

Пакеты инженерного анализа для вычислительной гидродинамики

Текст Александр Мурашов

Появление интегрированных пакетов для проведения гидрогазодинамических расчетов привело к революции в проектировании различных устройств и механизмов. Сейчас во многих отраслях стандартом является проведение детальных виртуальных численных экспериментов с расчетом целых изделий прежде проведения натуральных экспериментов

Современные пакеты инженерного анализа обычно имеют модульную структуру, обязательно графический интерфейс и интерпретаторы текстовых команд, предоставляющих пользователю набор удобных инструментов для управления формированием виртуальной модели, проведением расчетов и отображением полученных результатов. В области анализа гидрогазодинамических процессов и тепло-массопереноса в России нашли

распространение такие коммерческие пакеты, как STAR-CD/STAR-CCM+, Fluent, CFX, FlowVision и Gas Dynamics Tool. По уровню полноты реализуемых физических и математических моделей и необходимому уровню профессиональной подготовки пользователей первые три относят к группе так называемых пакетов «тяжелого класса». STAR-CD/STAR-CCM+, Fluent, CFX – это коммерческие профессиональные CFD-комплексы для решения широкого спектра задач механики сплошных сред и теплообмена. Разработ-

чиком пакета STAR-CD/STAR-CCM+ является транснациональная компания CD-adapco Group. Все права на пакеты CFX и Fluent принадлежат корпорации ANSYS Inc. Моделирование процессов, протекающих в жидких и газообразных средах, в пакетах STAR-CD, Fluent и CFX осуществляется на основе численного решения полных трехмерных нестационарных уравнений Навье-Стокса. Пакеты обеспечивают возможность анализа течений вязкой ньютоновской и неньютоновской жидкости и газа в широком диапазоне скоростей от ползучих до гиперзвуковых течений при ламинарном и турбулентном режимах. Для замыкания осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса при моделировании турбулентных течений эти программные комплексы содержат достаточно обширные каталоги полуэмпирических моделей турбулентности. Разностные схемы первого, второго и третьего порядков в пакетах STAR-CD, Fluent и CFX сконструированы с применением метода конечного объема для дискретизации

исходных уравнений. Пользователю предоставляется возможность самостоятельного выбора разностных схем и алгоритмов, а также их параметров. Импорт геометрии расчетной области из CAD-систем осуществляется с помощью стандартных форматов STL, IGES, X_T и т. д. Активно развиваются версии пакетов, интегрированные в CAD-среду и наоборот. Разностные сетки могут иметь смешанные типы ячеек – гексаэдры, усеченные многогранники, призмы, пирамиды, тетраэдры. Предусмотрена возможность адаптивного сгущения сеток, а также сопряжения различных расчетных сеток, в том числе сеток различной топологии и скользящих сеток. Наряду со встроенными сеточными генераторами предусмотрена возможность использования сеток, построенных в независимых сеточных генераторах, а также прочтения сеток, построенных в других инженерных пакетах. Кроме того, предусмотрены дополнительные возможности, обеспечивающие построение объектно-ориентированных разностных сеток применительно к различным классам задач – например, для задач турбомашиностроения, задач внешней аэродинамики и др. Все три рассматриваемых пакета обеспечивают постановку широкого класса задач. Формирование модели может осуществляться как с помощью графического интерфейса, так и с использованием встроенной системы команд, работающей в режиме интерпретатора. Препроцессор последовательно выполняет команды, поступающие от графического интерфейса набранными вручную либо записанными в предварительном созданном командном файле (script). Пакеты отличаются открытостью архитектуры и гибкостью при построении расчетной модели. Предусмотрена возможность поль-

зовательского программирования. Возможно совместное применение встроенного языка программирования для задания свойств материалов, граничных условий, описания источников членов и пользовательского программирования на алгоритмических языках высокого уровня (FORTRAN, C++). Пакеты имеют развитые средства представления и интерпретации результатов и интерфейсы к широкому кругу CAD/CAE-программ. Для обеспечения анализа течения жидкости и газа с учетом сопутствующих физических и химических процессов в пакеты включены следующие модели:

- многокомпонентные течения;
- химические реакции с учетом химической кинетики, в том числе и реакции горения;
- кондуктивный, конвективный и лучистый теплообмен, в том числе с учетом независимого течения различных жидкостей, разделенных твердыми теплопроводными стенками;
- течение в пористых средах;
- течение двух жидкостей («тяжелой» и «легкой») с границей раздела;
- многофазные течения (несущий газ с частицами твердой и жидкой фаз, а также несущая жидкость с частицами твердой фазы и газовыми пузырьками) с учетом теплообмена и дроблением капель на основе стохастических моделей, а также с учетом условия возникновения кавитации.

Моделирование процессов, протекающих в жидких и газообразных средах, в пакетах STAR-CD, Fluent и CFX осуществляется на основе численного решения полных трехмерных нестационарных уравнений Навье-Стокса

Вычисления в данных пакетах могут проводиться на различных платформах под управлением операционных систем UNIX (Linux) или Windows. Параллельные версии пакетов обеспечивают работу в режиме па-

раллельного счета на гомогенных и гетерогенных многопроцессорных системах с общей и отдельной памятью с использованием библиотеки межпроцессорной коммуникации MPI под управлением Windows- и Linux-систем. Пакеты сертифицированы по международной системе качества ISO, а также имеют различные национальные и отраслевые сертификаты. Как следует из приведенного выше описания, представленные пакеты обеспечивают широкий спектр приложений для решения промышленных задач и анализа природопользовательских проблем. При этом данные пакеты обладают равными возможностями в реализации этих приложений. В то же время очевидно, что представленные пакеты тождественны только в исходной системе уравнений механики жидкости и газа, которая лежит в основе математического фундамента пакетов. Конкретные же реализации разностных схем, алгоритмов и подходов к решению тех или иных вычислительных проблем в этих пакетах зачастую существенно разнятся. Таким образом, следует ожидать, что процесс (а в некоторых случаях и сама возможность) получения адекватных, практически значимых решений для задач различного класса при использовании рассмотренных пакетов может существенно различаться. Пакет FlowVision, очевидно, следует отнести к пакетам «среднего клас-

са». Он менее универсален, чем пакеты первой группы, однако существенно проще в освоении и менее требователен к вычислительным ресурсам. Flow Vision разрабатывается и поддерживается Российской компанией ТЕСИС (г. Москва). В

пакете используется набор моделей течения жидкости, описываемых уравнениями Навье-Стокса, записанных в различных приближениях, в той или иной степени учитывающих сжимаемость среды. Эти уравнения дополняются уравнениями переноса концентрации, что позволяет решать задачи о течении смесей. Для моделирования турбу-

В том числе предусмотрена передача потоков на внутренних границах при решении задач со скользящими сетками.

Так же как и рассмотренные выше пакеты, FlowVision имеет модульную объектно-ориентированную структуру. Ядро пакета написано на языке C++.

Реализован двусторонний ин-

нестационарных ударно-волновых газодинамических процессов, включая горение и детонацию. Течение невязкого сжимаемого газа описывается трехмерными нестационарными уравнениями Эйлера с уравнением состояния идеального газа. Для описания вязких течений используются уравнения Навье-Стокса. Реализованы раз-

Последняя тенденция показывает, что наиболее развитые страны все больше внимания обращают на разработки, распространяемые по GPL-лицензии

лентных течений в приближении Рейнольдса в пакете используется ряд полуэмпирических моделей турбулентности. Для разностной аппроксимации исходных уравнений в пакете FlowVision используется метод контрольного объема. Разностные уравнения имеют второй порядок аппроксимации. Алгоритм разрешения системы разностных уравнений основан на описанном в работах академика О. М. Белоцерковского проекционном методе MAC, использующем расщепление по физическим процессам. Так же как и в представленных выше пакетах, препроцессор FlowVision обеспечивает импорт геометрии из CAD-систем и некоторых других инженерных пакетов, например NASTRAN, ABAQUS, ANSYS.

FlowVision использует регулярную расчетную сетку, состоящую из кубических ячеек. Предусмотрена возможность адаптации сетки как к параметрам решения (например к градиентам), так и к криволинейным границам расчетной области путем поэтапного размельчения (или укрупнения) ячеек сетки (метод подсеточного разрешения) до необходимого уровня. При этом пристеночные ячейки представляют собой усеченные фигуры. Набор граничных условий в пакете FlowVision идентичен рассмотренным выше, используемым в пакетах STAR-CD, CFX и Fluent.

терфейс FlowVision с конечноэлементным пакетом ABAQUS. Такой интерфейс обеспечивает обмен необходимой информацией для решения связанных аэроупругих задач.

Пакет позволяет осуществлять анализ процессов теплопереноса и диффузии в твердом теле, а также может быть использован при решении задач сопряженного теплообмена между твердым телом и жидкостью. В пакет встроена модель течения с поверхностью раздела сред и модели горения, а также модель течения в пористых средах и модель многофазных сред. Реализована параллельная версия пакета с использованием библиотеки межпроцессорной коммуникации MPI. Пакет работает на различных платформах под управлением операционных систем Windows и Linux.

FlowVision сертифицирован Госстандартом России. Он является менее универсальным пакетом, чем пакеты STAR-CD, CFX и Fluent, но в то же время благодаря достаточно большому спектру включенных в него моделей охватывает весьма широкий круг приложений.

Другой отечественный пакет, Gas Dynamics Tool (GDT), разрабатываемый и поддерживаемый компанией GDT Software Group (г. Тула), можно отнести к специализированным пакетам. Он предназначен для численного моделирования

личные подмодели, позволяющие применять пакет для исследования течений многофазных сред и специфических физико-химических процессов.

Для численного интегрирования уравнений используется явная двухшаговая схема модифицированного метода крупных частиц. Пакет характеризуется высокой совместимостью и минимальными системными требованиями. В GDT используется регулярная сетка из кубических (квадратных) ячеек. Разработчики пакета пошли по пути формирования ломаной поверхности, образованной гранями ячеек, которые пересекаются криволинейными границами. Моделирование сложных структур потока в пристеночных областях при этом обеспечивается за счет использования мелкомасштабной разностной сетки.

Последние версии пакета обеспечивают возможность эффективного использования многопроцессорных вычислительных систем. Пакет позволяет моделировать следующие процессы:

- плоские и пространственно-трехмерные нестационарные течения вязких и невязких газов;
- эволюция систем газов и тел, имеющих произвольную геометрическую конфигурацию при наличии диффузии и теплопроводности с учетом теплообмена с твердыми

сплошными и проницаемыми телами, с возможностью их движения по заданному или вычисляемому закону;

- течения химически реагирующих сред;
- детонация в газообразных смесях, конденсированных взрывчатых веществах, мультифазных зарядах;
- течения при наличии импульсно-периодического источника внешнего подвода энергии (например, под воздействием лазерного излучения).

Однако принципиальное отсутствие возможности применения криволинейных сеток с нерегулярной структурой ячеек в ряде задач является существенным ограничением (особенно при решении в GDT задач вязкого обтекания тел). Вместе с тем пакет GDT прекрасно зарекомендовал себя при решении многих задач нестационарной газовой динамики, таких как сравнение характеристик различных моделей взрыва для идеальных и неидеальных взрывчатых веществ, а также для исследования воздействия ударных волн и температурных воздействий на комплексные конструкции. Пакет относится к классу специализированных пакетов. Особо отметим гибкость визуализации выходных данных в различных форматах.

Последняя тенденция показывает, что наиболее развитые страны имеют хотя бы одну достойную разработку, распространяемую по GPL-лицензии. Наиболее функционально развитым считается пакет OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) – свободно распространяемый инструментальный вычислительный гидродинамики для операций со скалярными и векторными полями. Код OpenFOAM разработан в Великобритании в компании OpenCFD Limited и используется многими промышленными предприятиями более 12 лет. Свое название и

идеологию построения код берет от предшественника FOAM (Field Operation And Manipulation), который является закрытым и продолжает развиваться параллельно с OpenFOAM. Первоначально программа предназначалась для прочностных расчетов и в результате многолетнего академического и промышленного развития на сегодняшний момент позволяет решать следующие задачи:

- прочностные расчеты;
- гидродинамика ньютоновских и неньютоновских вязких жидкостей как в несжимаемом, так и в сжимаемом приближении с учетом конвективного теплообмена и действием сил гравитации.

Для моделирования турбулентных течений возможно использование RANS-моделей, LES- и DNS-методов. Возможно решение дозвуковых, околозвуковых и сверхзвуковых задач;

- задачи теплопроводности в твердом теле;
- многофазные задачи, в том числе с описанием химических реакций компонент потока;
- задачи, связанные с деформацией расчетной сетки;
- сопряженные задачи;

- некоторые другие задачи, при математической постановке которых требуется решение в условиях сложной геометрии среды;
- распараллеливание как в кластерных, так и в многопроцессорных системах.

В основе кода лежит набор библиотек, предоставляющих инструменты для решения систем дифференциальных уравнений в частных производных как в пространстве, так и во времени. Рабочим языком кода является C++. В терминах данного языка большинство математических дифференциальных и тензорных операторов в программном коде (до трансляции в исполняемый файл) уравнений может быть представлено в удобочитаемой форме, а метод дискретизации и решения для каждого оператора может быть выбран уже пользователем в процессе расчета. Таким образом, в коде полностью инкапсулируются и разделяются понятия расчетной сетки (метод дискретизации), дискретизации основных уравнений и методов решения алгебраических уравнений. Пакет имеет свой генератор сеток, пре- и постпроцессор. По мнению и проведенным вы-

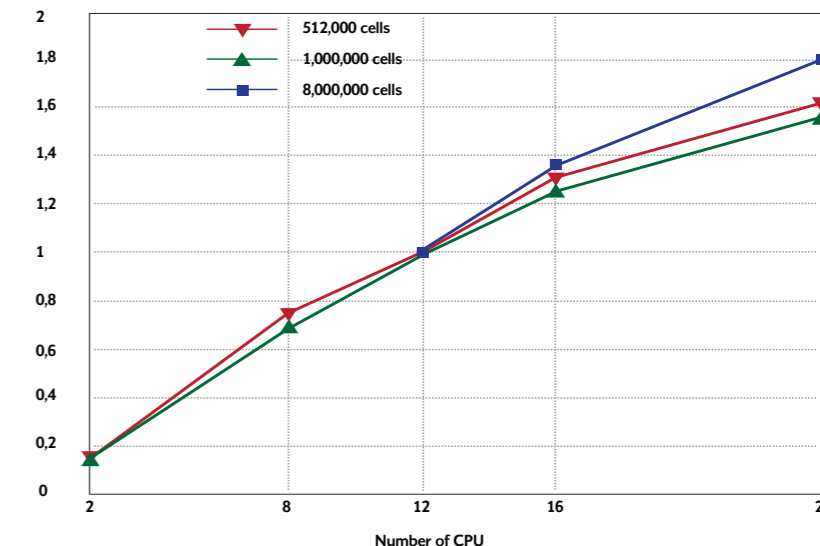


Рис. 1. Зависимость относительного показателя ускорения счета от числа процессоров, участвующих в вычислениях для моделей размерностью до 8 млн ячеек

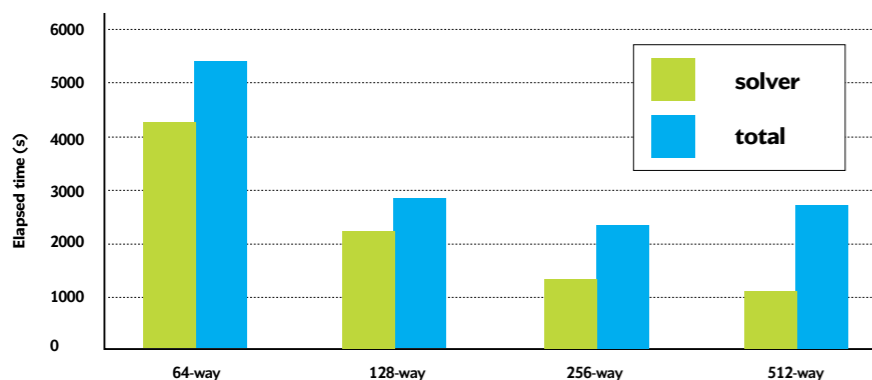


Рис. 2. Полное время счета и время счета решателя за 200 итераций

числительным экспериментам доктора Марка Олесена из EMCON Technology, OpenFOAM показывает в сравнении с коммерческим продуктом STAR-CD одинаковые результаты и сравнимые времена вычислений.

Анализ применимости суперкомпьютеров для инженерного ПО

Эффективность распараллеливания зависит от сложности взаимодействия программной и аппаратной частей многопроцессорной вычислительной системы (МВС). Это и архитектура МВС, и используемые математические модели, разностные схемы и алгоритмы их реализации, размерность задачи, метод декомпозиции расчетной области, операции ввода-вывода и обмена данными и многое другое. Основное решение задач происходит на МВС с разделенной памятью. Для таких систем самым «узким местом» являются каналы передачи данных от процессора к процессору. Их низкая пропускная способность во многих случаях существенно сдерживает быстродействие всей системы. Поэтому приходится придерживаться принципа нахождения всех процессов в каждом процессоре. Обычно поступают таким образом, чтобы избежать распараллеливания по физическим процессам, при котором не избежать передачи больших массивов данных по каналам связи.

Наилучшее распараллеливание удается получить, если процессоры обмениваются только данными о состоянии полей на стыках между областями, так как при этом объем передаваемых данных минимален. Основной способ распараллеливания состоит в разделении сетки на приблизительно одинаковые по количеству ячеек сегменты, близкие по форме к кубам. Таким образом, сетка делится на участки, за которыми жестко закрепляются процессоры. Для расчета полей в следующий момент времени каждый процессор выполняет шаг по времени на закрепленной к нему сетке. После этого все процессоры посылают соседним значения в приграничных узлах своего участ-

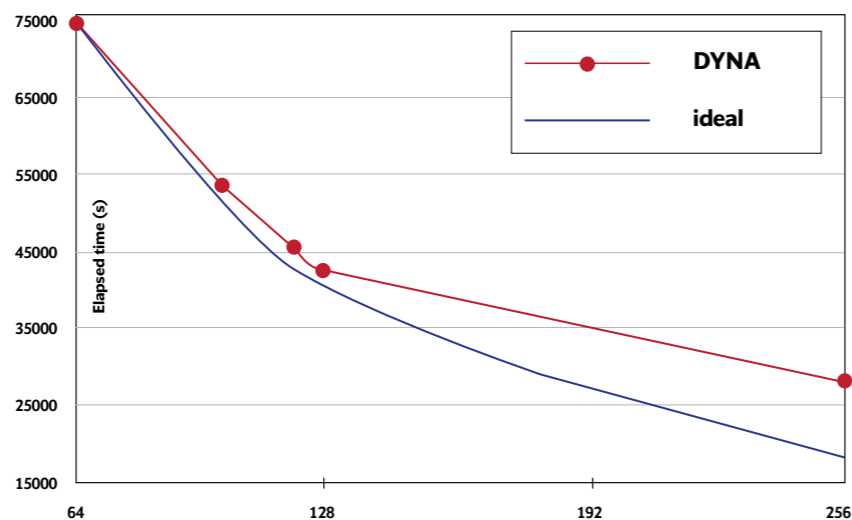


Рис. 3. Зависимость полного времени счета от количества задействованных счетных ядер

ка. Эти значения и используются другими процессорами в качестве граничных условий. Время выполнения шага по времени каждым процессором пропорционально количеству узлов сетки, принадлежащей данному процессору. А поскольку на каждом шаге по времени процессоры ждут друг друга для обмена значениями граничных узлов, то, чтобы минимизировать время работы программы, следует поровну распределить узлы между процессорами. Чтобы свести к минимуму издержки на обмен значениями граничных узлов, нужно свести к минимуму общую длину границ между процессорами, а она стремится к полусумме периметров всех участков всех процессоров. На рис. 1 представлена зависимость коэффициента масштабируемости пакета STAR-CD на ряде размерностей расчетных сеток. В качестве дополнительного обоснования использования СК правильным будет представить также результаты масштабируемости пакетов, представленные самими разработчиками ПО или наиболее «продвинутыми» европейскими исследователями. На рис. 2 показаны зависимости времени счета 200 итераций от ко-

личества задействованных ядер для задачи размерностью сетки 94 млн ячеек в STAR-CCM+ v4.02. Пример использования СК для решения задач МДТТ в пакете LS-Dyna на масштабируемой системе показан на рис. 3 для задачи, содержащей 6 млн конечных элементов. Наблюдается практически линейное ускорение расчетов, однако полное время имеет минимум для 256 процессоров, что, вероятно, связано с неэффективностью системы ввода-вывода. В качестве примеров использования МВС представим результаты масштабируемости пакетов, либо представленные самими разработчиками ПО, либо полученные сторонними исследователями. Отдельным показателем при выборе инструмента численного анализа может служить набор дополнительных специализированных модулей. В отношении структуры расчетных сеток, топологии элементарных объемов и блоков также существуют небольшие различия. В ряде случаев тип расчетных сеток

определяет скорость вычислений, качественные и количественные показатели результирующих полей величин. Рассматривая универсальные пакеты, практически невозможно выписать все модули и возможности по причине их огромного многообразия. Также ввиду их стандартизации и сертификации не всегда можно выявить глобальные отличия в целом. В таблице выписаны лишь несколько специфических возможностей. В организациях и предприятиях, только начинающих приобретать опыт виртуального эксперимента, часто встает вопрос о выборе оборудования. Можно отметить, что под практически каждый пакет анализа и особенно под каждую область исследований требуется индивидуальная подборка многопроцессорной вы-

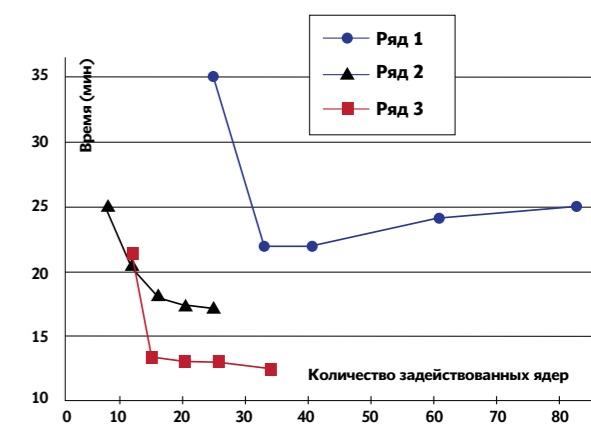


Рис. 4. Зависимость времени счета от количества ядер: ряд 1 – Intel Xeon Processor E5410 (12M Cache, 2.33 GHz, 1333 MHz FSB); ряд 2 – Intel Xeon Processor X5570 (8M Cache, 2.93 GHz, 6.40 GT/s Intel QPI); ряд 3 – Intel Xeon Processor X5650 (12M Cache, 2.66 GHz, 6.40 GT/s Intel QPI)

числительной системы. Даже в случае поиска универсальной системы всегда существует единственное оптимальное решение. К сожалению, сегодня практически ни один интегратор НРС, в том числе европейский, не обладает достаточной базой знания для определения такой системы исходя из задач клиента. Исключения составляют в основном холдинги, не только производящие кластерные решения, но и оказывающие на базе своих решений услуги. В таблице приведены некоторые сравнительные результаты различных систем на одном выбранном пакете гидрогазодинамического анализа на одной выбранной модели с двойной точностью, имеющей невысокую способность к распараллеливанию. На рис. 4 видно, что в случае проведения организацией масштабных проектов или больших серий расчетов при выборе инструмента численного моделирования необходимо не только проводить оценку возможностей комплекса модулей прикладного программного обеспечения, но и выбирать аппаратно-программный комплекс в целом. Во всех тестируемых системах в качестве интерконнекта для ряда 2 и 3 используется IB QDR, для ряда 1 – IB DDR. Примеры успешного применения вычислительных технологий в проектировании – тема наших следующих статей.

	CFX	FLUENT	CFD-Flo	STAR-CCM+
Излучение	+	+	%	+
Переходные модели турбулентности (SAS/DES)	+	+	-	+
Вращающиеся машины (MRF/frozen-rotor)	+	+	-	+
Вращающиеся машины (sliding-mesh/stage)	+	+	-	+
Метод свободного тела в потоке (6 ст. своб.)	+	+	-	+
Акустика (предсказание шума)	+	-	-	\$
Химические реакции	+	+	-	+
Горение	+	+	-	+
Многофазное течение (эйлерова постановка)	+	+	-	+
Акустический сопряженный анализ	+	%	%	\$
Электромагнетизм-текущая среда	\$	-	-	-
Многогранные ячейки	-	-	-	+

+ – реализовано; - – не реализовано; \$ – требуются дополнительные модули; % – есть ограничения