



Обоснование необходимости и эффективности применения суперкомпьютеров

В данном разделе приводятся некоторые соображения об оценке вычислительных ресурсов необходимых для проведения прямого численного моделирования химически реагирующих течений (combustion DNS). Вопросы, связанные с оценкой ресурсов для DNS простых турбулентных течений без горения на сегодняшний день достаточно хорошо изучены, теоретически обоснованы и изложены в литературе (см., например, [Geurts,2004; Волков,2008]). Для DNS химически реагирующих течений вопрос не только не представлен, но и не проработан до конца [Ertesvåg,2000].

DNS является наукой само по себе. Философия проведения прямого численного моделирования значительно отличается от общепринятых методик, использующихся в инженерных расчетах. Далее приводится оценка пространственных и временных масштабов, необходимых для сеточного разрешения, а также оценка необходимых вычислительных затрат. Следует отметить, что хотя точная оценка зависит от того или иного численного метода и его реализации на той или иной многопроцессорной архитектуре, данный подход вполне пригоден для качественного оценки.

Полное время необходимое для проведения расчета с помощью прямого численного моделирования может быть представлено в виде следующего произведения:

$$N_{\text{points}} \times N_{\text{time steps}} \times \text{Time}_{\text{per point per time step}} = N_p \times N_t \times T_{pt},$$

где

N_p – пространственное разрешение,

N_t – временное разрешение,

T_{pt} — вычислительное время, необходимое для расчета одного шага по времени для одного узла или контрольного объема расчетной сетки.

Оценка T_{pt}

На каждом временном шаге в каждом узле расчетной сетки решается система уравнений Навье-Стокса, дополненная уравнением сохранения энергии ($2 + n$ уравнений, где n – количество измерений в пространстве, обычно $n = 3$). Пусть химически реагирующая среда задана системой химических реакций с числом компонент N_s . Тогда, дополнительно решаются $N_s - 1$ уравнений переноса для концентраций компонент. Можно показать [Ertesvåg,2000; Warnatz,2006], что более точные результаты получаются, когда решаются все N_s уравнений. Дополнительно вычисляется источниковый член в уравнении энергии. Когда каждый компонент среды участвует в среднем в \bar{n}_r реакциях, то вычислительные затраты можно оценить пропорционально произведению $N_s \times \bar{n}_r$.

DECgroup Inc Аналитика



Таким образом:

$$T_{pt} \approx (2 + n + N_s + A N_s \bar{n}_r) T_{op}, \text{ где}$$

A — const, которая варьируется в зависимости от численного метода, архитектуры вычислительной системы и т.д. Опыт [Ertesvåg,2000] показывает, что $A \sim 10$.

Также делается допущение о пренебрежительно малых вычислительных затратах на расчет радиационного теплообмена (хотя это не так).

T_{op} – время CPU необходимое для выполнения данных операций.

Характерные масштабы в пространстве и времени

Колмогоровские масштабы длины и времени являются наименьшими [Geurts,2004; Волков,2008] масштабами в турбулентности:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4}, \tau = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2}.$$

Для молекулярного смешивания минимальными масштабами длины и времени являются масштабы Бэтчелора [Ertesvåg,2000; Warnatz,2006]:

$$\eta_B = \left(\frac{\nu D^2}{\epsilon} \right)^{1/4} = \frac{\eta}{\sqrt{Sc}}, \tau_B = \tau.$$

Введем конвективное время для линейных масштабов Колмогорова и Бэтчелора:

$$\tau_U = \frac{\eta}{U}, \tau_{(U,B)} = \frac{\eta_B}{U}.$$

Для химически реагирующих течений «наибольший» временной масштаб пропорционален скорости выгорания топлива:

$$\tau_c \approx \frac{1}{R_{br}}$$

«наибольший» пространственный масштаб:

$$\delta_L \approx \sqrt{D \tau_c}, \text{ где } D \text{ – коэффициент диффузии.}$$

Эти масштабы могут быть определены для сотен или тысяч элементарных реакций [Warnatz,2006]. Далее введем наименьшие временной и пространственный масштабы химических реакций и для линейного масштаба определим конвективное время:

$$\tau_{(r,min)}, \delta_{(r,min)}, \tau_{(U,r,min)} = \delta_{(r,min)} / U.$$

Пространственное разрешение

Пусть процесс моделируется в расчетной области с характерным линейным размером L в трехмерном пространстве, с объемом L^3 . Дискретизируем объем расчетной области таким образом, чтобы конечно-элементная сетка имела разрешающую способность с наименьшим пространственным масштабом:

$$Np \approx \left(\frac{L}{\min \{ \eta, \eta_{(B,min)}, \delta_{(r,min)} \}} \right)^n \approx \left(\frac{L}{\eta} \right)^n \max \left\{ 1, Sc_{max}^{(n/2)}, \left(\frac{\eta}{\delta_{(r,min)}} \right) \right\},$$

DECgroup Inc Аналитика



$$\frac{L}{\eta} \approx \frac{L'}{\eta} \approx \mathfrak{R}_\lambda^{(3n/2)} \approx \mathfrak{R}_l^{(3/4)}, \text{ (где } \mathfrak{R} \text{ - число Рейнольдса)}$$

$$Np \approx \left(\frac{L}{\eta}\right)^n \approx \mathfrak{R}_\lambda^{(3n/2)},$$

$$Np \approx \left(\frac{L}{\eta}\right)^n \left(\frac{\eta}{\delta_{(r, min)}}\right)^n \approx \mathfrak{R}_\lambda^{(3n/2)} \left(\frac{\eta}{\delta_{(r, min)}}\right)^n.$$

Временное разрешение

Наибольший временной масштаб определяется как отношение L/U , который пропорционален $\theta = l' / u'$. Тогда временное разрешение может быть определено следующим соотношением:

$$N_t \approx \frac{\text{largest time}}{\text{smallest time}} \approx \frac{\max\{\theta, \tau_{(r, max)}\}}{\min\{\tau_U, \tau_{(U, B, min)}, \tau_{(U, r, min)}, \tau_{(r, min)}\}}$$

$$N_t \approx \max\left\{\frac{\theta}{\tau_U}, \frac{\theta}{\tau_{(U, B, min)}}, \frac{\theta}{\tau_{(U, r, min)}}, \frac{\theta}{\tau_{(r, min)}}, \frac{\tau_{(r, max)}}{\tau_U}, \frac{\tau_{(r, max)}}{\tau_{(U, B, min)}}, \frac{\tau_{(r, max)}}{\tau_{(U, r, min)}}, \frac{\tau_{(r, max)}}{\tau_{(r, min)}}\right\}$$

Здесь, первые два члена связаны с турбулентностью, следующие пять - описывают взаимоотношения между турбулентностью и горением, и последний связан с различными реакциями.

Сравнение вычислительных ресурсов для DNS и DNS в химически реагирующих средах

В турбулентных течениях без химических реагирующих сред, приведенные выше выражения значительно упрощаются. Кроме того, хорошо известно [Geurts, 2004; Волков, 2008], что для турбулентных течений минимальными являются Колмогоровские масштабы. Тогда

$$N_p N_t \approx \left(\frac{L}{\eta}\right)^n \frac{\theta}{\tau_U} \approx \mathfrak{R}_\lambda^{(3n/2)} \mathfrak{R}_\lambda^{(3/2)}$$

Для DNS турбулентных течений $T_{pt} \approx (2+n)T_{op}$

Для DNS турбулентных химически реагирующих сред: $T_{pt} \approx (2+n+N_s+A N_s \bar{n}_r)T_{op}$

Отсюда следует что DNS без горения требует значительно меньших вычислительных ресурсов чем DNS с горением.

Практический пример оценки вычислительных ресурсов для DNS

Пусть заданы: $\mathfrak{R}_\lambda = 200, \theta = 1 \text{ s}, L = 1 \text{ m}, N_s = 100, \bar{n}_r = 10, \tau_{(r, min)} = 10^{-9} \text{ s}, \delta_{(r, min)} = 10^{-6} \text{ m};$

Тогда:

DECgroup Inc Аналитика



$$N_p \approx \left(\frac{L}{\delta_{(r, \min)}} \right)^3 \approx 10^{18}$$

$$N_t \approx \frac{\theta}{\tau_{(r, \min)}} \approx 10^9$$

$$T_{pt} \approx (2 + 3 + 100 + 10 \times 100) T_{op} \approx 10^3 T_{op}$$

оптимистично допускается, $A = 1$

Для DNS турбулентных химически реагирующих сред: $N_p N_t T_{pt} \approx 10^{30} T_{op}$!

Для DNS турбулентных течений: $N_p N_t \approx \mathfrak{R}_\lambda^6 \approx 6 \times 10^{13}$; $T_{pt} = 5 T_{op}$; $N_p N_t T_{pt} \approx 10^{14} T_{op}$!

Таким образом, разница для двух примеров составляет примерно 10^{16} раз.

От DNS к LES

По сравнению с DNS, LES требует меньших вычислительных ресурсов. Поскольку LES исключает прямой расчет мелких вихрей, то разностные сетки и временные шаги могут быть намного больше (**примерно на порядок** [Geurts,2004; Волков,2008]), чем Колмогоровские масштабы длины и времени. Имеющиеся оценки показывают, что количество узлов для LES составляет около 5% количества узлов, используемого в DNS. При фиксированной расчетной памяти возможно достижение более высоких чисел Рейнольдса, чем в DNS.

Однако, характерные масштабы присущие химически реагирующим средам остаются прежними, и накладывают практически те же требования к ресурсам, что и при DNS. Кроме того, вблизи стенки все вихри малы настолько, что размеры энергосодержащих и диссипативных вихрей перекрываются. Размеры крупных вихрей в пристеночной области зависят от числа Рейнольдса, а сеточные и временные шаги, требуемые для LES, вблизи стенки постепенно падают до величин, характерных для DNS.

В качестве примера, в Таблице №1 приведено распределение характерных пространственных масштабов низко-эмиссионной камере сгорания современной газотурбинной установки [Warnatz,2006]. Временные масштабы также, как правило, определяются скоростями химических реакций и для комплексных кинетических механизмов могут варьироваться от долей секунд до микро- или наносекунд. Пространственные и временные масштабы тесно взаимосвязаны (как правило нелинейно). Поэтому принципиальным при прогнозировании, становится аккуратное разрешение всего спектра масштабов.

Численное исследование турбулентного горения (химически реагирующих сред) в рамках модели крупных вихрей и прямого численного моделирования является **«grand challenge problem»**, характеризующейся метафизичностью, комплексной физической кинетикой и жесткостью решаемой системы уравнений, где характерные масштабы длины и времени могут различаться многими порядками!

DECgroup Inc Аналитика



Таблица №1. Распределение пространственных характерных масштабов в камере сгорания современной газотурбинной установки.

линейный размер камеры сгорания	10 – 100 см
энергосодержащие вихри	1 – 10 см
диссипативные вихри	0.1 – 10 мм
диффузионные вихри, масштабы фронта пламени	10 – 100 мкм
молекулярное взаимодействие, химические реакции	1 – 10 нм

Литература

- Волков К.Н., Емельянов В.Н. Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 364 с.
- Ertesvåg I.S. Turbulent Flow and Combustion (in Norwegian). Tapir Academic Publisher. 2000. 284p.
- Geurts B. J. Elements of Direct and Large-Eddy Simulation. Shipping & Handling, 2004, 388p.
- Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. Combustion (4th ed.). Berlin Heidelberg New York Springer. 2006. 378p.