивает неоднократное использование «сопутствующего» функционала (чтение файла начальных данных, декомпозиция, межпроцессорные обмены и так далее), который необходим при реализации любых численных алгоритмов.

Если в качестве примера рассматривать шаги реализации алгоритма SIMPLE, которые описаны выше, то процесс его внедрения в структурный блок «*Память метода*» должен быть организован следующим образом:

1. Создание на базе структурного блока «*Ядро*» специального объектно-ориентированного класса SIMPLE для решения расцепленной системы уравнений Навье-Стокса (1);
2. Определение в классе SIMPLE массивов, необходимых для реализации решения уравнений, таких как: плотность, молекулярная вязкость, три компоненты вектора скорости, давление и поправки давления. Дополнительно создать массивы градиентов компонент скорости, давления и поправки давления;
3. Создание в методах класса процедуры для расчета градиентов. Данная процедура необходима для вычисления градиента скорости, давления и поправки давления (см. шаги 1 и 5 итерационной процедуры SIMPLE);
4. Создание процедуры линеаризации конвективного и диффузионного слагаемых, входящих в уравнение движения. Отдельно создать процедуру линеаризации явного градиента давления, входящего в правую часть уравнения движения. Последовательный вызов данных процедур и вызов решателя СЛАУ обеспечивает выполнение шага 2;
5. Создание процедуры вычисления массового потока на основе текущего поля скорости (шаг 3);
6. Создание процедуры для линеаризации уравнения неразрывности для нахождения поправки давления и вызова решателя СЛАУ. После решения СЛАУ получим поле приращения давления, согласно шагу 4;
7. Создание процедуры корректировки поля скорости. Массовый поток рассчитывается в соответствующей реализованной процедуре (шаг 5);
8. Создание процедуры вычисления невязки расчетных полей и ее сравнение с невязкой заданной пользователем. При необходимости завершить расчет (шаг 6.).

Описанную последовательность шагов можно представить в виде блок-схемы (Рис. 12).

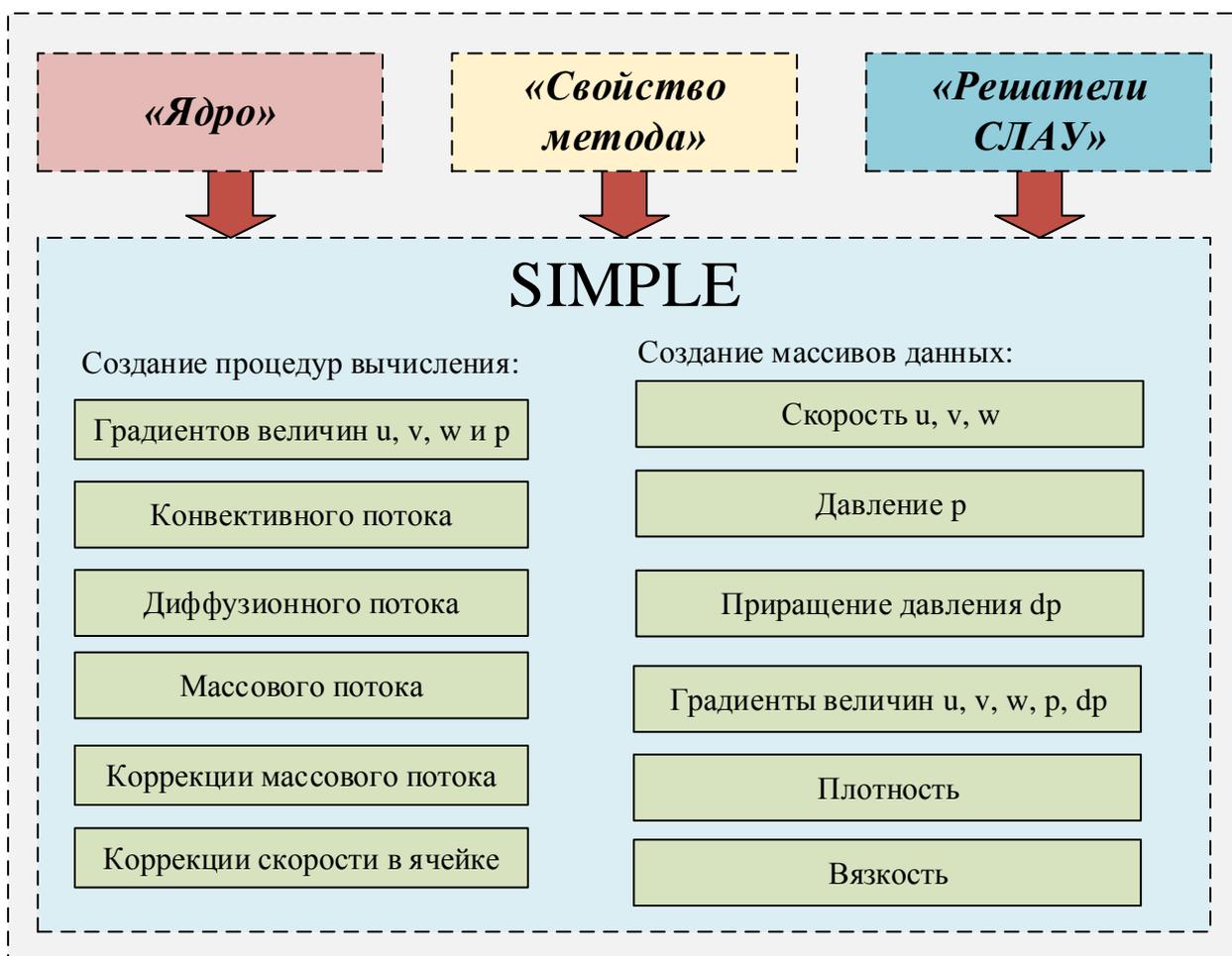


Рис. 12 – Структурный блок алгоритма SIMPLE

По аналогичной схеме строятся все численные алгоритмы, реализованные в пакете программ ЛОГОС, например, алгоритмы расчета параметров турбулентности, энергии и объемных долей. Использование данной структуры обеспечивает независимость блоков друг от друга и создает условия для полноценного многопользовательского процесса написания исходного кода различными группами разработчиков, например, одни реализуют уравнение турбулентности, а другие уравнение энергии.

Многопользовательское написание исходных кодов необходимо для непрерывного процесса разработки пакета программ ЛОГОС, что позволяет существенно сократить время разработки и внедрения соответствующего функционала. Для многопользовательского доступа используется открытая библиотека системы контроля версий Mercurial с интерфейсной оболочкой TortoiseHG. Данная система относится к классу распределенных систем контроля версий и позволяет:

- создавать несколько локальных репозиториев для каждого пользователя проекта;
- выкладывать свои изменения, как в локальные, так и в общий репозиторий;
- осуществлять слияния изменений и так далее.

Структуру процесса внесения и слияния изменений можно графически представить в виде блок-схемы (Рис. 13), где разными цветами обозначены разные пользователи.

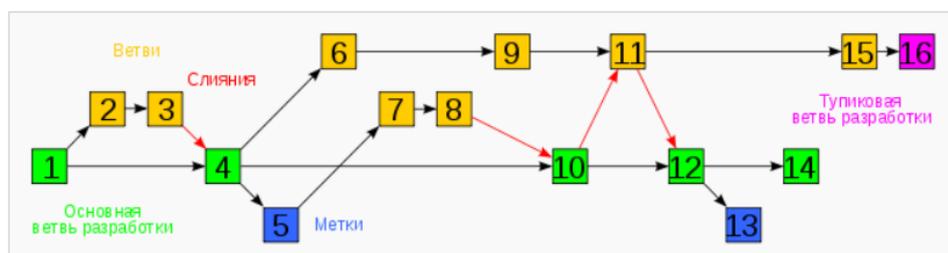


Рис. 13 - Представление работы механизма веток в TortoiseHG

На рисунке видно, что последние изменения «14» зеленого цвета содержат в себе все изменения, сделанные «синим» и «желтым» пользователем соответственно.

В дополнение можно отметить, что такой принцип организации работы позволяет многократно сократить время на разработку кода, уменьшить количество ошибок, возникающих при разработке больших пакетов программ.

Внедрение алгоритма SIMPLE в общую структуру пакета программ ЛОГОС

В настоящее время итерационный алгоритм SIMPLE реализован в пакете программ ЛОГОС в виде отдельного исполняемого модуля (ЛОГОС-SIMPLE) и позволяет считать несжимаемые и сжимаемые течения, течения в анизотропных пористых средах, многофазные течения, течения с учетом сопряженного теплообмена и естественной конвекции, трансзвуковые и сверхзвуковые течения, течения в деформируемых и подвижных сетках типа «Химера», течения с использованием современных моделей турбулентности DES, DDES и IDDES, что отражено в многочисленных статьях и монографиях [Козелков и др., 2013а, Козелков и др., 2014а, Козелков и др., 2014б; Козелков и др., 2015].

Современные требования к инженерным расчетным комплексам обусловлены наличием интерактивного взаимодействия между пользователем и пакетом программ. Для выполнения данного требования алгоритм SIMPLE полностью интегрирован в пользовательский интерфейс ПреПостПроцессора (Рис. 14), представляющий собой визуальный инструмент построения сеточных моделей и задания начальных данных расчета.

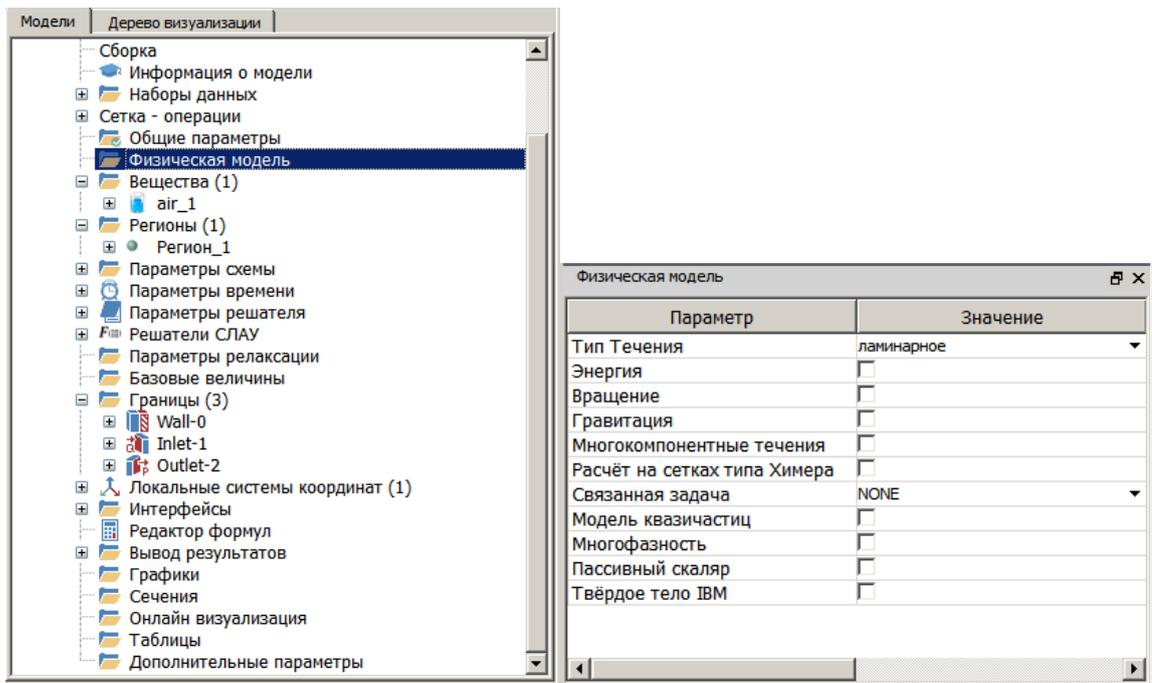


Рис. 14 – Представление алгоритма SIMPLE в пользовательском дереве ПреПостПроцессора

Также тесная интеграция осуществлена и с ScientificView, высоко-параллельным инструментом визуализации и постобработки расчетных данных [Потехин и др., 2008].

Таким образом, организованная структура взаимодействия 3-х пакетов программ (ПреПостПроцессор, SIMPLE и ScientificView) обеспечивает полный цикл (от построения сеточной модели до визуализации) расчета методических и промышленно-ориентированных задач на предприятиях атомной, ракетной, авиационной и автомобильной промышленности в высоко-параллельном режиме, речь о котором пойдет в следующем параграфе.

Интерактивное представление итерационного алгоритма SIMPLE в пре-постпроцессоре пакета программ ЛОГОС выполнялось при определяющем участии диссертанта.

1.5 Верификация алгоритма SIMPLE

Перед тем как исследовать эффективность предложенной параллельной реализации, необходимо верифицировать итерационный алгоритм SIMPLE на серии показательных задач внутреннего и внешнего течения вязкой несжимаемой жидкости. Верификация заключается в сравнении получаемых результатов численного моделирования либо с эмпирическими данными, либо с экспериментальными данными или с результатами расчетов по аналогичному пакету программ. Такая доказательная практика необходима для подтверждения работоспособности алгоритма и отражает его готовность к счету промышленно-ориентированных задач.

В качестве верификационных задач возьмем задачи, входящие в минимальный базис для валидации методов численного моделирования турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости [Козелков и др., 2014с; Козелков и др., 2015b]. Под минимальным понимается базис, включающий задачи, которые в обязательном порядке должны быть численно решены программой, подлежащей валидации. Представленный здесь базис является «базовым», а для валидации моделей расчета, обладающих спецификой, например, относительно применения в различных отраслях промышленности (авиация или космос) или моделирования физических явлений, базис должен быть расширен соответствующими задачами. Здесь приводится описание наиболее сложных и представительных задач этого базиса, охватывающих следующий функционал: ламинарные течения, нестационарные течения, турбулентные течения, естественная конвекция, тепловой турбулентный пограничный слой. При решении большинства задач базиса [Козелков и др., 2014с; Козелков и др., 2015b] диссертант принимал активное участие, что отражается в публикациях [Голубев и др., 2013; Козелков и др., 2013а; Козелков и др., 2013b; Козелков и др., 2014b; Козелков и др., 2015а; Козелков и др., 2016а; Лашкин и др., 2016а; Лашкин и др., 2016b].

Ламинарное движение жидкости в квадратной каверне с движущейся стенкой

Рассмотрим стационарное ламинарное движение жидкости в квадратной каверне с подвижной верхней стенкой (Рис. 15), движущейся в своей собственной плоскости с постоянной скоростью, при этом боковые и нижняя стенки неподвижны. Течение считается несжимаемым, а физические свойства течения выбираются исходя из безразмерного числа Рейнольдса $Re = 1000$. Результаты решения сравнивались с [Ghia et al., 1982].

Для оценки результатов численного моделирования использовались четыре сеточные модели: две структурированные размерностью 10000 (грубая) и 50000 (подробная) ячеек и две неструктурированные - 22804 и 18980 ячеек соответственно. Первая неструктурированная сетка состоит преимущественно из призм, вторая из полиэдральных призм. Примеры сеточных моделей приведены на рисунке 15.

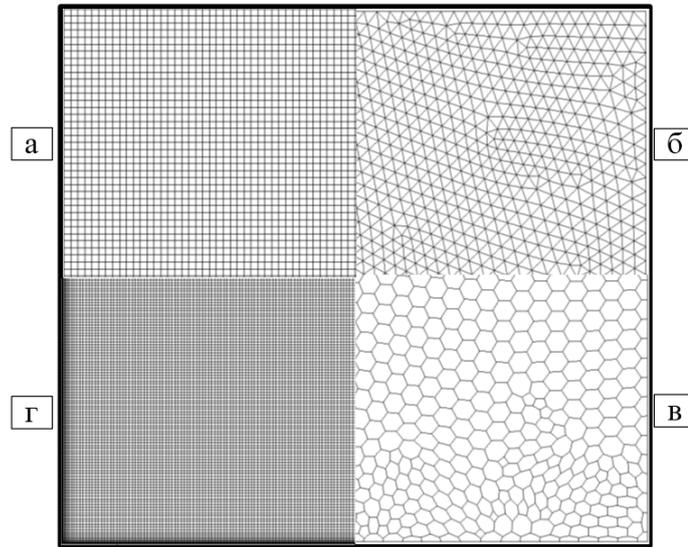


Рис. 15 – Сеточные модели квадратной каверны: (а) и (г) – структурированные, (б) и (в) - неструктурированные

Расчет проводился в последовательном режиме до значений невязки по массе меньше 10^{-6} кг.:

$$res_m = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{f=nb(P)} \rho_f S_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f) \right), \quad (55)$$

Результаты расчета сравниваются с эталонным решением из [Ghia et al., 1982] по безразмерным профилям компонент скорости вдоль вертикальной и горизонтальной линий, проходящих через центр каверны (Рис. 16).

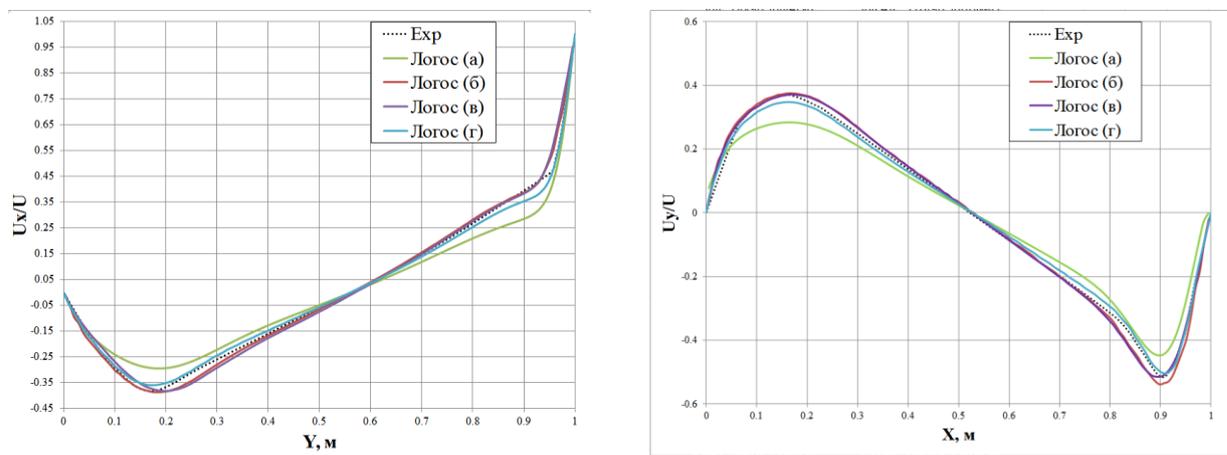


Рис. 16 – Графики безразмерной скорости

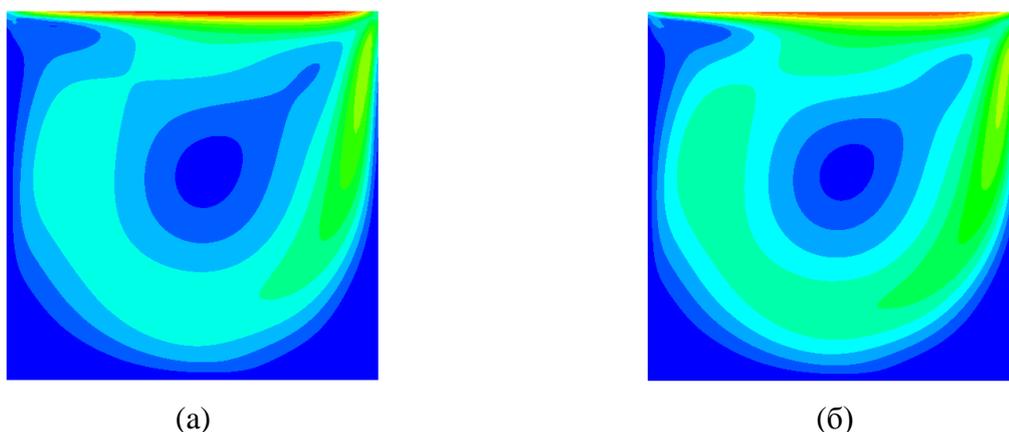


Рис. 17 – Модуль скорости в квадратной камере: (а) – структурированная, (б) – неструктурированная сеточная модель

Как видно из графиков, полученные результаты находятся в хорошем согласии с эталонными данными [Ghia et al., 1982] вне зависимости от типа сеточной модели. Максимальная среднеквадратичная погрешность численного эксперимента наблюдается на грубой структурированной сеточной модели и достигает максимум 20%, минимальная на подробной структурированной сетке - 2%, на неструктурированной сетке – 5%, что свидетельствует о правильности моделирования ламинарных течений на произвольных неструктурированных сетках.

Ламинарная естественная конвекция в квадратной полости

Рассмотрим задачу естественной конвекции ламинарного стационарного течения несжимаемой жидкости, находящейся в поле силы тяжести. Задача решается в квадратной полости с температурой левой и правой стенок T_h и T_c соответственно, при этом $T_h > T_c$. Верхняя и нижняя стенки считаются теплоизолированными. Определяющим для этой задачи, является число Рэлея:

$$Ra = \frac{g\beta\Delta TL^3 \text{Pr} \rho^2}{\mu^2}, \quad (56)$$

где $g = 9.81 \frac{\text{м}}{\text{с}^2}$ - ускорение свободного падения, β - коэффициент термического расширения, $\Delta T = T_h - T_c$ - перепад температуры, L - характерный размер камеры, Pr - число Прандтля. Рассмотрим значения числа Рэлея $Ra = 10^4$.

Естественная конвекция моделируется путем учета влияния массовых сил на основании модели Буссинеска. Результаты решения сравниваются с результатами из [Wan et al., 2001].

Для моделирования используются сеточные модели из предыдущего теста (ламинарное течение в квадратной камере с движущейся верхней стенкой), изображенные на рисунке 15.

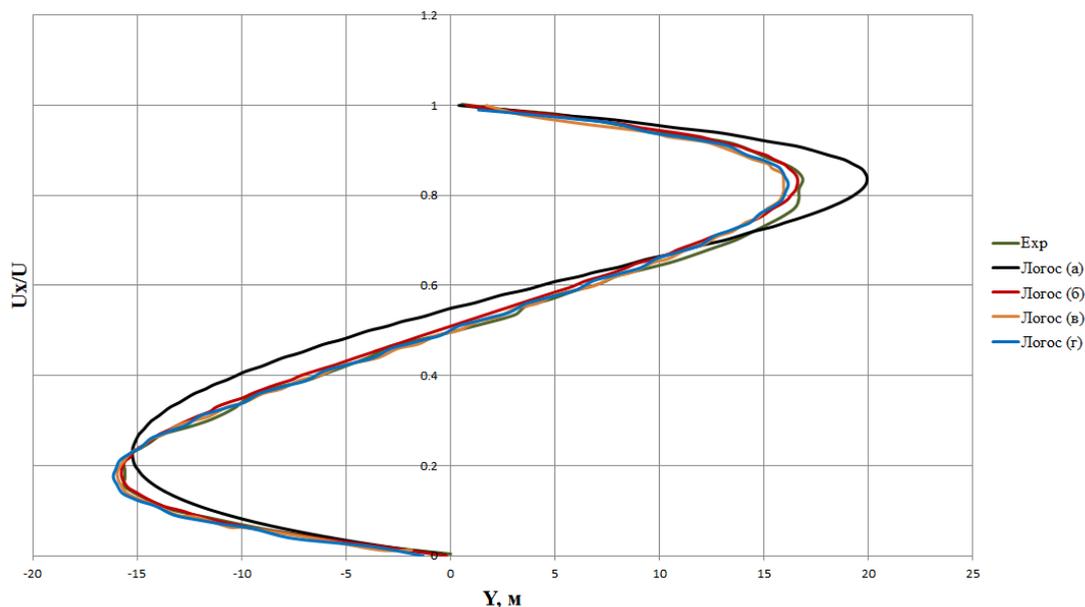


Рис. 18 – График безразмерной скорости

Как видно из графиков, полученные результаты находятся в хорошем согласии с эталонными данными [Wan et al., 2001] в независимости от типа сеточной модели (Рис. 18). Максимальная среднеквадратичная погрешность численного эксперимента наблюдается на грубой структурированной сеточной модели и достигает максимум 20%, минимальная на подробной структурированной сетке - 3%, на неструктурированной сетке – 7%, что свидетельствует о правильности моделирования ламинарных течений на произвольных неструктурированных сетках.

Ламинарное нестационарное обтекание цилиндра

Рассмотрим решение задачи нестационарного обтекания круглого цилиндра потоком вязкого несжимаемого нетеплопроводного газа. Правильным решением данной задачи служит наличие на некотором расстоянии позади цилиндра последовательности вихрей, вращающихся попеременно вправо и влево. Такая последовательность вихрей называется вихревой дорожкой Кармана [Шлихтинг, 1974]. Режим течения выбран таким образом, чтобы получить ламинарный поток с числом Рейнольдса $Re = 250$. Шаг по времени $\Delta t = 0.1 \text{ сек.}$ выбирался исходя из соответствия числу Куранта $CFL = 1$. Для расчетов используются одна блочно-структурированная сетка и две неструктурированные сетки, представленные на рисунке 19.

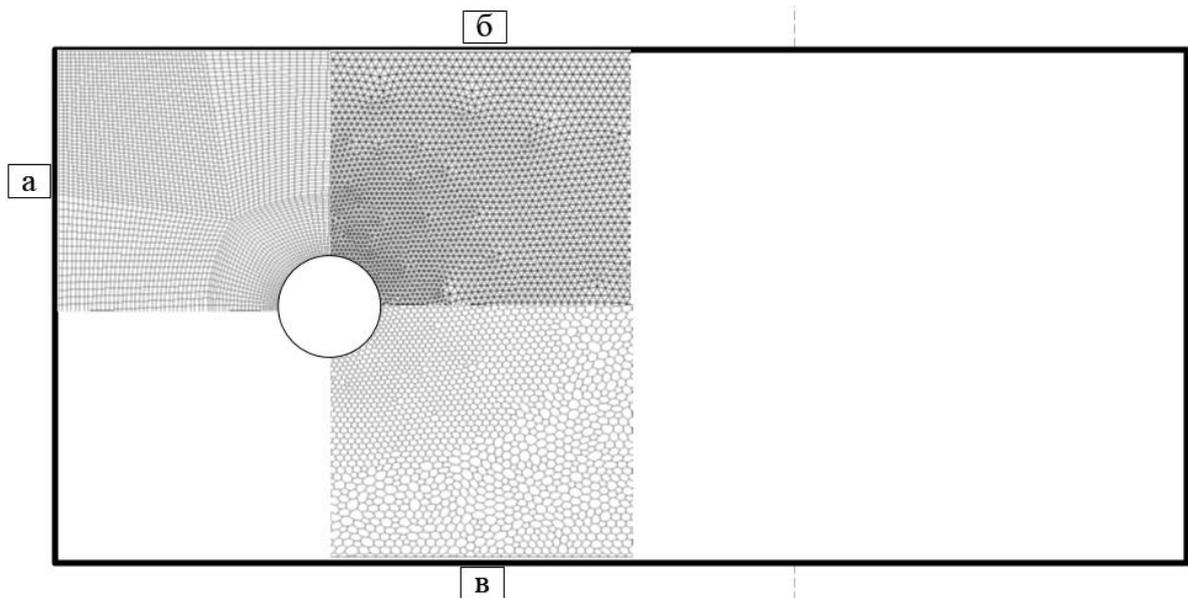


Рис. 19 – Сеточные модели цилиндра: (а) – структурированная, (б) и (в) – неструктурированные

В процессе расчета вычисляются компоненты силы давления и силы трения для вычисления коэффициента лобового сопротивления:

$$C_x = \frac{F_x + S_x}{0.5\rho|\mathbf{u}_\infty|^2 S_c}, \quad (57)$$

где F_x и S_x - сила давления и трения вдоль действующая на цилиндр вдоль оси x , ρ - плотность среды, \mathbf{u}_∞ - вектор скорости на входе и S_c - площадь поверхности цилиндра.

Периодичность нестационарного процесса характеризуется числом Струхалия, определяемого по формуле:

$$St = \frac{D}{T|\mathbf{u}_\infty|}, \quad (58)$$

где T - периодичность колебаний.

В качестве реперных данных, будем использовать величины лобового сопротивления и числа Струхалия, взятые из работы [Шлихтинг, 1974]. При числе Рейнольдса $Re = 250$ значения параметров: $C_x = 1.38$ и $St = 0.19$.

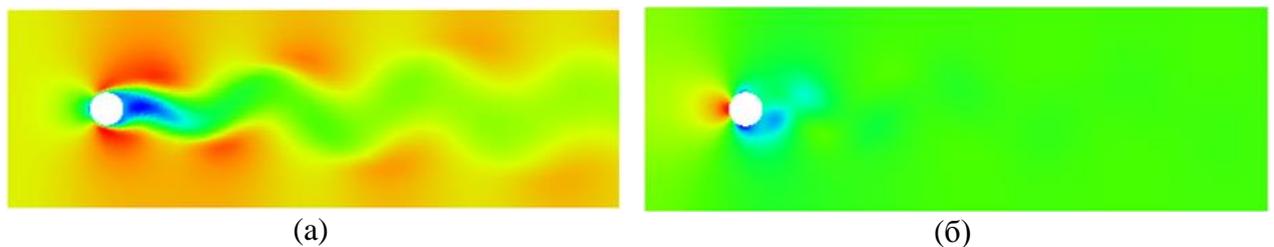


Рис. 20 – Модуль скорости (а) и распределение поля давления (б) на структурированной сетке

Расчеты выполнены в нестационарной постановке с использованием схем первого и второго порядка точности по времени. Результаты расчетов представлены в таблице 2 и 3.

Таблица 2 – Результаты расчетов по схеме первого порядка точности по времени

Сетка	St	Погрешность, %	C_x	Погрешность, %
Логос (а)	0.1818	4.31	1.4389	6.49
Логос (б)	0.1835	3.43	1.4427	7.27
Логос (в)	0.1735	6.81	1.4419	7.0

Таблица 3 – Результаты расчетов по схеме второго порядка точности по времени

Сетка	St	Погрешность, %	C_x	Погрешность, %
Логос (а)	0.1837	2.53	1.4419	4.27
Логос (б)	0.1887	0.7	1.4427	4.54
Логос (в)	0.1852	3.43	1.4389	4.49

Анализ данных показывает, что использование схемы второго порядка точности по времени позволяет увеличить точность расчета. Максимальная погрешность коэффициента лобового сопротивления получена на неструктурированной сетке, при использовании первого порядка дискретизации по времени, и составляет порядка 7%, а минимальная погрешность достигается на структурированной сеточной модели - 4.27%. Стоит отметить, что наблюдается сходимость к более точному результату при повышении порядка дискретизации по времени, что показывает правильность реализации алгоритма при счете нестационарных течений.

Турбулентное обтекание пластины

Рассмотрим стационарное турбулентное течение вязкой несжимаемой жидкости вблизи плоской пластины. Расчетная область и варианты сеточных моделей приведены на рисунке 21. Исходная постановка задачи двумерная, но решение проходит в трехмерной постановке. Для расчетов используются одна блочно-структурированная сетка и две неструктурированные сетки, представленные на рисунке 21.

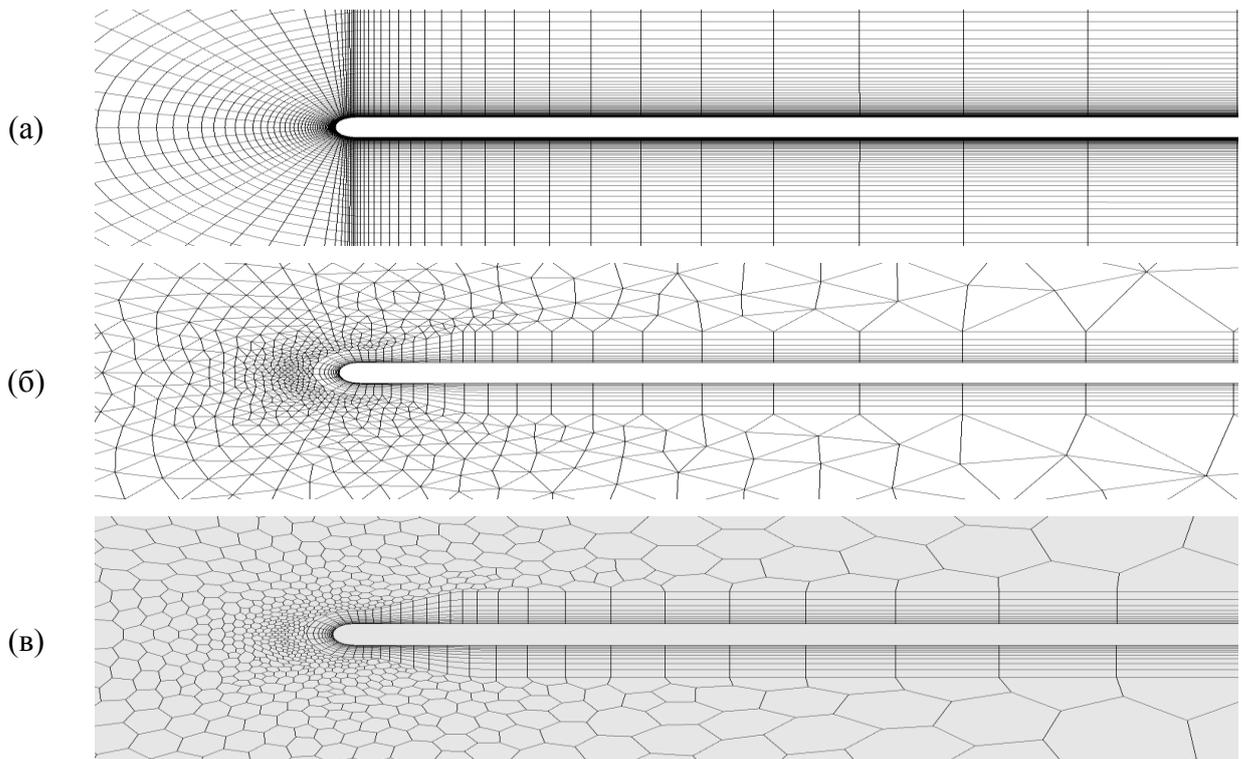


Рис. 21 – Сеточные модели пластины: (а) – структурированная, (б) и (в) – неструктурированные

Расчеты выполнены в стационарной постановке с использованием схем первого порядка точности при дискретизации компонент скорости и параметров турбулентности. Результаты расчетов представлены на рисунке 22.

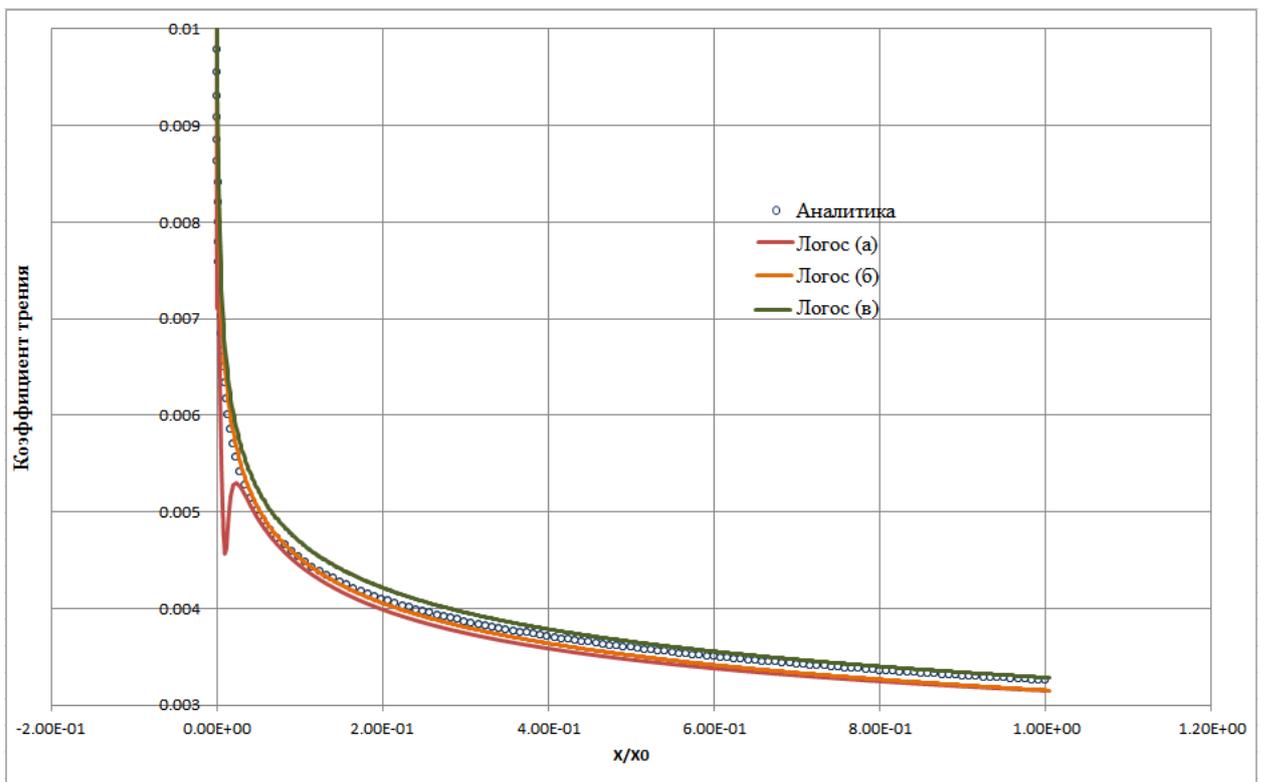


Рис. 22 – Результаты расчета

Анализ графиков показывает хорошее согласие результатов, полученных с использованием трех различных сеточных моделей. При этом более точный результат получен на гексаэдральной сеточной модели. Самая большая погрешность наблюдается при использовании тетраэдральной сеточной модели и не превышает 5%.

Турбулентное течение в канале с обратным подогреваемым уступом

Рассмотрим моделирование течения вязкой несжимаемой жидкости в канале с внезапным расширением в виде обратного уступа [Vogel & Eaton, 1985]. Схема геометрии расчетной области и сеточные модели представлены на рисунке 23. Для расчетов используются блочно-структурированная сетка и две произвольные неструктурированные сетки, состоящие из тетраэдров и полиэдров. Течение газа считается турбулентным при числе Рейнольдса $Re = 21000$.

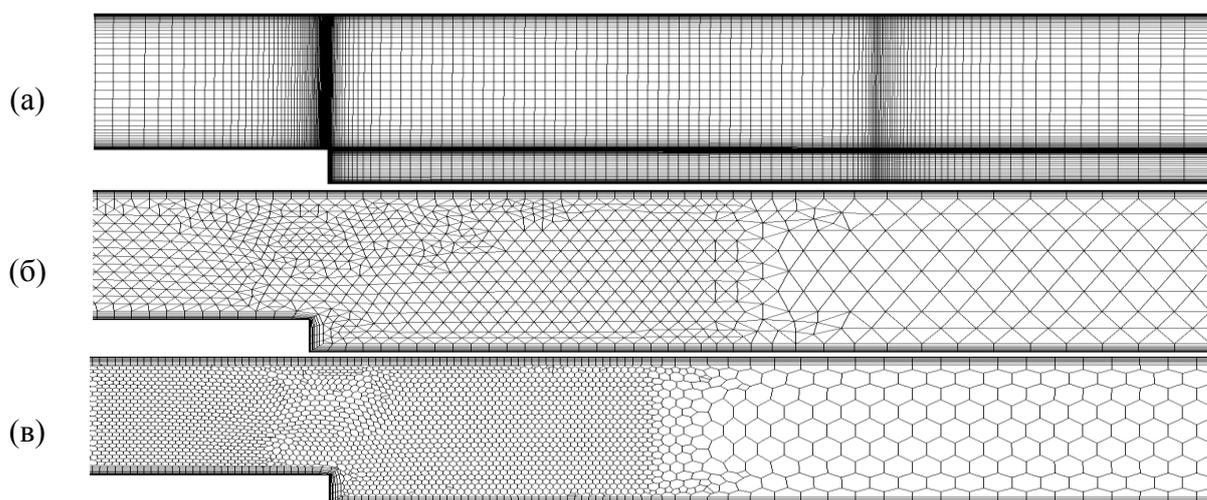


Рис. 23 – Сеточные модели обратного уступа: (а) – структурированная, (б) и (в) - неструктурированные

Расчеты выполнены в стационарной постановке, с использованием схем первого порядка точности при дискретизации компонент скорости, температуры и параметров турбулентности. Результаты расчетов представлены на рисунке 24.

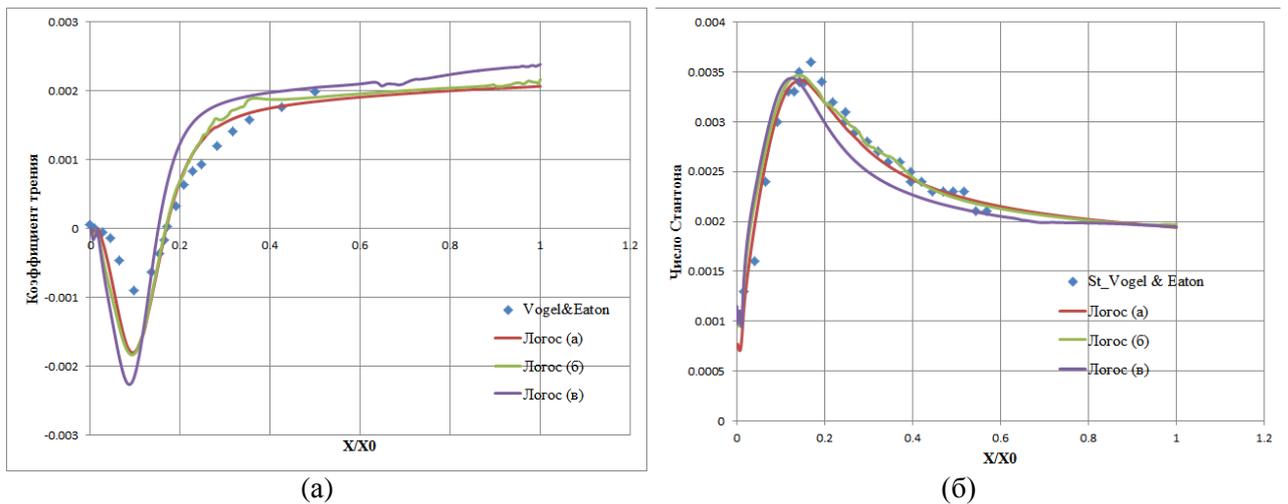


Рис. 24 – Результаты расчета: (а) – коэффициент трения, (б) – число Стантона

Анализ графиков показывает хорошее согласие результатов, полученных с использованием трех различных сеточных моделей. При этом более точный результат получен на гексаэдральной сеточной модели. Самая большая погрешность наблюдается при использовании полиэдральной сеточной модели.

В итоге, по результатам тестирования можно сделать вывод, что верификация показала хорошее согласие с реперными данными (эмпирическими или экспериментальными), что подтверждает правильность реализации алгоритма SIMPLE. Во второй главе диссертации будет исследована эффективность предложенного параллельного алгоритма без заострения внимания на точность получаемых результатов. Напомним, что обширный набор тестовых задач, моделируемых в пакете программ ЛОГОС с использованием алгоритма SIMPLE, представлен в работах [Козелков и др., 2014с; Козелков и др., 2015b].

1.6 Заключение

В главе представлена математическая модель для описания течений вязкой несжимаемой жидкости, которая используется в диссертации. Подробно описана используемая схема дискретизации уравнений, а именно метод контрольных объемов. Описаны основные шаги итерационной процедуры SIMPLE для решения стационарных задач. В параграфе 1.3 представлены особенности эффективной параллельной реализации. Приведены особенности декомпозиции сеточной модели с использованием фиктивных ячеек. Отдельно затронут вопрос хранения и решения параллельных матричных СЛАУ, как этапа, наиболее влияющего на эффективность расчета алгоритма SIMPLE в целом. В параграфе 1.4 приведены результаты верификации на тестовых задачах: течения вязкой несжимаемой жидкости, а именно: течение в каверне, естественная конвекция, нестационарные и турбулентные течения.

По направлению реализации алгоритма SIMPLE диссертантом разработана методика реализации и реализована параллельная версия классического алгоритма SIMPLE на неструктурированных сетках на основе алгебраического многосеточного метода AMG, учитывающая особенности распределенного хранения и решения СЛАУ на тысячах процессорных ядер. Помимо этого лично диссертантом реализована модель памяти с использованием формата LDU для хранения и решения распределенных матриц, позволившая сократить время решения на 10-15%. На этой модели памяти были реализованы итерационные алгоритмы решения СЛАУ симметричным методом Гаусса-Зейделя и сопряженных градиентов. Также автором был предложен и реализован механизм сопряженного теплообмена с использованием интерфейсов, а также реализован турбулентный тепловой пограничный слой. Совместно с коллективом авторов алгоритм SIMPLE был внедрен в ПреПостПроцессор и проведена его верификация на характерных задачах гидродинамики с использованием произвольных неструктурированных сеточных моделей. При определяющем участии диссертанта проходит подготовка и выпуск версий пакета программ ЛОГОС, его тестирование и адаптация к новым классам задач.

ГЛАВА 2. РЕАЛИЗАЦИЯ СОВМЕЩЕННОГО АЛГОРИТМА НА ПРОИЗВОЛЬНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ

2.1 Введение

Как было показано в предыдущей главе одним из универсальных алгоритмов численного моделирования течений вязкой несжимаемой жидкости является алгоритм SIMPLE, основанный на решении системы уравнений Навье-Стокса [Лойцянский, 1973; Ландау и Лившиц, 1988]. Простота численной реализации алгоритма SIMPLE [Patankar, 1980] обеспечила ему доминирующее положение при решении промышленно-ориентированных задач на протяжении более трех десятков лет [Ferziger & Peric, 2002; Быстров и др., 2005; Лашкин и др., 2016b]. Однако, в последнее десятилетие значительный рост вычислительных мощностей привел к необходимости численного моделирования течений в геометрически сложных конструкциях, сеточная модель для которых состоит из сотен миллионов ячеек произвольной формы. Для сокращения календарного времени счета подобного рода задач необходима эффективная параллельная реализация (например, описанная в предыдущей главе), способная задействовать тысячи процессорных ядер. Другим, не менее важным фактором эффективного счета является этап решения СЛАУ, возникающий при дискретизации системы уравнений Навье-Стокса неявными методами. Здесь самым эффективным способом решения СЛАУ является многосеточный метод [Brandt, 1982; Vanek et al., 1996; Волков и др., 2014], уже широко используемый при решении промышленно-ориентированных задач. Однако, большое число настроечных параметров (тип цикла, тип сглаживателя, количество итераций сглаживателя, глобальный уровень и так далее [Волков и др., 2014]) приводит к вопросам его оптимального (эффективного) использования. Подбор оптимальных параметров многосеточного решателя, в большинстве случаев, является индивидуальной задачей, но как показывает вычислительная практика, существуют универсальные настройки для конкретных классов задач, например, несжимаемые или сжимаемые течения. В случае неудовлетворительного подбора настроек многосеточного решателя возможно замедление решения СЛАУ и, соответственно, вычислительного алгоритма до нескольких раз [Лашкин и др., 2016a; Лашкин и др., 2016b].

Эффективная параллельная реализация алгоритма SIMPLE с оптимальными настройками решателя СЛАУ позволяет использовать его для решения промышленно-ориентированных задач различной направленности [Быстров и др., 2005; Лашкин и др., 2016a]. Однако, опыт использования классического алгоритма SIMPLE показывает его

низкую скорость сходимости, в связи с чем были разработаны модификации для устранения данной проблемы [Darwish et al., 2009; Лашкин и др., 2016a].

Одним из недостатков алгоритма SIMPLE, влияющих на скорость сходимости, является последовательное нахождение трех компонент скорости и поправки давления. При этом связь скорости и давления осуществляется полу-неявно, что сказывается на низких коэффициентах релаксации (для скорости $\alpha_u = 0.7$, для давления $\alpha_p = 0.3$). Ситуация может усугубиться при решении задач на произвольных неструктурированных сетках, при использовании которых необходимо применять более низкие коэффициенты релаксации ($\alpha_p = 0.05$) [Тарасова и др., 2015], что существенно понижает скорость сходимости при решении промышленно-ориентированных задач. Вопрос низкой скорости сходимости становится еще более актуальным в областях с высоким сеточным разрешением, в которых шаг («псевдо-шаг») по времени зависит от характерного размера ячейки, т.е. чем подробнее сеточная модель, тем больше итераций необходимо сделать до сходимости [Darwish et al., 2009]. Для задач большой размерности это приводит к нерациональному использованию вычислительных ресурсов. Отметим, что данная проблема характерна для всех численных алгоритмов, использующих процедуры релаксации.

Повышение скорости сходимости алгоритма SIMPLE сводится к разработке модификаций, наиболее точно подстраивающих поля скорости и давления. Более «точная» связь обеспечит повышение коэффициентов релаксации, и, как следствие, увеличение скорости сходимости. Одной из наиболее успешных модификаций является полностью неявный совмещенный (coupled) алгоритм (далее алгоритм COUPLED) решения скоростей и давления [Darwish et al., 2009; Shterev & Stefanov, 2010; Chen & Przekwas 2010; Mangani & Bianchini, 2010; Лашкин и др., 2016a]. Неявное совмещение осуществляется за счет использования матриц блочного вида. В этом случае слагаемые градиента давления и массового потока в уравнениях сохранения количества движения и неразрывности дискретизируются (напомним, что в разделенном алгоритме SIMPLE эти слагаемые вычисляются только явно). Получаемые таким образом неявные коэффициенты суммируются в одну общую диагонально-доминантную матрицу блочного вида, решаемую с использованием многосеточных методов [Brandt, 1982]. Основываясь на выводах работ [Darwish et al., 2009;], реализация совмещенного алгоритма выглядит весьма перспективно и лишает его недостатков, присущих SIMPLE алгоритму.

В немногочисленных работах, посвященных разработке и сравнению совмещенного и SIMPLE алгоритмов, показывается впечатляющая скорость сходимости

совмещенного решателя и почти одинаковое время расчета одного контрольного объема, не зависящее от размера сетки, что для разделенного решателя SIMPLE недостижимо [Darwish et al., 2009]. Преимущество совмещенного решателя показано на простых ламинарных тестовых задачах, как правило, двумерных. При решении же промышленно-ориентированных задач, где определяющим фактором является турбулентность, расчет которой проводится независимо (отщепляется) от скорости и давления, преимущество совмещенного решателя нивелируется, и календарное время счета становится сопоставимым с разделенным решателем [Mangani & Bianchini, 2010]. Ситуация может значительно усугубиться при расчете сжимаемых течений, моделирование которых требует понижения коэффициентов релаксации, в том числе и для совмещенного алгоритма. В итоге может оказаться, что решение промышленно-ориентированных задач с использованием совмещенного алгоритма крайне неэффективно. В связи с этим вопрос целесообразности применения совмещенного алгоритма при решении турбулентных, сжимаемых течений в сложных геометрических конструкциях остается открытым и практически неизученным.

Данная глава посвящена изучению вопроса эффективной параллельной реализации совмещенного алгоритма COUPLED на произвольных неструктурированных сетках. В параграфе 2.2 представлено исследование эффективности параллельного алгоритма SIMPLE на произвольных неструктурированных сетках. В параграфе 2.3 приведено описание совмещенного алгоритма COUPLED для численного решения уравнений Навье-Стокса на неструктурированных сетках с учетом поправки Рхи-Чоу и неортогональной коррекции. В параграфе 2.4 представлены особенности внедрения совмещенного алгоритма в общую структуру пакета программ ЛОГОС. Результаты верификации и тестирования совмещенного алгоритма приведены в параграфе 2.5. В параграфе 2.6 приведены исследования эффективности совмещенного алгоритма по сравнению с алгоритмом SIMPLE. В заключении суммированы результаты к главе.

2.2 Исследование эффективности алгоритма SIMPLE

Как показано в параграфе 1.3 при описании параллельной версии алгоритма SIMPLE межпроцессные обмены происходят практически на каждом шаге алгоритма, но основное их количество (порядка 80%) приходится на этап решения СЛАУ. Этот факт можно подтвердить простыми вычислениями. Общее количество межпроцессных обменов только для алгоритма SIMPLE равно одиннадцати (четыре для обмена градиентами скорости и давления, один для градиента поправки давления и по три для промежуточной \mathbf{u}^* и истинной скорости \mathbf{u}). Для решателя СЛАУ эта цифра намного больше и, например, если использовать три итерации многосеточного решателя с построением десяти грубых уровней и делать три итерации на каждом уровне, то получим сто восемьдесят межпроцессных обменов при использовании V-цикла. Хотя, это достаточно грубая оценка, но она ярко показывает, что важным фактором эффективной реализации параллельного алгоритма SIMPLE является этап решения СЛАУ, и именно этот ключевой этап требует минимизации количества межпроцессных обменов внутри решателя, что в итоге повысит эффективность алгоритма в целом.

Оптимальные настройки многосеточного решателя СЛАУ

Эффективная реализация многосеточного решателя AMG в большей степени зависит от настроек, изменяя которые можно минимизировать количество внутренних итераций многосеточного решателя. Понятно, что чем меньше внутренних итераций, тем меньше межпроцессных обменов, и тем меньше время расчета и, следовательно, выше эффективность. Основными настройками, влияющими на количество внутренних итераций многосеточного решателя, являются:

1. Тип используемого цикла (V, W или F-цикл);
2. Количество итераций сглаживателя на каждом уровне AMG;
3. Количество ячеек для огрубления (две, четыре, восемь).

Для обоснования выбора оптимальных настроек многосеточного решателя СЛАУ, обеспечивающих минимальное количество итераций, приведем результаты численных экспериментов в следующих задачах, используемых для верификации алгоритма SIMPLE: течение в квадратной каверне с движущейся верхней стенкой (Задача 1) [Ghia et al., 1982], турбулентное обтекание плоской пластины (Задача 2) [Лойцянский, 1973] и течение в канале с обратным подогреваемым уступом (Задача 3) [Vogel & Eaton, 1985]. Все задачи согласно исходной постановке - двумерные, но решались в трехмерной постановке. Количество ячеек в задачах, соответственно, равнялось: $1.0 \cdot 10^3$, $3.4 \cdot 10^3$,

$8.6 \cdot 10^3$. В качестве сглаживателя применялся симметричный алгоритм Гаусса–Зейделя, как наименее затратный по числу машинных операций на одной итерации и являющийся признанным сглаживающим оператором [Бахвалов и др., 2002; Уоткинс, 2009]. Рекурсивное огрубление производилось до тех пор, пока на самом грубом уровне оставалось максимум 5 счетных ячеек. Задачи решались в последовательном режиме (на одном процессе), и цель данного численного эксперимента состояла только в определении оптимальных настроек многосеточного решателя. По этой причине все задачи содержали «небольшое» количество ячеек и могли достаточно быстро решаться на современном персональном компьютере средней производительности в течение нескольких минут. Все полученные результаты по каждой изменяемой настройке сведены в три таблицы.

Таблица 4 содержит полное количество внутренних итераций для каждого из V, W и F циклов, необходимых сглаживателю в многосеточном решателе до полной сходимости задачи, реализуемой согласно алгоритму SIMPLE. Также в таблице приведено общее время счета в стационарной постановке до сходимости по массе порядка 10^{-6} кг. (55).

Таблица 4 – Результаты расчетов с циклами V, W и F

Задача	Полное количество итераций			Время счета, с		
	V-цикл	W-цикл	F-цикл	V-цикл	W-цикл	F-цикл
Задача 1	15633	492093	45090	8.9	27.4	12.3
Задача 2	48384	1034775	107730	17.4	48.5	20.0
Задача 3	61416	1354076	198378	28.3	89.2	38.8

Из таблицы однозначно видно, что применение V-цикла в многосеточном решателе СЛАУ существенно сокращает общее количество итераций и время решения задач. По сравнению с V-циклом количество итераций для F-цикла выше в 2÷3 раза, а для W-цикла - в 20÷30 раз. Общее время счета также минимально при использовании V-цикла.

Далее будем рассматривать только V-цикл. Общее количество V-циклов в решении задачи зависит от количества итераций сглаживателя на каждом уровне многосеточного метода. Чем больше их число, тем меньше V-циклов потребуется для полного решения. Однако, с увеличением количества итераций сглаживателя многосеточный решатель «вырождается» в решатель Гаусса–Зейделя, что приводит к естественному замедлению счета. В случае высокопараллельных вычислений замедление становится более существенным, так как имеет место увеличение количества межпроцессных обменов. Таким образом, необходимо определить оптимальное количество итераций сглаживателя на каждом грубом уровне для получения минимального времени счета. Таблица 5 содержит данные по влиянию изменения количества итераций сглаживателя на каждом уровне на время решения представленных задач.

Таблица 5 – Зависимость числа V-циклов от количества итераций сглаживателя на иерархических уровнях многосеточного метода

Задача	Количество итераций сглаживателя						
	1	2	3	4	5	6	8
	Время счета, с / полное число V-циклов						
Задача 1	10,7 / 1553	8,6 / 769	8,8 / 579	9,2 / 501	9,9 / 472	11,2 / 470	13,1 / 441
Задача 2	28,9 / 9773	25,6 / 5104	22,2 / 3270	22,3 / 2431	22,6 / 2056	23,3 / 1807	27,5 / 1611
Задача 3	27,1 / 10120	24,9 / 5011	24,4 / 3448	24,7 / 2796	25,4 / 2477	26,8 / 2225	30,1 / 1956

Анализ содержимого данной таблицы не дает однозначного ответа на вопрос о принципе выбора того или иного количества итераций сглаживателя на каждом уровне. Применение двух или трех итераций обеспечивает минимальное физическое время счета хотя бы одной задачи. Использование одной и более четырех итераций сглаживателя приводит к замедлению счета, и при их числе, равном шести, в первой задаче замедление достигает 30%. Чуть меньшее замедление, порядка 20%, наблюдается в Задачах 2 и 3, но уже на восьми итерациях сглаживателя. Понятно, что с ростом числа итераций сглаживателя время решения будет увеличиваться, и задание количества итераций сглаживателя в общем случае индивидуально для каждой задачи. Например, для Задачи 2 можно взять как три, так и четыре или пять итераций сглаживателя.

Дальнейшее ускорение вычислений многосеточным методом связано с выбором степени огрубления (оптимального количества ячеек, образующих грубую ячейку), влияющей на число грубых уровней и суммарное число грубых ячеек. Чем выше данный параметр, тем меньше уровней и грубых ячеек генерируется и наоборот. Задача состоит в определении оптимальной степени огрубления, так как чем она выше, тем меньше грубых ячеек и их уровней нужно создавать. Следовательно, требуется меньшее время на построение грубых уровней и выполнение одной итерации AMG (то есть одного V-цикла), но тем больше итераций сглаживателя и итераций AMG необходимо для решения задачи, так как при уменьшении числа грубых уровней многосеточный решатель постепенно вырождается в обычный решатель Гаусса–Зейделя. Таблица 6 содержит данные о влиянии количества ячеек для огрубления на общее число итераций сглаживателя и физическое время счета задачи.

Таблица 6 – Результаты расчетов при различном количестве ячеек для огрубления

Задача	Количество ячеек для огрубления			Количество ячеек для огрубления		
	2	4	8	2	4	8
	Число итераций сглаживателя			Время, с		
Задача 1	13842	13296	14430	9,2	8,0	8,6
Задача 2	41472	41832	48656	24,7	21,3	24,8
Задача 3	51052	50110	51370	30,7	25,3	25,7

Необходимо отметить, что при увеличении количества ячеек для огрубления общее количество уровней уменьшается, и, как показано в таблице 6, количество итераций и время счета задачи начинают расти при использовании 8 ячеек. В данных тестовых случаях оптимальным вариантом будет огрубление по четырем ячейкам для генерации следующих грубых уровней.

Общий анализ полученных результатов свидетельствует, что для оптимальной работы многосеточного решателя в настройках необходимо: задавать V-цикл; три итерации сглаживателя на каждом уровне; огрублять по четырем ячейкам. Опыт решения производственных задач позволяет заключить, что данные настройки не универсальны (например, при решении сжимаемых задач целесообразней прибегать к F-циклу по причине его большей устойчивости, что по умолчанию и делается в пакете программ ЛОГОС), и для некоторых задач более оптимальными могут быть другие типы циклов и иное количество ячеек для огрубления. Стоит отметить, что наиболее устойчивое решение СЛАУ обеспечивается при F-цикле, трех итерациях сглаживателя и двух ячейках для огрубления, при этом, как показано выше, время решения СЛАУ может увеличиться до 3 раз. Данные настройки, совместно с решением системы линейных уравнений до относительной точности порядка 0,1 (относительная точность - отношение текущей невязки к начальной) и ограничением максимального числа итераций до 30 (в случае недостижения заданной точности выход из решателя СЛАУ осуществляется после 30-й итерации) [СВ2, СВ3], позволяют получать минимальное количество внутренних циклов и, соответственно, минимальное время решения большинства задач гидродинамики с использованием алгоритма SIMPLE. Анализ применения различных методов ускорения газодинамических расчетов детально обсуждается в [Волков и др. 2013].

Способы оценки эффективности

В данной работе эффективность работы расчетного алгоритма SIMPLE измерялась двумя различными способами - прямо и косвенно. Прямая (реальная) оценка эффективности основывается на сравнении времени расчета задачи на одном процессоре

(T_1) со временем расчета этой же задачи на нескольких процессорах. Так, ускорение при параллельной реализации на p процессорах составляет:

$$S_p = T_1/T_p. \quad (59)$$

Для оценки масштабируемости параллельного алгоритма используется понятие расчетной эффективности:

$$E_p = (S_p/p) \cdot 100\%. \quad (60)$$

В настоящее время существует большое разнообразие программ косвенной (программной) оценки эффективности параллельной реализации алгоритмов (например, [Новаев и др., 2011]) на нескольких процессорах без проведения экспериментов на одном процессоре. Здесь с этой целью прибегали к программному средству STK (Statistics Tool Kit) [Новаев и др., 2011], позволяющему оценить эффективность параллельных алгоритмов, которые используют MPI-интерфейс передачи сообщений [Shir et al., 1996] и OpenMP-интерфейс [Антонов, 2009] многопоточного распараллеливания на вычислительных узлах с общей памятью. Программа STK делает возможным проведение мониторинга и анализа эффективности использования ресурсов многопроцессорных ЭВМ. Помимо этого в STK имеются средства для определения причин неэффективной работы как программы в целом, так и отдельных ее фрагментов.

В STK эффективность выполнения задачи подсчитывается как отношение времени вычислений ко всему времени счета. Для каждого MPI-процесса параллельной задачи измеряется время выполнения вызовов функций MPI и ввода–вывода ($T_{\text{обмена}}$), а также общее время ($T_{\text{общее}}$) работы программы. Исходя из этих данных, можно находить показатель эффективности функционирования параллельной программы на отдельном MPI-процессе по формуле:

$$E_i^{STK} = \frac{T_a}{T_a + T_{\text{обмена}}} \cdot 100\%, \quad (61)$$

где $T_a = T_{\text{общее}} - T_{\text{обмена}}$ - время чисто арифметической работы на процессе с i -м номером. Для оценки эффективности выполнения параллельной программы определяется средняя эффективность выполнения всех MPI-процессов:

$$E_{avr}^{STK} = \frac{\sum_{i=1}^N T_a}{\sum_{i=1}^N (T_a + T_{\text{обмена}})} \cdot 100\%, \quad (62)$$

где N - количество процессов, E_{avr}^{STK} - показатель средней программной эффективности выполнения параллельной задачи.

В эффективном параллельном алгоритме при условии равномерной декомпозиции (количество ячеек на каждом MPI-процессе одинаково) все MPI-процессы должны затрачивать одно и то же время на решение своего фрагмента задачи. Однако в реальных условиях это труднодостижимо из-за наличия ввода-вывода данных, сопряженного теплообмена и т.п. Поэтому для каждого из MPI-процессов устанавливается свой показатель эффективности E_i^{STK} , и среди них выделяются минимальный (E_{min}^{STK}), максимальный (E_{max}^{STK}) и средний (E_{ave}^{STK}) показатели программной эффективности. Вместе они дают представление о дисбалансе вычислений параллельной задачи. Близость E_{avr}^{STK} к E_{max}^{STK} свидетельствует о слабом дисбалансе (небольшое число MPI-процессов участвует в вычислениях меньше, чем остальные), близость E_{avr}^{STK} к E_{min}^{STK} при $E_{avr}^{STK} \ll E_{max}^{STK}$ говорит о сильном дисбалансе (на небольшое число MPI-процессов приходится существенно большая часть вычислений, чем на остальные).

Численные эксперименты по оценке эффективности

Проведение численных экспериментов направлено в первую очередь на определение эффективности параллельной реализации алгоритма SIMPLE. Поэтому размерность задач выбиралась достаточно большой, чтобы имелась возможность распараллелить данные задачи на сотни процессов. Настройки многосеточного решателя выбирались исходя из численных экспериментов, приведенных выше, справедливых также и при работе в параллельном режиме. Декомпозиция представленных тестовых задач включала разное число процессов, причем количество процессов, участвующих в счете, увеличивалось до «насыщения», то есть до момента, когда время счета становилось большим по сравнению с предыдущим значением. Это наглядно показывало границу перехода к неэффективным вычислениям, и нецелесообразному дальнейшему увеличению числа процессов.

Для того чтобы оценить эффективность на разном числе процессов, были выбраны области из $6.7 \cdot 10^5$, $4.39 \cdot 10^6$, $1.439 \cdot 10^7$ ячеек. Выбор их количества обуславливался физикой течения. Задачи 1 и 3 - это внутренние течения, которые широко распространены практически во всех отраслях промышленности (автомобильной, атомной и др.). Задача 2 - внешнее обтекание тела - типичная задача автомобильной и авиационной промышленности.

Для представленных задач сравнение с экспериментальными или аналитическими данными в данной работе не приводилось, но результаты моделирования достоверны. Подробную информацию о точности представления различных течений с помощью пакета программ ЛОГОС можно найти в работах [СЖ1, СЖ2].

Задача 1 - Турбулентное течение жидкости в трубе круглого сечения

Рассмотрим стационарное изотермическое турбулентное течение вязкой несжимаемой жидкости в прямолинейной круглой трубе с числом Рейнольдса $Re = 10^5$. Схема расчетной области представлена на рисунке 25. Для моделирования использовалась блочно-структурированная сетка с общим числом ячеек $6.7 \cdot 10^5$.

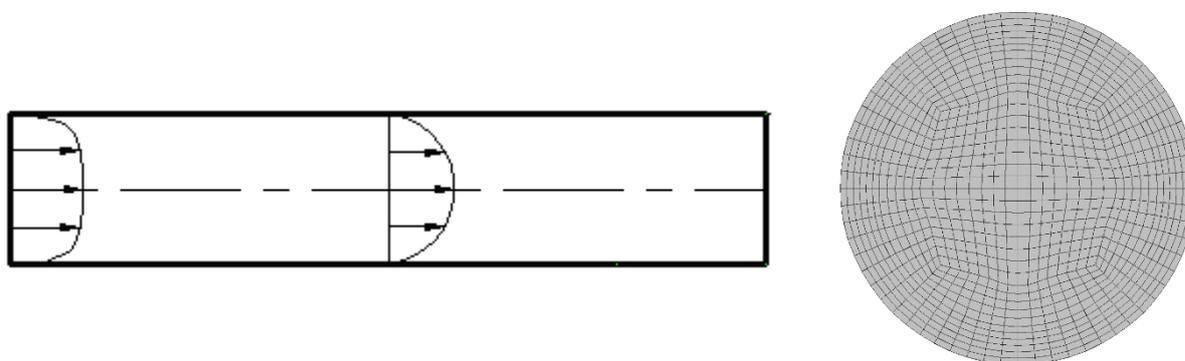


Рис. 25 - Геометрия расчетной области и сеточная модель

Сравнить время решения задачи на различном количестве MPI-процессов с учетом оценок ускорения, найденным по двум методикам, можно с помощью данных в таблице 7.

Таблица 7 - Информация для оценки эффективности параллельной реализации Задачи 1

Количество MPI-процессов	Количество ячеек на один MPI-процесс	Время, с	S_p	$E_p, \%$	$E_{\min}^{STK}, \%$	$E_{\max}^{STK}, \%$	$E_{avr}^{STK}, \%$
1	670000	916,1	1,0	100,0	100,0	100,0	100,0
2	335000	503,2	1,8	91,0	97,2	97,2	97,2
4	167000	252,8	3,6	90,5	95,4	95,9	95,6
8	83750	131,5	7,0	87,1	91,8	92,2	91,9
16	41875	68,6	13,4	83,5	87,9	88,4	88,1
32	20938	44,5	20,6	64,3	67,8	68,1	67,9
64	10469	44,7	20,5	32,0	33,8	33,9	33,8
128	5235	49,7	18,4	14,4	19,9	21,4	20,7

Идеальное ускорение недостижимо в реальных расчетах из-за выполнения необходимых межпроцессных обменов, число которых нелинейно увеличивается с ростом числа расчетных MPI-процессов, из-за роста числа фиктивных ячеек, расчет в которых отчасти дублируется (например, для подобласти из 10000 ячеек, слой фиктивных ячеек (размер границы) составляет $\sim 30\%$ от числа всех ячеек подобласти одного MPI-процесса,

что в значительной степени предопределяет разницу между реальной эффективностью и эффективностью по STK в зависимости от уменьшения размера подобластей, так как по STK вычисления в фиктивных и нефиктивных ячейках неотличимы). В результате это приводит к замедлению расчета задачи в целом. Нахождение баланса между ускорением и эффективностью использования вычислительных ресурсов – это задача трудоемкая, и зачастую требующая индивидуального подхода к каждой конкретной ситуации.

В Задаче 1 анализ результатов показывает, что, например, реальная эффективность E_p равняется 64,3% и обеспечивается при декомпозиции на 32 MPI-процесса, при этом средняя программная эффективность E_{avr}^{STK} составляет 67,9%. Дальнейшее увеличение числа процессоров приводит к заметному снижению эффективности. Так, при декомпозиции на 64 процесса реальная эффективность E_p уже 32%, а программная $E_{avr}^{STK} = 33,8\%$. Отличия связаны с обработкой фиктивных ячеек, увеличивающей вычислительную нагрузку на процессоры. При отсутствии фиктивных ячеек показатель программной эффективности был бы ниже. Таким образом, в данной задаче минимальное время счета достигается при количестве ячеек порядка $1 \cdot 10^4 \div 2 \cdot 10^4$ в каждом MPI-процессе, при этом реальная эффективность на 64 MPI-процессах уменьшается в два раза по сравнению с 32 MPI-процессами, что свидетельствует о лучшем балансе вычислений при количестве ячеек, равном $2 \cdot 10^4$. В дополнение можно отметить отсутствие дисбаланса ($E_{min}^{STK} \approx E_{max}^{STK}$), свидетельствующее о равномерности распределения расчетной нагрузки на все MPI-процессы.

Задача 2 - Турбулентное обтекание потоком воздуха препятствия «Ahmed body»

В этом численном эксперименте решим задачу турбулентного обтекания потоком воздуха препятствия вида «Ahmed body» [Ahmed et al., 1984]. Число Рейнольдса порядка $Re = 10^6$, а параметры воздуха посчитаем стандартными.

Модель расчетной области представлена на рисунке 26. Для расчетов используется неструктурированная сетка из усеченных гексаэдров. Общее число ячеек составляет $4,39 \cdot 10^6$. Постановка задачи и сеточная область полностью трехмерные.

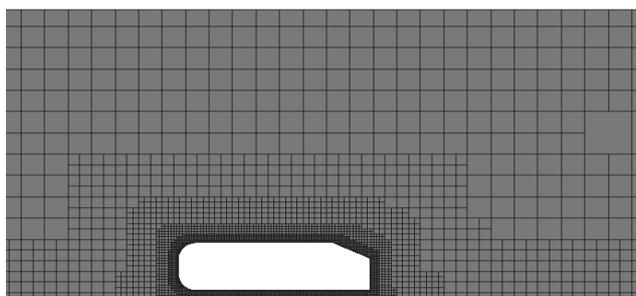


Рис. 26 - Сеточная модель вокруг препятствия «Ahmed body»

Данные о времени решения задачи на различном количестве MPI-процессов с приведением оценок ускорения по двум методикам приведены в таблице 8.

Таблица 8 - Информация для оценки эффективности параллельной реализации Задачи 2

Количество MPI-процессов	Количество ячеек на один MPI-процесс	Время, с	S_p	$E_p, \%$	$E_{\min}^{STK}, \%$	$E_{\max}^{STK}, \%$	$E_{avr}^{STK}, \%$
1	4392680	37063,3	1,0	100,0	100,0	100,0	100,0
2	2196340	19929,4	2,0	97,9	97,5	97,8	97,7
4	1098170	10360,6	3,8	94,0	95,8	97,5	96,7
8	549085	5636,6	7,2	90,2	93,0	95,9	94,7
16	274542	2388,0	13,8	86,2	90,1	94,5	92,3
32	173271	1271,4	27,0	84,5	89,1	91,5	90,3
64	68635	666,5	48,4	75,6	82,4	89,0	85,6
128	34317	402,5	92,1	71,9	75,3	81,7	78,0
256	17158	320,0	115,8	45,3	49,3	53,3	51,3
384	11439	288,6	128,4	33,4	38,3	39,5	38,9
512	8579	260,0	142,7	27,9	30,4	32,8	31,6
768	5720	301,6	122,9	16,0	19,9	23,8	21,9

Как видно из таблицы, минимальное время счета достигается при декомпозиции на 512 MPI-процессов, при этом реальная эффективность достаточно низкая и находится на уровне $E_p = 27,9\%$. Программная эффективность в данном случае составляет $E_{avr}^{STK} = 31,6\%$. Таким образом, в Задаче 2 оптимальное количество ячеек, рассчитываемое каждым MPI-процессом, находится в пределах от $8 \cdot 10^3$ до $1,1 \cdot 10^4$, что примерно соответствует результатам предыдущего эксперимента.

Задача 3 - Течение газа в канале за обратным уступом

Исследуем стационарное изотермическое турбулентное течение газа в канале с обратным уступом, соответствующее числу Рейнольдса $Re = 21000$ [Vogel & Eaton, 1985]. Для расчетов используем блочно-структурированную трехмерную сетку (Рис. 27) с общим числом ячеек $1.439 \cdot 10^7$. Исходную постановку задачи возьмем двумерную.

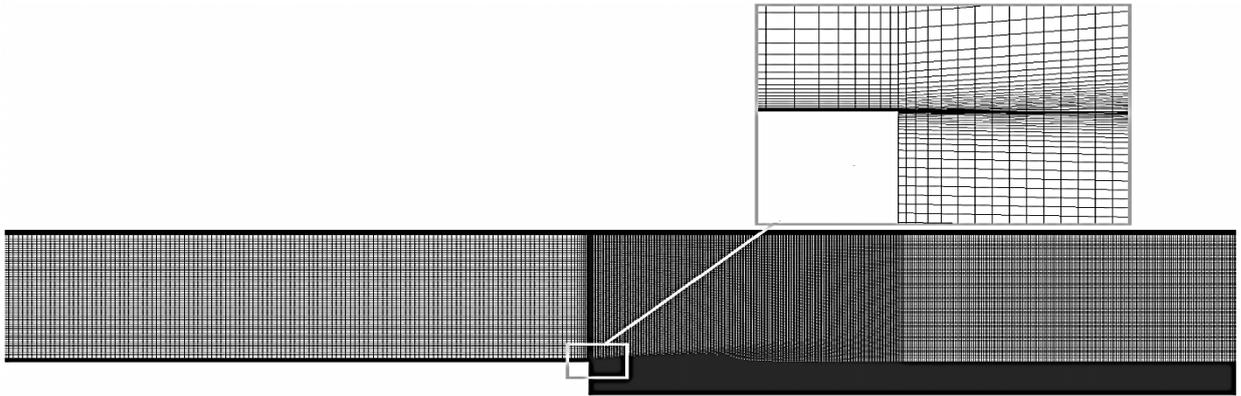


Рис. 27 - Сеточная модель уступа

Для сравнения времени решения задачи на различном количестве MPI-процессов данные приведены в таблице 9. Они основаны на измерении программной эффективности при декомпозиции от 8 процессоров. Это связано с невозможностью посчитать данную задачу на одном процессе ввиду ограничения объема доступной оперативной памяти. В Задаче 3 ускорение S_p воспроизводится из E_{avr}^{STK} и является приближенной величиной с погрешностью $\sim 12\%$, если судить по результатам из таблицы 9.

Таблица 9 - Информация для оценки эффективности параллельной реализации Задачи 3

Количество процессоров	Количество ячеек на один MPI-процесс	Время, с	S_p	E_{min}^{STK} , %	E_{max}^{STK} , %	E_{avr}^{STK} , %
8	1799085	287523,6	7,6	92,7	98,3	95,1
16	899542	151600,5	14,9	90,8	98,0	93,0
32	449771	77656,8	28,1	85,4	92,0	87,7
64	224885	45839,4	52,6	79,7	89,7	82,2
128	112442	26081,5	104,4	78,1	85,3	81,5
256	56221	15545,0	175,1	65,6	71,6	68,4
512	28110	9580,1	284,1	53,2	58,1	55,5
1024	14055	8263,2	329,3	30,2	33,7	32,2
1280	11244	8461,7	313,7	23,2	25,7	24,5
1536	9370	9263,2	282,6	17,3	19,7	18,4

Реальную эффективность невозможно измерить, поэтому единственным средством ее оценки является программа STK. Данные, полученные при помощи такого способа, как показали расчеты в предыдущих задачах, коррелируют с расчетной эффективностью.

Как видно из таблиц, минимальному времени счета в каждом MPI-процессе отвечает ≈ 14000 ячеек. При этом величины реальной и программной эффективности находятся на уровне $E_p \approx 30\%$ и $E_{avr}^{STK} \approx 35\%$ и превышают 50% при числе ячеек более $2 \cdot 10^4$ в каждом MPI-процессе. Разница в показателях эффективности связана в первую очередь с наличием фиктивных ячеек и возрастающей нагрузкой на каждый MPI-процесс

при увеличении числа процессорных ядер. Также можно с уверенностью отметить, что в каждом численном эксперименте отсутствует дисбаланс вычислений.

Таким образом, проведено комплексное исследование реализованного алгоритма SIMPLE на произвольных неструктурированных сетках. Исследование показало, что алгоритм SIMPLE обладает хорошими показателями по точности, эффективности и сбалансированности вычислений, что позволяет его использовать при моделировании широкого круга задач на тысячах процессорных ядер.

Как было отмечено выше, скорость сходимости алгоритма SIMPLE вызывает массу вопросов, и попытки ее увеличения предпринимаются по сей день. Актуальность данного вопроса повышается при реализации численных алгоритмов моделирования многофазных течений, в которых необходимо согласовывать поля скоростей отдельных фаз, что практически приводит к перемножению коэффициентов релаксации и как следствие значительному замедлению скорости сходимости подобных задач. Поэтому, модифицированная версия алгоритма SIMPLE, направленная на увеличение скорости сходимости, наряду с параллельной эффективностью, позволит значительно сократить времена счета, что и будет рассмотрено в следующих параграфах диссертации.

2.3 Описание совмещенного алгоритма

В этом параграфе подробно остановимся на шагах реализации совмещенного итерационного алгоритма COUPLED для решения системы уравнений Навье-Стокса (1), осредненной по Рейнольдсу [Ландау и Лившиц, 1988] и записанной в полу-дивергентной форме, для моделирования сжимаемых изотермических нестационарных течений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})}_{\text{поток массы}} = \underbrace{b^p}_{\text{источник массы}}, \\ \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \mathbf{u} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u})}_{\text{конвективное слагаемое}} - \underbrace{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}}_{\text{диффузионное слагаемое}} + \underbrace{\nabla p}_{\text{градиент давления}} = \underbrace{\mathbf{b}^u}_{\text{источник импульса}}, \end{array} \right. \quad (63)$$

нестационарное слагаемое, скорость изменения массы

нестационарное слагаемое

где b^p и \mathbf{b}^u - объемные источники массы и импульса соответственно.

Данная дифференциальная система уравнений может использоваться для решения как несжимаемых, так и сжимаемых течений с произвольными числами Маха. Для простоты изложения уравнение энергии опущено, так как его решение происходит отдельно от уравнений движения и неразрывности и не оказывает никакого влияния на систему в случае несжимаемых течений.

При описании алгоритма COUPLED будем опираться на работу [Darwish et al., 2009]. Дополнительно обратим внимание на вывод поправки Рхи-Чоу конкретно для данного алгоритма, и использование среднегармонического усреднения при вычислении коэффициентов данной поправки. Анализ литературы показал, что рассмотрение данных вопросов не затрагивается, хотя они являются достаточно важными. Сразу оговоримся, что все наработки по эффективной параллельной реализации, в том числе и настройки решателей СЛАУ, также применимы и для данного алгоритма.

Воспользовавшись методом контрольных объемов [Versteeg & Malalasekera, 1995], получим дискретный аналог:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\rho_P^n - \rho_P^o}{\Delta t} + \sum_{f=face(P)} \rho_f (\mathbf{u}_f^n \cdot \mathbf{S}_f) - q^p V = 0, \\ \frac{\rho_P^n \mathbf{u}_P^n - \rho_P^o \mathbf{u}_P^o}{\Delta t} + \sum_{f=face(P)} \rho_f (\mathbf{u}_f^n \otimes \mathbf{u}_f^n) \cdot \mathbf{S}_f - \mathbf{u}_f^n \sum_{f=face(P)} \rho_f \mathbf{u}_f^o \cdot \mathbf{S}_f \\ + \nabla p_P^n V_P - \sum_{f=face(P)} \boldsymbol{\tau}_f^n \cdot \mathbf{S}_f - \mathbf{q}_P^n V_P = 0. \end{array} \right. \quad (64)$$

Как было отмечено выше, при описании алгоритма SIMPLE основная сложность решения данной системы уравнений в несжимаемом случае состоит в отсутствии прямой

связи уравнений неразрывности и движения, которая в случае сжимаемых течений осуществляется через плотность. Для решения данной неоднозначности используют поправку Рхи-Чоу. Данная поправка вводит давление в дискретный аналог уравнения неразрывности и перевязывает два уравнения системы (64). Рассмотрим более подробно получение данной «перевязки». Для этого уравнение сохранения количества движения (второе уравнение системы) представим в окончательном алгебраическом виде для контрольных объемов P и N :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_P \mathbf{u}_P + \sum_{N=nb(P)} \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N &= \mathbf{b}_P^u V_P - \nabla p_P V_P + \frac{\rho_P V_P}{\Delta t} \mathbf{u}_P^0 \\ \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N + \sum_{P=nb(N)} \mathbf{A}_P \mathbf{u}_P &= \mathbf{b}_N^u V_N - \nabla p_N V_N + \frac{\rho_N V_N}{\Delta t} \mathbf{u}_N^0 \end{aligned} \quad (65)$$

здесь \mathbf{A}_P и \mathbf{A}_N - диагональные матрицы СЛАУ размерностью 3×3 , \mathbf{b}_P и \mathbf{b}_N - векторные правые части системы, включающие все явные источники, в том числе и слагаемые от неортогональной коррекции. В уравнениях (65) индекс для нового итерационного шага опущен, полагая, что все неявные слагаемые с нового итерационного шага заносятся в элементы диагональных матриц \mathbf{A}_P и \mathbf{A}_N . Слагаемые $\sum_{N=nb(P)} \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N$ и $\sum_{P=nb(N)} \mathbf{A}_P \mathbf{u}_P$ содержат неявные слагаемые от конвективных и диффузионных потоков от соседних контрольных объемов, явная часть которых заносится в \mathbf{b}_P и \mathbf{b}_N соответственно.

Выразим скорость в ячейках из уравнений (65), поделив на диагональную матрицу:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_P &= -\frac{\sum_{N=nb(P)} \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N}{\mathbf{A}_P} + \frac{V_P}{\mathbf{A}_P} \mathbf{q}_P^u - \frac{V_P}{\mathbf{A}_P} \nabla p_P + \frac{\rho_P V_P}{\mathbf{A}_P \Delta t} \mathbf{u}_P^0, \\ \mathbf{u}_N &= -\frac{\sum_{P=nb(N)} \mathbf{A}_P \mathbf{u}_P}{\mathbf{A}_N} + \frac{V_N}{\mathbf{A}_N} \mathbf{q}_N^u - \frac{V_N}{\mathbf{A}_N} \nabla p_N + \frac{\rho_N V_N}{\mathbf{A}_N \Delta t} \mathbf{u}_N^0. \end{aligned} \quad (66)$$

В данных равенствах подразумевается, что $\frac{1}{\mathbf{A}_P}$ и $\frac{1}{\mathbf{A}_N}$ - обратные матрицы \mathbf{A}_P^{-1} и

\mathbf{A}_N^{-1} соответственно.

Действуя аналогичным способом, выражение для вычисления вектора скорости на грани выглядит следующим образом:

$$\mathbf{u}_f = -\frac{\sum_{F=nb(f)} \mathbf{A}_F \mathbf{u}_F}{\mathbf{A}_f} + \frac{V_f}{\mathbf{A}_f} \mathbf{q}_f^u - \frac{V_f}{\mathbf{A}_f} \nabla p_f + \frac{\rho_f V_f}{\mathbf{A}_f \Delta t} \mathbf{u}_f^0. \quad (67)$$

Согласно [Patankar, 1980] учет слагаемого $\frac{\sum_{F=nb(f)} \mathbf{A}_F \mathbf{u}_F}{\mathbf{A}_f}$ влечет необходимость

вычисления значений в соседних контрольных объемах. Эти значения в свою очередь зависят от значений в близлежащих контрольных объемах и так далее. В конце концов, формула для вычисления скорости должна содержать все значения полей скорости и давления в окружающих объемах, что является достаточно трудоемкой и ресурсоемкой задачей. Отбрасывание данного слагаемого не влияет на конечный результат и является стандартной процедурой вывода алгоритма SIMPLE. Переопределим данные слагаемые в правой части уравнений:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_P &= \frac{\sum_{N=nb(P)} \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N}{\mathbf{A}_P}, \\ \mathbf{k}_N &= \frac{\sum_{P=nb(N)} \mathbf{A}_P \mathbf{u}_P}{\mathbf{A}_N}, \\ \mathbf{k}_f &= \frac{\sum_{F=nb(f)} \mathbf{A}_F \mathbf{u}_F}{\mathbf{A}_f}. \end{aligned} \quad (68)$$

Применив линейную интерполяцию второго порядка точности, получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_f &= \lambda \mathbf{k}_P + (1-\lambda) \mathbf{k}_N = \\ &= \lambda \left(-\mathbf{u}_P + \frac{V_P}{\mathbf{A}_P} \mathbf{b}_P^u - \frac{V_P}{\mathbf{A}_P} \nabla p_P + \frac{\rho_P V_P}{\mathbf{A}_P \Delta t} \mathbf{u}_P^0 \right) + \\ &+ (1-\lambda) \left(-\mathbf{u}_N + \frac{V_N}{\mathbf{A}_N} \mathbf{b}_N^u - \frac{V_N}{\mathbf{A}_N} \nabla p_N + \frac{\rho_N V_N}{\mathbf{A}_N \Delta t} \mathbf{u}_N^0 \right). \end{aligned} \quad (69)$$

Подставляя выражение (69) в уравнение (67) получим выражение для вычисления скорости на грани:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_f &= (1-\lambda) \mathbf{u}_P + \lambda \mathbf{u}_N + \\ &+ \left(\frac{V_f}{\mathbf{A}_f} \mathbf{q}_f^u - \left(\lambda \frac{V_P}{\mathbf{A}_P} \mathbf{q}_P^u + (1-\lambda) \frac{V_N}{\mathbf{A}_N} \mathbf{q}_N^u \right) \right) + \\ &+ \left(-\frac{V_f}{\mathbf{A}_f} \nabla p_f + \left(\lambda \frac{V_P}{\mathbf{A}_P} \nabla p_P + (1-\lambda) \frac{V_N}{\mathbf{A}_N} \nabla p_N \right) \right) + \\ &+ \left(\frac{\rho_f V_f}{\mathbf{A}_f \Delta t} \mathbf{u}_f^0 - \left(\lambda \frac{\rho_P V_P}{\mathbf{A}_P \Delta t} \mathbf{u}_P^0 + (1-\lambda) \frac{\rho_N V_N}{\mathbf{A}_N \Delta t} \mathbf{u}_N^0 \right) \right). \end{aligned} \quad (70)$$

Уравнение (70) с учетом нестационарного слагаемого подставим в уравнение неразрывности и получим дискретный аналог:

$$\begin{aligned}
& \frac{\rho_P^n - \rho_P^o}{\Delta t} + \sum_{f=nb(P)} \rho_f (\overline{\mathbf{u}}_f \cdot \mathbf{S}_f) + \sum_{f=nb(P)} \rho_f (\mathbf{u}'_f \cdot \mathbf{S}_f) = b_P^p V_P, \\
& \mathbf{u}'_f = \left(\frac{V_f}{\mathbf{A}_f} \mathbf{q}_f^u - \left(\lambda \frac{V_P}{\mathbf{A}_P} \mathbf{b}_P^u + (1-\lambda) \frac{V_N}{\mathbf{A}_N} \mathbf{b}_N^u \right) \right) \\
& + \left(\frac{V_f}{\mathbf{A}_f} \nabla p_f - \left(\lambda \frac{V_P}{\mathbf{A}_P} \nabla p_P + (1-\lambda) \frac{V_N}{\mathbf{A}_N} \nabla p_N \right) \right) \\
& + \left(\frac{\rho_f V_f}{\mathbf{A}_f \Delta t} \mathbf{u}_f^0 - \left(\lambda \frac{\rho_P V_P}{\mathbf{A}_P \Delta t} \mathbf{u}_P^0 + (1-\lambda) \frac{\rho_N V_N}{\mathbf{A}_N \Delta t} \mathbf{u}_N^0 \right) \right) \cdot \mathbf{S}_f.
\end{aligned} \tag{71}$$

В уравнении объем V_f и обратная диагональ вычисляются согласно:

$$\begin{aligned}
V_f &= \lambda V_P + (1-\lambda) V_N, \\
\frac{1}{\mathbf{A}_f} &= \frac{\lambda}{a_P} + \frac{(1-\lambda)}{a_N},
\end{aligned} \tag{72}$$

где $a_P = (\mathbf{A}_P \cdot \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f$ и $a_N = (\mathbf{A}_N \cdot \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f$.

Для реализации совмещенного алгоритма будем использовать блочную матрицу. В этом случае линеаризованный аналог уравнения (64):

$$\begin{bmatrix} a_P^{pp} & a_P^{pu} & a_P^{pv} & a_P^{pw} \\ a_P^{up} & a_P^{uu} & a_P^{uv} & a_P^{uw} \\ a_P^{vp} & a_P^{vu} & a_P^{vv} & a_P^{vw} \\ a_P^{wp} & a_P^{wu} & a_P^{wv} & a_P^{ww} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_P^n \\ u_P^n \\ v_P^n \\ w_P^n \end{bmatrix} + \sum_{N=nb(P)} \begin{bmatrix} a_N^{pp} & a_N^{pu} & a_N^{pv} & a_N^{pw} \\ a_N^{up} & a_N^{uu} & a_N^{uv} & a_N^{uw} \\ a_N^{vp} & a_N^{vu} & a_N^{vv} & a_N^{vw} \\ a_N^{wp} & a_N^{wu} & a_N^{wv} & a_N^{ww} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_N^n \\ u_N^n \\ v_N^n \\ w_N^n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_P^p \\ b_P^u \\ b_P^v \\ b_P^w \end{bmatrix}. \tag{73}$$

Здесь верхний индекс n – значение величины на новом итерационном слое, a_P и a_N – диагональные и недиагональные коэффициенты блочной матрицы СЛАУ соответственно, и b_P – правая часть системы, включающая, в том числе, и объемные источники. Коэффициенты с нижним индексом N устанавливают связь исходного контрольного объема P с соседним контрольным объемом N . Первая строка системы (73) представляет собой уравнение неразрывности, решаемое относительно абсолютного давления, три последующие строки – уравнения сохранения количества движения для трех компонент скоростей. Система уравнений (73) составляется для каждой ячейки расчетной модели и количество таких систем равно количеству контрольных объемов в расчетной модели.

Используя блочную матрицу (73), вычисление коэффициентов можно представить в виде следующих последовательных шагов. На первом шаге вычисляются конвективные и диффузионные слагаемые:

$$\begin{aligned}
a_N^{uu} - &= \mu_f S_f^*, \quad a_N^{vv} - = \mu_f S_f^*, \quad a_N^{ww} - = \mu_f S_f^*, \\
a_N^{uu} + &= \min(m_f, 0), \quad a_N^{vv} + = \min(m_f, 0), \quad a_N^{ww} + = \min(m_f, 0), \\
a_P^{uu} - &= \sum_{N=nb(P)} a_N^{uu}, \quad a_P^{vv} - = \sum_{N=nb(P)} a_N^{vv}, \quad a_P^{ww} - = \sum_{N=nb(P)} a_N^{ww}, \\
b_P^u + &= \sum_{f=nb(P)} \mu_{eff} \left((\nabla u_f + \nabla u_f^T) \cdot \mathbf{S}_f - (\nabla u_f \cdot \mathbf{d}_{PN}) S_f^* \right), \\
b_P^v + &= \sum_{f=nb(P)} \mu_{eff} \left((\nabla v_f + \nabla v_f^T) \cdot \mathbf{S}_f - (\nabla v_f \cdot \mathbf{d}_{PN}) S_f^* \right), \\
b_P^w + &= \sum_{f=nb(P)} \mu_{eff} \left((\nabla w_f + \nabla w_f^T) \cdot \mathbf{S}_f - (\nabla w_f \cdot \mathbf{d}_{PN}) S_f^* \right).
\end{aligned} \tag{74}$$

Далее добавляем объемные источники в уравнение движения:

$$b_P^u + = q^u V_P, \quad b_P^v + = q^v V_P, \quad b_P^w + = q^w V_P. \tag{75}$$

В случае решения нестационарных задач на следующем шаге необходимо добавить все нестационарные слагаемые для уравнения движения:

$$\begin{aligned}
a_P^{uu} + &= \frac{\rho_P V_P}{\Delta t}, \quad a_P^{vv} + = \frac{\rho_P V_P}{\Delta t}, \quad a_P^{ww} + = \frac{\rho_P V_P}{\Delta t}, \\
b_P^u + &= \frac{\rho_P V_P}{\Delta t} u_P^o, \quad b_P^v + = \frac{\rho_P V_P}{\Delta t} v_P^o, \quad b_P^w + = \frac{\rho_P V_P}{\Delta t} w_P^o.
\end{aligned} \tag{76}$$

На последнем этапе формируются коэффициенты для уравнения движения от градиента давления:

$$\begin{aligned}
a_N^{pu} + &= (1 - \lambda) S_f^x, \quad a_N^{pv} + = (1 - \lambda) S_f^y, \quad a_N^{pw} + = (1 - \lambda) S_f^z, \\
a_P^{pu} + &= \sum_{f=nb(P)} \lambda S_f^x, \quad a_P^{pv} + = \sum_{f=nb(P)} \lambda S_f^y, \quad a_P^{pw} + = \sum_{f=nb(P)} \lambda S_f^z.
\end{aligned} \tag{77}$$

После формирования коэффициентов уравнения движения (заполнение нижних трех строк блочной матрицы), происходит вычисление коэффициентов матрицы, отвечающих за уравнение неразрывности (верхняя строка). И здесь ключевым моментом при дискретизации является полностью неявное вычисление массового потока, в отличие от разделенного алгоритма, где массовый поток используется с предыдущего итерационного слоя и заносится в правую часть:

$$\begin{aligned}
a_N^{pu} + &= \lambda_f \rho_f S_f^x, \quad a_N^{pv} + = \lambda \rho_f S_f^y, \quad a_N^{pw} + = \lambda \rho_f S_f^z, \\
a_P^{pu} + &= \sum_{f=nb(P)} (1 - \lambda_f) \rho_f S_f^x, \\
a_P^{pv} + &= \sum_{f=nb(P)} (1 - \lambda_f) \rho_f S_f^y, \\
a_P^{pw} + &= \sum_{f=nb(P)} (1 - \lambda_f) \rho_f S_f^z.
\end{aligned} \tag{78}$$

Помимо массового потока также формируются диагональные элементы и правая часть относительно давления, причем их формирование аналогично алгоритму SIMPLE:

$$\begin{aligned}
a_N^{pp} - &= \rho_f D_f S_f^*, \quad a_P^{pp} = - \sum_{f=nb(P)} a_N^{pp}, \\
b_P^p - &= \rho_f D_f S_f^* (\nabla p_P \cdot \mathbf{d}_{Pf} - \nabla p_N \cdot \mathbf{d}_{Nf}),
\end{aligned} \tag{79}$$

где $D_f = \frac{V_P + V_N}{a_p + a_N}$ - среднегармоническое усреднение коэффициента поправки Рхи-Чоу, ρ_f

- плотность на грани f , вычисляемая по заданной схеме (в данной работе схема дискретизации не важна ввиду использования несжимаемого вещества).

Реализация граничных условий при решении системы уравнений (63) существенно отличается от разделенного алгоритма. Это в первую очередь касается массового потока в уравнении неразрывности и сил давления в уравнении движения. Значения граничных коэффициентов для произвольного контрольного объема P зависят от типа граничного условия: вход, выход, стенка и т.д., и будут рассмотрены ниже.

Входное граничное условие предполагает задание только трех компонент скорости для уравнения движения. По этой причине дискретизация конвективного слагаемого и массового потока возможна только явным образом. Дискретизация диффузионного слагаемого и градиента давления происходит аналогично внутренним граням:

$$\begin{aligned}
a_P^u &= a_P^v = a_P^w = \mu_P S_f^* - \min(m_f, 0), \\
b_P^u &= \sum_{f=outface(P)} \left[\mu_P (\nabla u_P \cdot \mathbf{S}_f + \nabla u_P^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla u_P \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right] - u_{inlet} \min(m_f, 0), \\
b_P^v &= \sum_{f=outface(P)} \left[\mu_P (\nabla v_P \cdot \mathbf{S}_f + \nabla v_P^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla v_P \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right] - v_{inlet} \min(m_f, 0), \\
b_P^w &= \sum_{f=outface(P)} \left[\mu_P (\nabla w_P \cdot \mathbf{S}_f + \nabla w_P^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla w_P \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right] - w_{inlet} \min(m_f, 0),
\end{aligned} \tag{80}$$

Явное задание компонент скоростей и массового расхода не предполагает использование поправки Рхи-Чоу и, следовательно, вычисленный массовый поток с учетом коэффициента пористости заносится в правую часть:

$$b_p^p = m_f. \quad (81)$$

Для заданного статического давления реализация конвективного слагаемого и градиента давления в уравнении движения происходит явно:

$$\begin{aligned} a_p^u &= a_p^v = a_p^w = \mu_f S_f^* - \min(m_f, 0), \\ b_p^u &= \sum_{f=\text{outface}(P)} \left[\mu_p (\nabla u_p \cdot \mathbf{S}_f + \nabla u_p^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla u_p \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right], \\ b_p^v &= \sum_{f=\text{outface}(P)} \left[\mu_p (\nabla v_p \cdot \mathbf{S}_f + \nabla v_p^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla v_p \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right], \\ b_p^w &= \sum_{f=\text{outface}(P)} \left[\mu_p (\nabla w_p \cdot \mathbf{S}_f + \nabla w_p^T \cdot \mathbf{S}_f - S_f^* (\nabla w_p \cdot \mathbf{d}_{PN})) \right]. \end{aligned} \quad (82)$$

Как и для внутренних граней, используется поправка Рхи-Чоу, применяемая для уравнения неразрывности:

$$a_p^{pu} = S_f^x \quad a_p^{pv} = S_f^y \quad a_p^{pw} = S_f^z. \quad (83)$$

Необходимо отметить, что данное граничное условие может использоваться и как входное.

Наибольшее отличие в реализации граничных условий от разделенного алгоритма состоит в реализации граничного условия «стенка без проскальзывания». В разделенном алгоритме SIMPLE используется известный механизм отложенной коррекции [Ferziger & Peric, 2002], приводящий к одинаковости диагональных коэффициентов всех трех СЛАУ скоростей. Такой подход обеспечивает стабильность расчета, но в силу явного учета компонент скоростей приводит к замедлению скорости сходимости. В совмещенном алгоритме используется известный неявный подход [Darwish et al., 2009], реализация которого в SIMPLE алгоритме по вышеприведенным причинам невозможна. Суть неявного подхода заключается в разложении тангенциальной скорости по компонентам вектора внешней нормали, и учета внедиагональных коэффициентов, связывающих компоненты скоростей между собой.

Сила поверхностного трения вычисляется исходя из равенства:

$$\mathbf{F} = \boldsymbol{\tau}_w \cdot \mathbf{S}_f, \quad (84)$$

где $\boldsymbol{\tau}_w = \mu \frac{\mathbf{u}_t - \mathbf{u}_w}{\mathbf{d}_{Pf}}$ - тензор вязких напряжений на стенке, $\mathbf{u}_t = \mathbf{u}_p - (\mathbf{u}_p \cdot \mathbf{n}_w) \mathbf{n}_w$ - тангенциальная компонента скорости в ячейке (скорость параллельная стенке), \mathbf{n}_w - внешняя нормаль к стенке, \mathbf{u}_w - скорость движения стенки.

Таким образом, коэффициенты для пристеночной ячейки задаются следующими равенствами:

$$\begin{aligned}
 a_p^{uu} &= \mu_f S_f^* \left(1 - (n_w^x)^2\right) & a_p^{uv} &= \mu_f S_f^* n_w^x n_w^y & a_p^{uw} &= \mu_f S_f^* n_w^x n_w^z, \\
 a_p^{vu} &= \mu_f S_f^* n_w^y n_w^x & a_p^{vv} &= \mu_f S_f^* \left(1 - (n_w^y)^2\right) & a_p^{vw} &= \mu_f S_f^* n_w^y n_w^z, \\
 a_p^{wu} &= \mu_f S_f^* n_w^z n_w^x & a_p^{wv} &= \mu_f S_f^* n_w^z n_w^y & a_p^{ww} &= \mu_f S_f^* \left(1 - (n_w^z)^2\right), \\
 b_p^u &= \varepsilon_p \mu_f S_f^* u_w^x & b_p^v &= \varepsilon_p \mu_f S_f^* u_w^y & b_p^w &= \varepsilon_p \mu_f S_f^* u_w^z.
 \end{aligned} \tag{85}$$

Данное граничное условие не предполагает изменение коэффициентов для уравнения неразрывности.

Реализация граничного условия «стенка с проскальзыванием» аналогична реализации граничного условия «стенка без проскальзывания» с учетом равенства касательного напряжения нулю ($\tau_w = 0$). Скорость движения стенки не задается и равна тангенциальной компоненте скорости в приграничной ячейке. Давление и любые другие скалярные величины приравниваются значениям в приграничной ячейке. Для данного граничного условия необходимо учитывать градиент давления в уравнении движения:

$$a_p^{pu} = S_f^x, \quad a_p^{pv} = S_f^y, \quad a_p^{pw} = S_f^z. \tag{86}$$

В итоге представленные шаги дискретизации системы уравнений (63), с применением полностью неявного алгоритма, позволяют решать задачи сжимаемых и несжимаемых течений в пористых средах, с переменным коэффициентом пористости и относительно реальной скорости. Дискретизация уравнений с применением полностью неявного алгоритма позволит существенно сократить общее число итераций и соответственно общее время счета задачи, что продемонстрировано ниже при решении тестовых задач.

Таким образом, описанную выше процедуру формирования коэффициентов блочной матрицы можно представить в виде последовательных шагов, представляющих совмещенный алгоритм:

1. Вычисляются градиенты трех компонент скоростей и давления, согласно формуле (15);
2. Формируются коэффициенты блочной матрицы для уравнения сохранения количества движения и неразрывности (73). Решение СЛАУ происходит с использованием многосеточного решателя AMG;
3. Вычисляются массовые потоки на гранях контрольного объема согласно (70);

4. Проверяются условия выхода (например, по величине невязки расчетных полей) и при необходимости происходит возврат к шагу 1.

Такую итерационную процедуру можно представить в виде следующей блок-схемы (Рис. 28).



Рис. 28 – Блок-схема работы совмещенного алгоритма

Представленный численный совмещенный алгоритм решения уравнений Навье-Стокса позволяет моделировать течения вязкой несжимаемой среды, при этом совмещение поля скорости и давления происходит полностью неявно. Такой способ позволяет считать ламинарные несжимаемые течения со скоростью сходимости до 4-5 раз выше по сравнению с разделенным алгоритмом. Однако, при моделировании турбулентных течений, как показано в работе [Mangani & Bianchini, 2010], скорость сходимости заметно снижается, и возникает естественный вопрос о целесообразности применения совмещенного алгоритма COUPLED. Как было показано в исследованиях, при непосредственном участии диссертанта, снижение скорости сходимости связано с использованием коэффициентов релаксации, о чем ниже и пойдет речь.

2.4 Внедрение совмещенного алгоритма в пакет программ ЛОГОС

В настоящее время совмещенный алгоритм COUPLED реализован и внедрен в пакет программ ЛОГОС в виде отдельного исполняемого модуля (ЛОГОС-COUPLED). Функциональное наполнение совмещенного алгоритма аналогично разделенному алгоритму и позволяет считать несжимаемые и сжимаемые течения, течения в анизотропных пористых средах, многофазные течения, течения с учетом сопряженного теплообмена и естественной конвекции, трансзвуковые и сверхзвуковые течения, что отражено в многочисленных статьях и монографиях [Козелков и др., 2013а, Козелков и др., 2014а, Козелков и др., 2014b; Козелков и др., 2015; Лашкин и др., 2016а; Лашкин и др., 2016b].

Процесс внедрения совмещенного алгоритма COUPLED в общую структуру пакета программ ЛОГОС можно представить в виде двух основных этапов. На первом этапе происходит интегрирование совмещенного алгоритма в пользовательский интерфейс ПреПостПроцессора (Рис. 29), на втором – внедрение новых решателей СЛАУ, позволяющих решать матрицы блочного вида (элемент СЛАУ – это матрица произвольного размера), на которых основан совмещенный алгоритм. Помимо решателей СЛАУ изменения коснулись способов учета сил гравитации, сопротивления пористого тела, плавучести, граничных условий и так далее. В третьей главе диссертации более подробно представлены изменения и адаптация совмещенного алгоритма для моделирования течений в анизотропных пористых средах.

Интегрирование в пользовательский интерфейс ПреПостПроцессора

Процесс интегрирования совмещенного алгоритма в пользовательский интерфейс ПреПостПроцессора аналогичен внедрению алгоритма SIMPLE. Единственное отличие состоит в способе задания релаксации для разделенного и совмещенного алгоритма. Отличие в интерфейсе представлено на рисунке 29.

Параметр	Значение	Параметр	Значение
Алгоритм решения	SIMPLE	Алгоритм решения	COUPLED
Точность решения	1e-08	Число Куранта (начальное)	200
Скорость	0.7	Число Куранта (минимальное)	10
Давление	0.3	Число Куранта (максимальное)	200
Турбулентные параметры	0.5	Число Куранта (коэф. роста)	1.1
Турбулентная вязкость	1	Число Куранта (интервал изменения)	100
		Точность решения	1e-08

Рис. 29 – Различие в механизме релаксации разделенного и совмещенного алгоритмов

Как видно из рисунка 29, алгоритм SIMPLE использует коэффициенты релаксации, а COUPLED – безразмерное сеточное число Куранта. Ниже приведем отличия и связь в

механизмах релаксации между двумя алгоритмами, а также подбор оптимальных релаксационных параметров для разделенного и совмещенного алгоритма.

Особенности применения релаксации в совмещенном алгоритме

При численном решении для обеспечения процесса сходимости уравнения (1) необходимо дополнять процедурами верхней или нижней релаксации, в противном случае процесс решения может привести к расходимости итерационного процесса. Подобная практика применяется при использовании многих численных алгоритмов. При этом подбор коэффициентов релаксации индивидуален для каждой конкретной задачи [Patankar, 1980; Флетчер, 1991; Ferziger & Peric, 2002], что приводит к дополнительным сложностям при попытках наиболее эффективного решения задач.

На основе работы, выполненной при определяющем участии диссертанта [Лашкин и др., 2016а], рассмотрим один из способов применения процедуры релаксации для итерационного алгоритма SIMPLE. В уравнении сохранения количества движения процедура нижней релаксации вводится неявно, непосредственно, в систему линейных алгебраических уравнений через параметр релаксации α_u . В этом случае дискретный аналог уравнения сохранения количества движения записывается в виде [Ferziger & Peric, 2002]:

$$\frac{1}{\alpha_u} \mathbf{A}_P \mathbf{u}_P^{*,n} + \sum_{N=nb(P)} \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N^{*,n} = -V_P \nabla p_P^{n-1} + \frac{1-\alpha_u}{\alpha_u} a_P \mathbf{u}_P^{*,n-1}. \quad (87)$$

Такая процедура обеспечивает диагональное преобладание СЛАУ, что позволяет находить решения матрицы за более короткое время [Ferziger & Peric, 2002].

Аналогично процедура нижней релаксации применяется ко всем уравнениям переноса основных величин, в том числе переноса турбулентных параметров при RANS моделировании с использованием SST модели турбулентности:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha_{turb}} a_P k_P^n + \sum_{N=nb(P)} a_N k_N^n &= \frac{1-\alpha_{turb}}{\alpha_{turb}} a_P k_P^{n-1} + G_k - Y_k, \\ \frac{1}{\alpha_{turb}} a_P \omega_P^n + \sum_{N=nb(P)} a_N \omega_N^n &= \frac{1-\alpha_{turb}}{\alpha_{turb}} a_P \omega_P^{n-1} + G_\omega - Y_\omega, \end{aligned} \quad (88)$$

где α_{turb} - параметр релаксации турбулентных параметров.

Очевидно, что введение процедур неявной релаксации для уравнений движения, турбулентности и неразрывности положительно сказывается на устойчивости расчета. Выбор релаксационных параметров для алгоритма SIMPLE обсуждается ниже.

Так же как и для SIMPLE алгоритма в совмещенный алгоритм желательно введение процедуры нижней релаксации. Это осуществляется путем добавления локального псевдошага по времени в уравнение сохранения количества движения [Ferziger & Peric, 2002]:

$$\frac{\partial}{\partial \tau_{loc}} \rho \mathbf{u} + \sum_{f=nb(P)} (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^{n+1})_f \cdot \mathbf{S}_f + \sum_{f=nb(P)} p_f^{n+1} \cdot \mathbf{S}_f = \sum_{f=nb(P)} (\boldsymbol{\tau}_\mu + \boldsymbol{\tau}_t) \cdot \mathbf{S}_f, \quad (89)$$

где $\tau_{loc} = CFL(h_{loc} / |\mathbf{u}|)$ – локальный псевдошаг по времени, характеризующий скорость протекания процессов диффузионного и конвективного переноса в контрольном объеме P , h_{loc} – характерный размер ячейки, CFL – число Куранта.

Скорость сходимости и устойчивость расчета в основном зависят от величины числа Куранта. Увеличивая число Куранта можно добиться увеличения скорости сходимости, но понижения устойчивости алгоритма и, наоборот, уменьшение числа Куранта увеличивает устойчивость алгоритма, но уменьшает скорость сходимости.

Связь параметров α_u и CFL осуществляется согласно [Ferziger & Peric, 2002]:

$$CFL = \frac{\alpha_u}{1 - \alpha_u}. \quad (90)$$

Например, использование в разделенном алгоритме параметра релаксации $\alpha_u = 0.7$ соответствует коэффициенту $CFL = 2.3$ в совмещенном алгоритме.

Стандартные (оптимальные) значения параметров релаксации для разделенного алгоритма SIMPLE представлены в [Patankar, 1980; Флетчер, 1991; Ferziger & Peric, 2002] и равны $\alpha_u = 0.7$ и $\alpha_p = 0.3$. Однако практика показывает, что для устойчивого решения промышленно-ориентированных задач значения данных коэффициентов, особенно, коэффициента α_p , требуется брать в несколько раз меньше¹. В совмещенном алгоритме значение коэффициента CFL чем больше, тем лучше.

Стремление коэффициента CFL к бесконечности быстрее приближает решение к стационарному, однако на практике при слишком большом значении данного коэффициента численное решение ведет себя неустойчивым образом и может вообще не достигнуть сходимости или попросту развалиться. Слишком низкое значение данного коэффициента сводит на нет все преимущества совмещенного алгоритма по сравнению с

¹ Особенно это касается расчета сжимаемых течений, где значение коэффициента релаксации для давления зачастую выбирается равным 0.01, а то и того меньше.

разделенным алгоритмом. Оптимальное значение данного коэффициента зависит от многих особенностей течения, включая разрешение расчетной сетки.

Чтобы достичь оптимальной скорости сходимости, естественно предположить, что параметр релаксации для совмещенного алгоритма должен быть не меньше, чем для разделенного алгоритма.

При решении промышленно-ориентированных задач ключевым свойством течения является турбулентность. На практике для моделирования турбулентности используются RANS модели [Menter, 1992], которые при решении осредненной системы уравнений Навье-Стокса решаются независимо, каждый со своим параметром релаксации, и вопрос о согласовании параметров релаксации для численного решения системы уравнений Навье-Стокса и уравнений турбулентности остается открытым.

При применении разделенного решателя параметр релаксации для решения уравнений турбулентности выбирается таким же, как и параметр релаксации для решения уравнений Навье-Стокса, т.е. $\alpha_{turb} = 0.7$. При увеличении этого коэффициента вплоть до единицы, изменений в итерационном процессе не произойдет, поскольку основная система - система уравнений Навье-Стокса - решается с меньшим коэффициентом. Уменьшение коэффициента α_{turb} до значений $\alpha_{turb} < 0.7$ приведет к тому, что и система уравнений Навье-Стокса будет решаться с меньшим коэффициентом, что уменьшит скорость сходимости.

Логично предположить, что при применении совмещенного решателя будет наблюдаться такая же картина. Единственным вопросом остается, каково же значение этого оптимального коэффициента.

Ниже приведем результаты численных экспериментов, выполненных с целью подбора оптимального значения коэффициента релаксации для совмещенного решателя.

Прежде чем анализировать турбулентные течения, определим оптимальное значение коэффициента CFL на серии задач в ламинарной постановке с последовательным его увеличением от $CFL = 3.3$ (соответствует оптимальному значению релаксации для скорости $\alpha_u = 0.7$ в классическом алгоритме SIMPLE) до $CFL = 1000$.

Рассмотрим задачи течения вязкой несжимаемой жидкости в трубе круглого сечения [Идельчик, 1992], обтекание пластины [Лойцянский, 1973], течение за обратным уступом [Vogel & Eaton, 1985] и течение в плоском асимметричном диффузоре [Pasciarino, 2000]. На рисунке 30 представлены графики зависимости времени решения данных задач до установления в зависимости от коэффициента CFL . Для решения использовались

расчетные сетки, состоящие из шестигранников правильной формы с характерным размером ячеек $\Delta = 0.0005$.

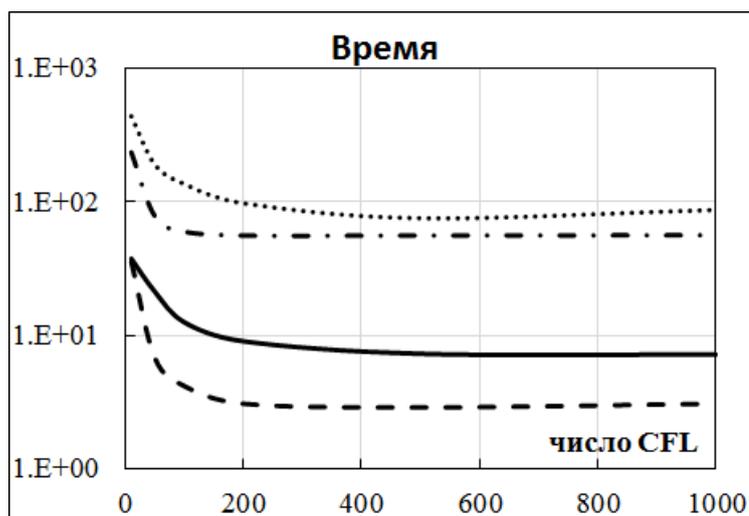


Рис. 30 – Зависимость времени счета от коэффициента CFL для четырех тестовых задач

Анализ данных графиков показывает, что практически на всех задачах оптимальный коэффициент CFL равен 200 и при его увеличении время счета не изменяется. При переводе этого значения на разделенный решатель получаем значение $\alpha_u = 0.995$. В подавляющем большинстве случаев разделенный алгоритм с таким значением параметра релаксации «разваливается», что уже говорит о лучшей скорости сходимости совмещенного алгоритма.

Таким образом, для достижения максимального уровня скорости сходимости в совмещенном алгоритме COUPLED необходимо использовать релаксацию для турбулентности не ниже 0.995.

Внедрение блочного многосеточного решателя СЛАУ в пакет программ ЛОГОС

Как было отмечено выше, наиболее важным этапом эффективной реализации любого численного алгоритма является этап решения СЛАУ. В зависимости от задачи и способа решения СЛАУ количество внутренних линейных итераций может варьироваться от одной до десятков тысяч [Козелков и др., 2013b]. В случае использования совмещенного алгоритма необходимо использовать блочный решатель СЛАУ. Основное отличие блочного решателя от скалярного состоит в том, что в качестве элемента матрицы используется матричный блок размером $N \times N$, а результат решения – вектор размером N (для совмещенного решателя $N = 4$). Каждый блочный элемент $N \times N$ хранится в линейном массиве размером N^2 , в отличие от блочной матрицы, хранящейся в LDU формате.

Важным в решении СЛАУ является выбор ведущего элемента для функции агрегирования. Как показывает вычислительная практика, при использовании совмещенного алгоритма наиболее целесообразно выбирать верхний элемент блока, отвечающего за уравнение неразрывности.

Все стандартные скалярные операции (умножения, деления) заменяются на соответствующие матричные операции. Например, перемножение двух скаляров заменяется на умножение матричного блока $N \times N$ на вектор N , а обратная диагональ заменяется операцией вычисления обратной матрицы.

Вектор невязки $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ вычисляется для каждого поля отдельно. Условием выхода является достижение заданного уровня невязки всеми расчетными полями.

Параллельная реализация подразумевает межпроцессорные обмены матричными блоками $N \times N$ и векторами размером N .

В качестве примера можно рассмотреть сеточную модель, состоящую из двух ячеек (Рис. 31).

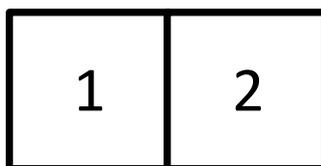


Рис. 31 – Пример расчетной модели из двух ячеек

В результате дискретизации уравнений совмещенным алгоритмом получаем СЛАУ следующего вида:

$$\begin{bmatrix} \left(\begin{matrix} P_{11}^{pp} & P_{11}^{pu} & P_{11}^{pv} & P_{11}^{pw} \\ u_{11}^{up} & u_{11}^{uu} & u_{11}^{uv} & u_{11}^{uw} \\ v_{11}^{vp} & v_{11}^{vu} & v_{11}^{vv} & v_{11}^{vw} \\ w_{11}^{wp} & w_{11}^{wu} & w_{11}^{wv} & w_{11}^{ww} \end{matrix} \right) & \left(\begin{matrix} P_{12}^{pp} & P_{12}^{pu} & P_{12}^{pv} & P_{12}^{pw} \\ u_{12}^{up} & u_{12}^{uu} & u_{12}^{uv} & u_{12}^{uw} \\ v_{12}^{vp} & v_{12}^{vu} & v_{12}^{vv} & v_{12}^{vw} \\ w_{12}^{wp} & w_{12}^{wu} & w_{12}^{wv} & w_{12}^{ww} \end{matrix} \right) \\ \left(\begin{matrix} P_{21}^{pp} & P_{21}^{pu} & P_{21}^{pv} & P_{21}^{pw} \\ u_{21}^{up} & u_{21}^{uu} & u_{21}^{uv} & u_{21}^{uw} \\ v_{21}^{vp} & v_{21}^{vu} & v_{21}^{vv} & v_{21}^{vw} \\ w_{21}^{wp} & w_{21}^{wu} & w_{21}^{wv} & w_{21}^{ww} \end{matrix} \right) & \left(\begin{matrix} P_{22}^{pp} & P_{22}^{pu} & P_{22}^{pv} & P_{22}^{pw} \\ u_{22}^{up} & u_{22}^{uu} & u_{22}^{uv} & u_{22}^{uw} \\ v_{22}^{vp} & v_{22}^{vu} & v_{22}^{vv} & v_{22}^{vw} \\ w_{22}^{wp} & w_{22}^{wu} & w_{22}^{wv} & w_{22}^{ww} \end{matrix} \right) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} p_1 \\ u_1 \\ v_1 \\ w_1 \\ p_2 \\ u_2 \\ v_2 \\ w_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^p \\ b_1^u \\ b_1^v \\ b_1^w \\ b_2^p \\ b_2^u \\ b_2^v \\ b_2^w \end{bmatrix}$$

Рис. 32 – Вид СЛАУ для двух контрольных объемов

Таким образом, введенные изменения позволили внедрить совмещенный решатель в пакет программ ЛОГОС.

2.5 Верификация совмещенного алгоритма

Предыдущая глава была посвящена разработке и верификация модуля ЛОГОС-SIMPLE. На серии численных экспериментов, имеющих экспериментальные и численные решения, были подтверждены достоверность и точность получаемых результатов на сетках различной структуры и топологии. Аналогичным образом был верифицирован модуль ЛОГОС-COUPLED. Полученные результаты полностью идентичны между двумя модулями, что подтверждает правильность реализации исходных физико-математических моделей. Помимо данного набора тестовых задач, с помощью алгоритма COULED были исследованы задачи, реализующие дополнительный функционал, а именно сопряженный теплообмен, течения в трубах различного сечения, вынужденной и естественной конвекции.

Турбулентное течение в отводах круглого и квадратного сечения

В данной задаче рассматривается стационарное турбулентное течение вязкой несжимаемой жидкости в отводах круглого и квадратного поперечного сечения с углом поворота $\delta = 90^\circ$ (Рис. 33). Число Рейнольдса составляет порядка $Re = 2 \cdot 10^5$. Геометрические характеристики задавались следующим образом: $b = 1\text{ м}$ (диаметр для круглого сечения, ширина стороны для квадратного сечения), внутренний радиус отвода $R = 1\text{ м}$, внешний радиус отвода $R_1 = 2\text{ м}$, длина прямолинейного участка до изгиба и после изгиба $L_1 = L_2 = 10b_0$.

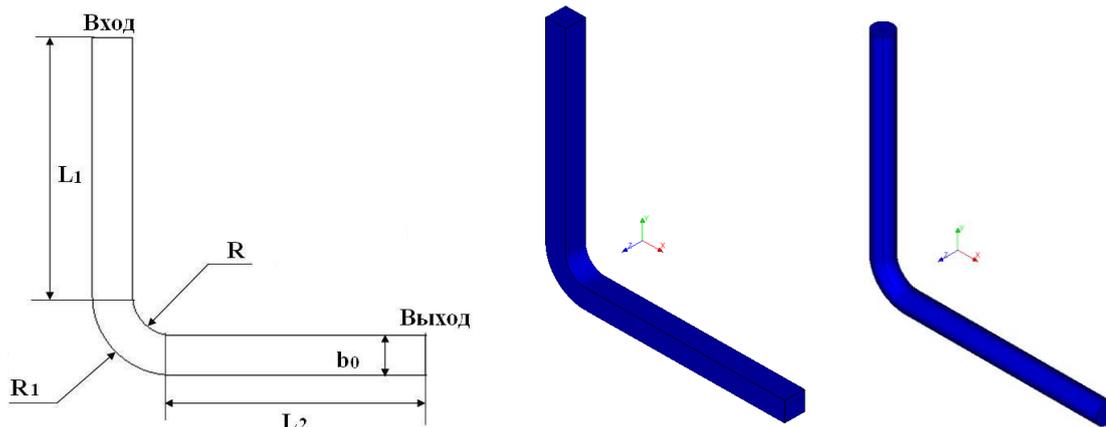


Рис. 33 - Геометрическая и расчетные модели круглого и квадратного отводов

Сравнение расчетных и экспериментальных данных проводится для величины потерь полного давления на участке между двумя сечениями, первое из которых расположено перед изгибом, а второе – в конце прямолинейного участка после изгиба, длина которого равна L_2 .

Перепад полного давления между сечениями может быть найден по формуле (91):

$$\Delta P = \xi \frac{\rho W_{in}^2}{2}, \quad \xi = \xi_m + \xi_r, \quad (91)$$

где ξ – коэффициент гидравлического сопротивления, ξ_m – коэффициент местного гидравлического сопротивления, ξ_r – коэффициент сопротивления трения.

Коэффициент сопротивления трения равняется сумме двух сопротивлений: $\xi_r = \xi_{r_1} + \xi_{r_2}$, где ξ_{r_1} – коэффициент сопротивления на закругленном участке, ξ_{r_2} – коэффициент сопротивления трения на прямолинейном участке.

Для турбулентного режима течения коэффициент потерь на трение в поворотном участке отвода может быть определен следующим образом [Идельчик, 1992]:

$$\xi_{r_1} = 0.0175 \cdot \delta \cdot \lambda \cdot \frac{R_0}{D_r}, \quad R_0 = \frac{R+R_1}{2} = 1.5 \text{ м}, \quad \lambda = \frac{1}{(1.8 \cdot \lg \text{Re} - 1.64)^2}, \quad (92)$$

где $D_r = b_0$ – гидравлический диаметр, λ – коэффициент потерь на трение.

Коэффициент потерь на трение на прямолинейном участке отвода и коэффициент местного сопротивления определяются следующим образом [Идельчик, 1992]:

$$\xi_{r_2} = \lambda \cdot L_2 / D_r, \quad \xi_m = A_1 \cdot B_1 \cdot C_1, \quad (93)$$

где $A_1=1$ - для угла поворота $\delta = 90^\circ$, $B_1 = \frac{0.21}{\sqrt{R_0/D_2}}$, $C_1 = 1$.

Для расчетов использовались сетки с числом ячеек 296400 – для отвода круглого сечения и с числом ячеек 486000 - для отвода квадратного сечения. На рисунке 34(а) показаны фрагменты этих расчетных сеток.

Расчеты в стационарной постановке проводились до сходимости порядка 10^{-6} кг. Для аппроксимации конвективных слагаемых использовалась схема первого порядка точности. В таблице 10 представлены эмпирическое, полученное по формулам, и расчетные значения перепада давления. Также в таблице приведены значения $Y+$ и относительная погрешность расчетов.

Таблица 10 - Перепад давления и относительная погрешность

		Отвод квадратного сечения			Отвод круглого сечения		
Re	$\Delta P_{эмп}$, Па	$Y+$	$\Delta P_{расч}$, Па	δ , %	$Y+$	$\Delta P_{расч}$, Па	δ , %
$2 \cdot 10^5$	5.9001	1.071	5.8263	1.25	2.153	5.8232	1.3

На рисунке 34(б) представлено расчетное поле скорости в плоскости симметрии (слева) и фрагмент векторного поля в повороте отвода (по центру), полученное по результатам моделирования в пакете ЛОГОС.

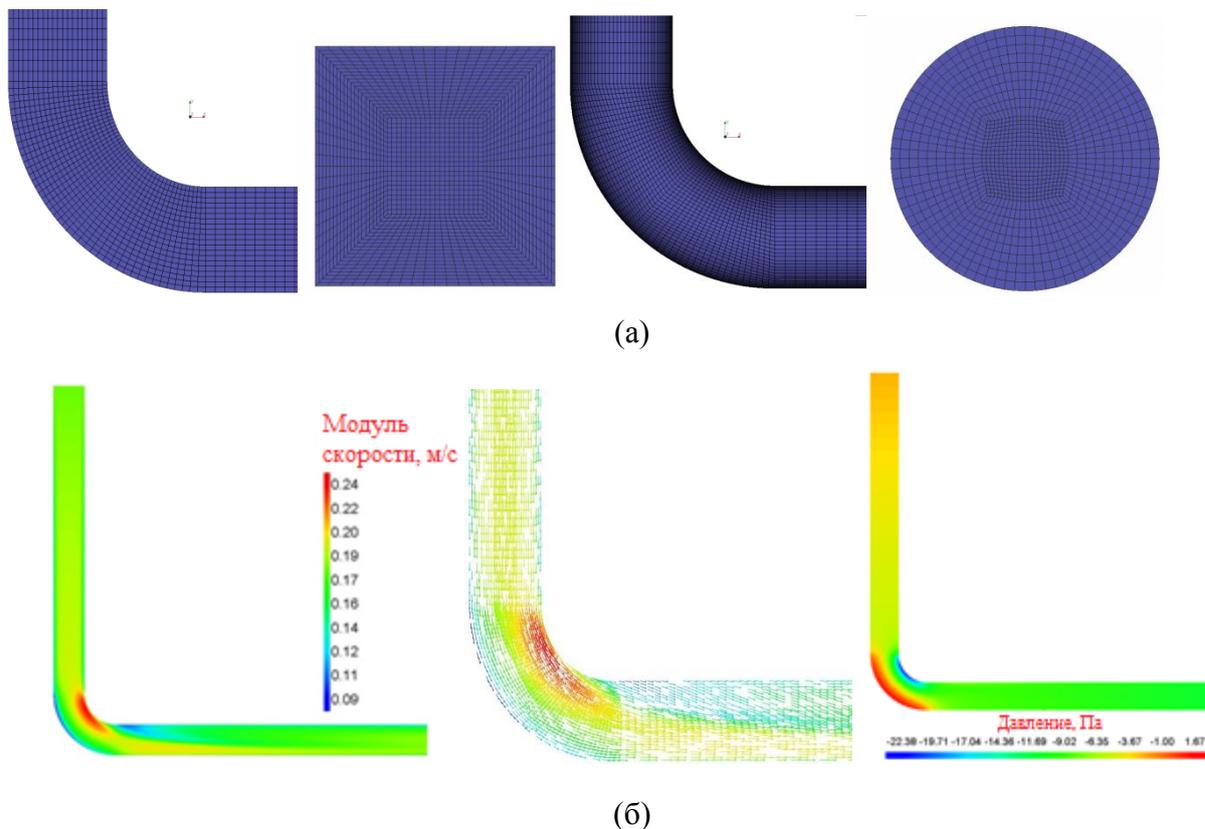


Рис. 34 – (а) – Фрагменты расчетных сеток для отводов квадратного и круглого сечения, (б) – Поле модуля скорости (слева), фрагмент векторного поля скорости (посередине) и поле давления (справа) для отвода круглого сечения

Физика течения такова, что поток на повороте ускоряется, и на внутренней стороне отвода наблюдается максимум поля скорости, с противоположной стороны наблюдается минимум. Вниз по потоку после поворота скорость увеличивается около нижней стенки, а около верхней уменьшается. Картина распределения давления также представлена на рисунке 34(б).

Рассчитанный перепад давления, полученный для рассмотренного режима течения, находится в хорошем согласии со справочными данными [Идельчик, 1992]. Относительная погрешность не превышает 1.3%.

Охлаждение твердотельных блоков в плоском канале

Данная задача моделирует два взаимозависимых физических процесса в различных расчетных областях. В одной области течет жидкость, а в другой распространяется тепло от данной жидкости.

В данном тесте рассматривается задача охлаждения шести твердотельных блоков с заданным объемным тепловыделением, установленных в плоском прямоугольном канале, ламинарным потоком воздуха при вынужденной конвекции [Bilgen & Yamane, 2004]. Геометрия расчетной области схематично представлена на рисунке 35.

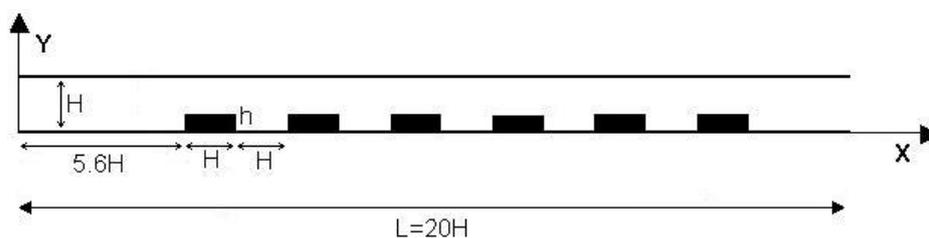


Рис. 35 – Схема геометрии расчётной области

Плоский прямоугольный канал имеет высоту $H = 1$ м и длину $L = 20H$. Внутри него, вплотную к нижней стенке, расположены шесть одинаковых твердотельных блоков длиной H и высотой $h = 0.25H$. Левая грань первого блока находится на расстоянии $5.6H$ от входа. Промежутки между блоками одинаковы и равны H . Каждый блок равномерно нагревается объемным источником тепла мощностью Q . Стенки канала неподвижны, непроницаемы и теплоизолированы. Эффекты плавучести и вязкой диссипации не учитываются. Параметры жидкости выбираются так, чтобы число Рейнольдса $Re=100$, а число Прандтля $Pr=0.7$.

В таблице 11 представлены параметры жидкости и твердого тела.

Таблица 11 – Параметры жидкости и твердого тела

Параметр	Значение	Размерность
<i>Параметры жидкости</i>		
Плотность жидкости, ρ_f	1	кг/м ³
Молекулярная вязкость μ	0.01	кг/(м·с)
Коэффициент теплопроводности λ	0.0142857	Вт/(м·К)
Теплоемкость при постоянном давлении C_p	1	Дж/(кг·К)
Скорость набегающего потока	1	м/с
<i>Параметры твердого тела</i>		
Плотность твердого тела, ρ_s	100	кг/м ³
Объемный источник тепла Q	71.142857	Вт/(м ³)
Коэффициент теплопроводности λ	71.142857	Вт/(м·К)
Теплоемкость при постоянном давлении C_p	1	Дж/(кг·К)

На рисунке 36(а) приведено поле температуры. Видно, что твердотельные блоки разогреваются за счет объемного источника тепла. Расположенные ближе к входу блоки имеют меньшую температуру, поскольку обтекаются жидкостью с меньшей температурой. На рисунке 36(б) приведены профили температур вдоль прямой $Y = 0.1$ м.

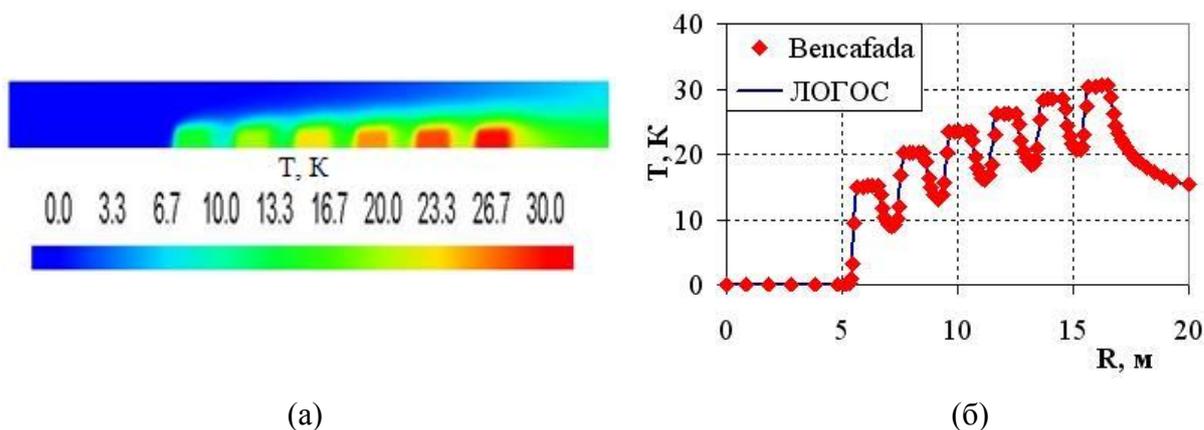


Рис. 36 – (а) – Распределение поля температуры, (б) – Профили температур

Среднеквадратичное отклонение профиля температур, по сравнению с экспериментом, составляет 0.053423. Рассчитанная температура в центрах твердотельных блоков отличается от результатов [Bilgen & Yamane, 2004] не более, чем на 1 градус, что соответствует относительной погрешности $\sim 3\%$. Наблюдается достаточно хорошее качественное и количественное совпадение результатов.

Развитая турбулентная конвекция

В данной задаче исследуется развитое турбулентное конвективное течение воды в подогреваемой снизу кубической полости [Васильев и Фрик, 2010]. Вертикальные стенки куба теплоизолированы, горизонтальные выступают в качестве теплообменников. Средняя температура воды в полости 25°C , что соответствует среднему числу Прандтля $\text{Pr}=6.1$. Заданное значение перепада температуры между теплообменниками $\Delta T = 20^{\circ}\text{C}$ (нижний теплообменник имеет температуру $T_1=35^{\circ}\text{C}$, верхний – $T_2=15^{\circ}\text{C}$), что соответствует числу Релея $\text{Ra}=6.1 \times 10^9$. Результаты расчетов сравнивались с экспериментальными данными, полученными в [Васильев и Фрик, 2010].

Расчеты выполнялись в нестационарной постановке. Расчет проводился в 2 этапа: расчет развития турбулентной конвекции, за которым следовал расчет развитой турбулентной конвекции с осреднением расчетных величин. Для аппроксимации конвективных слагаемых используется схема второго порядка точности, для дискретизации по времени используется схема второго порядка. В расчетах используется равномерная сетка, содержащая $150 \times 150 \times 150 = 3375000$ ячеек. На рисунке 37 представлены средние поля скорости, полученные в эксперименте и в расчетах.

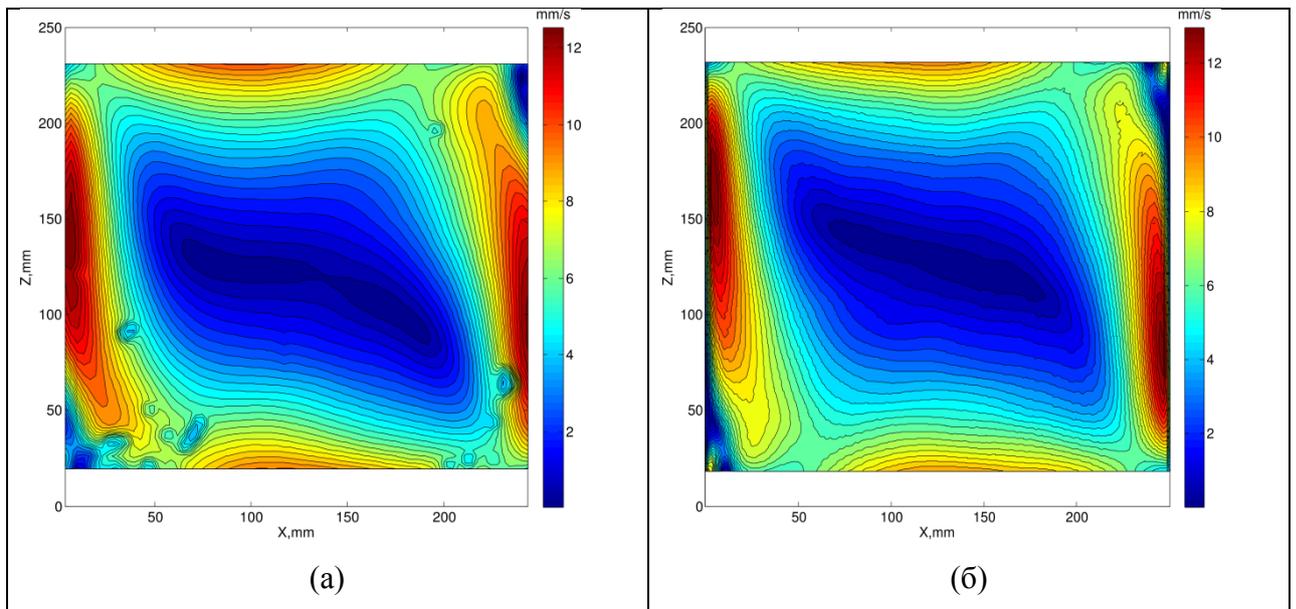


Рис. 37 - Средние поля скорости: (а) – эксперимент, (б) – Логос-COUPLED

В эксперименте и в расчетах структура средних полей скорости очень близка. Хорошо видно, что в полости возникает крупномасштабный вихрь, соизмеримый с размерами полости. Помимо основного вихря на средних полях существуют вторичные вихри меньшего масштаба, локализованные в противоположных углах кубической полости. Для количественного сравнения были построены, проходящие через центр полости при фиксированной координате (125 мм), профили горизонтальной и вертикальной компонент скорости (Рис. 38). Оба профиля демонстрируют хорошее совпадение, повторяя не только структуру потока, но и воспроизводя значение скорости в пограничных слоях.

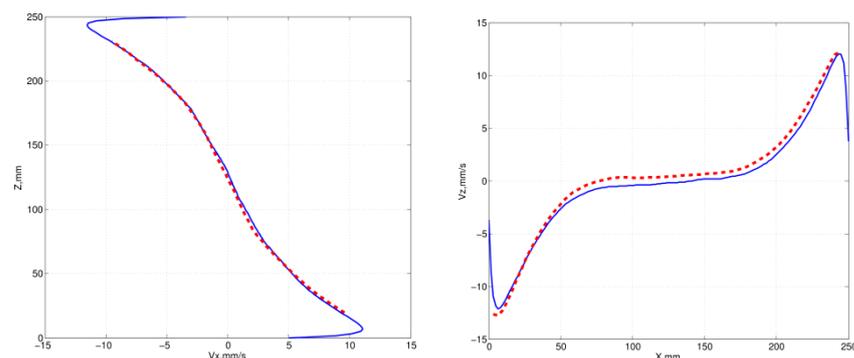


Рис. 38 - Профили средней по времени скорости, синяя линия – расчет, красная штриховая линия – эксперимент (слева – профиль вертикальной компоненты скорости, справа – профиль горизонтальной компоненты скорости)

Для горизонтальной компоненты скорости среднеквадратичное по профилю отклонение расчета от эксперимента составило 0,17 мм/с. Для вертикальной компоненты скорости аналогичные оценки дают среднеквадратичное отклонение в 0,62 мм/с.

Кросс-верификация по приведенным задачам показала отсутствие различия между двумя алгоритмами, что подтверждается использованием одних и тех же исходных уравнений Навье-Стокса. Данные задачи отражают дополнительные функциональные возможности (сопряженный теплообмен и развитая турбулентная конвекция).

В итоге можно утверждать, что верификация показала хорошее согласие с реперными данными (эмпирическими или экспериментальными). Данный факт подтверждает правильность реализации совмещенного алгоритма COUPLED. Напомним, что обширный набор тестовых задач, моделируемых в пакете программ ЛОГОС с использованием алгоритма SIMPLE и COUPLED, представлен в работах [Козелков и др., 2014с; Козелков и др., 2015b].

Помимо точности получаемых результатов остается вопрос эффективности реализации совмещенного алгоритма, что будет отражено в следующей главе.

2.6 Исследование эффективности совмещенного и разделенного алгоритма

Применяя алгоритмы эффективной параллельной реализации (формат хранения сеточной модели, фиктивные ячейки и так далее) и настройки решателя СЛАУ для совмещенного алгоритма, сравним эффективность совмещенного и разделенного алгоритма при счете на последовательности сгущающихся сеток. Отметим, что точность получаемых результатов не является целью данного параграфа, и результаты, получаемые по совмещенному алгоритму, находятся в пределах численной погрешности.

Турбулентное течение в трубе

Рассмотрим стационарное изотермическое турбулентное течение вязкой несжимаемой жидкости в прямолинейной гладкой круглой трубе. Параметры течения жидкости соответствуют числу Рейнольдса $Re = 10^5$.

Рассмотрим численное решение на трех вариантах сеточной модели (Рис. 39). Вблизи твердых стенок построены призматические слои с коэффициентом роста 1.12, толщина первой расчетной ячейки во всех сетках обеспечивает значение $y^+ < 1$ ($\Delta x^+ = 3e - 6 \Delta x^+$ м.). Параметры, необходимые для построения расчетной модели, приведены в таблице 12.

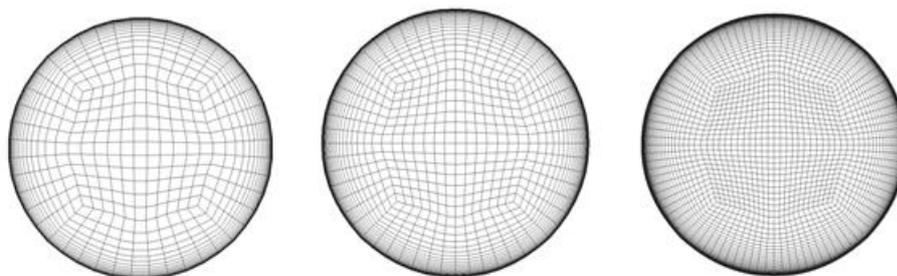


Рис. 39 - Примеры сеточных моделей (MESH1, MESH2, MESH3)

Таблица 12 - Параметры построения сеточных моделей

Расчетная сетка	Количество ячеек, млн.	Характерный размер ячеек в основной области $\Delta = \max(\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z)$, м.	Количество ячеек в области сгущения
MESH1	0.6	$8e-4$	20
MESH2	1.02	$6e-4$	40
MESH3	2.5	$4e-4$	60

Расчеты выполнены в стационарной постановке до сходимости по массе порядка 10^{-6} кг. Графики сходимости итерационного процесса для совмещенного и разделенного решателя (со стандартными параметрами релаксации) представлены на рисунке 40.

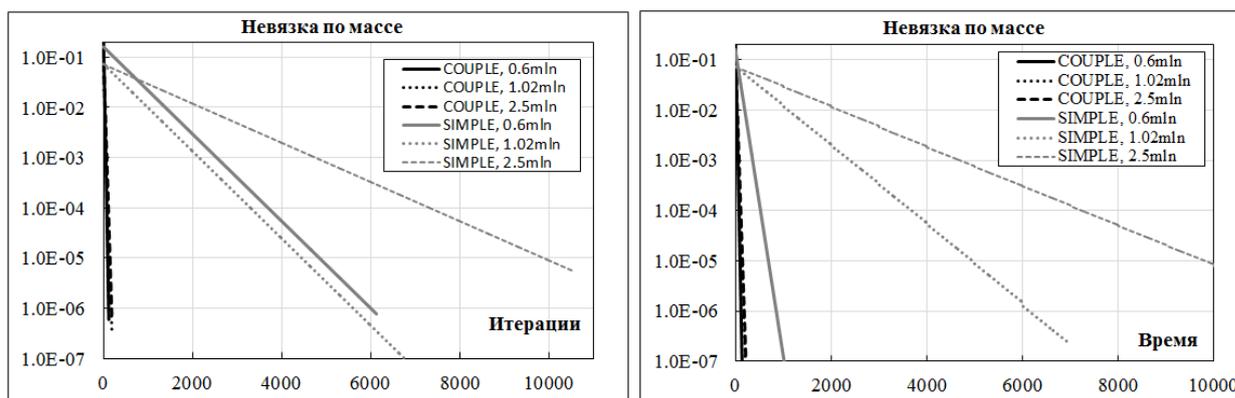


Рис. 40 – Сходимость по итерациям и по времени

Сводные результаты сравнения разделенного и совмещенного решателя для данной задачи сведены таблицу 13.

Таблица 13 – Результаты расчета

Сетка	Итерации			Время, сек.		
	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й
MESH1	116	4395	37.88	274.92	761.92	2.77
MESH2	176	5965	33.89	633.09	1340.9	2.11
MESH3	189	10851	57.41	1492.1	4828.3	3.23

Анализ таблиц показывает, что применение совмещенного алгоритма на подробной сетке позволило сократить общее количество итераций в 57 раз, а физическое время счета более чем в 2 раза.

Турбулентное течение за обратным уступом

Описание постановки данной задачи рассмотрено в первой главе диссертации. Построенные сеточные модели имеют сгущение в области отрыва потока, а также мелкое изотропное разрешение в основной области. Область входа и выхода имеет более грубое разрешение. Вблизи твердых стенок построены призматические слои с коэффициентом роста 1.12, толщина первой расчетной ячейки во всех сетках обеспечивает значение $y^+ < 1$ ($\Delta x^+ = 2.3e - 5$ м.). Расчетная область в направлении 3-й координаты z имеет толщину, равную удвоенной высоте уступа.

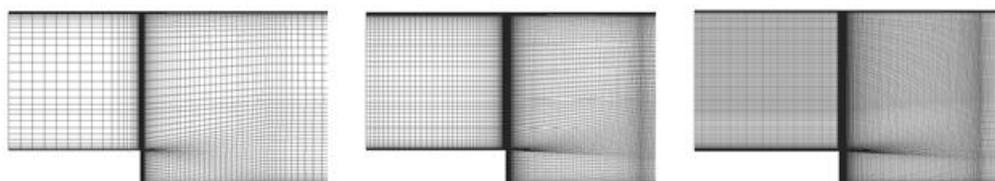


Рис. 41 – Примеры сеточных моделей

Таблица 14 – Параметры построения сеточных моделей

Расчетная сетка	Кол-во ячеек, млн.	Δx^+ , м	Δz^+ , м	Характерный размер ячеек в основной области $\Delta = \max(\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z)$ м
MESH1	0.06	$2.3e-5$	$1e-2$	$5e-2$
MESH2	0.5	$2.3e-5$	$2.5e-3$	$2.7e-3$
MESH3	0.88	$2.3e-5$	$5e-3$	$2e-3$

Расчеты выполнены в стационарной постановке до сходимости порядка 10^{-6} кг. Графики сходимости итерационного процесса для совмещенного и разделенного решателя (со стандартными параметрами релаксации) представлены на рисунке 42.

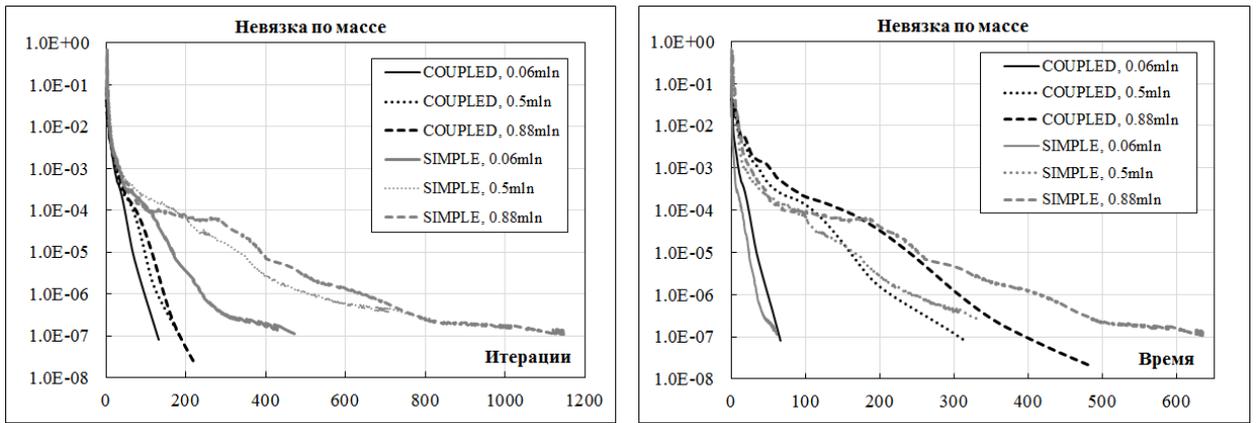


Рис. 42 – Сходимость по итерациям и по времени

Сводные результаты сравнения разделенного и совмещенного решателя для данной задачи сведены таблицу 15.

Таблица 15 – Результаты расчета

Сетка	Итерации			Время, сек.		
	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й
MESH1	67	242	3.61	66.88	34.97	0.52
MESH2	129	503	3.89	215.7	242.76	1.13
MESH3	146	641	4.39	308.08	414.86	1.35

Анализ данных показывает, что применение совмещенного алгоритма позволило сократить общее количество итераций в 4-5 раза. Однако, физическое время счета задачи зависит от сеточной модели, то есть на грубой сетке время для разделенного решателя меньше, а на более подробной сетке совмещенный решатель оказывается быстрее на 35%.

Течение в плоском асимметричном диффузоре

Рассмотрим стационарное турбулентное течение вязкой несжимаемой жидкости в плоском асимметричном диффузоре. Число Рейнольдса $Re = 20000$. Вблизи твердых стенок построены призматические слои с коэффициентом роста 1.12, толщина первой расчетной ячейки во всех сетках обеспечивает значение $y^+ < 1$ ($\Delta x^+ = 1e - 5$ м.).



Рис. 43 – Примеры сеточных моделей

Таблица 16 – Результаты расчета

Расчетная сетка	Кол-во ячеек, млн.	Δx^+ , м	Δz^+ , м	Характерный размер ячеек в основной области $\Delta = \max(\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z)$ м	Кол-во ячеек в основной области
MESH1	0.044	1e-5	1e-3	2.4e-3	80
MESH2	0.062	1e-5	1e-3	2e-3	100
MESH3	0.105	1e-5	4e-3	1.3e-3	140

Расчеты выполнены в стационарной постановке до сходимости порядка 10^{-6} . Графики сходимости итерационного процесса для совмещенного и разделенного решателя (со стандартными параметрами релаксации) представлены на рисунке 44.

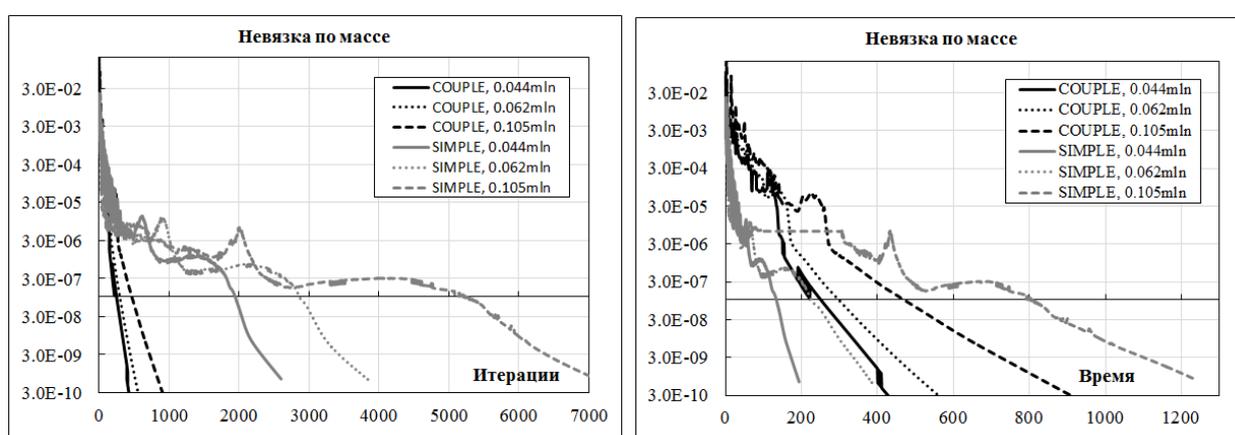


Рис. 44 – Сходимость по итерациям и по времени

Сводные результаты сравнения разделенного и совмещенного решателя для данной задачи сведены в таблицу 17.

Таблица 17 – Результаты расчета

Сетка	Итерации			Время, сек.		
	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й
MESH1	163	834	1.52	20.04	66.13	0.87
MESH2	189	816	4.31	315.97	336.79	1.07
MESH3	223	1147	5.14	484.05	629.83	1.3

Анализ данных графиков показывает, что применение совмещенного алгоритма позволило сократить общее количество итераций от 4 до 5 раз. Физическое время счета задачи, как и в предыдущем тесте, зависит от сеточной модели, то есть на грубой сетке время для разделенного решателя меньше, а на более подробной сетке совмещенный решатель оказывается быстрее на 30%.

Как и в предыдущем тестовом случае, физическое время счета зависит только от количества ячеек, то есть чем выше разрешение сеточной модели, тем быстрее получение результата с помощью совмещенного алгоритма.

Таким образом, численные эксперименты продемонстрировали преимущество совмещенного алгоритма COUPLED. Его использование позволит повысить эффективность счета (к уже имеющейся в алгоритме SIMPLE) на 30%.

2.7 Заключение

В главе представлена математическая модель для описания течений вязкой несжимаемой жидкости. Подробно описана схема дискретизации уравнений при использовании совмещенного итерационного алгоритма. Описаны основные шаги итерационной процедуры COUPLED для решения стационарных и нестационарных задач.

В параграфе 2.2 представлено исследование эффективности параллельной реализации алгоритма SIMPLE на произвольных неструктурированных сетках. В параграфе 2.3 описана верификация алгоритма. В параграфе 2.3 приведено описание совмещенного алгоритма COUPLED для численного решения уравнений Навье-Стокса на неструктурированных сетках с учетом поправки Рхи-Чоу и неортогональной коррекции. В параграфе 2.4 представлены особенности внедрения совмещенного алгоритма в общую структуру пакета программ ЛОГОС. Результаты верификации и тестирования совмещенного алгоритма приведены в параграфе 2.5. В параграфе 2.6 приведены исследования эффективности совмещенного алгоритма по сравнению с алгоритмом SIMPLE.

Диссертант лично реализовал совмещенный алгоритм COUPLED и внедрил его в общую структуру пакета программ ЛОГОС. При определяющем участии диссертанта проведена верификация совмещенного алгоритма для решения тестовых и промышленно-ориентированных задач, а также проведено его численное исследование эффективности и определение оптимальных настроек решателя AMG. Помимо этого, автором был адаптирован многосеточный решатель СЛАУ для блочных матриц. Совместно с коллегами исследована эффективность совмещенного алгоритма, проведена его верификация на серии численных экспериментов на произвольных сеточных моделях, а также Определены оптимальные настройки совмещенного алгоритма SIMPLE которые позволяют считать задачи в среднем на 30% эффективнее/быстрее чем классический алгоритм SIMPLE.

ГЛАВА 3. ПРИМЕНЕНИЕ СОВМЕЩЕННОГО АЛГОРИТМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОМЫШЛЕННО-ОРИЕНТИРОВАННЫХ ЗАДАЧ

3.1 Введение

Применимость реализованных алгоритмов и методик к расчету промышленно-ориентированных задач, как правило, подтверждается численным моделированием задач, имеющих экспериментальные или аналитические решения. Большинство подобных задач имеют двумерную постановку и простую геометрическую форму (уступ, каверна, цилиндр и так далее). В случае решения промышленно-ориентированных задач, где зачастую количество расчетных ячеек приближается к миллиарду, а геометрическая сложность конструкции может порождать в процессе пространственной дискретизации ячейки произвольного размера и формы, требуется дополнительная адаптация реализованных алгоритмов. Ярким примером подобной адаптации могут послужить задачи численного моделирования течений в реакторах энергетических установок или теплообменников, геометрии которых заменяют приближением пористого тела и решением уравнений Бринкмана-Форхгеймера [Brinkman, 1952; Kaviani, 1991]. Такая замена позволяет значительно сократить количество расчетных ячеек и при этом сохранить приемлемую точность получаемых результатов. Более того, такой подход позволяет моделировать течения как в областях, целиком занятых пористым телом, так и течения, содержащие граничащие подобласти свободной жидкости и пористого тела. При этом в непористых областях уравнения Бринкмана-Форхгеймера вырождаются в исходные уравнения Навье-Стокса. Опыт применения этих уравнений продемонстрировал хорошую точность в описании течений в пористых средах [Costa et al., 2004].

Проблема эффективности также актуальна и для моделирования течений в пористых средах. В этом случае повысить скорость сходимости возможно за счет использования совмещенного алгоритма, описанного во второй главе диссертации. Как было показано выше, применение совмещенного алгоритма для решения ламинарных течений вязкой сжимаемой и несжимаемой жидкости увеличивает в разы скорость сходимости по сравнению с алгоритмом SIMPLE на последовательности сгущающихся сеток. При моделировании течений в пористых средах дополнительно повысить эффективность возможно за счет полностью неявной аппроксимации линейного тензора сопротивления даже в анизотропном случае, что существенно повысит скорость сходимости к уже имеющейся.

В данной главе подробно остановимся на решении промышленно-ориентированного класса задач с использованием совмещенного алгоритма, эффективность реализации которого подтверждена многочисленными экспериментами [Costa et al., 2004], часть которых приведена во второй главе диссертации. Помимо этого приведена реализация совмещенного алгоритма для моделирования течений в пористых средах.

3.2 Обобщение совмещенного алгоритма для моделирования течений в анизотропных пористых средах

Система уравнений Бринкмана-Форхгеймера описывает течения вязкого ламинарного несжимаемого газа в деформируемой во времени пористой среде. Записанная относительно реальной скорости, система имеет вид [Costa et al., 2004; Kaviany, 1991; Nield & Bejan, 2013]:

$$\begin{cases} \frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{u}) = 0, \\ \frac{\partial(\varepsilon\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\varepsilon\nabla \cdot (p\mathbf{I}) + \nabla \cdot (\varepsilon\boldsymbol{\tau}) - \left(\frac{\varepsilon^2\mu}{\mathbf{K}} + F \frac{\varepsilon^3\rho|\mathbf{u}|}{\sqrt{\mathbf{K}}} \right) \cdot \mathbf{u}, \end{cases} \quad (94)$$

где $\varepsilon = V_{por}/V_{all}$ - безразмерный коэффициент пористости, V_{por} - объем пор, V_{all} - общий объем ячейки, \mathbf{u} - вектор реальной скорости.

Тензор проницаемости \mathbf{K} определяется геометрической структурой пористой среды (не зависит от свойств материала) и в общем случае определяется геометрией порового пространства. Из уравнения (94) видно, что \mathbf{K} имеет размерность квадрата длины и является грубой мерой среднеквадратичного порового диаметра. Для изотропных пористых сред тензор проницаемости \mathbf{K} является диагональным, что говорит об одинаковости геометрических свойств среды во всех направлениях. В случае анизотропных пористых сред или задания проницаемости в локальных системах координат (например, цилиндрических) \mathbf{K} является либо ортотропным, либо симметричным с заполненными недиагональными коэффициентами. В неоднородных пористых средах тензор проницаемости может задаваться функцией от координат и времени.

Влияние нелинейного коэффициента Форхгеймера F ощутимо при локальных числах Дарси бóльшими 10^{-3} , поэтому только в ряде некоторых случаев ламинарного течения этим слагаемым пренебрегают [Nield & Bejan, 2013].

Модифицированная молекулярная вязкость Бринкмана задается в пористой области, зависит только от коэффициента пористости среды и представляется в виде [Brinkman, 1952]:

$$\mu_B = (1 - \varepsilon)^{-0.25}. \quad (95)$$

Последние два слагаемых в уравнении движения представляют собой слагаемые Дарси и Форхгеймера. Эти слагаемые удобнее представить в виде тензора сопротивления:

$$\mathbf{P} = \left(\frac{\varepsilon^2 \mu}{\mathbf{K}} + F \frac{\varepsilon^3 \rho |\mathbf{u}|}{\sqrt{\mathbf{K}}} \right) \cdot \mathbf{u} = (\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\alpha} |\mathbf{u}|) \cdot \mathbf{u}, \quad (96)$$

где $\boldsymbol{\alpha}$ - инерциальный (нелинейный) тензор сопротивления, $\boldsymbol{\beta}$ - вязкий (линейный) тензор сопротивления. В тензорном виде уравнение (94) представляется в виде:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{bmatrix} \cdot |\mathbf{u}|. \quad (97)$$

Система уравнений (94) описывает течения вязкой сжимаемой и несжимаемой жидкостей, как в пористых, так и в свободных областях, а также на границе раздела различных пористых сред. Данную систему можно использовать и для решения задач с переменным по пространству и времени коэффициентом пористости и, соответственно, задавать реальную скорость.

Формирование коэффициентов матричной СЛАУ (7) можно представить в виде следующих последовательных шагов.

На первом шаге формируются коэффициенты для конвективного и диффузионного слагаемого векторного алгебраического уравнения сохранения количества движения.

$$\begin{aligned} a_N^{uu} &= a_N^{vv} = a_N^{ww} = \varepsilon_f \mu_f S_f^* - \min(m_f, 0), \\ a_P^{uu} &= a_P^{vv} = a_P^{ww} = \varepsilon_f \mu_f S_f^* - \min(m_f, 0), \\ b_P^u &= b_P^v = b_P^w = \varepsilon_f \mu_f (\nabla \mathbf{u}_f + \nabla \mathbf{u}_f^T) \cdot \mathbf{S}_f - \varepsilon_f \mu_f S_f^* (\nabla \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}). \end{aligned} \quad (98)$$

На следующем шаге вычисляются коэффициенты для слагаемого сил давления в уравнении движения. В совмещенном алгоритме данное слагаемое вычисляется полностью неявно, что невозможно в разделенном алгоритме SIMPLE, так как давление в исходное уравнение входит как параметр и не выражается в виде искомой величины. По этой причине дискретизация сил давления в алгоритме SIMPLE происходит явно, и коэффициенты давления заносятся в правую часть с предыдущего итерационного шага. Ниже формулы (99) и (100) демонстрируют отличие в формировании коэффициентов

матрицы. Для совмещенного алгоритма модифицируются коэффициенты блочной матрицы:

$$\begin{aligned} a_N^{up} &= \varepsilon_f (1 - \lambda_f) S_f^x, & a_N^{vp} &= \varepsilon_f (1 - \lambda_f) S_f^y, & a_N^{wp} &= \varepsilon_f (1 - \lambda_f) S_f^z, \\ a_P^{up} &= \varepsilon_f \lambda_f S_f^x, & a_P^{vp} &= \varepsilon_f \lambda_f S_f^y, & a_P^{wp} &= \varepsilon_f \lambda_f S_f^z. \end{aligned} \quad (99)$$

Последним шагом в формировании коэффициентов уравнения движения является ключевой этап реализации модели пористого тела. На данном шаге, в дополнение к вышеописанным коэффициентам блочной СЛАУ, суммируются слагаемые нелинейной и линейной части тензора проницаемости:

$$\begin{aligned} a_P^{uu} &+ = (|\mathbf{u}| \alpha_{11} + \beta_{11}) V, & a_P^{uv} &+ = (|\mathbf{u}| \alpha_{12} + \beta_{12}) V, & a_P^{uw} &+ = (|\mathbf{u}| \alpha_{13} + \beta_{13}) V, \\ a_P^{vu} &+ = (|\mathbf{u}| \alpha_{21} + \beta_{21}) V, & a_P^{vv} &+ = (|\mathbf{u}| \alpha_{22} + \beta_{22}) V, & a_P^{vw} &+ = (|\mathbf{u}| \alpha_{23} + \beta_{23}) V, \\ a_P^{wu} &+ = (|\mathbf{u}| \alpha_{31} + \beta_{31}) V, & a_P^{wv} &+ = (|\mathbf{u}| \alpha_{32} + \beta_{32}) V, & a_P^{ww} &+ = (|\mathbf{u}| \alpha_{33} + \beta_{33}) V. \end{aligned} \quad (100)$$

Как видно, дискретизация линейной части тензора проницаемости (100) происходит полностью неявно, что недостижимо для алгоритма SIMPLE, ввиду последовательного решения трех компонент скоростей и, как следствие, отсутствия неявной связи между компонентами скоростей.

После полного формирования коэффициентов уравнения движения (заполнение нижних трех строчек блочной матрицы) происходит вычисление коэффициентов матрицы, отвечающих за уравнение неразрывности (верхняя строка). И здесь ключевым моментом при дискретизации является полностью неявное вычисление массового потока, в отличие от разделенного алгоритма, где массовый поток используется с предыдущего итерационного слоя и заносится в правую часть. Помимо массового потока также формируются диагональные элементы и правая часть относительно давления, причем их формирование аналогично алгоритму SIMPLE:

$$a_N^{pp} = -\varepsilon_f^2 \rho_f D_f S_f^*, \quad a_P^{pp} = - \sum_{f=nb(P)} a_N^{pp}, \quad (101)$$

$$b_P^p = \varepsilon_f^2 \rho_f D_f S_f^* (\nabla p_N \cdot \mathbf{d}_{Pf} - \nabla p_P \cdot \mathbf{d}_{Nf}),$$

и неявный массовый поток для совмещенного алгоритма:

$$\begin{aligned} a_N^{pu} &= \lambda_f \varepsilon_f \rho_f S_f^x, & a_P^{pu} &= (1 - \lambda) \varepsilon_f \rho_f S_f^x, \\ a_N^{pv} &= \lambda \varepsilon_f \rho_f S_f^y, & a_P^{pv} &= (1 - \lambda) \varepsilon_f \rho_f S_f^y, \\ a_N^{pw} &= \lambda \varepsilon_f \rho_f S_f^z, & a_P^{pw} &= (1 - \lambda) \varepsilon_f \rho_f S_f^z, \end{aligned} \quad (102)$$

где $D_f = \frac{V_P + V_N}{a_P + a_N}$ - среднегармоническое усреднение коэффициента поправки Рхи-

Чоу, ρ_f - плотность на грани f , вычисляемая по заданной схеме (в данной работе схема дискретизации не важна ввиду использования несжимаемого вещества). Стоит отметить,

что вычисление скорости на грани \mathbf{u}_f (для массового потока в уравнении неразрывности) и давления (для сил давления в уравнении движения) происходит с противоположными интерполяционными факторами:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_f &= (1 - \lambda_f) \mathbf{u}_P + \lambda_f \mathbf{u}_N, \\ p_f &= \lambda_f p_P + (1 - \lambda_f) p_N. \end{aligned} \tag{103}$$

Данный подход позволяет согласовывать поля скорости и давления по правилам среднегармонического усреднения [Rhie & Chow, 1983].

Обработка граничных условий происходит аналогичным образом, описанным во второй главе диссертации.

3.3 Верификация совмещенного алгоритма для пористых сред

Течение жидкости через пористую вставку

В данной задаче рассматривается двумерное течение в плоскопараллельном канале заданной высотой H и длиной $L = 8H$ [Costa et al., 2004]. На расстоянии $3H$ от входа в канал установлена прямоугольная вставка из однородного изотропного пористого материала длиной $2H$. Длина канала L выбрана достаточно большой, чтобы исключить влияние областей установления потока на конечный результат. Рассматриваемая область схематично представлена на рисунке 45. Задача рассматривается в двумерной постановке, толщина канала исключается из рассмотрения наложением граничных условий симметрии. В качестве граничных условий для горизонтальных границ применяются жесткие стенки с прилипанием.

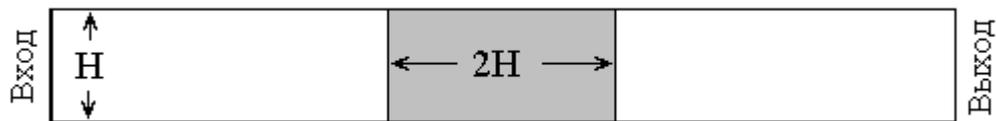


Рис. 45 - Схематичное изображение расчетной области

Определяющими безразмерными параметрами для этой задачи являются: число Рейнольдса $Re = 1$ и число Дарси $Da = 10^{-3}$, исходя из которых выбираются размерные величины свойств жидкости и коэффициенты сопротивления для пористого тела. Коэффициент пористости ε задавался равным единице.

Для решения задачи использовались три равномерные сеточные модели, параметры которых представлены в таблице.18.

Таблица 18 – Сеточные модели

№	Тип сеточной модели	Характерный размер вдоль потока, м	Количество ячеек
1	Равномерная	0.025	6400
2	Равномерная	0.0125	25600
3	Равномерная	0.00625	102400

Расчеты выполнены с использованием совмещенного и разделенного решателя в стационарной постановке до сходимости по массе порядка 10^{-6} кг. Графики сходимости итерационного процесса для совмещенного и разделенного решателя (со стандартными параметрами релаксации) представлены на рисунке 46.

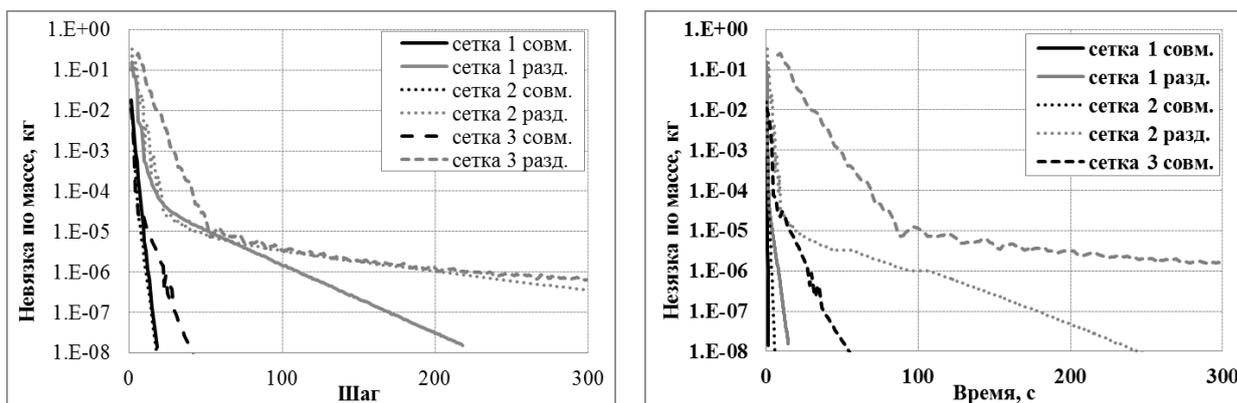


Рис. 46 - Графики зависимости невязки по массе от шага и времени расчета

Сводные результаты сравнения разделенного и совмещенного решателя для данной задачи сведены в таблице 19.

Таблица 19 – Результаты расчета

Сетка	Итерации			Время, сек.		
	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й
1	13	111	8.5	1.03	8.04	7.8
2	12	203	16.9	3.69	106.90	29.0
3	23	199	8.7	28.52	340.76	11.9

Анализ данных показывает, что применение совмещенного алгоритма на подробной сетке позволило сократить общее количество итераций до 17 раз, а физическое время счета до 29 раз.

При анализе результатов сравниваются профили скорости и давления вдоль горизонтальной линии, проходящей через середину канала. Графики сравнения полученных результатов с результатами [Costa et al., 2004] представлены на рисунке 47.

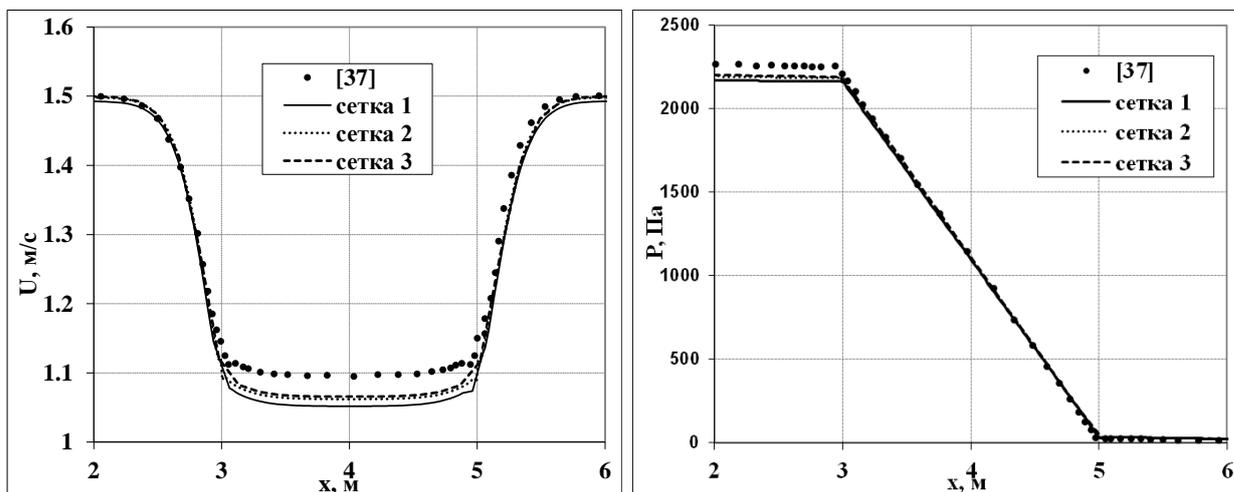


Рис. 47 - Профили скорости и давления вдоль горизонтальной линии, проходящей через середину канала

Полученные в расчетах величины скорости и перепадов давления на всех сетках полностью совпадают и находятся в доверительном согласии с результатами численных расчетов в [Costa et al., 2004].

Течение жидкости в плоском разделенном канале.

Задача приведена в [Costa et al., 2004] и описывает течения вязкой несжимаемой жидкости в плоскопараллельном канале высотой $2H$ и длиной $L \gg 2H$. Нижняя область высотой H занята пористой средой. Длина канала L выбирается достаточно большой, чтобы исключить влияние областей установления течения на конечный результат. Рассматриваемая физическая область схематически изображена на рисунке 48.

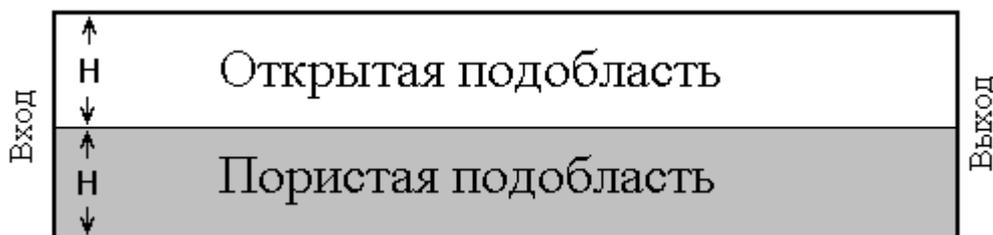


Рис. 48 - Схематичное изображение расчетной области

Определяющими безразмерными параметрами для этой задачи являются: число Рейнольдса $Re = 1$ в открытой области и число Дарси $Da = 10^{-2}$. Коэффициент пористости ε задавался равным единице.

Для решения задачи использовались три равномерные сеточные модели, параметры которых представлены в таблице 20.

Таблица 20 – Результаты расчетов

№	Тип сеточной модели	Характерный размер поперек потока, м	Количество ячеек
1	Равномерная	0.04	10000
2	Равномерная	0.02	20000
3	Равномерная	0.01	80000

Расчеты выполнены с использованием совмещенного и разделенного решателя в стационарной постановке до сходимости по массе порядка 10^{-6} кг. Графики сходимости итерационного процесса для совмещенного и разделенного решателя (со стандартными параметрами релаксации) представлены на рисунке 49.

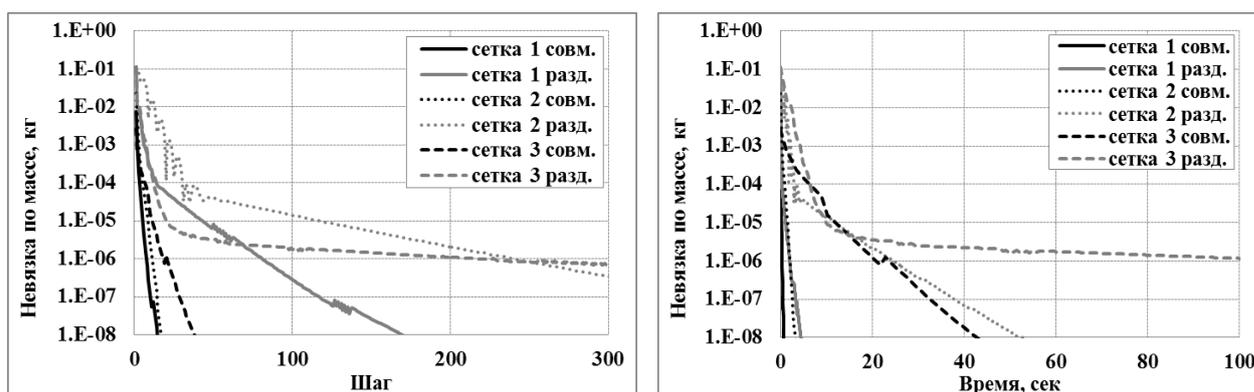


Рис. 49 – Сходимость по итерациям и по времени

Сводные результаты сравнения разделенного и совмещенного решателя для данной задачи сведены в таблице 21

Таблица 21 – Результаты расчетов

Сетка	Итерации			Время, сек.		
	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/Совмещ-й	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/Совмещ-й
1	8	82	10.25	0.36	2.04	5.67
2	12	241	20.08	2.12	24.44	11.53
3	19	218	11.47	21.85	114.17	5.22

Анализ данных показывает, что применение совмещенного алгоритма на подробной сетке позволило сократить общее количество итераций до 20 раз, а физическое время счета до 11 раз.

Результаты расчетов сравниваются с результатами, представленными в работе [Costa et al., 2004], по профилю горизонтальной компоненты скорости вдоль поперечного сечения канала в области установившегося течения.

На рисунке 50 представлены графики продольной компоненты скорости на различных сеточных моделях в сравнении с результатами [Costa et al., 2004]. На графике

по оси абсцисс отложена высота канала, по оси ординат – продольная компонента скорости.

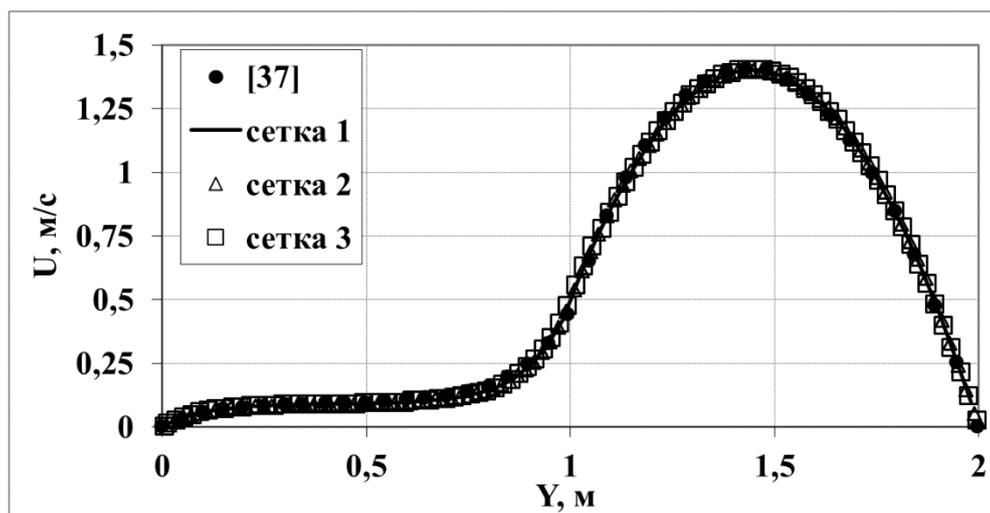


Рис. 50 - График продольной скорости вдоль центра канала

Наблюдается хорошее согласование с результатами [Costa et al., 2004], причем на всех трех сетках, что свидетельствует о работоспособности реализованной методики.

Течение жидкости через цилиндрический фильтр.

Данная задача демонстрирует возможности расчета течений жидкости в цилиндрических симметричных областях, занятых пористым телом. Примером может послужить задача фильтрации потока воздуха в двигателе автомобиля, где фильтр представлен в виде цилиндра. Основная сложность расчета такого рода задач состоит в несоответствии коэффициентов сопротивления тензоров, заданных в локальной цилиндрической и в глобальной картезианской системе координат. Дело в том, что если в локальной системе данный тензор представлен лишь диагональной частью, то в глобальной системе он трансформируется и содержит значения тензора сопротивления во внедиагональных элементах. Представленный в данной работе совмещенный алгоритм, как сказано выше, позволяет производить дискретизацию исходных внедиагональных элементов полностью неявно.

Течение жидкости в пористой области задается только в радиальном направлении. Это обеспечивается за счет усиления коэффициентов сопротивления в поперечном и продольном направлениях относительно радиального. Диагональный тензор сопротивления задается в цилиндрической системе координат таким образом, чтобы жидкость текла только в радиальном направлении. Такой эффект возможен, например, при следующих значениях тензоров сопротивления:

$$\mathbf{P}_{local} = \begin{bmatrix} 100 & 0 & 0 \\ 0 & 10000 & 0 \\ 0 & 0 & 10000 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 100 & 0 \\ 0 & 0 & 100 \end{bmatrix} \cdot |\mathbf{u}_{local}|. \quad (104)$$

Значение величин коэффициентов сопротивления не оказывает существенного влияния на картину течения (влияет только на перепад давления). Здесь важно отличие коэффициентов в радиальном направлении от коэффициентов в поперечном и продольном направлениях в 100 раз.

При переходе от локальной системы координат к глобальной, данный тензор трансформируется согласно правилу перехода от одной системы координат к другой:

$$\mathbf{P}_{global} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{P}_{local} \cdot \mathbf{M}, \quad (105)$$

где \mathbf{M} - матрица перехода. Например, для данной задачи трансформация тензора в глобальную систему координат будет выглядеть следующим образом:

$$\mathbf{P}_{global} = \begin{bmatrix} P_{xx} \cdot \cos(\varphi) \cdot \cos(\varphi) + P_{yy} \cdot \sin(\varphi) \cdot \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \cdot \sin(\varphi) \cdot (P_{xx} - P_{yy}) & 0 \\ \cos(\varphi) \cdot \sin(\varphi) \cdot (P_{xx} - P_{yy}) & P_{xx} \cdot \sin(\varphi) \cdot \sin(\varphi) + P_{yy} \cdot \cos(\varphi) \cdot \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & P_{zz} \end{bmatrix}, \quad (106)$$

где φ - угол поворота в цилиндрической системе координат. Таким образом, показано, что внедиагональные коэффициенты не равны нулю и способ их дискретизации влияет на скорость сходимости.

Геометрия расчетной области и сеточная модель приведены на рисунке 51. Сеточная модель построена в препроцессоре пакета программ ЛОГОС [Анищенко и др., 2014]. Для решения задачи использовалась равномерная радиальная сетка, содержащая 315000 ячеек.

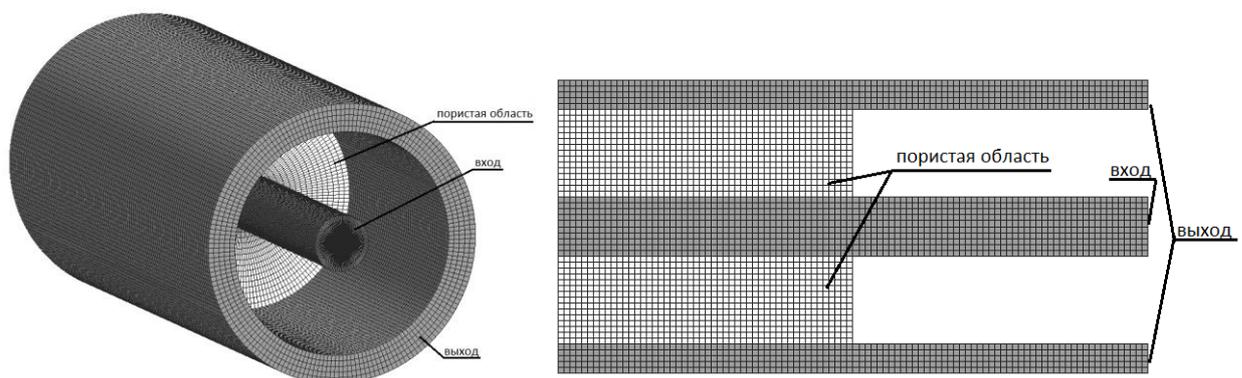


Рис. 51 - График продольной скорости вдоль центра канала

На вход в расчетную область подается жидкость с заданным расходом, на выходе задано статическое давление. Течение соответствует числу $Re = 1000$, где D - диаметр входного цилиндра.

Расчеты выполнены с использованием совмещенного и разделенного решателя в стационарной постановке до сходимости по массе порядка 10^{-6} кг. Графики сходимости итерационного процесса для совмещенного и разделенного решателя (со стандартными параметрами релаксации) представлены на рисунке 52.

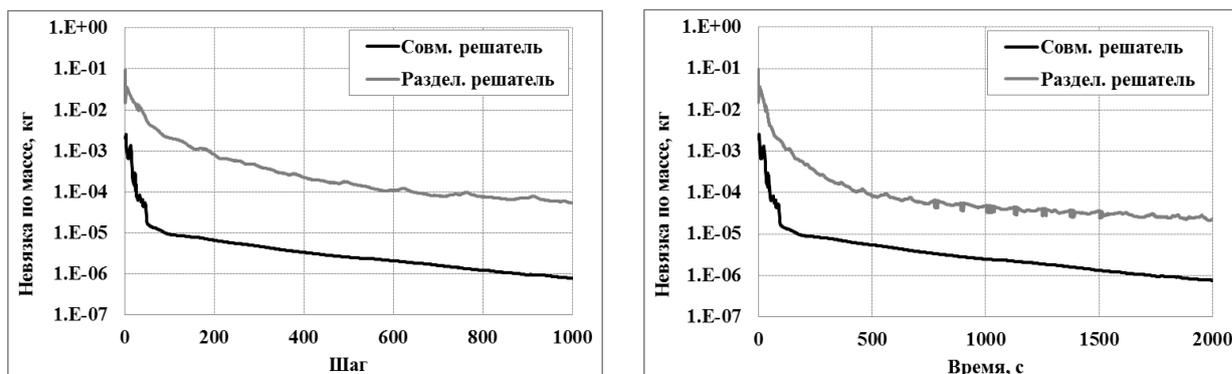


Рис. 52 - График продольной скорости вдоль центра канала

Сводные результаты сравнения разделенного и совмещенного решателя для данной задачи приведены в таблице 22.

Таблица 22 – Результаты расчетов

Итерации			Время, сек.		
Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й	Совмещ-й решатель	Раздел-й решатель	Раздел-й/ Совмещ-й
883	10837	12.3	1725.7	7943.3	4.6

Анализ данных показывает, что применение совмещенного алгоритма на подробной сетке позволило сократить общее количество итераций до 12 раз, а физическое время счета до 4 раз.

Таким образом, представлен и реализован совмещенный алгоритм, который позволяет моделировать течения жидкости, как целиком в пористых, так и в смешанных областях. Практическое внедрение данного алгоритма позволяет решать многочисленные промышленные задачи. С точки зрения важности и сложности моделирования стоит выделить задачи атомной энергетики, а именно численное моделирование работы ядерной энергетической установки в аварийном режиме. Решение подобного рода задач предполагает использование пористых зон в активной зоне реактора, как наименее ресурсоемкого подхода и при этом сохраняя приемлемую точность. Одной из таких задач является тестовый реактор MONJU, о котором речь пойдет в следующем разделе.

3.4 Применение совмещенного алгоритма для решения задач авиации

В настоящее время востребованность численных экспериментов при решении промышленно-ориентированных задач находится на непрерывно восходящем тренде

[Погосян и др., 2013; Betelin et al., 2014; Сафронов и др., 2014]. В первую очередь, это связано с доступностью вычислительных ресурсов и программных средств. По этой причине разработка и усовершенствование новых изделий в различных отраслях промышленности уже не представляется без использования численного моделирования. Особенно это актуально при разработке новой летательной техники, где предсказательность численного эксперимента при определении аэродинамических характеристик (коэффициент лобового сопротивления и подъемной силы), в том числе с использованием подвижных элементов конструкции, достигла высокой точности. Помимо определения интегральных характеристик не менее важной задачей является задача создания комфортных условий в кабине экипажа маневренного самолета при разработке новой авиатехники. В этом случае численный эксперимент должен учитывать влияние системы кондиционирования самолета, аэродинамического нагрева остекления, а также тепловыделения приборов, находящихся в кабине маневренного летательного аппарата.

В данной главе приведены численные расчеты комфортных условий в кабине маневренного самолета, которые в значительной степени определяются состоянием воздушной среды (распределением давления, температуры, скоростей движения воздуха с учетом тепловыделения приборов). Помимо этого решена задача теплового состояния грузового отсека самолета.

Расчет параметров воздушной среды в кабине экипажа маневренного самолета

Проведен расчет тепловых процессов в кабине экипажа с учетом теплопроводности в остеклении фонаря и тепловыделений внутренних приборов. Требуется получить стационарные поля распределения температуры и скорости воздуха в кабине экипажа. Геометрия схематично приведена на рисунке 53.



Рис. 53 – Общая геометрия задачи

Для газодинамической области используется сеточная модель, содержащая 16 призматических слоев и порядка 17 млн. ячеек. На рисунке 54 представлен общий вид расчетной сетки в сечении.

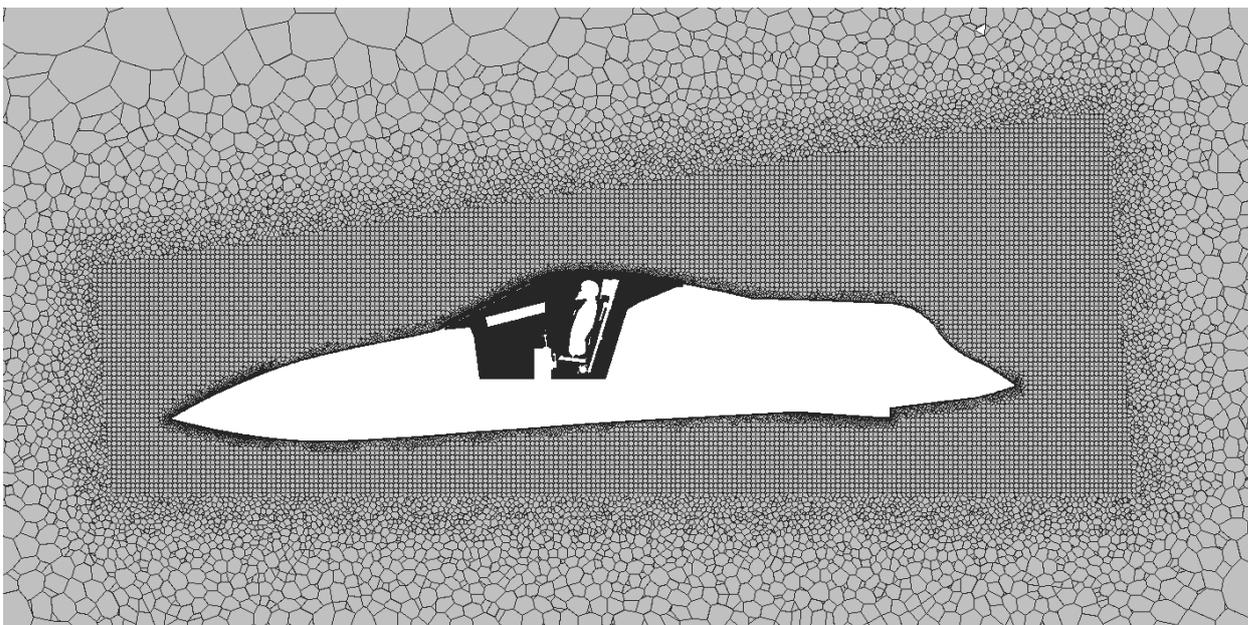


Рис. 54 – Общий вид расчетной сетки в центральном сечении для газодинамической задачи

В сетке для моделирования теплового состояния остекления кабины содержится 10 призматических слоев и 3 млн. ячеек. На рисунке 55 представлен общий вид расчетной сетки.

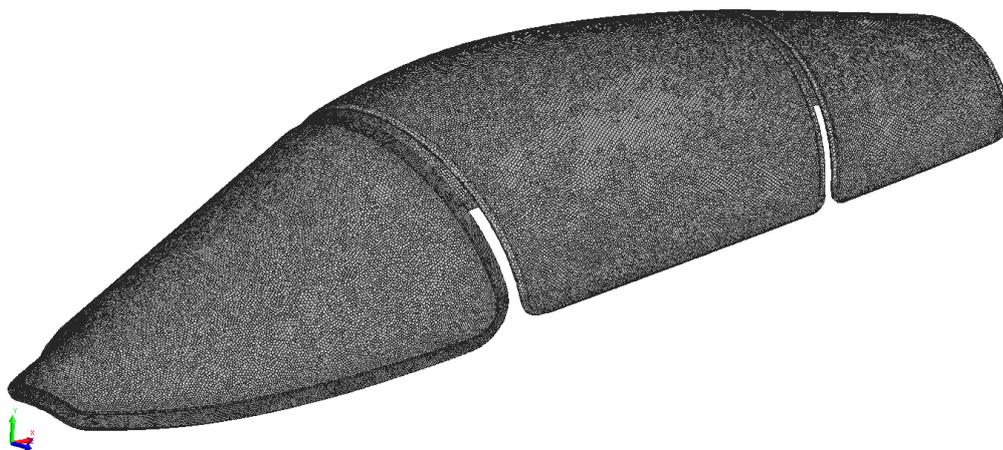


Рис. 55 – Общий вид расчетной сетки для тепловой задачи

Для моделирования воздуха в кабине взяты следующие параметры: $P_{\infty} = 27577 \text{ Па}$, $T_{\infty} = 287.5 \text{ К}$. Температура воздуха поступающего из системы вентиляции кабины составляет $T = 293 \text{ К}$

На элементах системы кондиционирования задавалось граничное условие «массовый расход». На поверхности стенки ставилось граничное условие – «жесткая стенка с прилипанием». Тепловыделяющее оборудование кабины экипажа представлено на рисунке 56.

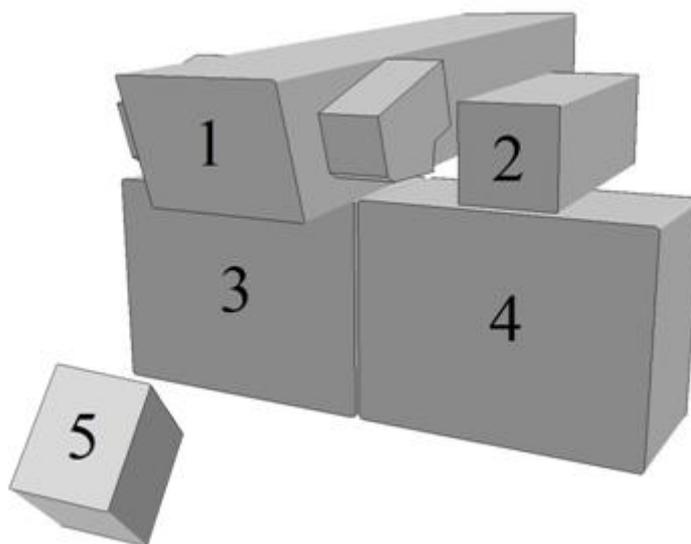


Рис. 56 – Оборудование кабины экипажа

Блоки задаются как «жесткая стенка с прилипанием» с заданным тепловым потоком, представленным в таблице 23.

Таблица 23 – Характеристики тепловыделяющих блоков

№ блока	Тепловой поток, $\frac{Вт}{м^2}$
1	199.2541
2	522.8019
3	367.3677
4	367.4655
5	390.5641

Расчет проводился в два этапа. Сначала моделировалось обтекание экипажа кабины без учета прогрева в остеклении фонаря. Потом с установившегося течения проводился стационарный расчет конвективного теплообмена в остеклении фонаря потоком сжимаемого газа. На рисунках 57-59 приведено поле температуры, полученное в расчете.

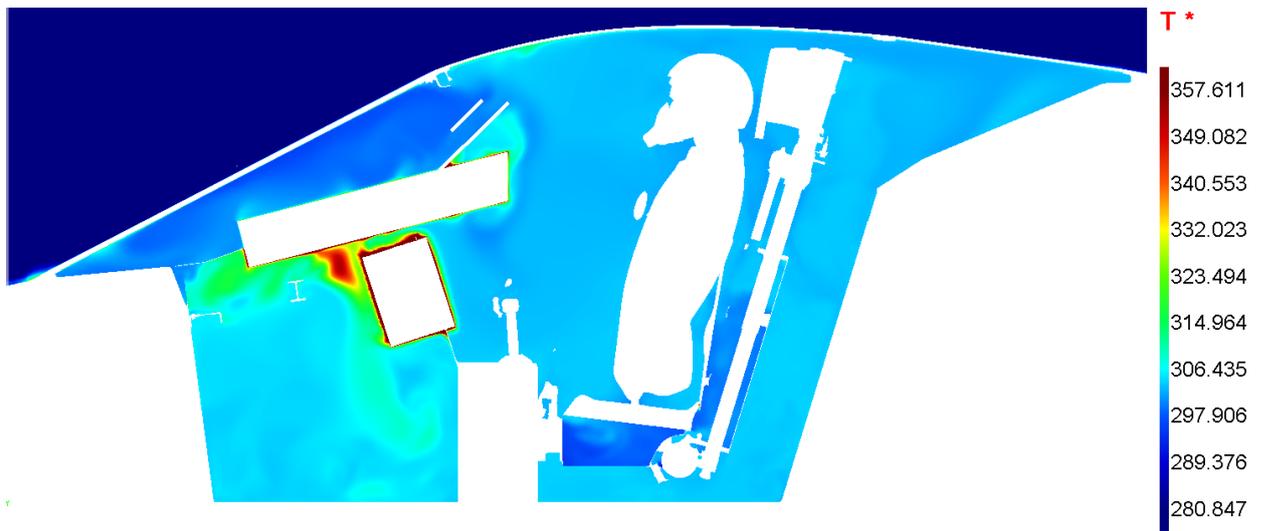


Рис. 57 – Поле температуры в газодинамической области, К

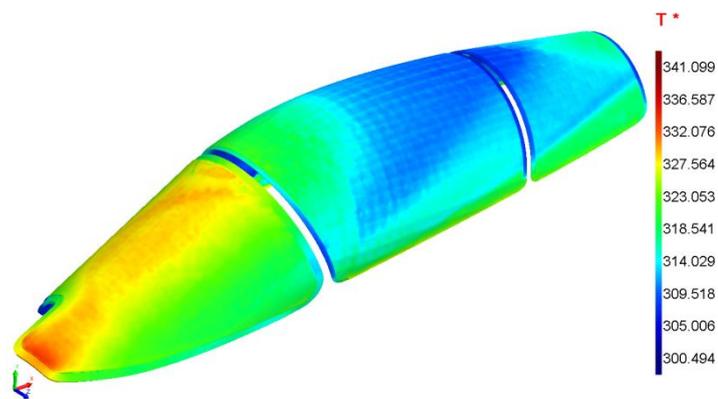


Рис. 58 – Распределение температуры в твердотельной области, К

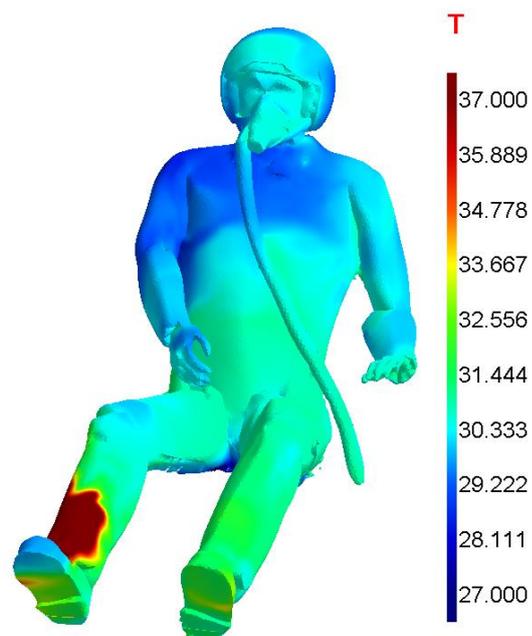


Рис. 59 – Распределение температуры на пилоте, °C

Дополнительно в расчете оценивались температура в датчиках. Схематичное расположение датчиков представлено на рисунке 60. Полученная в сошедшемся решении температура в датчиках приведена в таблице 5.1.1.1.3.

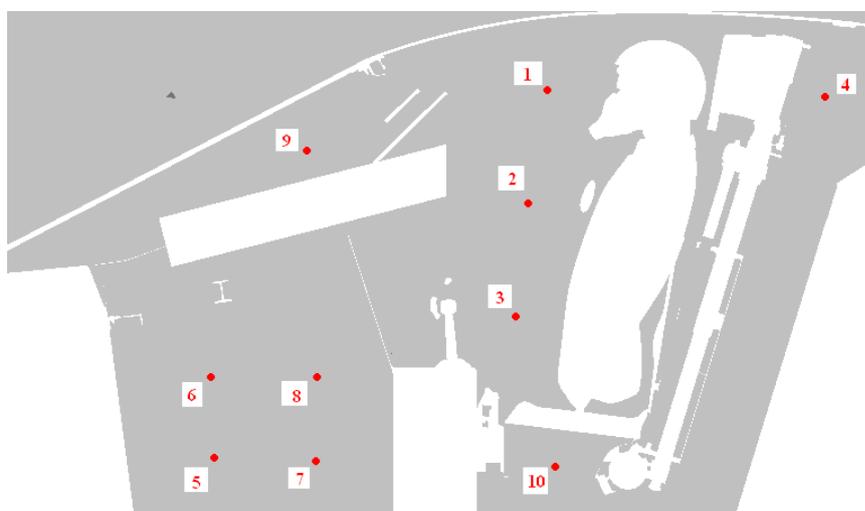


Рис. 60 – Расположение датчиков

Таблица 24 – Температура в датчиках

№ блока	Координата, (м, м, м)	Температура, °С
1	(4.0, 1.2, 0.0)	30.07
2	(3.8, 0.9, 0.0)	29.95
3	(3.8, 0.5, 0.0)	30.07
4	(4.7, 1.1, 0.0)	46.3
5	(3.0, 0.2, 0.0)	31.94
6	(3.0, 0.4, 0.0)	45.02
7	(3.4, 0.2, 0.0)	42.74
8	(3.4, 0.4, 0.0)	32.96
9	(3.3, 1.0, 0.0)	50.04
10	(3.95, 0.2, 0.0)	47.49

Таким образом, решена задача сопряженного теплообмена. Получена оценка распределения температуры внутри кабина маневренного самолета при условии наличия аэродинамического нагрева остекления, а также тепловыделения приборов, находящихся в кабине ЛА.

Результаты, полученные в пакете программ ЛОГОС, согласуются с результатами, полученными по коммерческому пакету программ, предоставленными компанией «ОКБ Сухого».

Расчет температурных полей в отсеках оборудования самолета

Решается задача расчета температурных полей в отсеке бортового оборудования самолета. Отсек содержит 57 тепловыделяющих блоков, для кондиционирования которых в отсек нагнетается охлажденный воздух и производится откачка нагретого воздуха. Часть блоков подвержена принудительному охлаждению путем продувки через них охлажденного воздуха. Охлаждение остальных блоков осуществляется посредством естественной конвекции. Через нижнюю поверхность отсека (обшивку) производится теплообмен с внешней средой. Также происходит обмен воздуха со смежными отсеками через отверстия и конструктивные зазоры в шпангоутах.

Отсек бортового оборудования, ограниченный шпангоутами 10 – 13, полом кабины и внешней обшивкой (Рис. 61). Блоки располагаются на стеллажах, размещенных между шпангоутами 10-11 и 12-13.

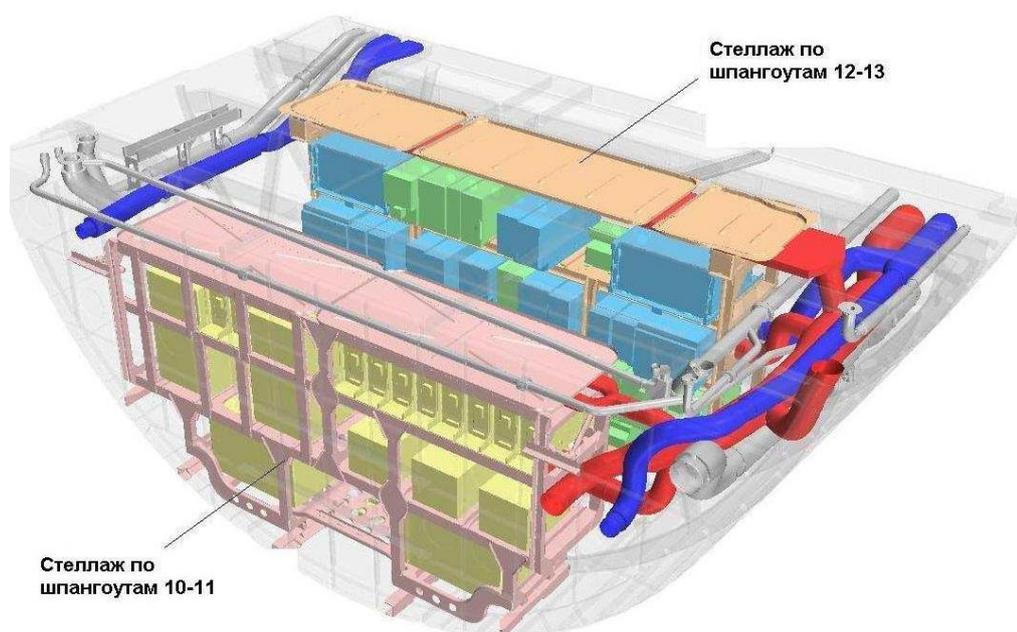


Рис. 61 – Размещение блоков оборудования в отсеке (вид по полету)

Для решения задачи заказчиком была построена объемная сетка на основе кубических ячеек. Основные характеристики и параметры сетки: содержит 18.3 миллиона ячеек; количество призматических пристеночных слоев на стенках блоков, обшивки, второстепенных деталей – 2; характерный размер ячейки на поверхности блоков – 2 см и меньше. Анализ сетки показал, что в ней содержатся плохие ячейки, непригодные для счета или вносящие значительные погрешности. В этих ячейках расчет не проводился, а значения расчетных полей интерполировались из смежных ячеек.

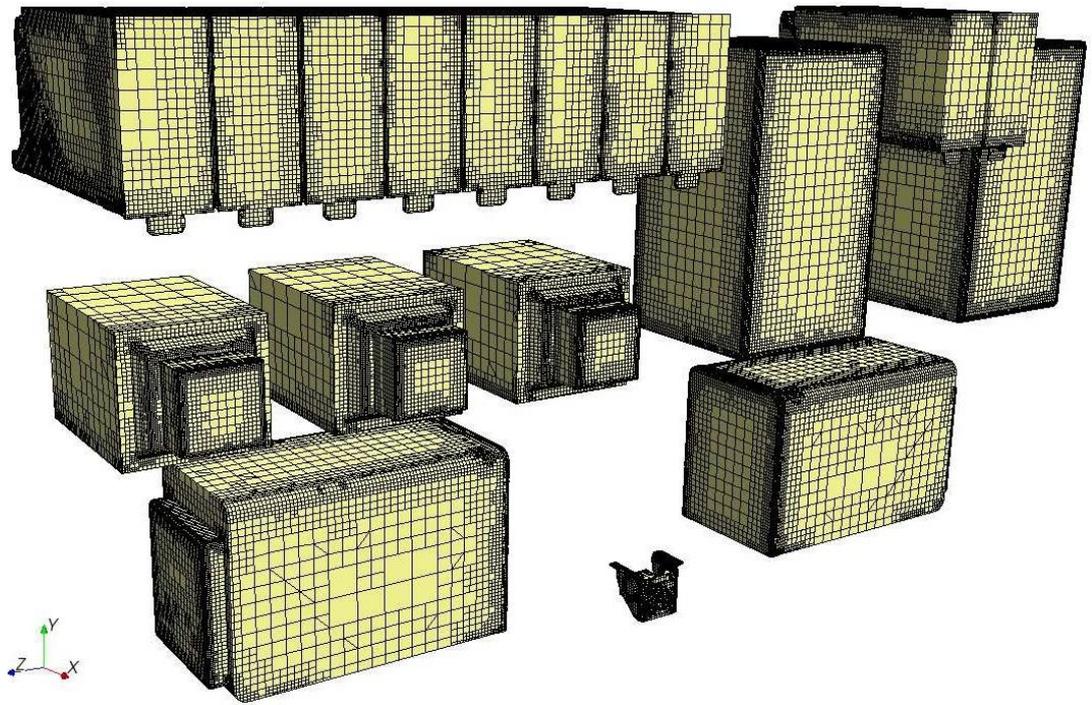


Рис. 62 – Поверхность объемной сетки (блоки по шпангоутам 10-11)

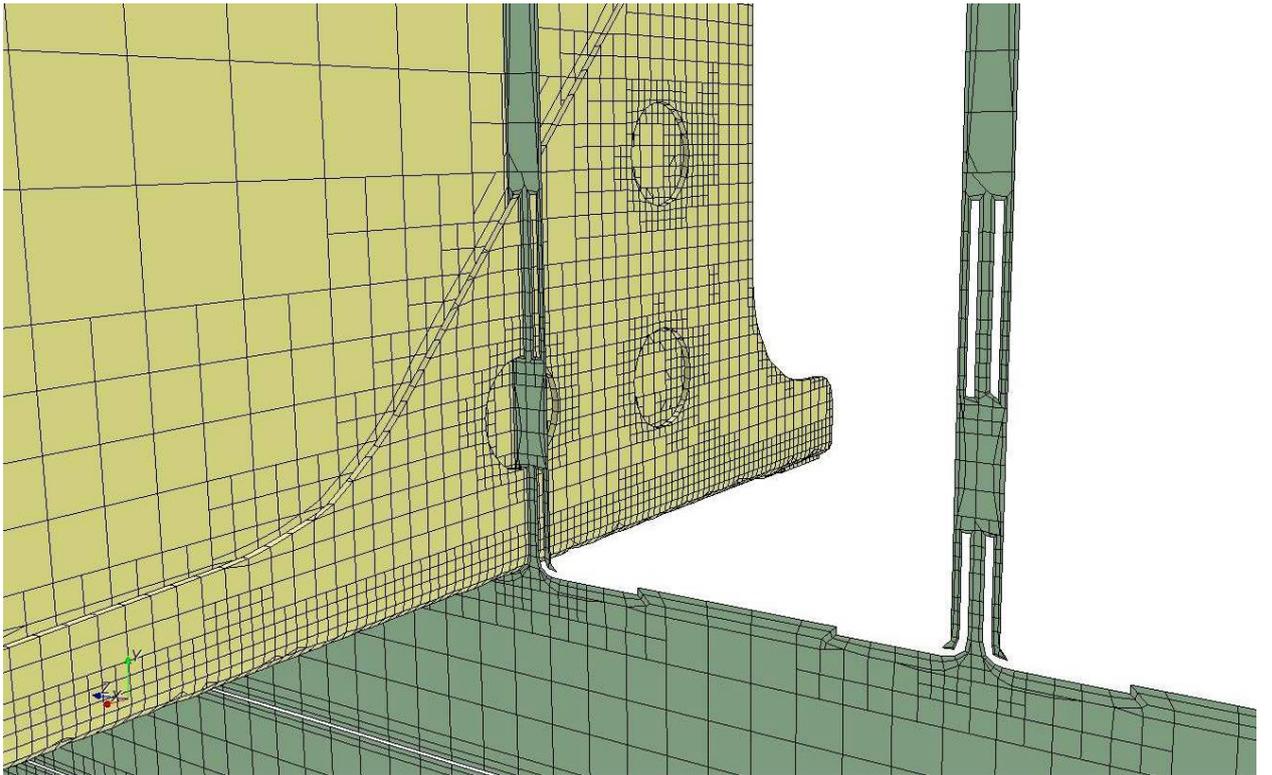


Рис. 63 – Объемная сетка в зазорах между блоками

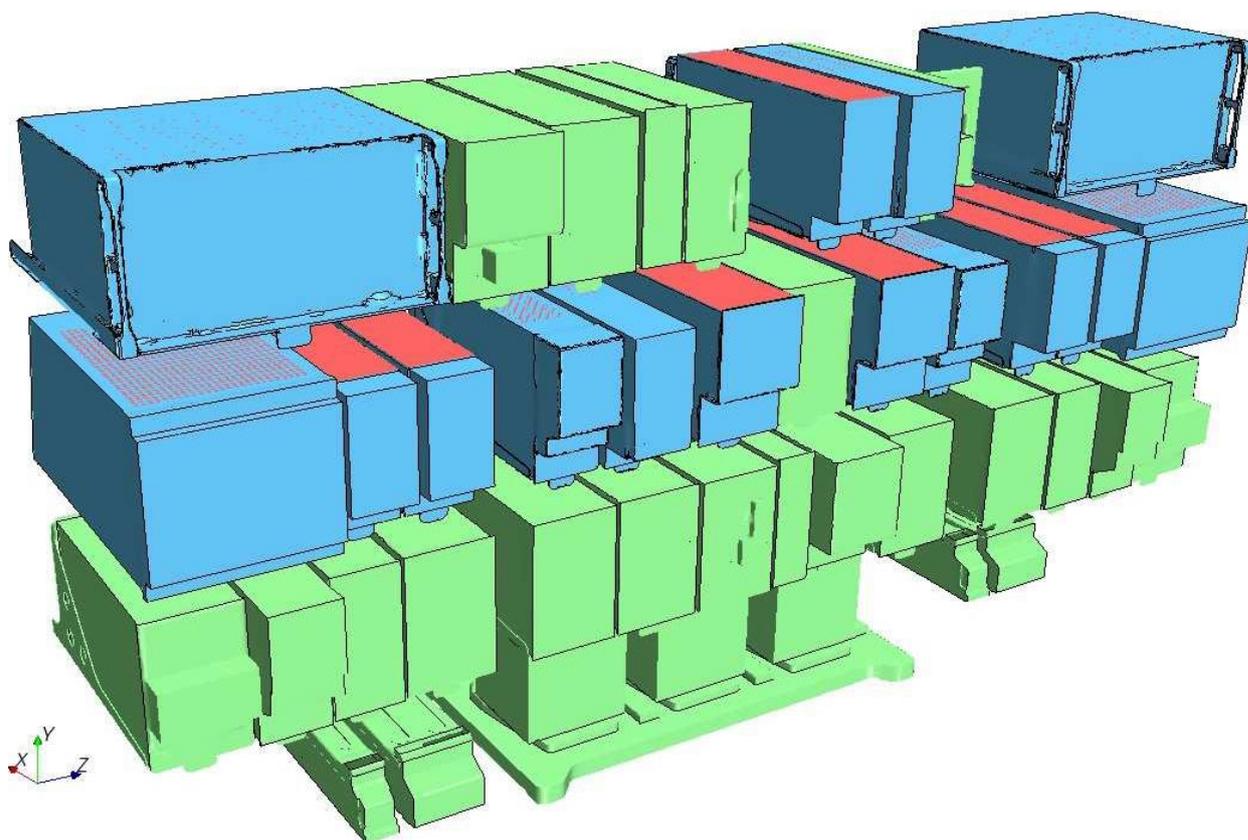


Рис. 64 – Поверхность объемной сетки (блоки по шпангоутам 12-13)

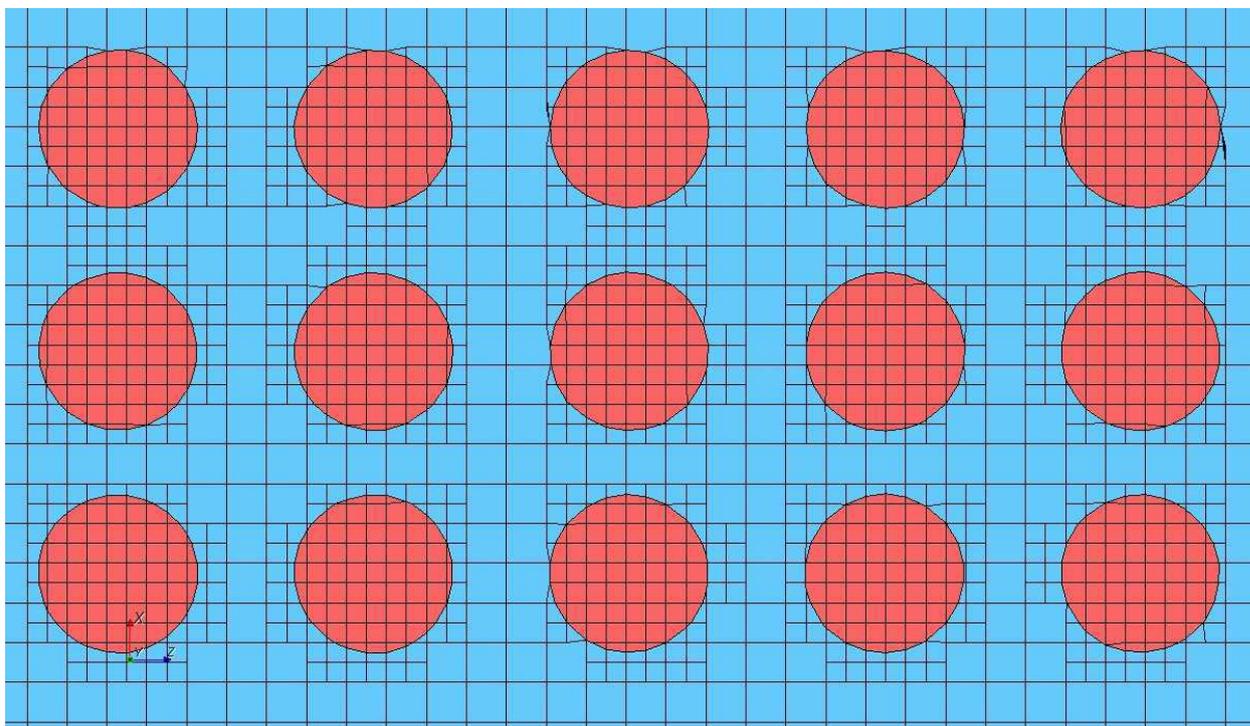


Рис. 65 – Поверхность объемной сетки (вентиляционные отверстия блока)

В начальный момент времени во всей расчетной области скорости принимаются равными нулю ($V=0$), давление равно атмосферному ($P=101325.0$ Па), температура соответствует заданной в салоне в начале эксперимента ($T=+27C$). На границах,

соответствующих отверстиям и зазорам в шпангоутах, задаются $P=101325.0$ Па и $T=22.247^{\circ}\text{C}$; расход воздуха вытяжной вентиляции задан в соответствии с таблицей НС01.11; общий расход воздуха приточной вентиляции принят равным общему расходу вытяжной вентиляции (21.9 кг/мин) и разделен поровну между ветками левого и правого бортов (по 10.95 кг/мин), температура охлаждающего воздуха $T=22.247^{\circ}\text{C}$; температура на внешней обшивке задана равной $T=4^{\circ}\text{C}$, коэффициент теплообмена $h=5$ W/(m²K). Задача решается в стационарной постановке. Воздух считается сжимаемым и его уравнение состояния соответствует уравнению идеального газа.

Обмен воздуха в отсеке оборудования со смежными отсеками – подкабинным отсеком и багажным отсеком - осуществляется через отверстия и конструктивные зазоры в шпангоутах 10 и 13 (Рис. 59). Пол кабины можно рассматривать как абсолютно теплоизолированную поверхность. Через обшивку (выполнена из алюминиевого сплава) производится теплообмен с внешней средой. Часть блоков, размещенных на стеллажах шп.12-13, подвергается принудительному охлаждению воздухом от системы кондиционирования. Из обеих стеллажей производится вытяжка воздуха. Блоки стеллажа шп.12-13, отмеченные цветом на схеме (рис. 64), имеют принудительное охлаждение от системы кондиционирования воздуха. Подвод охлаждающего воздуха к блокам производится через отверстия в стеллаже шп.12-13, полки которого выполнены полыми (Рис. 59). Охлаждающий воздух проходит через блоки, вентилируя их изнутри. Вытяжка воздуха из отсека производится через отверстия в патрубках вытяжной вентиляции. Вытяжка воздуха со стеллажа по шпангоутам 12-13 производится через верхний вытяжной патрубок, а также через полые полки стеллажа (Рис. 66).

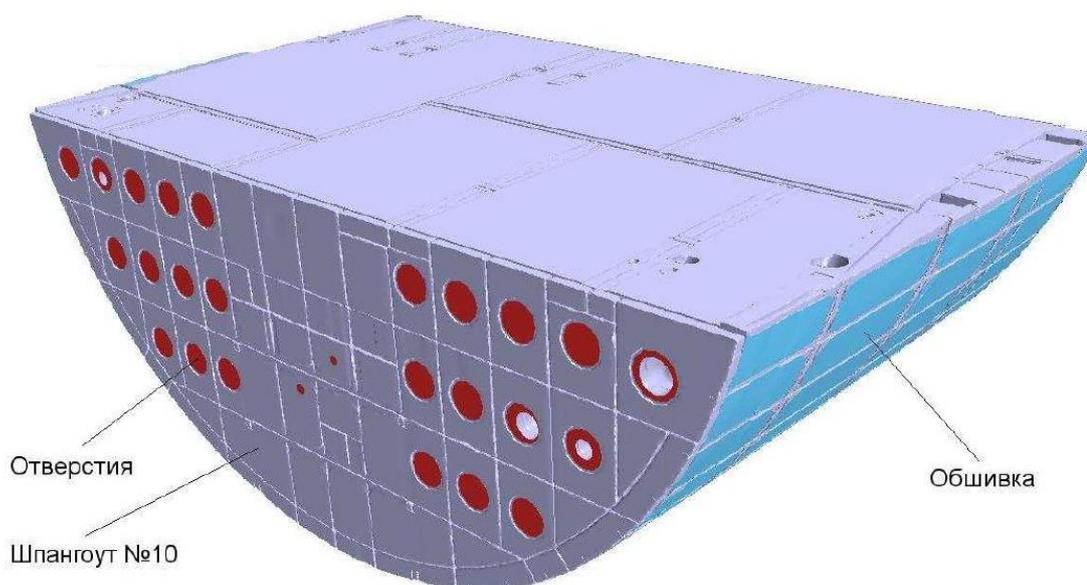


Рис. 66 – Отверстия и зазоры в шпангоуте 10 (вид против полета)

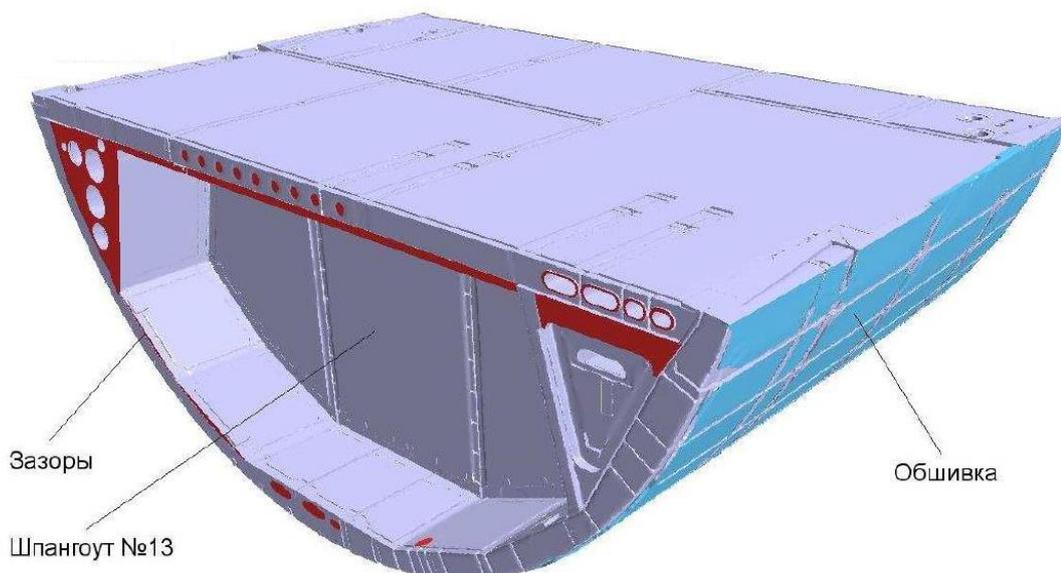


Рис. 67 – Отверстия и зазоры в шпангоуте 13 (вид по полету)

Решение задачи расчета температурных полей в отсеках оборудования самолета выполнялось в стационарной постановке. В результате решения получены пространственно-временные распределения скорости и температуры. Пространственная дискретность распределения полученных величин определяется характерными размерами конечно-объемных ячеек аппроксимирующей сетки по координатным направлениям.

На рисунке 66 изображены контрольные сечения (всего 6 шт.), перпендикулярные осям OX и OZ и пересекающие их, соответственно, в точках $X=0.2\text{м}$, $X=0.7\text{м}$, $X=1.2\text{м}$, $Z=-0.7\text{м}$, $Z=0.0\text{м}$, $Z=0.7\text{м}$.

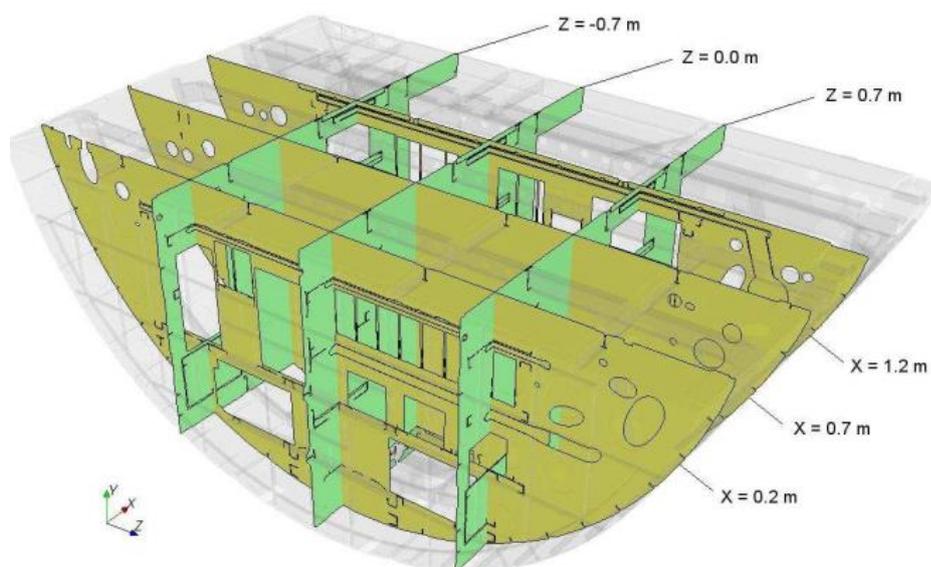


Рис. 68 – Положение контрольных сечений модели плоскостями

На рисунках 69-74 приведены поля температуры в контрольных сечениях.

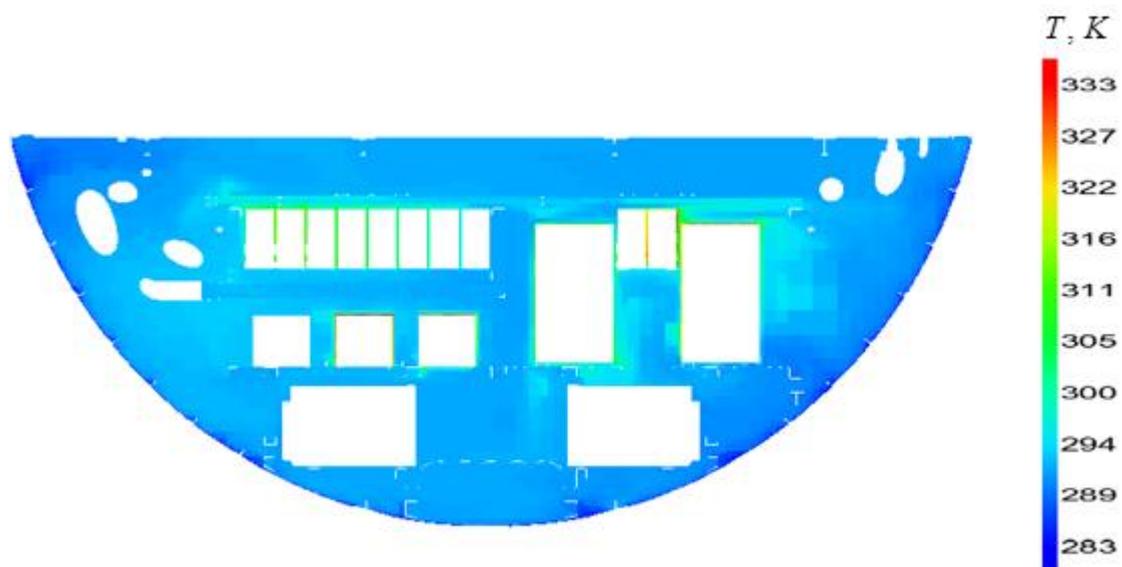


Рис. 69 – Поле температуры в сечении $x=0.2$

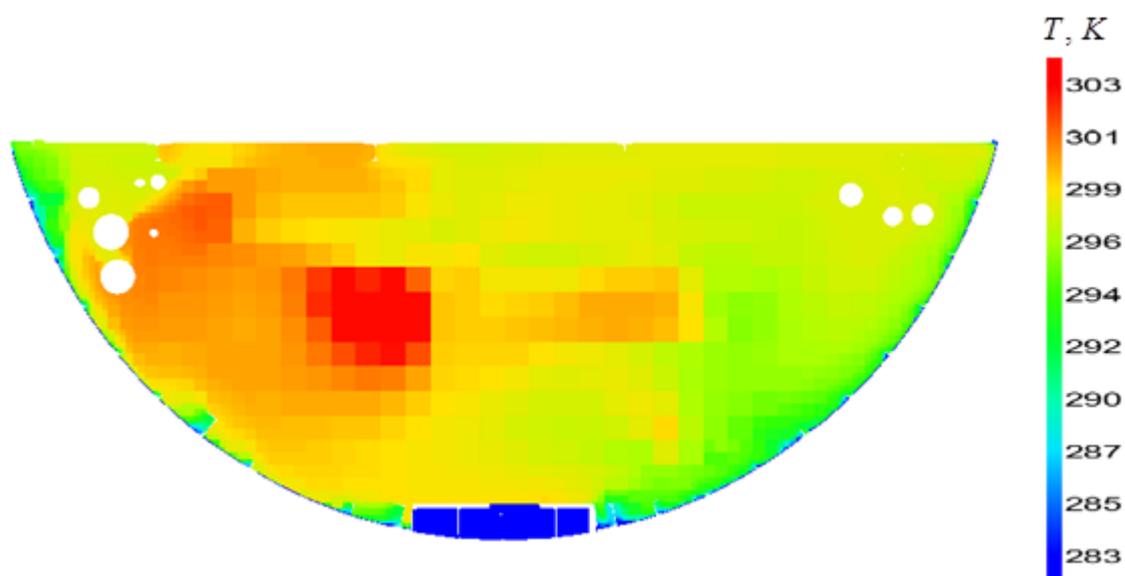


Рис. 70 – Поле температуры в сечении $x=0.7$

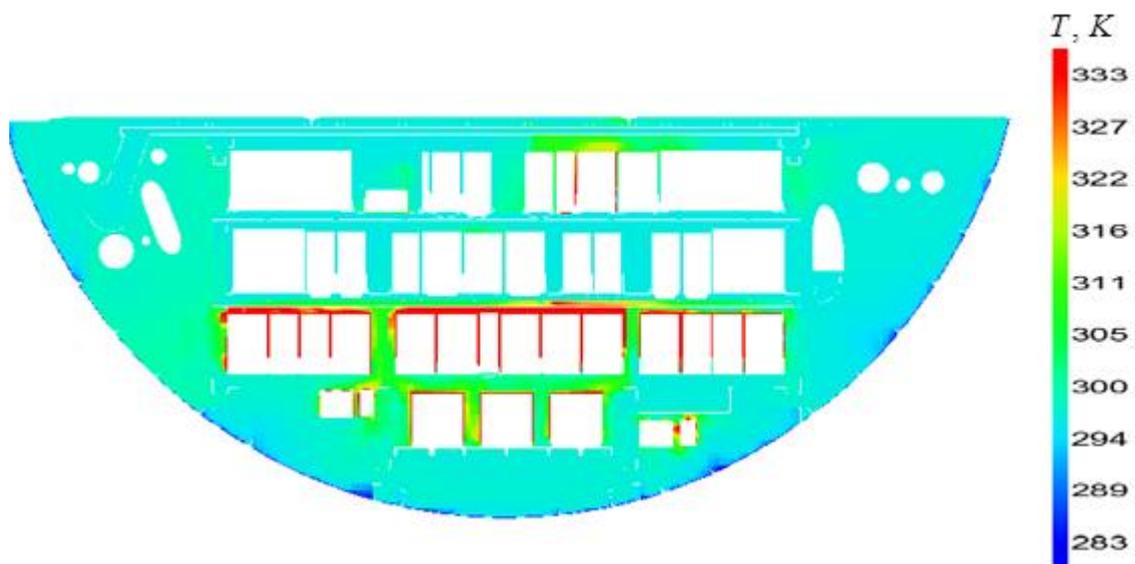


Рис. 71 – Поле температуры в сечении $x=1.2$

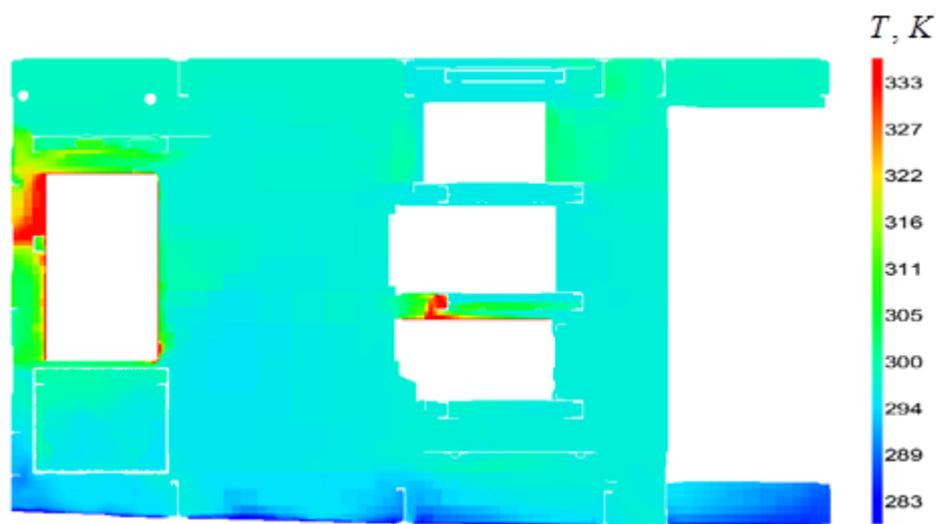


Рис. 72 – Поле температуры в сечении $z=-0.7$

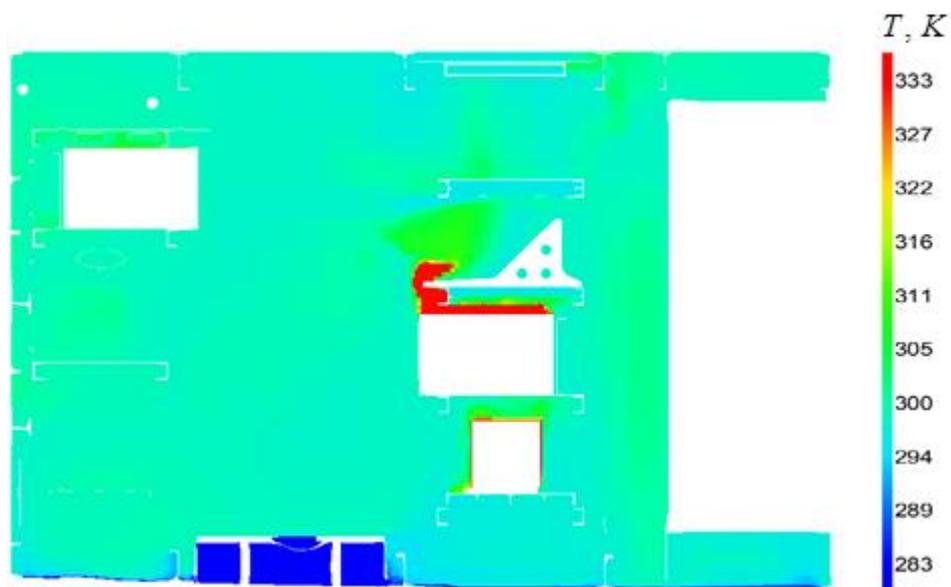


Рис. 73 – Поле температуры в сечении $z=0$

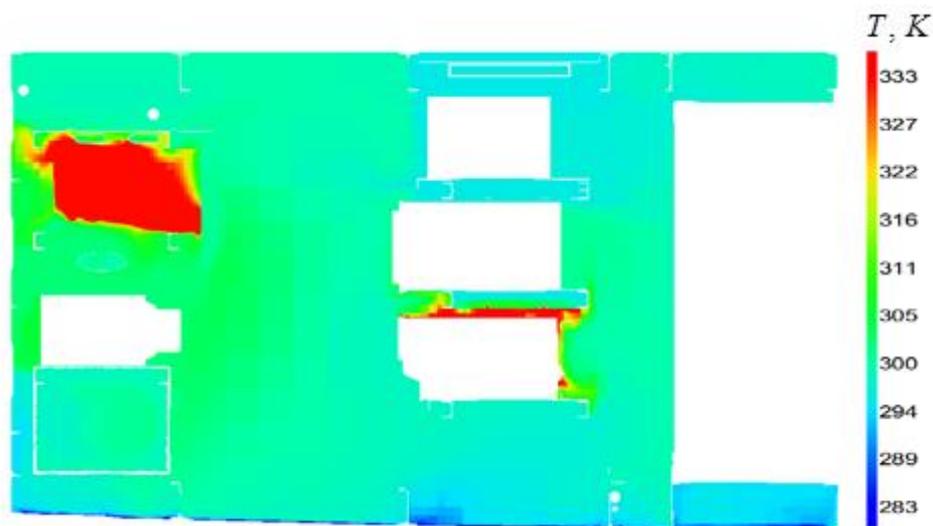


Рис. 74 – Поле температуры в сечении $z=0.7$

Представленные графики обнаруживают застойные зоны между тепловыделяющими стенками блоков, где температура достигает максимальных величин. Это может быть объяснено подходом к моделированию тепловыделения в блоках и заданием одинакового теплового потока на всех его границах. При этом вблизи границ, примыкающих к застойным зонам, возможно существенное локальное завышение температуры.

На рисунке 75 представлены графики температуры, зарегистрированной на датчиках в эксперименте, в расчете по коммерческому программному пакету и рассчитанные в пакете программ ЛОГОС.

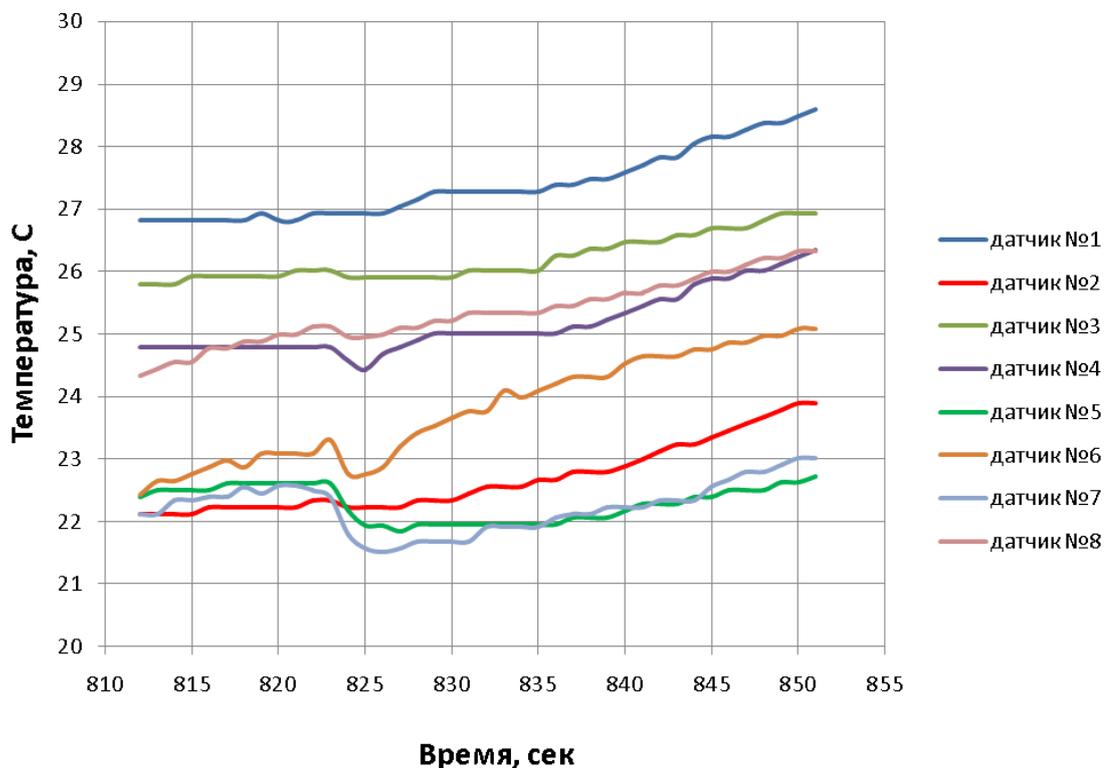


Рис. 75 – Значения температур, зарегистрированные на датчиках в эксперименте

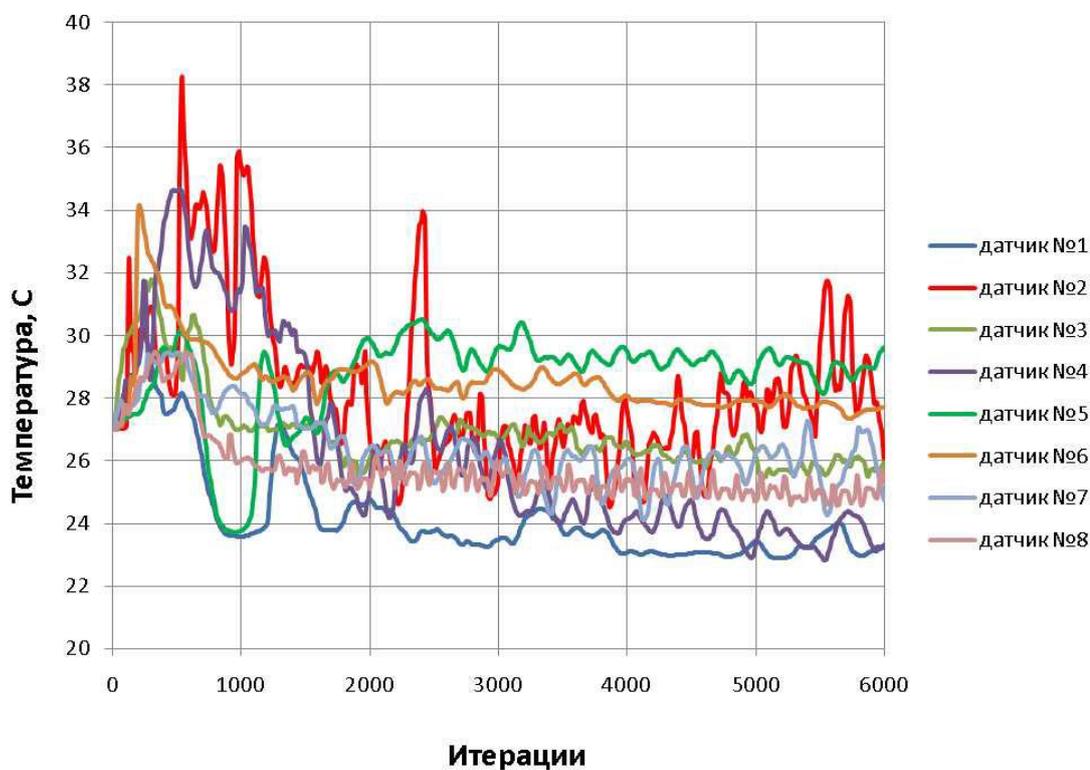


Рис. 76 – Расчетные значения температур по коммерческому пакету

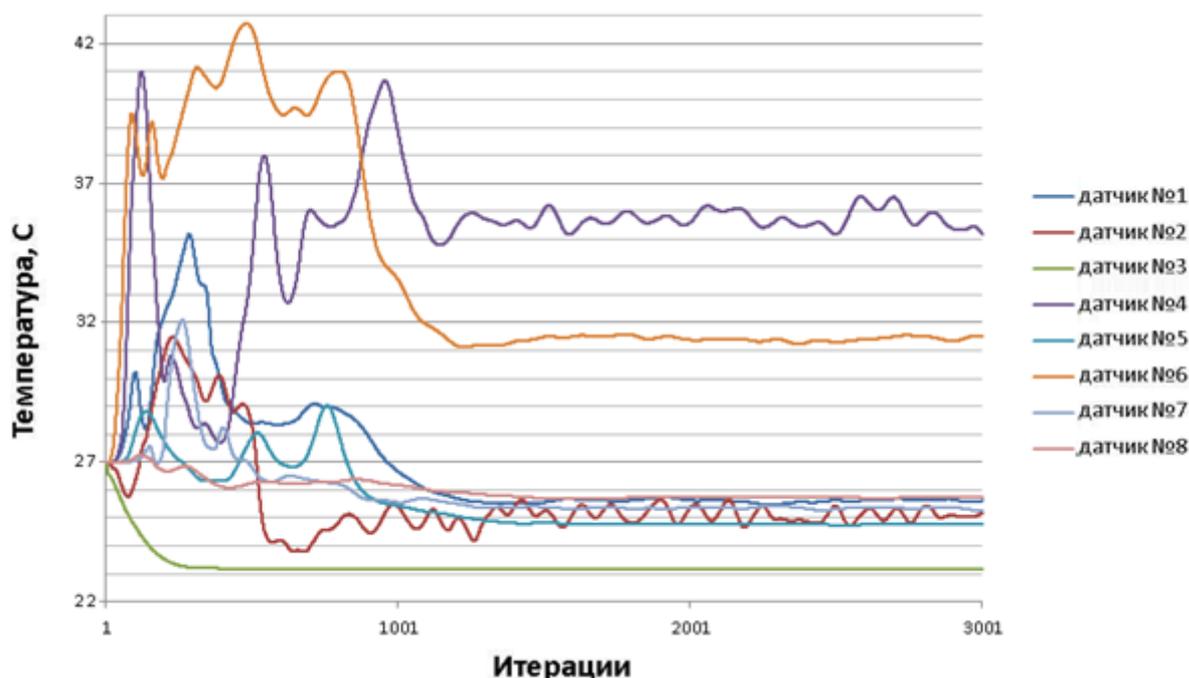


Рис. 77 – Расчетные значения температур по пакету ЛОГОС

Для сравнения экспериментальных и расчетных значений температур в контрольных точках сигналы были усреднены (для эксперимента по всем сорока точкам, для расчетов по последним двум тысячам итераций). Сравнение усредненных значений представлено в таблице 25.

Таблица 25 – Сравнение усредненных значений температуры в контрольных точках

№ датчика	T, эксперимент	T, расчет (ЛОГОС)
1	27.4	25.6
2	22.7	25.1
3	26.2	23.1
4	25.2	35.7
5	22.3	24.8
6	23.8	31.4
7	22.2	25.4
8	25.3	25.7

Значения температур в эксперименте приведены для небольшого отрезка времени и не стабилизируются в окрестности среднего значения. Значения температуры по пакету ЛОГОС проявляют меньшие осцилляции и находятся в окрестности средних значений.

3.5 Применение совмещенного алгоритма для решения задач атомной энергетики

В настоящее время обычной практикой при разработке промышленных конструкций атомной энергетики является проведение инженерного анализа, основанного на численном моделировании физических процессов, лежащих в основе работы

проектируемых установок. В атомной отрасли выполнение расчетного обоснования характеристик проектируемого оборудования имеет особую важность, поскольку процесс создания реакторных и ядерных энергетических установок (РУ и ЯЭУ) является чрезвычайно длительным, наукоемким и дорогостоящим процессом.

В данной главе приведены результаты численных расчетов естественной и вынужденной конвекции в верхней камере реактора MONJU, а также результаты моделирования перемешивания разнотемпературных потоков в верхней камере реактора БН-600.

Моделирование естественной и вынужденной конвекции в верхней камере реактора MONJU

MONJU – реакторная установка петлевого типа на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем. Схематическое изображение реактора MONJU приведено на рисунке 78, взятым из работы [Yoshikawa, 1995].

В 1995 году проводились испытания по аварийному останову реактора MONJU при его работе на уровне мощности 40%. При этом экспериментально исследовалось нестационарное течение теплоносителя в камере реактора MONJU в режиме расхолаживания (остаточное энерговыделение после прекращения цепной реакции деления). Полученные результаты изменения с течением времени расходов и выходных температур натрия для различных участков активной зоны приведены в работах [Yoshikawa & Minami, 2008a; Yoshikawa & Minami, 2008b].

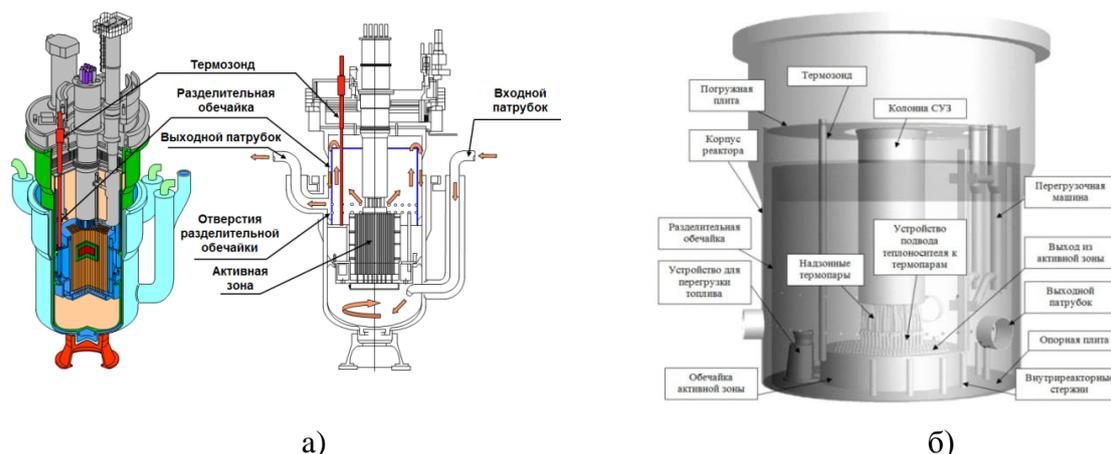


Рис. 78 – (а) – Схематическое изображение реактора MONJU, (б) – структура верхней камеры реактора MONJU

Геометрия верхней камеры реактора MONJU имеет сложную конструкцию. Основные элементы верхней камеры реактора MONJU представлены на рисунке 79, где более детально показана надзонная конструкция, состоящая из колонны СУЗ, направляющих регулирующих стержней (РС), подводящих трубок (ПТ), перфорированной

плиты (ПП) и чехлов надзонных термопар (НТ). Системы трубок, расположенные над выходами из активной зоны, создают очень сложное течение в области под колонной СУЗ. Размеры этих трубок существенно меньше размеров камеры. Однако их влияние на течение должно быть учтено для успешного моделирования физических процессов в верхней камере реактора.

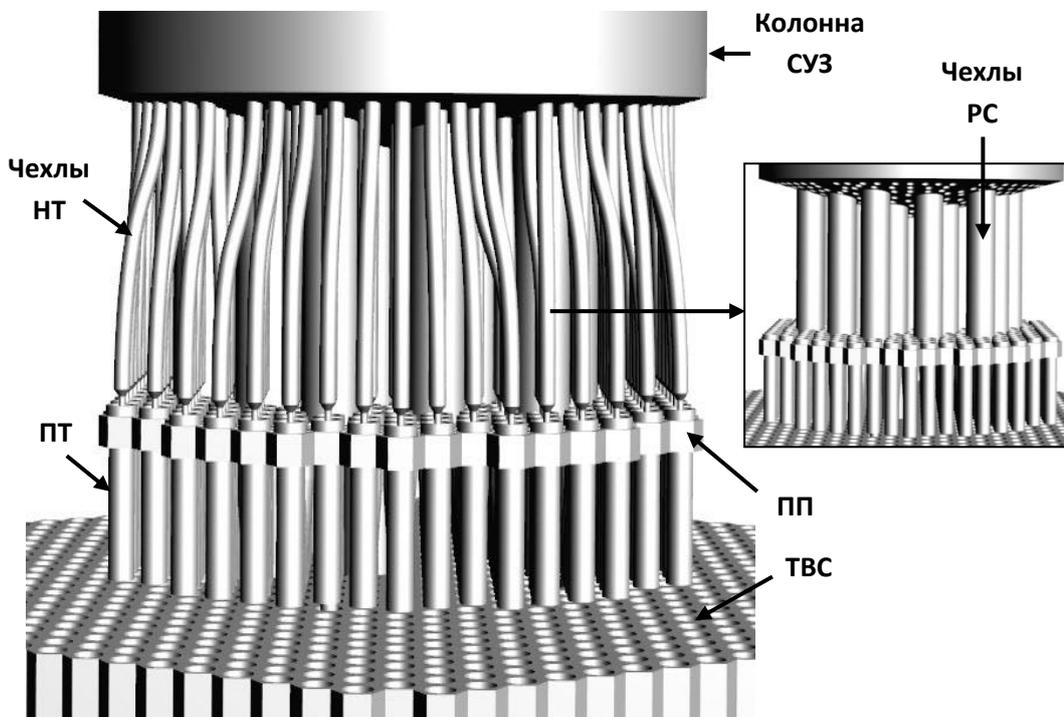


Рис. 79 – Элементы конструкции в надзонной области моделируемые пористым телом

Для численного исследования естественной конвекции натрия в верхней камере реактора MONJU в качестве расчетной области выбран сектор реактора 60 градусов [Blind et al., 2009].

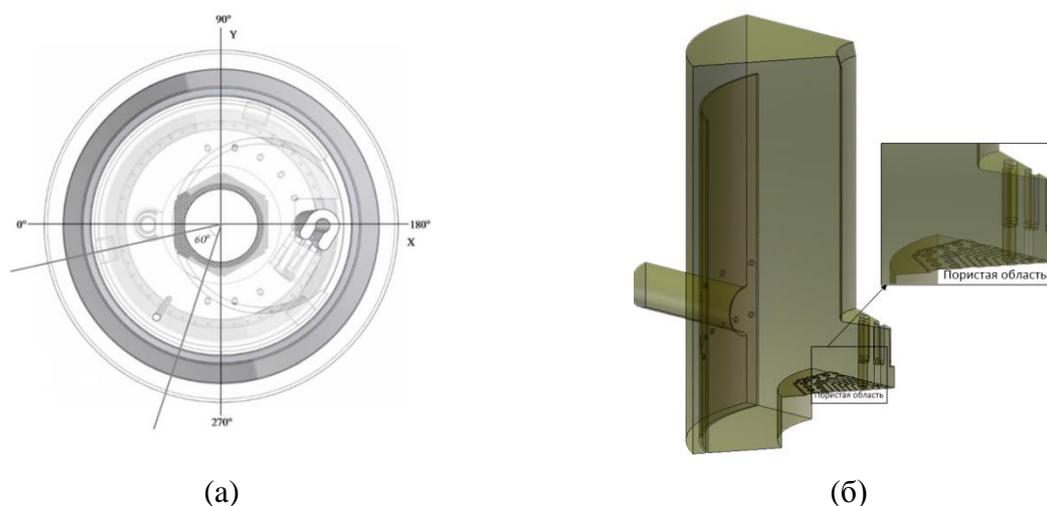


Рис. 80 – (а) – Геометрическая модель проточной части сектора верхней камеры реактора, (б) – выделенный 60-градусный сектор

Геометрическая модель проточной части сектора верхней камеры представлена на рисунке 80. В силу сложности элементов конструкции в надзонной области все элементы явным образом не моделируются, а в соответствии с [Blind et al., 2009] ПТ, ПП и НТ учитываются с использованием модели пористого тела, однако модель содержит направляющие регулирующих стержней (РС).

В качестве входных граничных условий на торцах всех ТВС задаются расход и температура в соответствии с экспериментальными данными [Yoshikawa & Minami, 2008a]. В расчетах используются термofизические свойства жидкого натрия [Yoshikawa & Minami, 2008a].

На основе геометрической модели (Рис. 81) построены две расчетные сетки, состоящие из ~8.8 млн. (сетка 1) и ~15.7 млн. ячеек (сетка 2).

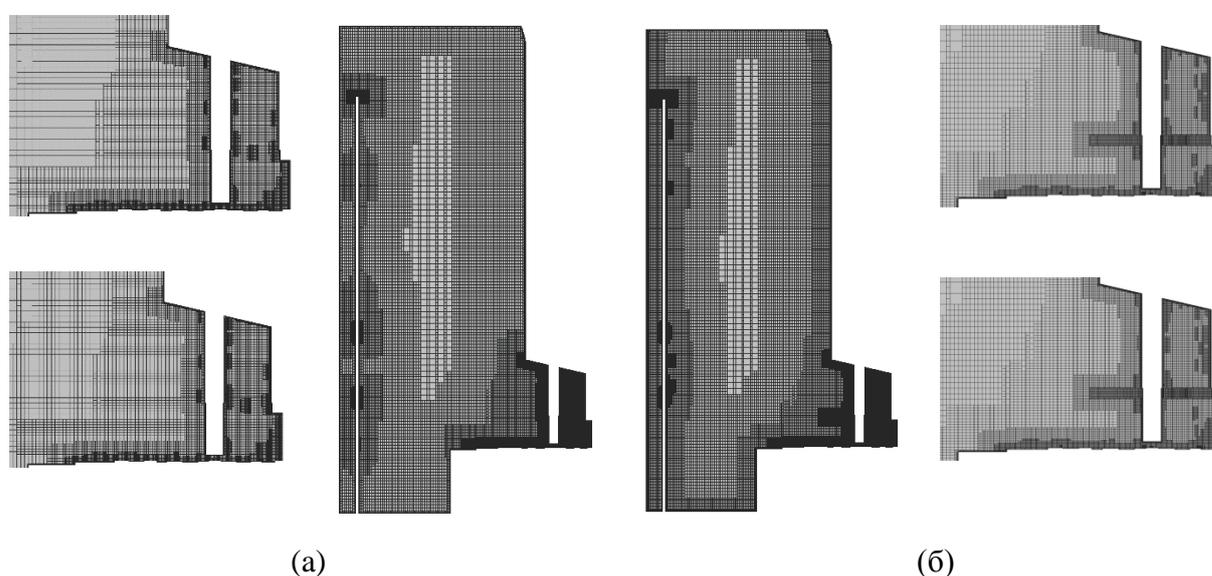


Рис. 81 - Сечение расчетной сетки в надзонной области в контрольном сечении: (а) – сетка 1, (б) – сетка 2.

Обе расчетные сетки построены методом отсечения с автоматическим выделением приграничных слоев, ячейки представляют собой усеченные шестигранники. Во второй сетке явно выделена перфорированная пластина (Рис. 78 (б)). Базовый размер ячеек составляет 20 мм, но в сложных частях геометрии произведено сгущение сетки, и размер ячеек составил около 2 мм. Для более точного моделирования профилей скорости и температуры около стенок реактора построен приграничный слой, состоящий из 10 ячеек (размер первой ячейки 0.38 мм, коэффициент роста 1.2).

Влияние подводящих трубок и чехлов надзонных термопар учитывалось с использованием модели пористого тела. Значение коэффициента гидравлического сопротивления для участка пористого тела вычисляется по следующей формуле:

$$\zeta = \lambda \cdot \frac{L}{d_g}, \quad (107)$$

где L - длина участка с пористым телом, d_g - гидравлический диаметр, λ - гидравлическое трение:

$$\lambda = \lambda_0 \cdot \left[1 + 0,1066 \cdot \left(\frac{s}{d} \right)^{\frac{4}{3}} \right] \cdot [0,58 + 0,42 \cdot \exp(-b)], \quad (108)$$

$$b = 28,45 \cdot 10^{-6} \cdot \left(\frac{s}{d} \right)^3 \cdot \left[1,1027 \cdot \left(\frac{s}{d} \right)^2 - 1 \right]^{0,75} \cdot \left(1,049 \cdot \frac{s}{d} - 1 \right)^{-4,5},$$

где s - шаг стержней в треугольной решетке, d - наружный диаметр стержней, λ_0 - коэффициент гидравлического трения гладких труб по формуле Никурадзе:

$$\lambda_0 = (1,82 \cdot \lg \text{Re} - 1,64)^{-2}. \quad (109)$$

Перепад давления задается следующей формулой:

$$\Delta p = \frac{1}{2} \zeta \rho |\mathbf{u}|^2 \quad (110)$$

Сопоставляя формулы (110) и (111), получим формулу для вычисления нелинейного коэффициента сопротивления вдоль оси Z:

$$\alpha_z = \frac{\zeta \rho}{2L}. \quad (111)$$

Данный коэффициент задавался исходя из координатной зависимости нахождения надзонной области.

Для стационарного режима контрольными характеристиками являются профиль температуры по высоте камеры реактора в месте расположения термозонда и поля скорости и температуры в вертикальной плоскости сечения (по высоте камеры), расположенной под углом 45 градусов относительно выходного патрубка.

Для нестационарного режима контрольными характеристиками являются профиль изменения (с течением времени) температуры натрия в точках расположения термопар термозонда [Yoshikawa & Minami, 2008a], и поля скорости, и температуры в вертикальной плоскости сечения (по высоте камеры), расположенной под углом 45 градусов относительно выходного патрубка в различные моменты времени 120, 240, 360 и 600 секунд, а также профиль температуры по высоте камеры реактора в месте расположения термозонда в моменты времени 120, 240, 360 и 600 секунд.

Для двух сеточных моделей на рисунках 82 и 83 представлены поля модуля скорости и температуры в вертикальном контрольном сечении, расположенном под углом 45 градусов относительно выходного патрубка.

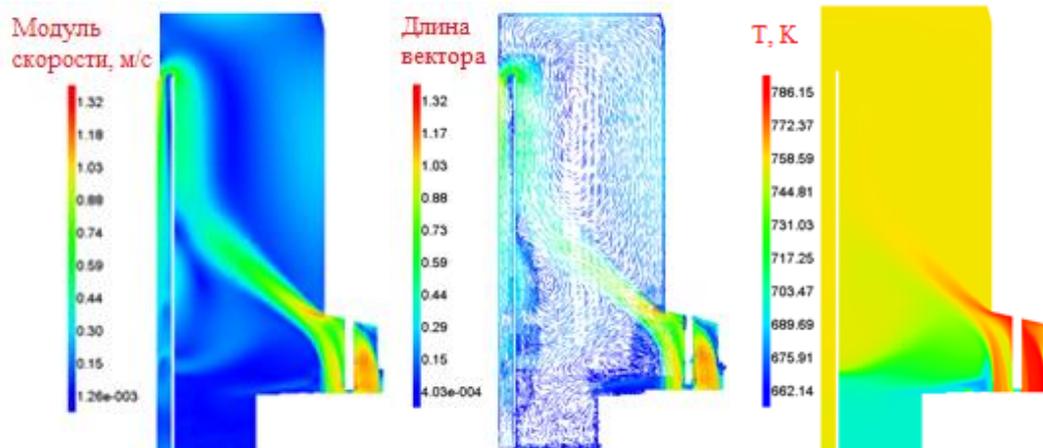


Рис. 82 - Поле модуля скорости, векторное поле скорости и поле температуры в контрольном сечении (сетка 1)

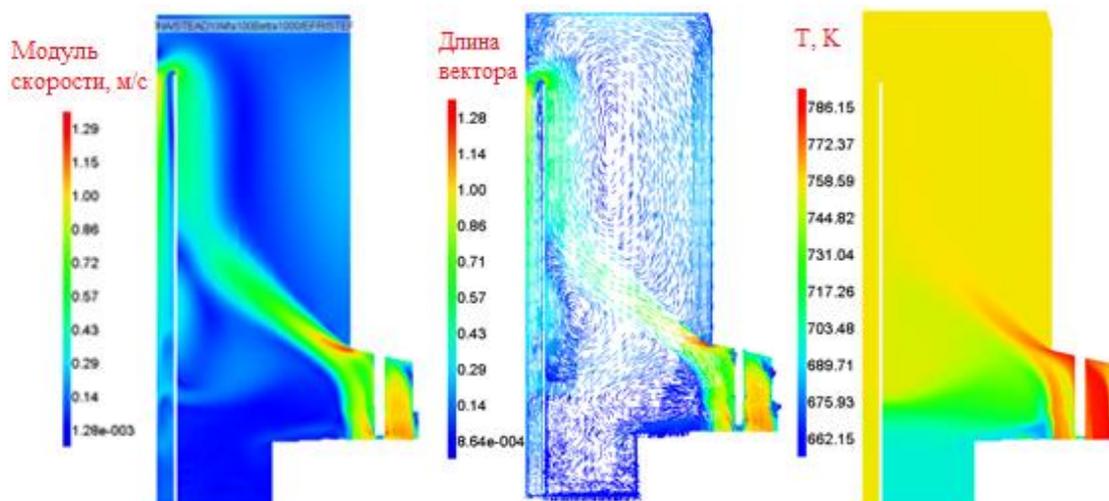


Рис. 83 - Поле модуля скорости, векторное поле скорости и поле температуры в контрольном сечении (сетка 2)

Расчет данного режима также проводился на сетке 2. В серии расчетов на второй сетке учитывалось влияние перфорированной пластины. Пластина моделировалась пористой плитой. На рисунке 84 приведено сравнение профилей температуры по высоте реактора, полученных на двух сетках. Легко увидеть, что пластина не оказывает существенного влияния на температуру на периферии области.

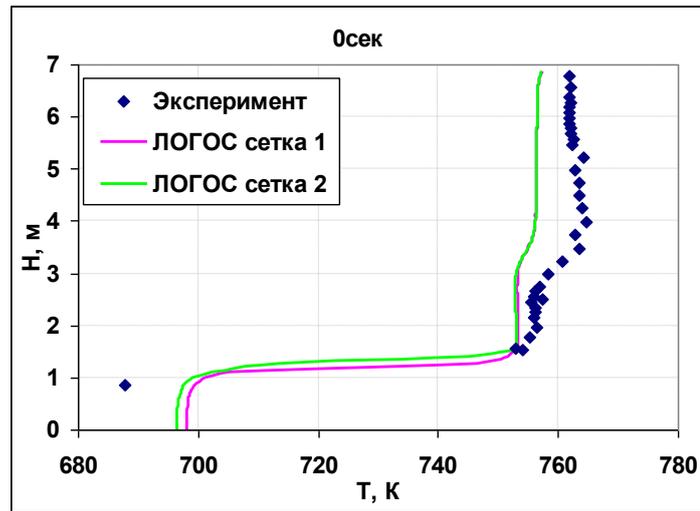


Рис. 84 - Зависимость температуры от высоты (стационарный режим) для двух сеток (сетки 1 и 2)

Для нестационарного режима контрольными характеристиками являются профиль изменения (с течением времени) температуры натрия в точках расположения термодпар.

На рисунках 85 - 89 приведены поля модуля скорости и температуры в вертикальной плоскости сечения (по высоте камеры), расположенной под углом 45 градусов относительно выходного патрубка в различные моменты времени. Результаты получены на сетке 1.

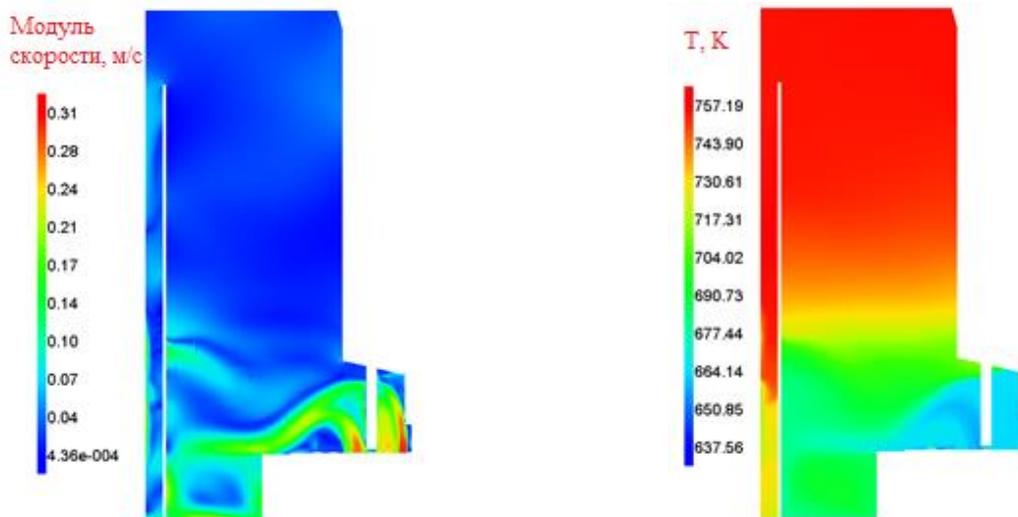


Рис. 85 – Поля модуля скорости и температуры в контрольном сечении на время 120 с

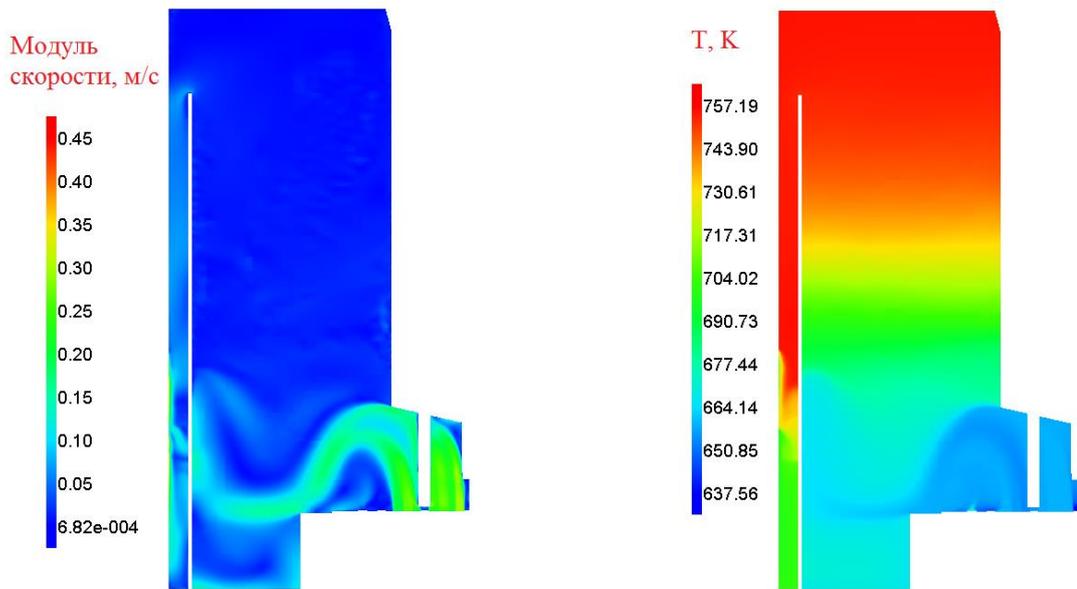


Рис. 86 - Поля модуля скорости и температуры в контрольном сечении на время 240 с

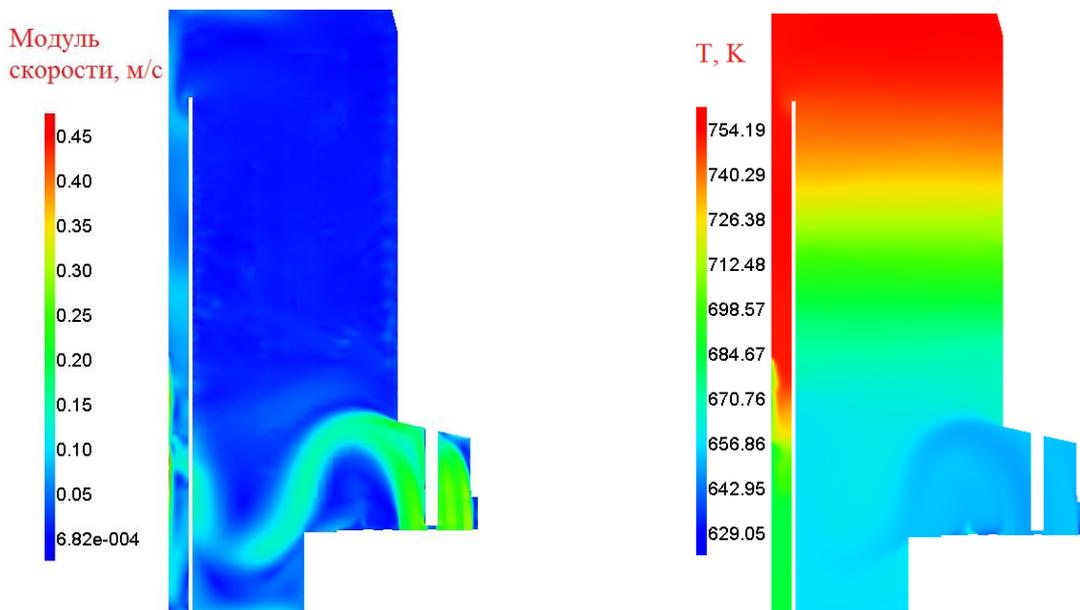


Рис. 87 - Поля модуля скорости и температуры в контрольном сечении на время 360 с

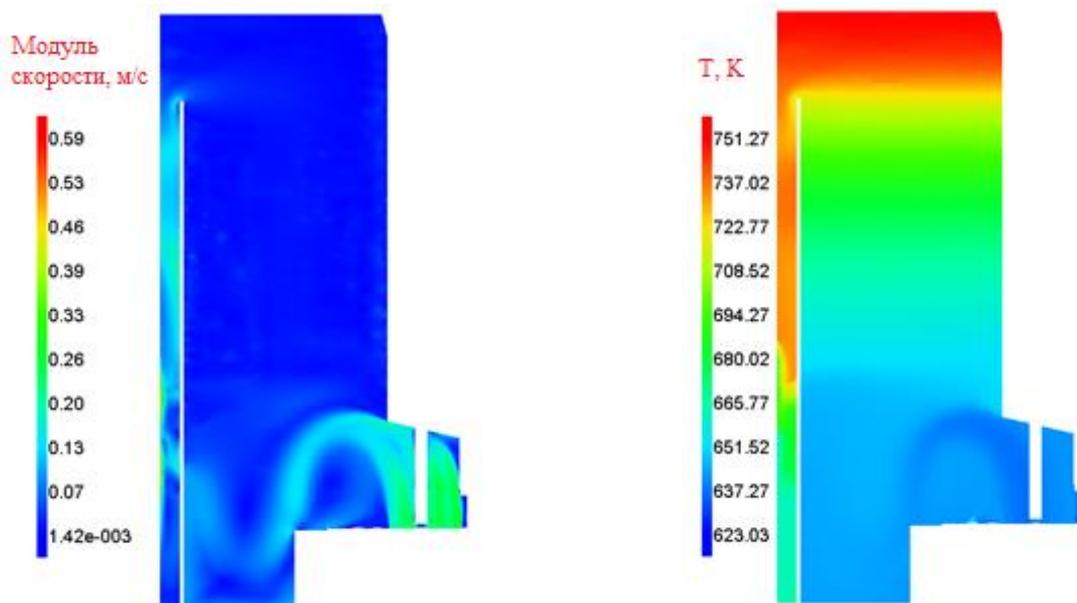


Рис. 88 - Поля модуля скорости и температуры в контрольном сечении на время 600 с

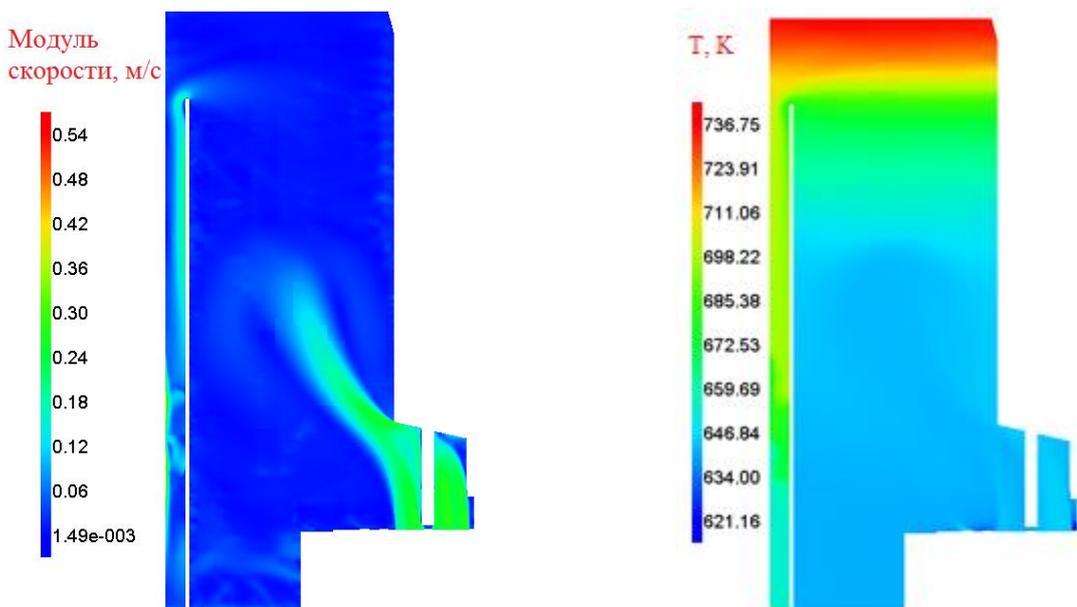


Рис. 89 - Поля модуля скорости и температуры в контрольном сечении на время 900 с

На рисунках 90 - 92 приведены профили температуры по высоте камеры реактора в месте расположения термозонда на различные моменты времени.

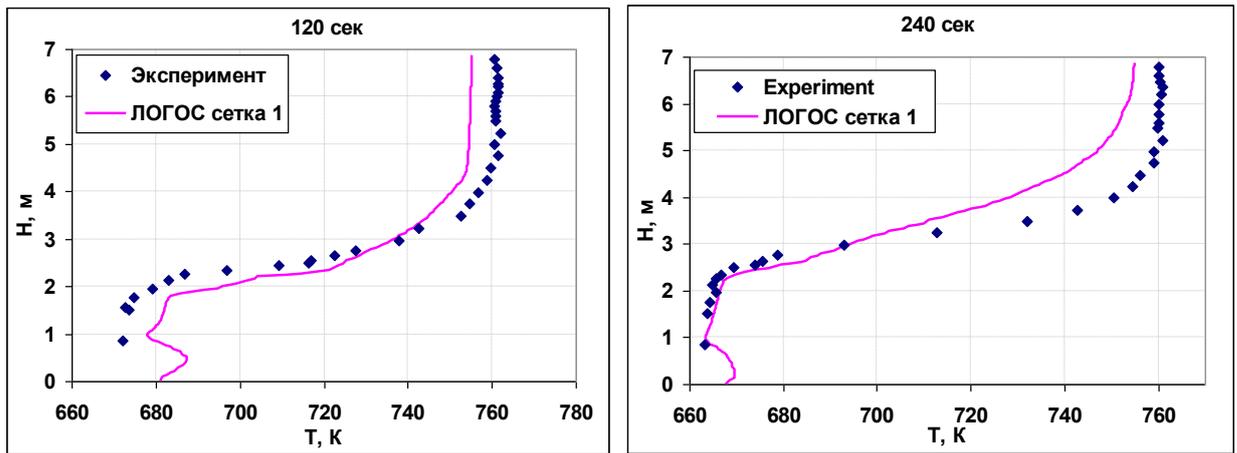


Рис. 90 - Профили температуры по высоте камеры на 120 с и 240 с

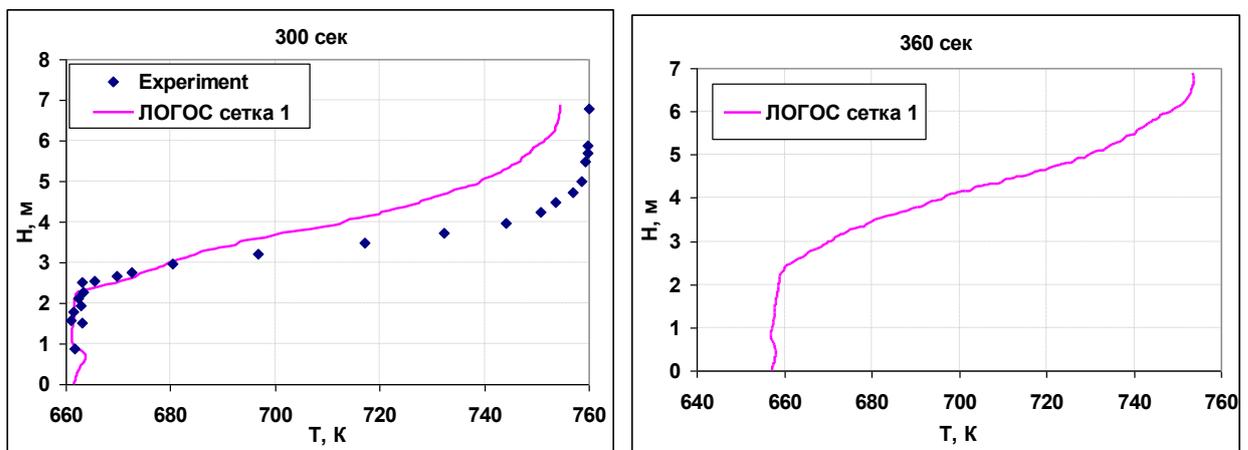


Рис. 91 - Профили температуры по высоте камеры на 300 с и 360 с

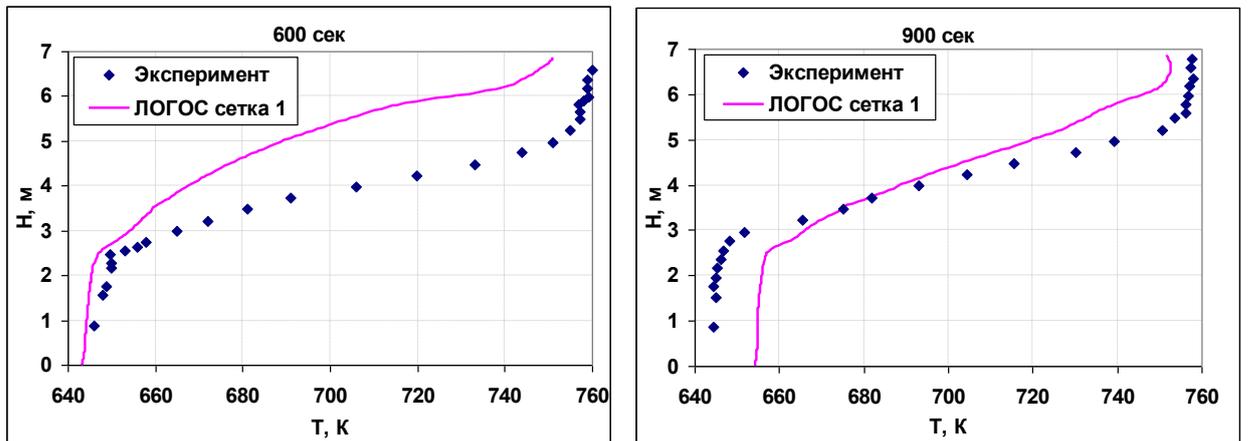


Рис. 92 - Профили температуры по высоте камеры на 600 с и 900 с

В итоге проведены расчеты стационарного режима реакторной установки петлевого типа с реактором MONJU на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем на мощности 40%. Проведены нестационарные расчеты режима расхолаживания.

По полученным результатам численного эксперимента в режиме расхолаживания можно сделать вывод о том, что расчет качественно хорошо описывает эксперимент.

Однако, в верхней части реакторной установки расчетные температуры ниже экспериментальных, а в нижней части выше. Это справедливо и для стационарных, и для нестационарных расчетов на двух сетках. Данный факт может свидетельствовать о том, что допущения, использованные при создании расчетной модели (о симметрии, не существенном влиянии сопряженного теплообмена натриевого теплоносителя с металлическими элементами конструкции, о замене сложных конструктивных элементов пористыми телами) вносят некоторые изменения в картину получаемых течений. В связи с этим необходимы дальнейшие исследования данной задачи в уточненной постановке.

Моделирование перемешивания разнотемпературных потоков натрия в верхней камере реактора БН-600

Общий вид реактора БН-600 представлен на рисунке 91. Рассматривается половина проточной части верхней смесительной камеры реактора. Геометрическая модель учитывает головки тепловыделяющих сборок (ТВС) активной зоны, трубы внутрикорпусной защиты, элеваторную выгородку и опору промежуточного теплообменника (ПТО) в виде твердотельной модели. Промежуточный теплообменник моделируется с использованием модели пористого тела. Геометрическая модель с входными участками приведена на рисунке 93. Распределение расхода, температуры натрия и граничные условия для активной зоны задавались согласно [Рогожкин, 2016].

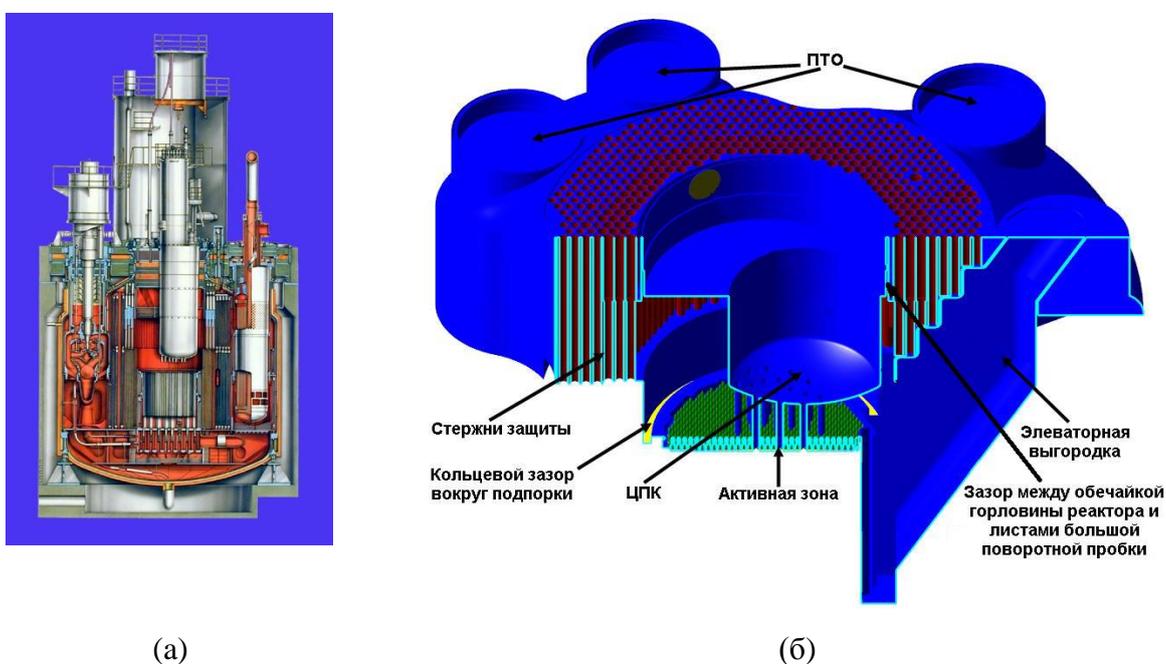


Рис. 93 – (а) – Общий вид реактора БН-600, (б) – геометрия модели с входными участками

Для проведения численного эксперимента построена расчетная сетка, содержащая ~60 млн. ячеек. Фрагменты сетки в различных сечениях приведены на рисунках 94 - 95.

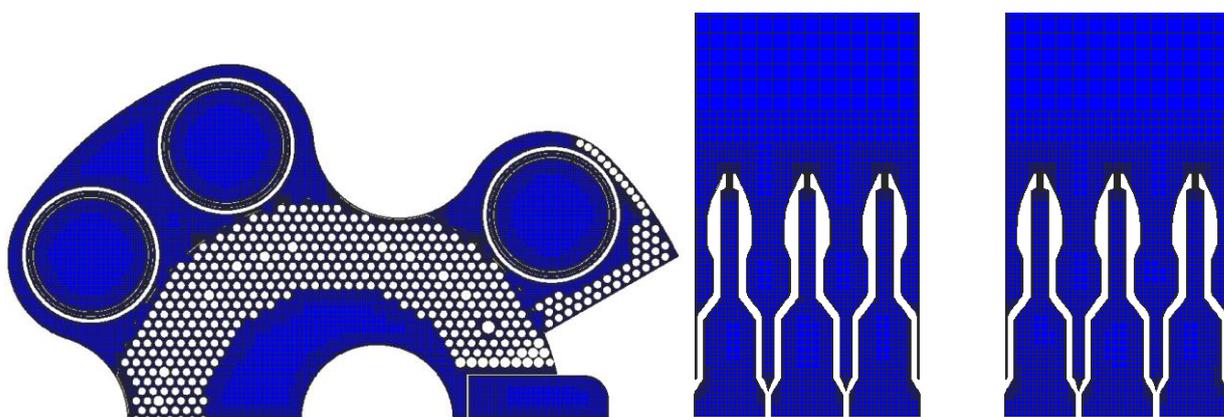


Рис. 94 - Фрагмент расчетной сетки в горизонтальном сечении и вблизи головок ТВС

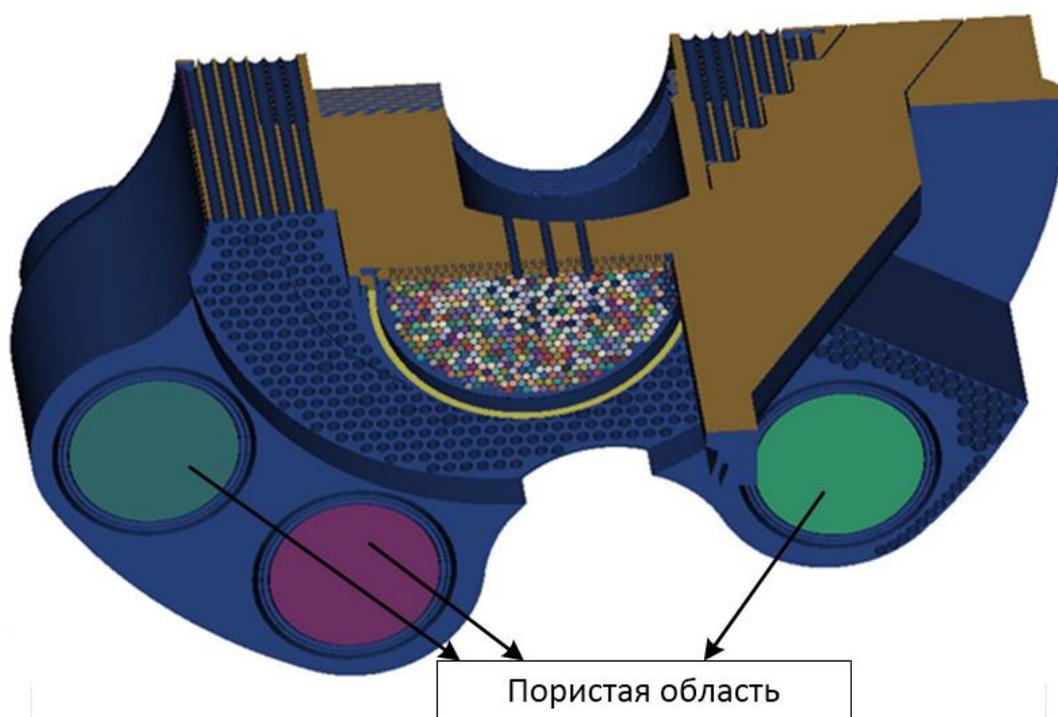


Рис. 95 - Фрагмент расчетной сетки в горизонтальном сечении и вблизи головок ТВС

Теплофизические свойства натрия (плотность, вязкость, теплоемкость и теплопроводность) задаются табличным образом в соответствии с [Кириллов и Денискина, 2000]. Расчет проведен с учетом силы гравитации.

Промежуточный теплообменник моделируется с использованием модели изотропного пористого тела. Коэффициенты пористости областей, моделирующих ПТО, выбирались исходя из заданного значения сопротивления ПТО, равного 7220 Па [Рогожкин, 2016].

Коэффициент сопротивления рассчитывался согласно выражению:

$$\alpha_z = \frac{\zeta \rho}{2L}, \quad (112)$$

где ζ - коэффициент гидравлического сопротивления, L - длина моделируемого участка.

Расчет проводился в три этапа. На первом этапе проведен стационарный расчет. На втором этапе с полученных полей был запущен нестационарный расчет до 200 секунд. На третьем этапе, с полученных полей второго этапа, проведены нестационарные расчеты до 300 секунд. Нестационарные расчеты проводились с постоянным шагом по времени 0,01 сек., информация по сенсорам записывалась на каждом шаге.

В результате численного моделирования в точках расположения блока баковых термопар и термопар на входе в ПТО (Т1-Т16) определяются поля скорости и температуры в плоскости симметрии конструкции и графики изменения температуры в зависимости от времени (длительность ~200 сек.).

На следующей серии рисунков приведены поля на конечное расчетное время 300 секунд. Необходимо отметить, что наблюдается изменение картины распределения полей от времени, что говорит о существенно нестационарном режиме течения. На рисунках 96 - 97 представлены поля температуры и скорости во всей модели. На рисунках с полями модуля скорости для наглядности подрезан максимум до 5 м/с, максимальное значение скорости реализуется на выходе из головок ТВС и составляет 11,9 м/с.

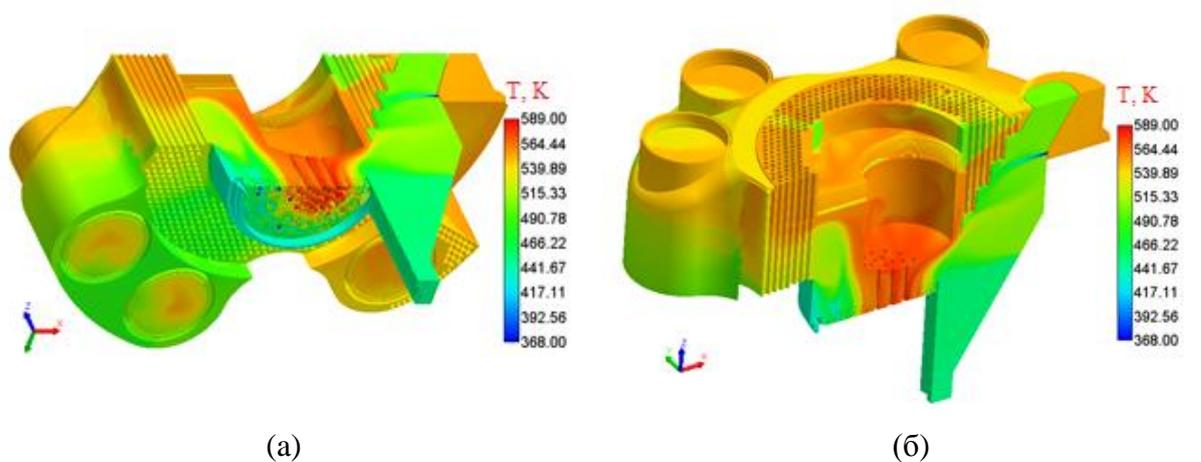
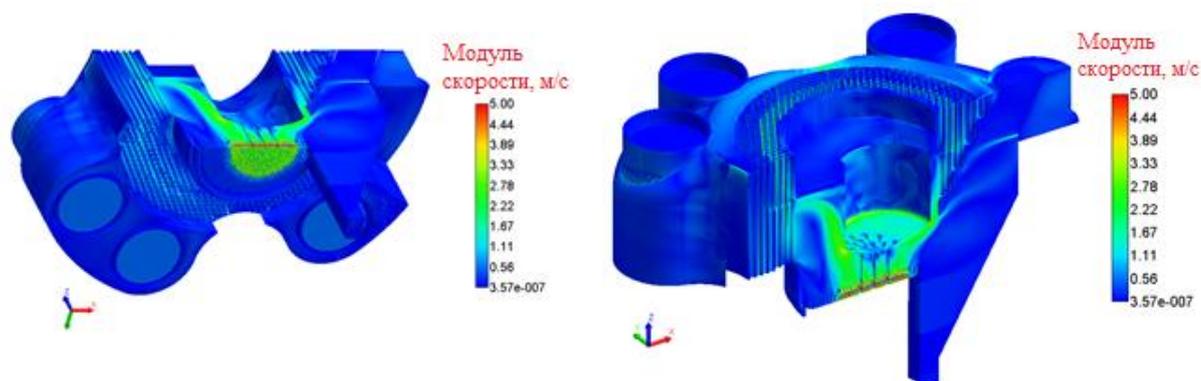


Рис. 96 – (а) – Поле температуры (вид снизу), (б) – Поле температуры (вид сверху)



(a)

(б)

Рис. 97 – (а) – Поле модуля скорости (вид снизу), (б) – Поле модуля скорости (вид сверху)

На рисунке 96 представлены поля модуля скорости и температуры в плоскости симметрии конструкции на момент времени 300 секунд. Максимальное значение модуля скорости реализуется на выходе из головок ТВС.

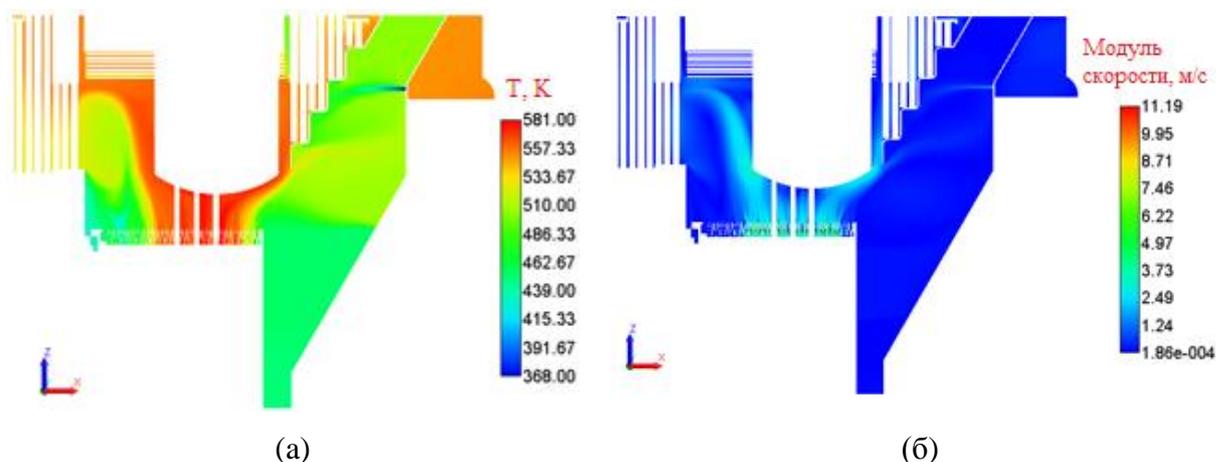
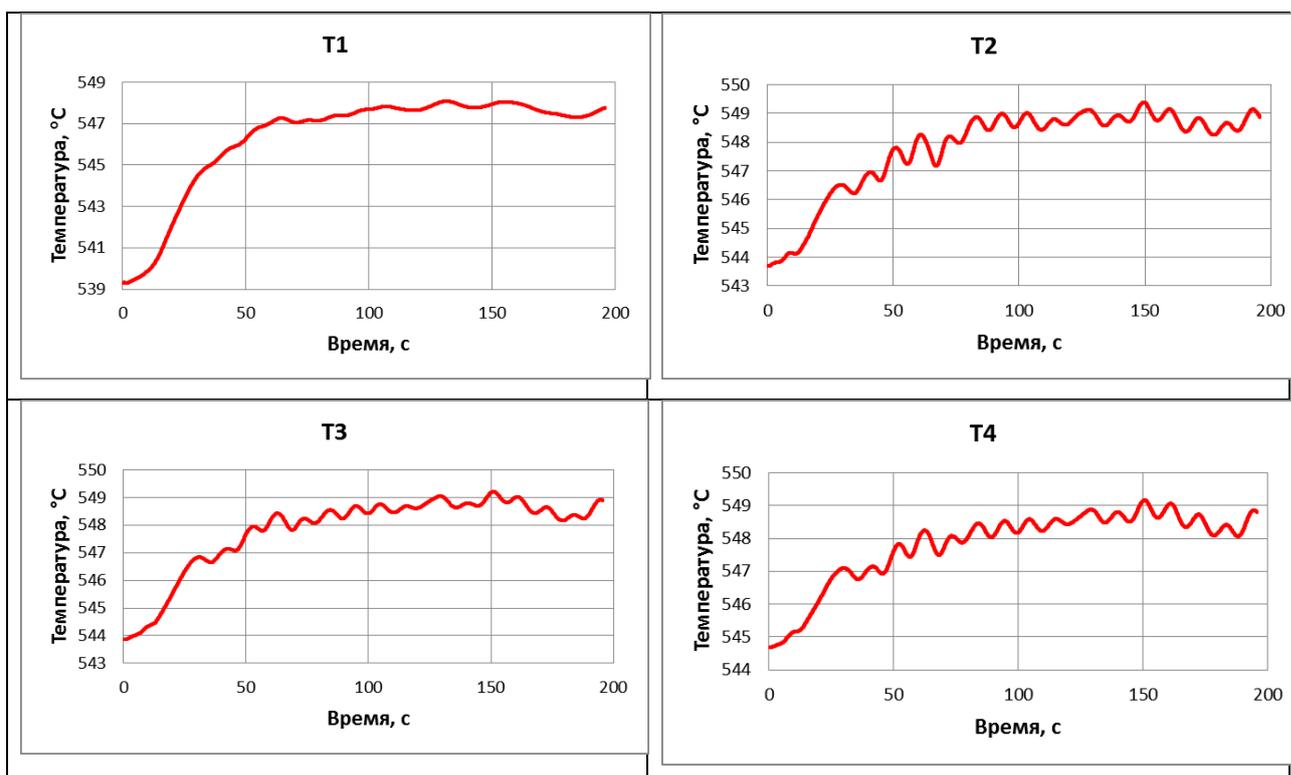
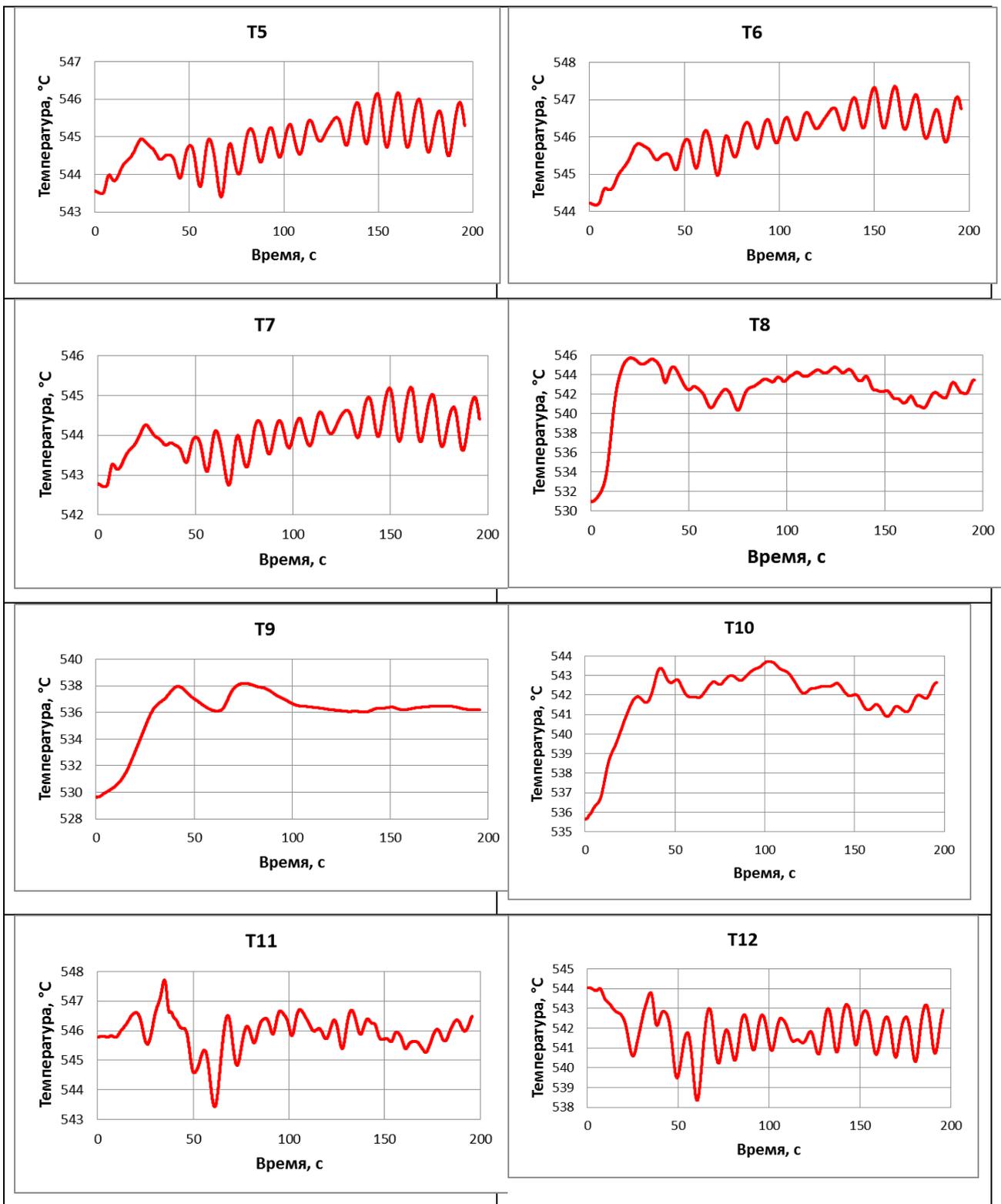


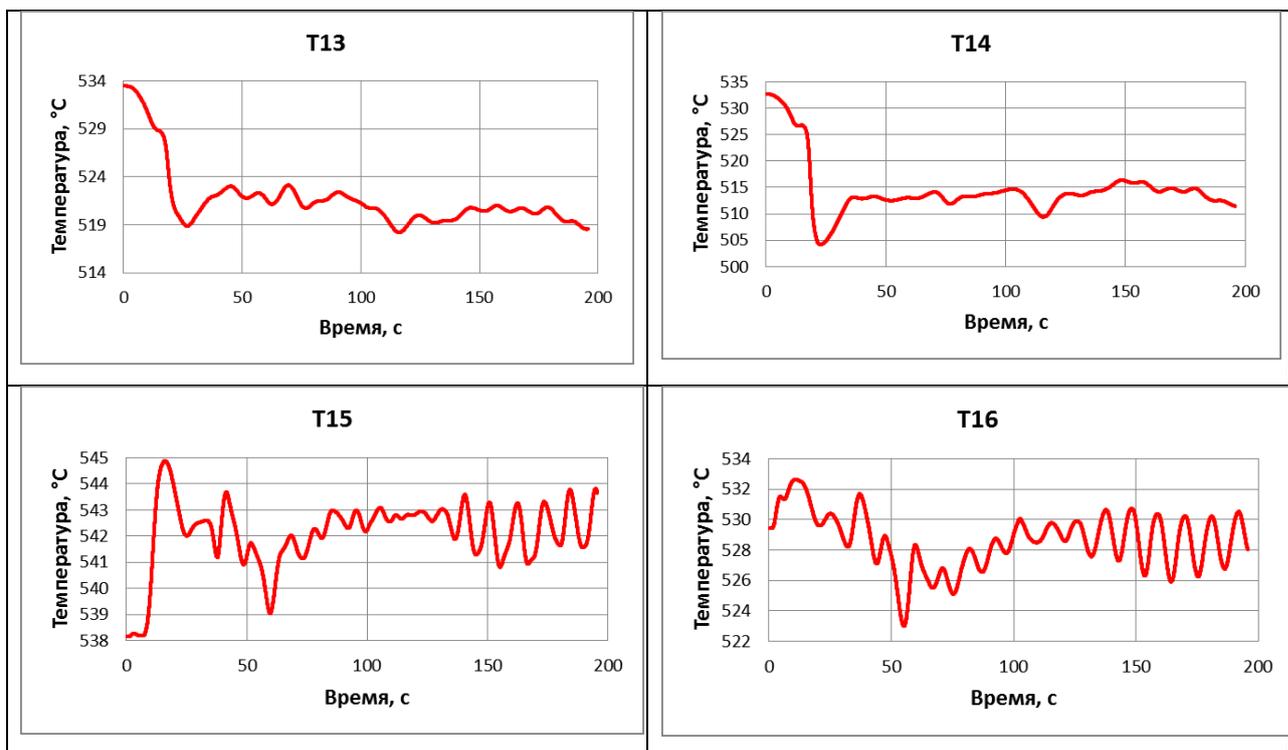
Рис. 98 – (а) – Поле температуры, (б) – Поле модуля скорости в плоскости симметрии

Координаты термопар Т1-Т15 и представлены в [Рогожкин, 2016]. В таблице приведены графики изменения температуры от времени, полученные в нестационарном расчете от 0с до 200 сек, в точках расположения термопар на входе в ПТО, а также блока баковых термопар.

Таблица 26 – зависимость температуры от времени в термопарах Т1-Т16







Для численного сравнения полученных результатов расчета с данными реактора БН-600 было выполнено усреднение значений температур в контрольных точках и вычислено относительное отклонение. Данные приведены в таблице 27.

Таблица 27 – зависимость температуры от времени в термопарах Т1-Т16

№ термопары	Эксперимент	Температура, С	Погрешность, %
T1	529	548	8,6
T2	533	549	7,1
T3	534	549	6,8
T4	538	549	4,8
T5	542	545	1,6
T6	539	547	3,4
T7	543	545	0,7
T8	540	542	0,7
T9	523	536	6,0
T10	530	542	5,2
T11	535	546	5,0
T12	537	542	2,3
T15	539	542	1,4

Наилучшее совпадение результатов расчета с эксплуатационными данными для 7 и 8 термопары. Остальные отклонения по программам не превышают 9%. Отличие результатов от эксплуатационных данных по показаниям баковой термопары практически одинаковы по всем программам и составляют 6,5-7,5 %.

3.6 Заключение

В главе представлена математическая модель для моделирования течений вязкой несжимаемой жидкости в пористом теле, описанная в диссертации.

В параграфе 3.2 представлены основные уравнения, описывающие течения в пористых средах. На основе совмещенного алгоритма приведены основные этапы решения данных уравнений. В параграфе 3.3 приведено сравнение разделенного и совмещенного алгоритма по количеству шагов и по времени моделирования течений в пористых средах. В параграфах 3.4 и 3.5 приведены численные эксперименты решения задач авиационной и атомной промышленности.

По направлению реализации совмещенного алгоритма SIMPLE для моделирования течений в пористых средах, диссертантом была выполнена основная часть работ по разработке методики, реализации и адаптации исходных уравнений Бринкмана-Форхгеймера. При определяющем участии автора были решены задачи верификации алгоритма для течений в пористых средах и исследована его эффективность. Совместно с коллегами были решены задачи расчета температурных полей в отсеке бортового оборудования, тепловых процессов в кабине маневренного ЛА, моделирования естественной и вынужденной конвекции в верхней камере реактора MONJU и моделирования перемешивания разнотемпературных потоков натрия в верхней камере реактора БН-600.

Заключение

Основные результаты, полученные в диссертации:

1. Разработана методика параллельной реализации классического и совмещенного алгоритма SIMPLE на неструктурированных сетках на основе алгебраического многосеточного метода AMG, учитывающая особенности распределенного хранения и решения СЛАУ на десятках тысяч процессоров. Проведена верификация и валидация реализованных алгоритмов на примере решения характерных задач гидродинамики, описывающих турбулентные течения вязкой несжимаемой жидкости на произвольных неструктурированных сетках.
2. Исследована эффективность реализованных алгоритмов при решении задач течений вязкой несжимаемой жидкости и газа в высокопараллельном режиме на произвольных трехмерных неструктурированных сетках. Определены оптимальные настройки для эффективного решения промышленно-ориентированных задач.
3. Разработан на базе совмещенного алгоритма SIMPLE метод решения уравнений Бринкмана-Форхгеймера для моделирования течений в анизотропных пористых средах с возможностью полностью неявной аппроксимации линейного тензора сопротивления. Проведена верификация и валидация, а также исследована эффективность разработанного метода.
4. Разработанные методы внедрены в общую структуру пакета программ ЛОГОС с учетом возможности моделирования многообластных сопряженных задач.
5. Проведена адаптация разработанных методов для решения промышленно-ориентированных задач атомной и авиационной отраслей промышленности.

Работы автора по теме диссертации

Публикации в журналах, включенных в список ВАК и/или входящих в мировые индексы цитирования (SCOPUS, Web of Science):

СВ1 Козелков А.С., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С., Пучкова О.Л., **Лашкин С.В.** Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС, журнал ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, 2013, вып.4, С. 44-56.

СВ2 Козелков А.С., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С., Пучкова О.Л., **Лашкин С.В.** Исследование схем дискретизации конвективного потока для моделирования турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости методом отсоединенных вихрей // *Фундаментальные исследования*, 2013, №10, С. 1051-1058.

СВ3 Голубев А.А., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Козелков А.С., **Лашкин С.В.**, Силаев Д.П., Симонов П.Г. Пакет программ ЛОГОС. Алгебраический многосеточный метод решения СЛАУ для задач гидродинамики, *Современные проблемы науки и образования*, 2013, № 6.

СВ4 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.

СВ5 Тарасова Н.В., Козелков А.С., Мелешкина Д.П., **Лашкин С.В.**, Денисова О.В., Сизова М.А. Особенности применения алгоритма SIMPLE для расчета сжимаемых течений // ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, 2015, вып.3, С. 20-34.

СВ6 Козелков А.С., Шагалиев Р.М., 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, том 56, № 8, С. 154–165.

СВ7 **Лашкин С.В.**, Козелков А.С., Мелешкина Д.П., Ялозо А.В., Тарасова Н.В. Моделирование течений вязкой несжимаемой жидкости разделенным и совмещенным алгоритмом типа SIMPLE // *Математическое моделирование*, 2016, том 28, №6, стр. 64-76.

СВ8 Козелков А.С., Мелешкина Д.П., Куркин А.А., Тарасова Н.В., **Лашкин С.В.**, Курулин В.В. Полностью неявный метод решения уравнений Навье-Стокса для расчета

многофазных течений со свободной поверхностью // Вычислительные технологии, 2016, Т. 21, №5, С. 54-76.

СВ9 Козелков А.С., Куркин А.А., Курулин В.В., **Лашкин С.В.**, Тарасова Н.В., Тятюшкина Е.С. Численное моделирование свободного всплытия пузырька воздуха // Известия РАН. Механика жидкости и газа, 2016, № 6. с. 3-14.

СВ10 **Лашкин С.В.**, Козелков А.С., Ялозо А.В., Герасимов В.Ю., Зеленский Д.К. Исследование эффективности параллельной реализации алгоритма SIMPLE на многопроцессорных ЭВМ // Вычислительная механика сплошных сред, 2016, т. 9, № 3, С. 298-315.

СВ11 **Лашкин С.В.**, Козелков А.С., Глазунова Е.В., Тарасова Н.В., Ялозо А.В. Применение ограничителей градиента при решении уравнений Навье-Стокса на произвольных неструктурированных сетках // Вопросы Атомной Науки и Техники, сер. Математическое моделирование физических процессов, 2017, вып.2, С. 3-17.

СВ12 Козелков А.С., Крутякова О.Л., Курулин В.В., **Лашкин С.В.**, Тятюшкина Е.С., Применение численных схем с выделением пограничного слоя для расчета турбулентных течений с использованием вихреразрешающих подходов на неструктурированных расчетных сетках // Вычислительная математика и математическая физика, 2017, том 57, № 6, С. 1048–1060.

СВ13 Kozelkov A. S., **Lashkin S.V.**, Tsibereva Yu.A., Volkov K., Tarasova N.V. An implicit algorithm of solving Navier-Stokes equations to simulate flows in anisotropic porous media // Computers and Fluids, 2018, v. 160, p. 164–174.

Публикации в других рецензируемых журналах:

СЖ1 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., Гинниатуллин 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. Р.Е. Алексева, № 4 (104), С. 21-69, 2014.

СЖ2 Козелков А.С., Куркин А.А., Шарипова И.Л., Курулин В.В., Пелиновский Е.Н., Тятюшкина Е.С., Мелешкина Д.П., **Лашкин С.В.**, Тарасова Н.В. Минимальный базис задач валидации методов расчета течений со свободной поверхностью // Труды Нижегородского государственного технического университета им. Р.Е. Алексева, 2015, № 2 (109), С. 49-69.

Публикации в трудах конференций:

ТК1 Козелков А.С., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Глазунов В.А., Голубев А.А., Денисова О.В., **Лашкин С.В.**, Жучков Р.Н., Тарасова Н.В., Сизова М.А. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС для расчета задач гидродинамики и тепломассопереноса на суперЭВМ: базовые технологии и алгоритмы // Супервычисления и математическое моделирование. Труды XII международного семинара / под ред. Р.М. Шагалиева. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2011, С. 215-229.

ТК2 Голубев А.А., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Козелков А.С., **Лашкин С.В.**, Силаев Д.П., Симонов П.Г. Пакет программ ЛОГОС. Разработка и реализация алгебраического многосеточного метода // Супервычисления и математическое моделирование. Труды XIV Межд. Конф., Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2013, с. 175 – 181.

ТК3 Козелков А.С., **Лашкин С.В.**, Курулин В.В., Сизова М.А., Рубцова Д.П., Тятюшкина Е.С. Современные подходы к моделированию турбулентных течений. Реализация и опыт использования моделей LES и DES в пакете программ ЛОГОС // Супервычисления и математическое моделирование. Труды XIV Межд. Конф., Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» 2013, С. 344 - 353.

ТК4 Козелков А.С., Шагалиев Р.М., Курулин В.В., **Лашкин С.В.**, Ялозо А.В., Денисова О.В. Актуальные проблемы высокопроизводительных вычислений в промышленных приложениях // Сборник докладов конференции «Суперкомпьютерные технологии в промышленности», ФГУП «Крыловский Государственный Научный Центр», г. Санкт-Петербург, 2014, С. 16-24.

ТК5 Козелков А.С., Шагалиев Р.М., Курулин В.В., Ялозо А.В., **Лашкин С.В.** Проблемы использования суперкомпьютеров для масштабируемого численного моделирования задач гидродинамики в промышленных приложениях // Сборник трудов семинара «Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования». Россия, Таруса, 2015, С. 133-150.

ТК6 Аксенов С.В., Дьянов Д.Ю., Жучков Р.Н., Зеленский Д.К., Иванов К.В., Козелков А.С., Корчажкин Д.А., **Лашкин С.В.**, Потехин А.Л., Пузан А.Ю., Саразов А.В., Соловьев А.Н., Циберев К.В. Использование многофункционального пакета программ ЛОГОС применительно к расчетам задач ракетно-космической отрасли на супер-ЭВМ // Ракетно-космическая техника: сборник VII научно-технической конференции молодых специалистов. Серия XI. Системы управления ракетных комплексов, 2015, С. 65-74.

ТК7 **Козелков А.С.**, Лашкин С.В., Ялозо А.В. Исследование потенциала суперкомпьютеров для масштабируемого численного моделирования задач гидродинамики в промышленных приложениях // Сборник докладов XI Всероссийского съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, Казань 2015, С. 1853–1855.

Прочие публикации:

ПП1 **Козелков А.С.**, Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Полищук С.Н., Лашкин С.В., Жучков Р.Н., Глазунов В.А., Яцевич С.В., Курулин В.В. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС: физико-математические модели расчета задач аэро-, гидродинамики и теплопереноса // Препринт ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» 111-2013, 2013, 67 с.

Свидетельства о регистрации:

СР1 Дерюгин Ю.Н., Козелков А.С. и др. Программа для ЭВМ «Пакет программ «ЛОГОС», версия 3.0» от 23.03.2012 №2012612880.

СР2 Дерюгин Ю.Н., Козелков А.С. и др. Программа для ЭВМ «Пакет программ «ЛОГОС», версия 4.0» от 25.07.2012 №2012616677.

СР3 Дерюгин Ю.Н., Спиридонов В.Ф., Козелков А.С. и др. Программа для ЭВМ «Пакет программ «ЛОГОС&ЛЭГАК-ДК», версия 4.0» от 21.11.2012.

СР4 Козелков А.С., Курулин В.В., **Лашкин С.В.** и др. Программа для ЭВМ «Программа для моделирования турбулентных течений с помощью модели турбулентного теплопереноса для низких значений чисел Рейнольдса. Версия 1» от 03.03.2015 № 2015613060.

СР5 Козелков А.С., Курулин В.В., **Лашкин С.В.** и др. Программа для ЭВМ «Программа для моделирования турбулентных течений с помощью модели турбулентного теплопереноса для высоких значений чисел Рейнольдса. Версия 1» от 03.03.2015 № 2015613071.

СР6 Козелков А.С., **Лашкин С.В.**, Ялозо А.В., «Программный модуль, позволяющий использовать внешнюю библиотеку теплофизических свойств материалов в коде ЛОГОС. Версия 1.0» от 16.12.2015 № 2015663389.

СР7 Дерюгин Ю.Н., Козелков А.С. и др. Программа для ЭВМ «Пакет программ «ЛОГОС», версия 5.0» от 20.02.2017 №2017612306.

Список литературы

1. Ahmed S. R., Ramm G., Faltin G. Some salient features of the time-averaged ground vehicle wake. SAE Technical Paper 840300, 1984.
2. Barth T., Jespersen D. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes // AIAA-89-0366, 27th Aerospace Sciences Meeting, 1989, Nevada.
3. Betelin V.B., Shagaliev R.M., Aksenov S.V., Belyakov I.M., Deryugin 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, v. 96, p.53–64.
4. Bhutta M. M. A., Hayat N., Bashir M. H., Khan S., Ahmad K. CFD applications in various heat exchangers design: A review // Applied Thermal Engineering, 2012, № 32, pp. 12-32.
5. Blazek J. Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications. New York, Elsevier, 2001.
6. Bidadi S., Rani S. Quantification of numerical diffusivity due to TVD schemes in the advection equation // Journal of Computational Physics, 2014, vol. 261, pp. 65-82.
7. Bilgen E., Yamane T. Conjugate heat transfer in enclosures with openings for ventilation // Heat and Mass Transfer, 2004, vol. 40, pp. 401–411.
8. Blind V, Bieder U, Sofu T. Benchmark Analysis of Sodium Natural Convection in the Upper Plenum of the MONJU Reactor Vessel: Preparation of a simplified model for the Upper Core Structures. DEN/CAD/DER/SSTH/LMDL/NT/2009-105/A.
9. Brandt A. Guide to multigrid development // Lectures Notes in Mathematics, 1982, vol. 960, pp. 220-312.
10. Brinkman H. The Viscosity of Concentrated Suspensions and Solutions // J. Chem. Phys., 1952, № 20, vol. 4, pp. 571-584.
11. Chen Z. J., Przekwas A. J. A coupled pressure-based computational method for incompressible/compressible flows // Journal of Computational Physics, 2010, vol. 229, pp. 9150-9165.
12. Costa V. A. F., Oliveira L. A., Baliga B. R., Sousa A. C. M. Simulation of coupled flows in adjacent porous and open domain using a control-volume finite-element method // Numerical Heat Transfer, 2004, № 45, pp. 675-697.
13. Darwish M., Moukalled F. Unified Formulation of the Segregated Class of Algorithms for Fluid Flow at All Speeds // Numerical Heat Transfer, 2000, № 1, vol. 37, pp. 103-139.

14. Darwish M., Moukalled F. TVD schemes for unstructured grids // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2003, vol. 46, pp. 599–611.
15. Darwish M., Sraj I., Moukalled F. A coupled finite volume solver for the solution of incompressible flows on unstructured grids // *Journal of Computational Physics*, 2009, vol. 228, pp. 180-201.
16. Degani A. T. Fox G. C. Parallel Multigrid Computation of the Unsteady Incompressible Navier–Stokes Equations // *JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS*, 1996, vol. 128, pp. 223-236
17. Elnaz S. CFD and Experimental Analysis of Diesel. Goteborg, Chalmers University of Technology, 2012.
18. Emrah O. An analysis on the pressure losst hrough perforated plates at moderate Reynolds numbers in turbulent flow regime // *Flow Measurement and Instrumentation*, 2015, vol. 43, pp. 6-13.
19. Ender O., Ilker T. Shell side CFD analysis of a small shell-and-tube heat exchanger // *Energy Conversion and Management*, 2010, vol. 51, pp. 1004-1014.
20. Emans M., Liebmann M. Velocity-Pressure Coupling on GPU. SFB-Report, 2013.
21. Ferziger J.H., Peric M. Computational Method for Fluid Dynamics. New York, Springer-Verlag, 2002.
22. Garbaruk A., Shur M., Spalart P.R., Strelets M. Jet noise computation based on enhanced DES formulations acceleration RANS-to-LES transition in free shear layers // Тезисы V Всероссийской научно-практической конференции «Вычислительные эксперименты в аэроакустике», г. Светлогорск, 2014 г.
23. Ghia U., Ghia K. N., Shin C. T. High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method // *Journal of Computational Physics*, 1982, vol. 48, pp. 387-411.
24. Grotjans H. Menter F. R. Wall functions for industrial applications // *Computational Fluid Dynamics*, 1998, vol. 1, pp. 1112-1117.
25. Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation // *Journal of Computational Physics*, 1983, vol. 49. pp. 357–393.
26. Hendrickson B., Leland R. The Chaco user’s guide: Version 2.0, Tech. Rep., Sandia National Laboratories, 1995.
27. Hendrickson B., Leland R. An empirical study of static load balancing algorithms. Proc. Scalable High Perf. Comput. Conf., 1994.

28. Jasak H. Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flow. Thesis submitted for the degree of doctor // Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, London, 1996.
29. Jareteg K. Block coupled calculation in OpenFOAM // Chalmers University of Technology, 2012.
30. Iaccarino G. Prediction of the turbulent flow in a diffuser with commercial CFD codes. Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs, 2000, 271-278.
31. Issa R. I. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting // Journal Computation Physics, 1985, vol. 62, pp. 40 – 65.
32. Kaviany M. Principles of Heat Transfer in Porous Media. New York, Springer-Verlang, 1991.
33. Kolev N. I. Multiphase Flow Dynamics. Berlin, Springer-Verlag, 2002.
34. Mangani L., Bianchini C. Coupled Finite Volume Solver Fof The Solution Of Laminar/Turbulent Incompressible and Compressible Flows. Gothenburg, Sweden, Fifth OpenFOAM Workshop, 2010.
35. Moukalled F., Darwish M., Sekar B. A. A pressure-based algorithm for multi-phase flow at all speeds // Journal of Computational Physics, 2003, vol. 190, pp. 550-571.
36. Malavasi S., Messa G., Fratino U., Pagano A. On the pressure losses through perforated plates // Flow Measurement and Instrumentation, 2012, vol. 28, pp. 57-66.
37. Menter F. R., Two-equation eddy viscosity turbulence models for aerodynamics flows // AIAA Paper, 1992, pp. 392-429.
38. Menter F. R., Kuntz M., Langtry R. Ten Years of Experience with the SST Turbulent Model. Begell House Inc, 2003.
39. Merkel C. L., Venkateswaran S., Buelow P. E. O. The Relationship Between Pressure-Based and Density-Based Algorithms // AIAA-89-0366, 30th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, 1992, Reno NV.
40. Nield D. A., Bejan A. Convection in Porous Media. New York, Springer Science, 2013.
41. Greenshields C. J. OpenFOAM. User Guide. Version 4.0. OpenFOAM Foundation Ltd, 2016.
42. Ozden E., Tari I. Shell side CFD analysis of a small shell-and-tube heat exchanger // Energy Conversion and Management. 2010, № 51, C. 1004-1014.
43. Park J. S., Kim C. Multi-dimensional limiting process for finite volume methods on unstructured grids // Computers & Fluids, 2012, vol. 65, pp. 8-24.
44. Patankar S. Numerical Heat Transfer And Fluid Flow. New York, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

45. Rhie C.M., Chow W.L. A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation // *AIAA Journal*, 1983, vol. 21, pp. 1525–1532.
46. Saad Y. *Iterative methods for sparse linear systems*. Minneapolis, SIAM, 2003.
47. Shavit U., Rosenzweig R., Assouline S. Free Flow at the Interface of Porous Surfaces: A generalization of the Taylor Brush Configuration // *Transport in Porous Media*, 2003, vol. 54, pp. 345-360.
48. Snir M., Otto S., Huss-Lederman S., Walker D., Dongarra J. *MPI: The Complete Reference*. MIT Press, 1996.
49. Strelets M. Detached eddy simulation of massively separated flows // 39th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, Nevada, 2001.
50. Shterev K., Stefanov S. Pressure based finite volume method for calculation of compressible flow // *Journal of Computational Physics*, 2010, vol. 229, pp. 461-480.
51. Smith C. *On Vertex-Vertex Systems and Their Use in Geometric and Biological Modelling*. Calgary, Alberta, 2006.
52. Sweeby P. K. High resolution schemes using flux-limiters // *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 1984, vol. 21, pp. 995-1011.
53. Venkatakrisnan V. On the accuracy of Limiters and Convergence to Steady State Solutions // AIAA-93-0880, 30th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, 1993, Nevada.
54. Van Albada G. D., Van Leer B., Roberts W. W. Jr., A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics // *Astronomy and Astrophysics*, 1982, vol. 108, pp. 76-84.
55. Vanek P., Mandel J., Brezina M. Algebraic multigrid based on smoothed aggregation for second and fourth order problems // *Computing*, 1996, vol. 56, pp. 179-196.
56. Versteeg H. K., Malalasekera W. *Fluid dynamics. The finite volume method*. New York, Longman Group Ltd, 1995.
57. Vogel J. C., Eaton J. K. Combined heat transfer and fluid dynamic measurements downstream of a backward-facing step // *J. Heat Transfer*. 1985, vol. 107, № 4, pp. 922-929.
58. Wan D. C., Patnaik B. S. V., Wei G. W. A New Benchmark Quality Solution for the Buoyancy-Driven Cavity by Discrete Singular Convolution // *Numerical Heat Transfer*. 2001, Part B, № 40, pp. 199-228.
59. Wang Y., Baboulin M., Dongarra J., Falcou J., Faigneau Y., Maitre O. A parallel solver for incompressible fluid flows // *Procedia Computer Science*, 2013, vol. 18, pp. 439-448.
60. Weiss J. M., Smith W. A. Preconditioning applied to variable and constant density flows // *AIAA Journal*, 1995, vol. 11, № 33, pp. 2050-2057.

61. Yoshikawa S. MONJU plant trip test in December 1995. Vienna, IAEA Headquarters, 1995.
62. Yoshikawa S., Minami M. FBR Plant Technology Unit: Data description for Numerical Analyses of Sodium Natural Convection in the Upper Plenum of the MONJU Reactor Vessel. Presented at: First (Kick-off) Research Coordination Meeting (RCM) of the IAEA Coordinated Research Project (CRP) on “Benchmark Analyses of Sodium Natural Convection in the Upper Plenum of the MONJU Reactor Vessel”. Vienna, IAEA Headquarters, 2008a.
63. Yoshikawa S., Minami M. FBR Plant Technology Unit: Complementary descriptions for detailed boundary conditions. Presented at: First (Kick-off) Research Coordination Meeting (RCM) of the IAEA Coordinated Research Project (CRP) on “Benchmark Analyses of Sodium Natural Convection in the Upper Plenum of the MONJU Reactor Vessel”. Vienna, IAEA Headquarters, 2008b.
64. Анищенко А. А., Дерюгин В. Ю., Дюпин В. Н., Иванов К. В., Санталов А. С., Санталова Е. Е. Препостпроцессор Логос-ПреПост. Архитектура уровня бизнес-логики, хранение, импорт и экспорт данных // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов, 2014, № 2, С. 78-82.
65. Антонов А. С. Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP. Москва, МГУ, 2009.
66. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М., Лаборатория базовых знаний, 2002.
67. Быстров Ю.А., Исаев С.А., Кудрявцев Н.А., Леонтьев А.И. Численное моделирование вихревой интенсификации теплообмена в пакетах труб. - Санкт-Петербург: «Судостроение», 2005.
68. Васильев А.Ю., Фрик П.Г. Инверсии крупномасштабной циркуляции при турбулентной конверсии в прямоугольных полостях // Письма в ЖЭТФ, 2010, т. 93, № 6, С. 363-367.
69. Волков К. Н., Дерюгин Ю. Н., Емельянов В. Н., Козелков А. С., Тетерина И. В. Алгебраический многосеточный метод в задачах вычислительной гидродинамики // Вычислительные методы и программирование, 2014, т. 15, С. 183-200.
70. 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., Физмалит, 2013.
71. Голубев А.А., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Козелков А.С., Лашкин С.В., Силаев Д.П., Симонов П.Г. Пакет программ ЛОГОС. Алгебраический многосеточный

- метод решения СЛАУ для задач гидродинамики, *Современные проблемы науки и образования*, 2013, № 6.
72. Евстигнеев В. А. *Применение теории графов в программировании*. М., Наука, 1985.
73. 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.
74. Идельчик И.Е. *Справочник по гидравлическим сопротивлениям*. М., Машиностроение, 1992.
75. Козелков А.С., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С., Пучкова О.Л., Лашкин С.В. Исследование схем дискретизации конвективного потока для моделирования турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости методом отсоединенных вихрей // *Фундаментальные исследования*, 2013а, №10, С. 1051-1058.
76. Козелков А.С., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С., Пучкова О.Л., Лашкин С.В. Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС, журнал ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, 2013b, вып.4, С. 44-56.
77. Козелков А. С., Жучков Р. Н., Уткина А. А., Володченкова К. Б. Моделирование турбулентных течений на сетках гибридной структуры с использованием схем высокого порядка точности // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*, 2014а, № 3, pp. 18-31.
78. 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*, 2014b, т. 7, № 1, С. 40-51.
79. 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. Р.Е. Алексеева*, № 4 (104), С. 21-69, 2014с.

80. Козелков А.С., Куркин А.А., Крутякова О.Л., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С. Зонный RANS-LES подход на основе алгебраической модели рейнольдсовых напряжений // Известия РАН. Механика жидкости и газа, 2015а, №5, с. 24-33.
81. Козелков А.С., Куркин А.А., Шарипова И.Л., Курулин В.В., Пелиновский Е.Н., Тятюшкина Е.С., Мелешкина Д.П., Лашкин С.В., Тарасова Н.В. Минимальный базис задач валидации методов расчета течений со свободной поверхностью // Труды Нижегородского государственного технического университета им. Р.Е. Алексеева, 2015b, № 2 (109), С. 49-69.
82. Козелков А.С., Шагалиев Р.М., 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, 2016а, том 56, № 8, С. 154–165.
83. Козелков А.С., Мелешкина Д.П., Куркин А.А., Тарасова Н.В., Лашкин С.В., Курулин В.В. Полностью неявный метод решения уравнений Навье-Стокса для расчета многофазных течений со свободной поверхностью // Вычислительные технологии, 2016b.
84. Козелков А.С., Куркин А.А., Курулин В.В., Лашкин С.В., Тарасова Н.В., Тятюшкина Е.С. Численное моделирование свободного всплытия пузырька воздуха // Известия РАН. Механика жидкости и газа, 2016, № 6.
85. Кириллов П. Л., Денискина Н. Б. Теплофизические свойства жидкометаллических теплоносителей (справочные таблицы и соотношения). М., ЦНИИ-атоминформ, 2000.
86. Курулин В. В., Козелков А. С. Численная схема для моделирования турбулентных течений несжимаемой жидкости с использованием вихререзающих подходов // Вычислительная математика и математическая физика, 2015, № 7, С. 1255-1265.
87. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М., Наука, 1973.
88. Ландау Л.Д., Лившиц В.М. Гидродинамика. М., Наука, 1988.
89. Лашкин С.В., Козелков А.С., Мелешкина Д.П., Ялозо А.В., Тарасова Н.В. Моделирование течений вязкой несжимаемой жидкости разделенным и совмещенным алгоритмом типа SIMPLE // Математическое моделирование, 2016а, том 28, №6, стр. 64-76.
90. Лашкин С.В., Козелков А.С., Ялозо А.В., Герасимов В.Ю., Зеленский Д.К. Исследование эффективности параллельной реализации алгоритма SIMPLE на

- многопроцессорных ЭВМ // Вычислительная механика сплошных сред, 2016b, т. 9, № 3, С. 298-315.
91. Леонов А. А., Чуданов В. В., Аксенова А. Е. Методы прямого численного моделирования в двухфазных средах. М., Наука, 2013.
 92. Молчанов А. М., Щербаков М. А., Янышев Д. С., Куприков М. Ю., Быков Л. В. Построение сеток в задачах авиационной и космической техники. Москва, МАИ, 2013.
 93. Новаев Д. А., Бартенев Ю. Г., Липов Д. И., Колпаков С. И., Киселев А. Б., Серова Т. Н., Худякова Л. В. Программные средства STK для исследования эффективности выполнения параллельных приложений // ВАНТ. Серия: Математическое моделирование физических процессов. 2011, № 4, С. 72-81.
 94. 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., Цибереv К.В. Применение отечественных суперкомпьютерных технологий для создания перспективных образцов авиационной техники // Журнал ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, 2013, вып.2, стр. 3-17.
 95. Подбельский В. В., Фомин С. С. Программирование на языке Си. Москва, Финансы и статистика, 2004.
 96. Потехин А. Л., Тарасов В. И., Фирсов С. А., Логинов И. В., Никитин В. А., Кузнецов М. Г., Попова Н. В., Деманова А. К., Козачек Ю. В. ScientificView - параллельная система пост-обработки результатов, полученных при численном моделировании физических процессов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2008, № 4, С. 37-45.
 97. Рогожкин С.А. Разработка моделей и исследование процессов тепломассопереноса в реакторе с натриевым теплоносителем // Автореферат на соискание ученой степени кандидата технических наук, Н. Новгород, 2016.
 98. 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 // Математическое моделирование, 2014, т. 26, № 9, с. 83-95.
 99. Смирнов Е.М., Зайцев Д.К. Метод конечных объемов в приложении к задачам гидрогазодинамики и теплообмена в областях сложной геометрии // Научно-технические ведомости СПбГПУ, 2004, № 36, Т. 2, С. 70-81.
 100. Страуструп Б. Язык программирования C++, спец. изд. СПб., БИНОМ, 2002.

101. Супрунов С. Знакомимся с YAML // Системный администратор, 2008, № 8, С. 72-76.
102. Тарасова Н.В., Козелков А.С., Мелешкина Д.П., Лашкин С.В., Денисова О.В., Сизова М.А. Особенности применения алгоритма SIMPLE для расчета сжимаемых течений // Журнал ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, 2015, вып.3, С. 20-34.
103. Уоткинс Д. С. Основы матричных вычислений. М., БИНОМ, 2009.
104. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М., Наука, 1974.
105. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей в двух томах. М., Мир, 1991.
106. Якововский М. В. Обработка сеточных данных на распределенных вычислительных системах // ВАНТ. Серия: Математическое моделирование физических процессов, 2004, № 2, С. 40-53.