

# 万核级可扩展 CFD 软件及应用

梁 贤 李新亮 傅德薰 马延文

(中国科学院力学研究所, 北京 100190)

**摘要** 介绍了超级计算机在国民生产中的作用和意义,重点展示了自主研发的可扩展大规模计算流体力学软件(CCFD)的结构及其在直接数值模拟(DNS)复杂流动问题中的应用.分析了 CCFD 核心计算模块 CCFD-Hoam 在不同构架的超级计算机中的并行加速比,结果表明在万核级并行计算规模下,CCFD-Hoam 的并行效率仍可以达到 80%以上,具有较强的并行加速能力.利用 CCFD-Hoam,在万核级并行计算规模下,首次对 RAE2822 翼型绕流和强冷却壁面条件且马赫数等于 8 的平板绕流做了高精度 DNS 计算,并给出精细的湍流场结构,结果表明 CCFD-Hoam 适用于近翼面复杂流场的高分辨 DNS 计算.

**关键词** 超级计算; 加速比; 复杂流动; 直接数值模拟; 湍流

中图分类号 TP317, O354 文献标志码 A 文章编号 1671-4512(2011)S1-0067-04

## Ten thousand order cores expandable CFD software and its application

Liang Xian Li Xinliang Fu Dexun Ma Yanwen

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

**Abstract** Function and significance of supercomputing in national production is introduced. The architecture of independent-developmental and expandable computational fluid dynamics software (China Computational Fluid Dynamics, CCFD) and its application in direct numerical simulation (DNS) of complex flow problems are specially presented. Parallel speed up of key module of CCFD, CCFD-Hoam, is carefully analyzed under different architectural super computers. The results show that the parallel efficiency of CCFD-Hoam is larger than 80% when CPU numbers up to ten thousand order. The high resolution DNS of complex flow problems, including around flow over airfoil RAE2822 and over strong cold flat plate with Mach 8, are completed by employing ten thousand order CPU cores. The meticulous turbulent structure prove that CCFD-Hoam can competent for high resolve DNS of near wall complex flow.

**Key words** supercomputing; parallel speed up; complex flow; direct numerical simulation; turbulence

十一五期间我国在超级计算机建设方面投入巨大,成绩斐然,投入运行的有国家级超级计算机“天河一号”、“深腾 7000”和“魔方”。此外,还需推广超级计算应用,加大软件开发力度,打破大型优秀软件多被国外垄断的劣势,争取十二五期间在软件研发方面也取得同步发展,推广网格计算和云计算服务及其软件研发<sup>[1]</sup>。

对边界层稳定性和复杂流动(湍流)机理的认识直接关系到对航空航天飞行器气动性能的设计与提高,随着超级计算机的发展,人们对湍流机理的认识也逐步深入,不仅验证了已有的理论,新的发现也层出不穷.湍流数值模拟的方法主要有直接数值模拟(DNS)、大涡模拟(LES)和雷诺平均数值模拟(RANS)<sup>[2]</sup>.其中 DNS 方法最为精细,

收稿日期 2011-02-28.

作者简介 梁 贤(1974-),男,讲师, E-mail: liangxian@imech. ac. cn.

基金项目 国家自然科学基金资助项目(10632050,10872205,11072248);国家高技术研究发展计划资助项目(2009AA01A139);国家重点基础研究发展计划资助项目(2009CB724100).

可以得到湍流的精细结构,为湍流机理的研究、大涡模拟方法和湍流模型的改进以及新模型的建立提供依据,对实验能起到有效促进,缺点是计算量大.随着超级计算机性能的不不断提高,DNS方法在机理研究方面已逐步被采用<sup>[3]</sup>.本文利用自主研发的计算流体力学软件(气动力分析软件,CCFD),对机翼、平板等不同典型外形的绕流做直接数值模拟,探讨了特殊的湍流机理.

## 1 CCFD 简介

万核级大规模并行 CFD 软件系统(CCFD)具有我国自主知识产权,可直接应用于先进大型飞机型号方案设计及初步详细设计.整体软件由前处理模块、核心求解器模块以及后处理模块 3 部分构成,其中核心求解器基于纳维-斯托克斯方程组的数值求解,包括有限差分 and 有限体积 2 大类解法,有限差分求解器模块为 CCFD-Hoam.这里将重点介绍 CCFD-Hoam 模块的功能及其在直接数值模拟复杂流动中的应用.

核心求解器 CCFD-Hoam 的数值方法为差分法,包含了目前流行的多种高精度差分格式,如中心差分格式、迎风差分格式、对称紧致差分格式、WENO 型差分格式,还包含了自主开发的差分格式,如迎风紧致格式、群速度控制型差分格式等,这些格式通常具有很高的数值精度,最高精度达到 10 阶.时间推进采用高阶龙格-库塔方法.计算网格采用结构网格,支持直角坐标系、柱坐标系、球坐标系及任意曲线坐标系(雅可比变换).

对于黏性项一般采用高阶中心差分格式,比如 4 阶、6 阶、8 阶、10 阶中心差分,这些格式都集成在 CCFD 的差分库中.对于无黏项,首先进行流通矢量分裂<sup>[4]</sup>,将原先的无黏项分解为正通量和负通量;然后再分别针对正、负通量采用相应的差分离散(通常采用迎风格式).与不进行矢量分裂直接离散对流项(通常采用中心格式或谱方法等)相比,矢量分裂后采用迎风差分格式更具稳定性,同时能有效抑制混淆误差<sup>[5-6]</sup>.本软件主要使用 Steger-Warming 流通矢量分裂.另外对于含激波或间断的流动,流通矢量分裂后配合激波捕捉格式求解,可以有效抑制数值解的非物理振荡.

## 2 CCFD 加速比测试

定义并行加速比

$$S_p = T_0(m_0)/T_1(m_1), \quad (1)$$

式中:下标 0 和 1 分别表示参考点和测试点; $m$  和  $T$  分别表示完成计算相同任务所用的 CPU 数目(核数)和时间.并行加速比的含义是针对完成相同任务,以使用  $m_0$  个 CPU 花费  $T_0$  时间作为参考点,对比 CPU 核数增加到  $m_1$ ,花费  $T_1$  时间时,计算所花费时间的比值.若将式(1)的分子分母同时乘以各自使用的 CPU 核数,则得到并行效率  $P_e = m_0 T_0(m_0)/(m_1 T_1(m_1))$ ,显然加速性能越高,并行效率越接近于 1.并行加速比是线性的,表示 CPU 核数增加  $N$  倍,计算时间应降低到  $1/N$ ,并行效率为 1<sup>[7]</sup>.

CCFD 无论在单一 CPU 构架系统下,还是在 CPU/GPU 混合构架系统下,都具有非常好的可扩展性和加速性能.在单一 CPU 体系构架的某国产超级计算机上的测试表明,以 4 096 核数作为参考点,当 CPU 核数增加到 32 768 时,并行效率仍然保持在 80% 左右,当 CPU 核数增加到 58 240 时,并行效率下降到 60%.这是由于当所使用的 CPU 核数很大时,CPU 之间通信任务加重,和计算任务相比,通信所占的比例太大,导致整体的加速比性能下降.从这个角度来说,测试加速比时还要注意选择合适的计算任务,分析任务在不同 CPU 核数时是通信占优型的还是计算占优型,这样才能正确评估加速比的测试结果.

图 1 给出了在混合构架体系的天河一号超级计算机上的测试结果,以 CPU 核数 256 作为参考

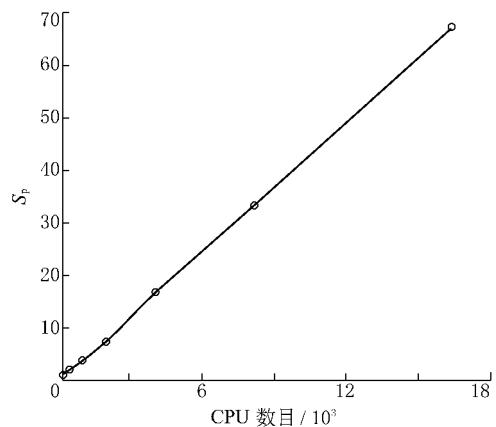


图 1 混合体系结构的加速比测试

点,当 CPU 核数增加到 16 384 时,测试结果都表现出线性或者是超线性的并行加速比特点,这说明在这样的规模下,CCFD 和天河一号可以发挥最佳的计算效能.在混合构架体系的计算机中,应着重关注 GPU 和 CPU 多线程协同作业的特点,这样才能发挥计算机的优势,但当前测试目前只关注了 CPU 核数的变化,还没有加入 GPU 方面的测试.

### 3 典型外形的计算结果

#### 3.1 RAE2822 绕流的 DNS 分析

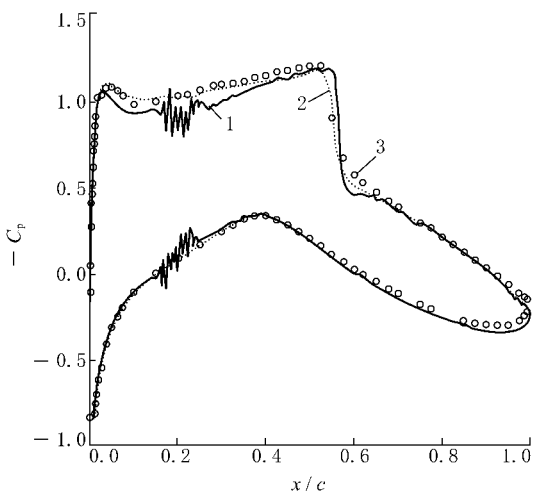
RAE2822 超临界翼型<sup>[8]</sup>是 NASA 公布的标准算例,有可靠的实验数据、高质量网格及较好的计算结果<sup>[9]</sup>,但目前尚无 DNS 和 LES 的计算结果,这里利用 CCFD 软件尝试了这方面的计算.来流条件是马赫数 0.729;攻角 2.31°,以弦长  $c$  作为特征长度,雷诺数为  $6.5 \times 10^6$ . 计算时将该翼形沿展向拓展了 3% 的弦长作为展向计算域,并采用周期性边界条件.为使流动能快速达到转换并进入湍流状态,在距离翼前缘附近加入周期性的单频率、单波数的行波扰动,即

$$v' = A \sin(\pi\phi) \sin[2\pi(\alpha_x\phi + \beta t)] \sin(2\pi\alpha_z z / z_{\max}), \quad (2)$$

式中:  $A=0.16$  为扰动振幅;  $\phi=(x-x_1)/(x_2-x_1)$ ;  $z_{\max}$  为展向宽度;  $\alpha_x$  和  $\alpha_z$  分别为  $x$  方向和  $z$  方向的扰动基频,且  $\alpha_x=\alpha_z=4$ ;  $\beta$  为扰动的基本频率,  $\beta=10$  Hz. 这里  $x_1$  和  $x_2$  为在  $x$  方向加入扰动的开始和结束位置,取  $x_1=0.15, x_2=0.25$ .

定义近翼面的一个网格尺度等于一个壁面尺度,以满足法向有足够的分辨率.当网格较粗时,称此时的计算为隐式大涡模拟 (ILES)<sup>[10]</sup>,当有足够细的网格划分时,称为 DNS. 给出了在  $5201 \times 128 \times 128$  网格规模下的结果,计算在中国科学院网络信息中心超级计算中心深腾 7000 上完成.

图 2 给出了翼展中段壁面压力系数 ( $C_p$ ) 沿弦



1—UDC7 加扰动的 DNS 计算; 2—WENO5 加 BL 模型且没有扰动的计算; 3—实验值.

图 2 壁面上的压力系统

向的分布,分别为采用 7 阶迎风格式 (UDC7) 且加扰动的 DNS 计算,以及采用 5 阶 WENO 格式 (WENO5) 格式加 BL 模型且没有扰动的计算,2

种结果均与实验值相符.从压力数值和激波位置,特别是高分辨率的激波计算结果可见,激波陡峭且几乎没有发生震荡,进一步说明高精度、高分辨率格式在复杂流动直接数值模拟中有不可替代的作用.计算时,若不加入扰动,整体翼面是层流状态,当加入扰动后,会转变为湍流,此时摩擦系数明显增大.

在壁湍流研究中,定义  $y^+ = y/l^+$ , 其中:  $l^+ = \mu/(\rho U_\tau)$  是近壁湍流的特征长度,称为内层长度尺度,  $U_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho}$  是近壁湍流的特征速度,称为摩擦速度<sup>[11]</sup>,  $\tau_w, \mu, \rho$  分别为壁面切应力、黏性系数及密度;  $y$  为由无量纲长度定义的法向距离,凡由  $l^+$  度量的长度量都用右上标“+”表征.

图 3 的结果采用 7 阶迎风格式,且加扰动计算得到,给出了近壁面  $y^+=5$  时的流向速度  $u$  的

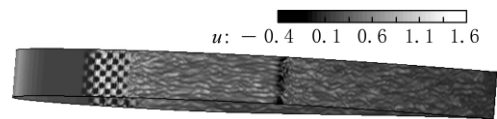


图 3 近壁面 ( $y^+=5$ ) 的流向速度分布

分布,在湍流区流向为高速和低速流体相间排列构成的条带结构<sup>[12]</sup>,这是湍流边界层近壁处的一大特征,图 3 给出了激波的位置,大约在  $x=0.55$  处.由图可见:流动从前缘开始,首先是层流区,然后进入扰动区,其后是一段扰动的快速增长区,大约在  $x \approx 0.3$  的位置发生 bypass 类型的转换,之后出现了大量的小尺度涡结构,表现出明显的湍流特征.这些结果只有借助高分辨率、高精度格式才能得到,说明 CCFD 适合于计算和分析复杂流场精细结构.

#### 3.2 强冷壁平板绕流模拟

高马赫数、高雷诺数平板绕流是当前国际上的计算难题之一,直接数值模拟这类流动问题有助于增进人们对湍流机理的认识.目前可检索到的计算结果一般为马赫数小于 6,雷诺数小于  $2 \times 10^6$  的算例<sup>[13]</sup>.这里利用 CCFD 对马赫数等于 8 的平板绕流做了直接数值模拟,具体来流条件:马赫数为 8;参考温度  $T_\infty=169.4$  K;以来流参考量和参考长度  $l_\infty=1$  英寸定义的雷诺数为  $2 \times 10^6$ ;以来流参考量和  $x=11$  处的动量厚度  $\theta$  定义的雷诺数为 8 815.1;壁面取冷却的固壁边界条件,且  $T_w/T_\infty=1.9$ ,其中  $T_w$  为壁温.计算区域为  $xyz=[4,15] \times [0,0.8] \times [0,0.175]$ ,对应的网格划分为  $6764 \times 80 \times 320$ ,且展向采用周期边界条件.在充分发展湍流段  $x=11$  处,以壁面尺度  $l^+$  度量的 3 个方向的网格间距为  $\Delta x^+ \Delta y^+ \Delta z^+ = 21.3 \times$

2×9.3. 结果在天河一号超级计算机上采用 9 216 核并行计算, 约 10 h 完成. 计算时在  $4.5 \leq x \leq 5$  之间加入吹吸扰动, 扰动形式类似于式(2).

图 4 给出了平板壁面摩擦系数  $C_f$  沿流向的

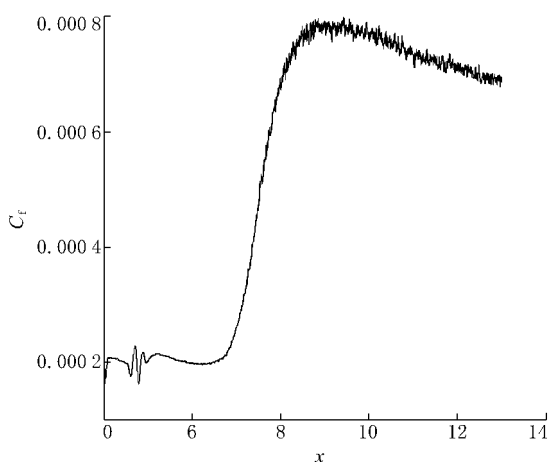


图 4 壁面摩擦阻力系数分布

变化, 流动在  $x \approx 7$  的地方开始转捩, 相比层流而言, 湍流区的摩擦增大近 4 倍. 在充分发展湍流阶段, 来流马赫数等于 6 时, 近壁区湍流马赫数最大约为 0.4<sup>[13]</sup>, 而本文计算表明, 当来流马赫数等于 8 时, 最大湍流马赫数达到 0.65 以上, 说明高马赫数情况下湍流强度明显增大. 图 5 给出了速度梯度张量第二不变量(Q)的等值面图, 这里 Q 值

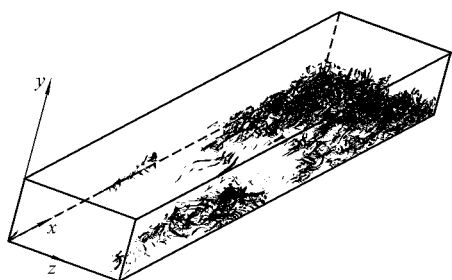


图 5 转换阶段的 Q 等值面

取 1 000, 它反应了边界层流场的涡结构, 在边界层内这些涡管基本上沿流向分布. 在转捩段, 流动开始形成湍流斑, 在向下游发展过程中向展向扩散, 并逐步过渡到充分发展阶段, 这时大尺度结构都破碎成小尺度结构, 逐步过渡得到充分发展湍流阶段, 边界层也明显增厚.

通常在 Morkovin 假设<sup>[3]</sup>下认识和分析可压缩湍流的性质, 压缩性效应主要通过平均量的影响表现, 称为外压缩性效应. 当马赫数较高时, 压缩性效应将主要通过脉动量的影响表现, 称为内压缩性效应表现, 此时边界层内部有小激波产生. 在当前的计算中已经观察到这些现象, 详细

分析将在进一步研究中展开.

感谢中国科学院网络中心超级计算中心、上海超级计算中心、国家超级计算天津中心提供计算机时.

#### 参 考 文 献

- [1] 南凯, 董科军, 谢建军. 面向云服务的科研协同平台研究[J]. 华中科技大学学报: 自然科学版, 2010, 38(S1): 14-19.
- [2] 张兆顺, 崔桂香, 许春晓. 湍流大涡数值模拟的理论和应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2008: 130-184.
- [3] 傅德薰, 马延文, 李新亮, 等. 可压缩湍流直接数值模拟[M]. 北京: 科学出版社, 2010: 189-258.
- [4] Steger J, Warming RF. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods[J]. J Comput Phys, 1981, 40: 263-293.
- [5] Lele S K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution[J]. J Comput Phys, 1992, 103: 16-42.
- [6] Fu D X, Ma Y W. A high order accurate different scheme for complex flow fields[J]. J Comput Phys, 1997, 134: 1-15.
- [7] 张林波, 迟学斌, 莫则尧, 等. 并行计算导论[M]. 北京: 清华大学出版社, 2006: 210-216.
- [8] Cook P H, McDonald M A, Firmin M C P. Aerofoil RAE2822—pressure distributions, and boundary layer and wake measurements, AR 138[R]. Farnborough: AGARD, 1979.
- [9] Slater J W. RAE2822 transonic airfoil[EB/OL]. [2008-07-08]. <http://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/raetaf/raetaf.html>.
- [10] Davidson L, Cokljat D, Frohlich J, et al. Large eddy simulation of flow around a high lift airfoil[M]. Berlin: Springer, 2003: 9-71.
- [11] 是勋刚. 湍流[M]. 天津: 天津大学出版社, 1994: 111-114.
- [12] Pirozzoli S, Grasso F. Direct numerical simulation and analysis of a spatially evolving supersonic turbulent boundary layer at  $M = 2.25$ [J]. Phys Fluids, 2004, 16(3): 530-545.
- [13] Li Xinliang, Fu Dexun, Ma Yanwe. Direct numerical simulation of a spatially evolving supersonic turbulent boundary layer at  $M_a = 6$  [J]. Chin Phys Lett, 2006, 23(6): 1519-1522.