



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики  
RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES  
Nuclear Safety Institute



# РАЗВИТИЕ КОДОВ МЕТОДИКИ КАБАРЕ

*3D-коды КАБАРЕ для расчета нестационарных задач тепломассопереноса без использования моделей турбулентности и настроечных параметров*

Головизнин В.М.<sup>1</sup>, Готов В.Ю.<sup>2</sup>, Данилин А.В.<sup>2</sup>, [Соловьев А.В.<sup>2</sup>](#)

1. Московский государственный университет, факультет ВМК
2. Институт безопасного развития атомной энергетики РАН



# Содержание доклада

## **Код Cabaret-stages**

- Краткая характеристика кода Cabaret-stages
  - Методика
  - Код
- Развитие кода
- Результаты 2016 года

## **Перспективный код**

# Методика КАБАРЕ 1D

## 1. Предварительный полушаг

$$\frac{U_c^{n+1/2} - U_c^n}{\tau_n / 2} + \frac{F_R^n - F_L^n}{h_i} = 0$$

## 2. Вычисление потоков

$$p = c^2 (\rho - \rho_0)$$

определение инвариантов

$$R = u + G \cdot p$$

$$Q = u - G \cdot p$$

$$G = (c \cdot \rho_0)^{-1}$$

экстраполяция

$$\begin{cases} R_\xi^\omega = u_\xi^\omega + G_{i-1/2} \cdot p_\xi^\omega \\ Q_\xi^\omega = u_\xi^\omega - G_{i+1/2} \cdot p_\xi^\omega \end{cases}$$

$$\begin{cases} \tilde{R}_i^{n+1} = 2R_{i-1/2}^{n+1/2} - R_{i-1}^n \\ \tilde{Q}_i^{n+1} = 2Q_{i+1/2}^{n+1/2} - Q_{i+1}^n \end{cases}$$

монотонизация

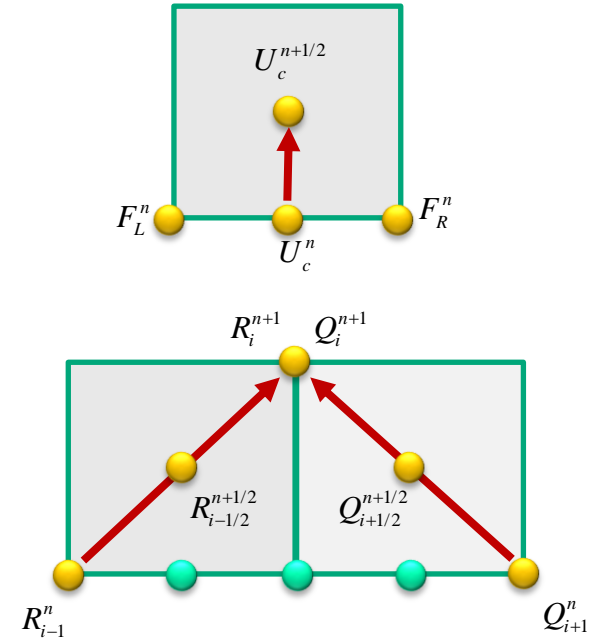
$$\begin{cases} R_i^{n+1} = [\tilde{R}_i^{n+1}]_{R \min}^{R \max} \\ Q_i^{n+1} = [\tilde{Q}_i^{n+1}]_{Q \min}^{Q \max} \end{cases}$$

$$R_{\min} = \min \{R_{i-1}^n, R_{i-1/2}^n, R_i^n\}$$

$$Q_{\min} = \min \{Q_i^n, Q_{i+1/2}^n, Q_{i+1}^n\}$$

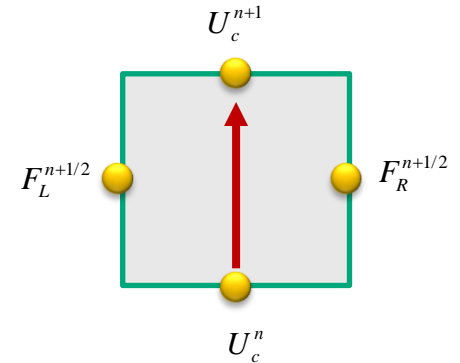
вычисление потоковых переменных

$$\begin{cases} R_i^{n+1} = u + G_{i-1/2} \cdot p \\ Q_i^{n+1} = u - G_{i+1/2} \cdot p \end{cases}$$



## 3. Вычислительный шаг

$$\frac{U_c^{n+1} - U_c^n}{\tau_n} + \frac{F_R^{n+1/2} - F_L^{n+1/2}}{h_i} = 0 \quad F_*^{n+1/2} = \frac{F_*^n + F_*^{n+1}}{2}$$



# Методика КАБАРЕ 3D

## 1. Предварительный полушаг

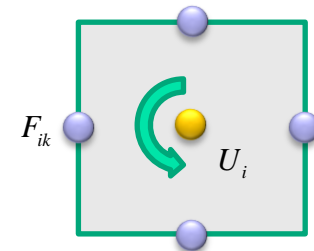
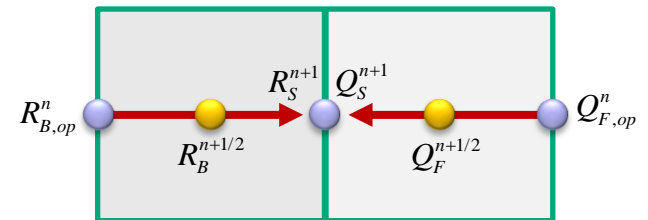
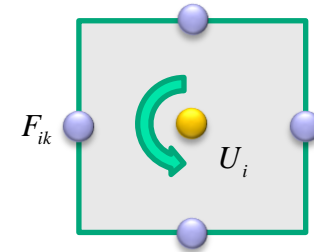
$$\frac{U_i^{n+1/2} - U_i^n}{\tau_n / 2} + \frac{1}{V_c} \sum_{k=1}^6 F_{ik}^n = 0$$

## 2. Вычисление потоков

Для грани S определены две ячейки В (back) и F (forward)  
В,ор и F,ор – грани, противоположные относительно S  
Все операции проводятся аналогично случаю 1D

## 3. Вычислительный шаг

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\tau_n} + \frac{1}{V_c} \sum_{k=1}^6 F_{ik}^{n+1/2} = 0 \quad F_*^{n+1/2} = \frac{F_*^n + F_*^{n+1}}{2}$$







# Методика КАБАРЕ 3D.

## криволинейная сетка

### 1.Предварительный полушаг

$$\frac{U_i^{n+1/2} - U_i^n}{\tau_n / 2} + \frac{1}{V_c} \sum_{k=1}^6 F_{ik}^n = 0$$

### 2.Вычисление потоков

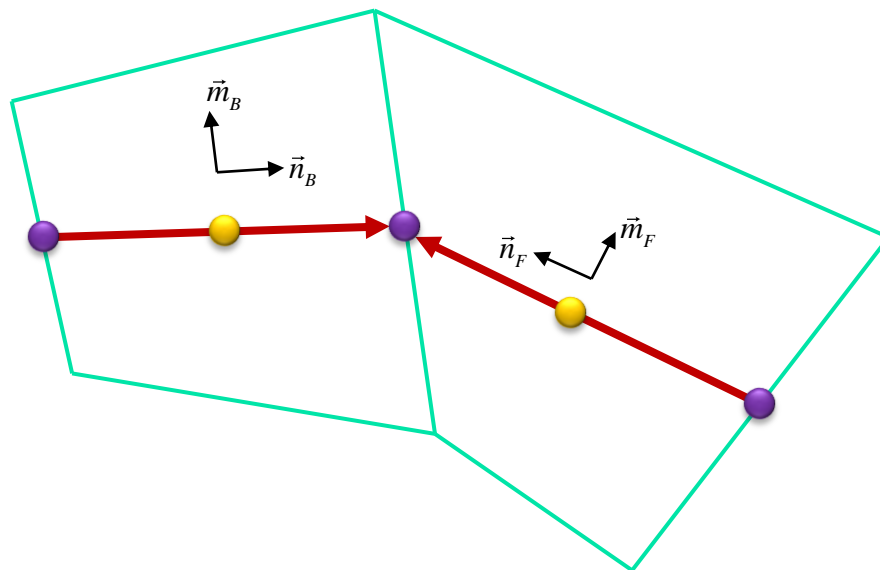
$$R = (\vec{u}, \vec{n}_B) + G \cdot p$$

$$Q = (\vec{u}, \vec{n}_F) - G \cdot p$$

$$S = (\vec{u}, \vec{m}_*)$$

### 3.Вычислительный шаг

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\tau_n} + \frac{1}{V_c} \sum_{k=1}^6 F_{ik}^{n+1/2} = 0 \quad F_*^{n+1/2} = \frac{F_*^n + F_*^{n+1}}{2}$$

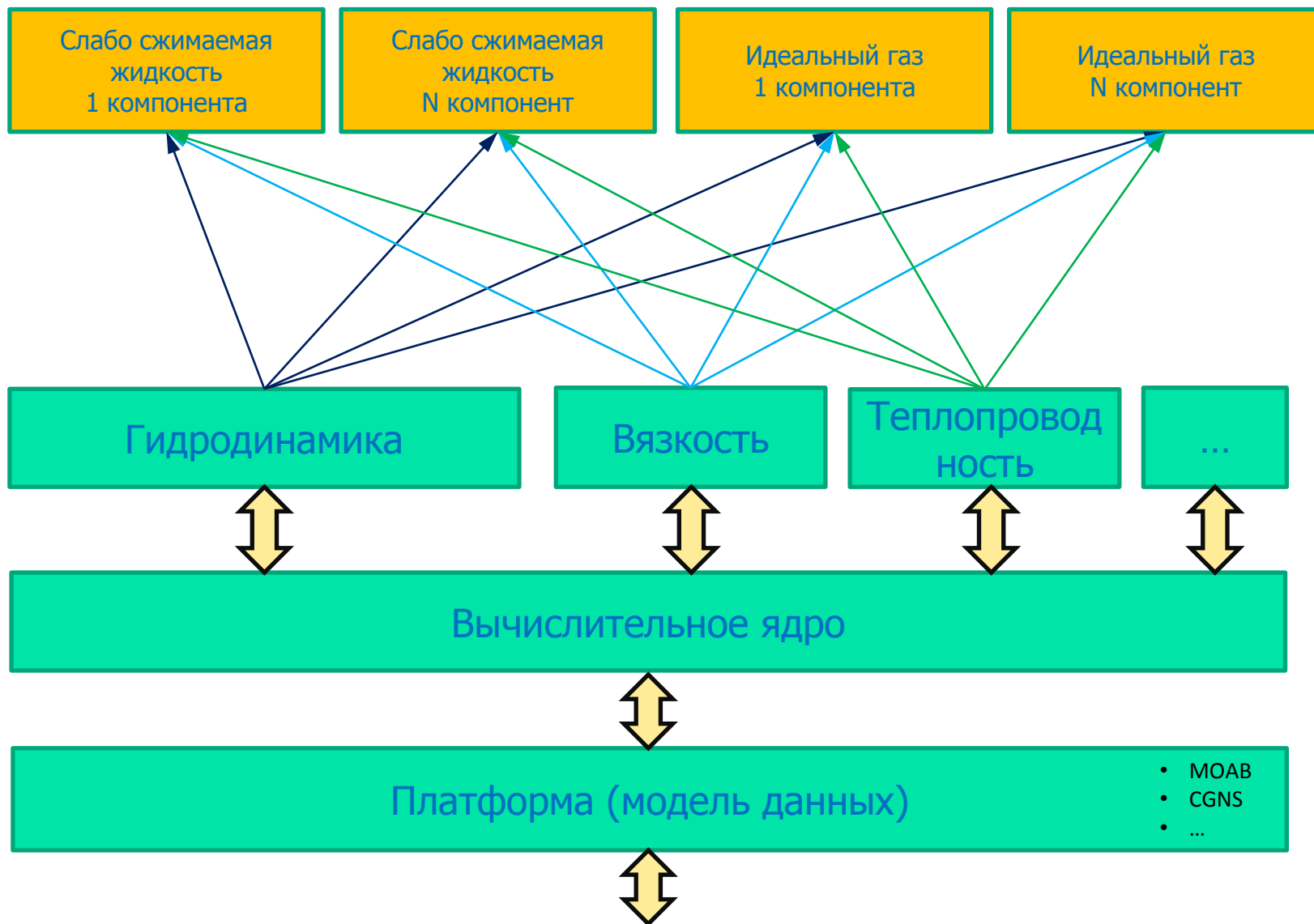




# Особенности кода

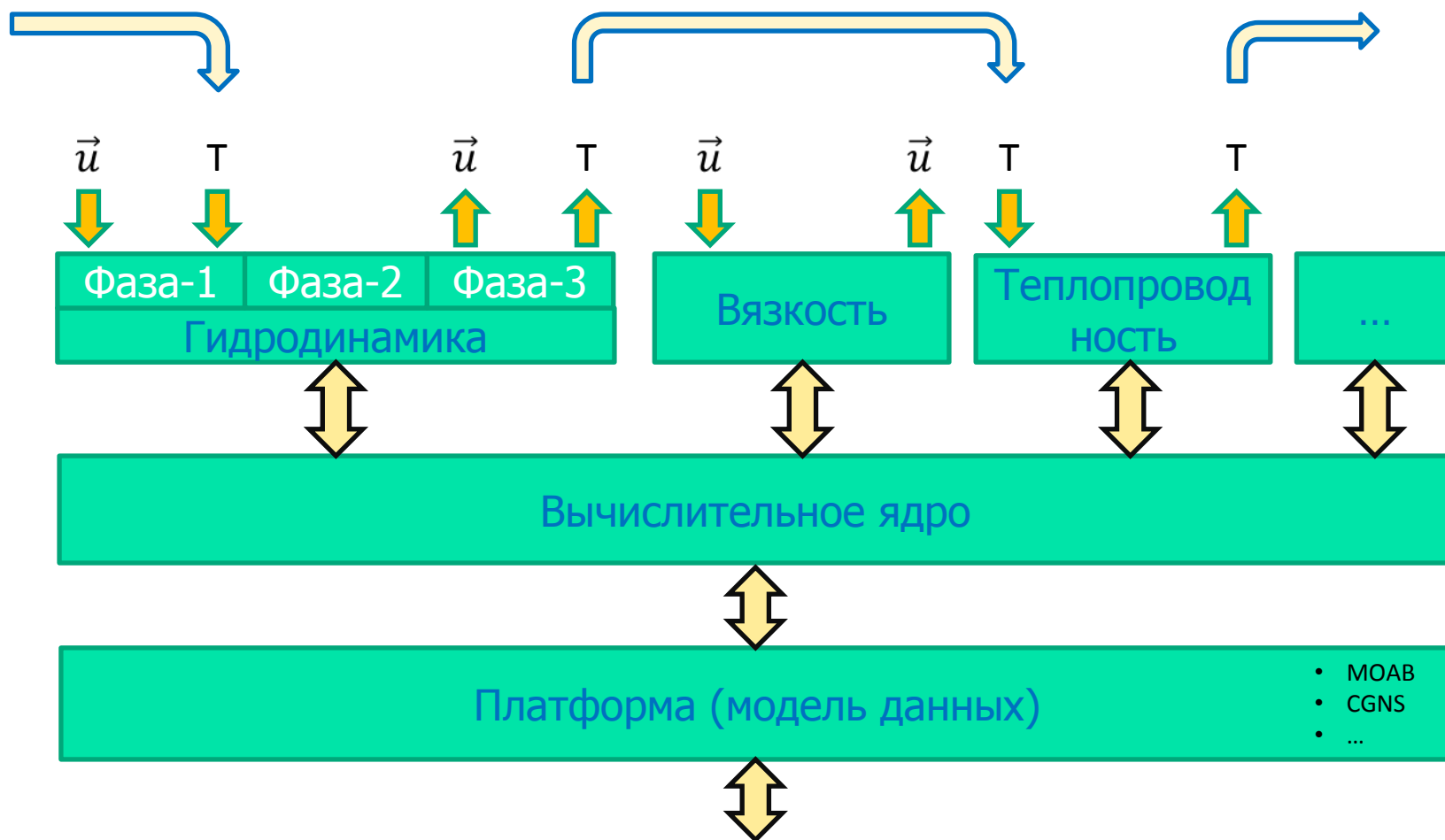
- Код является реализацией методики КАБАРЕ для проведения массивных параллельных вычислений на кластерных ЭВМ задач гидродинамики на неструктурированных гексаэдральных сетках
- Реализован на языке C++
- Единый код для нескольких гидродинамических моделей
- Вычисления, исходя из первых принципов. Отсутствие в коде моделей турбулентности и настроечных параметров
- Второй порядок аппроксимации по пространству и времени на неравномерных сетках
- В области непересекающихся характеристик – бездиссипативная схема
- MPI-распараллеливание на произвольное число процессоров
- Асинхронный обмен данных без блокировок через общие грани ячеек

# Единый код



# Асинхронное распараллеливание

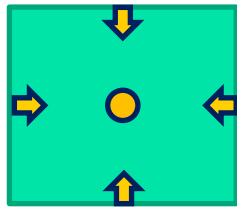
## 1. Задержка «готовность – потребность»



# Асинхронное распараллеливание

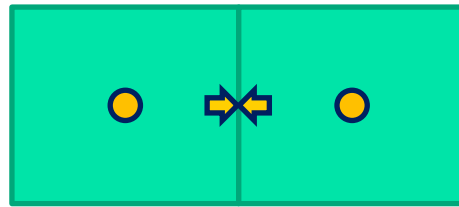
## 2. Порядок вычислений

Фаза-1



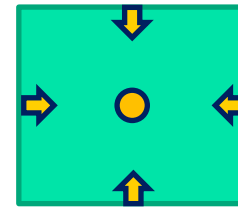
$$\frac{u_C^{n+1/2} - u_C^n}{\tau/2} + \frac{1}{V} \sum_{k=1}^6 F_k^n = 0$$

Фаза-2



$$v_S^{n+1} = v(\bar{u}_B, \bar{u}_F)$$

Фаза-3



$$\frac{u_C^{n+1} - u_C^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{1}{V} \sum_{k=1}^6 F_k^{n+1} = 0$$

### Параллельные вычисления:

- Все консервативные переменные вычисляются локально
- Вклад в потоковую переменную от консервативных вычисляется локально
- Вклады в потоковые переменные пересылаются между партициями
- Потоковые переменные вычисляются на каждой партиции единым образом

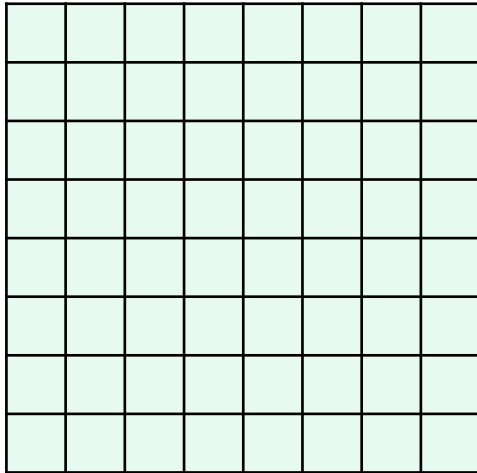


# Асинхронное распараллеливание

## 2. Порядок вычислений

Параллельные вычисления:

- Все консервативные переменные вычисляются **локально**
- Инварианты на гранях вычисляются **локально**
- Инварианты **пересылаются** между партициями
- Поточковые переменные по инвариантам вычисляются на каждой грани **локально**



1. Вычисления инвариантов с одной стороны на интерфейсных гранях
- 2. Отправка инвариантов в соседние партиции**
3. Вычисления инвариантов на внутренних гранях
4. Вычисление потоковых переменных на внутренних гранях
- 5. Получение инвариантов от соседних партиций**
6. Вычисление потоковых переменных на интерфейсных гранях

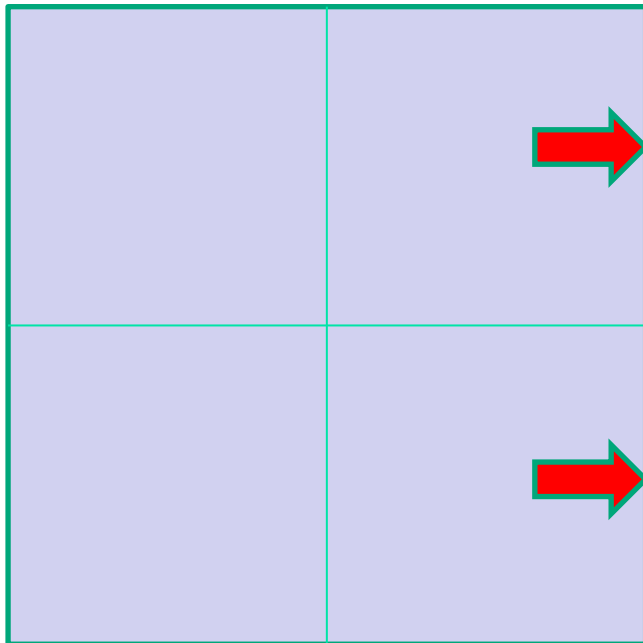


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

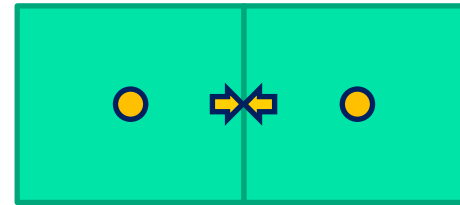
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

# Асинхронное распараллеливание

## 2. Порядок вычислений



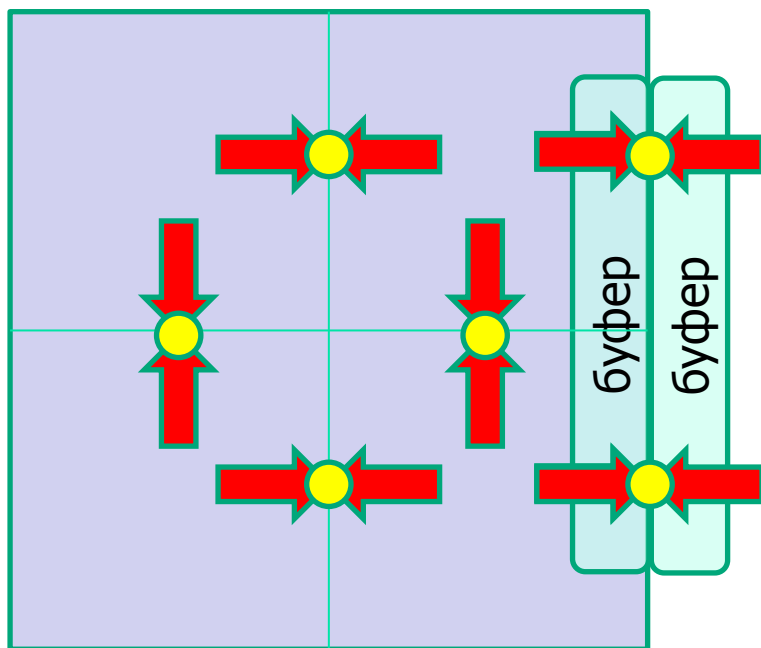
Фаза-2



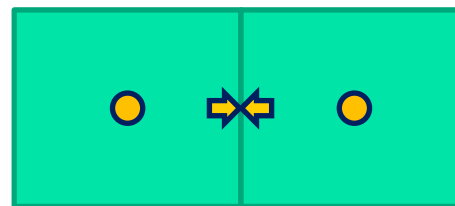
1. Инварианты на межпроцессорном интерфейсе

# Асинхронное распараллеливание

## 2. Порядок вычислений



Фаза-2



1. Инварианты на межпроцессорном интерфейсе
2. Неблокирующая отправка соседнему процессору
3. Вычисление на внутренних гранях
4. Тестирование прихода данных от соседних процессоров
5. Довычисление данных на интерфейсных гранях





Lomonosov 2  
1024 nodes / 14336 (14) processors  
64 ГБ (4,5 ГБ/ядро)  
CPU: Intel Xeon E5-2697 v3 2.60GHz

# Вычислительная эффективность



## Regular mesh weak scaling

Code: cabaret2

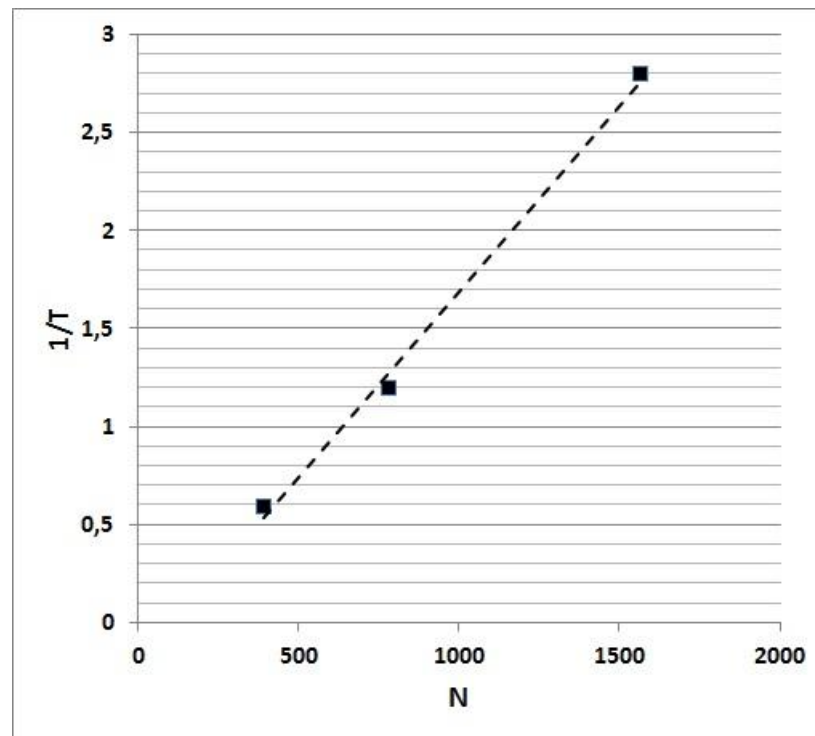
# of cells	# of processors	# cells per proc	Stats
343000 cells 70x70x70	392	880 / 1157 hexes per proc	t(real)=0.039291 N(step)=10 t=3.57143e-09 <u>Z=4.059</u>
686000 cells 140x70x70	784	883 / 1162 hexes per proc	t(real)=0.041087 N(step)=10 t=3.57143e-09 <u>Z=4.2300</u>
1372000 cells 140x140x70	1568	873 / 1152 hexes per proc	t(real)=0.038008 N(step)=10 t=3.57143e-09 <u>Z=3.9579</u>

## Regular mesh strong scaling

Code: cabaret2

# of cells	# of processors	# cells per proc	Stats
<u>1372000</u> cells 140x140x70	392	3484 / 4201 hexes per proc	t(real)=1.703594 N(step)=100 t=3.57143e-09 <u>Z=4.8413</u>
<u>1372000</u> cells 140x140x70	784	1743 / 2198 hexes per proc	t(real)=0.837325 N(step)=100 t=3.57143e-09 <u>Z=4.7563</u>
<u>1372000</u> cells 140x140x70	1568	873 / 1152 hexes per proc	t(real)=0.358254 N(step)=100 t=3.57143e-09 <u>Z=4.0630</u>

$$Z = \frac{t \cdot N_{proc}}{N_{step} \cdot N_{grid}} \square 4..5 \cdot 10^{-6} сек$$



# Развитие кода



- Платформа кода
- Вязкость, теплопроводность
- Синхронное распараллеливание



- Многокомпонентные среды
- Асинхронное распараллеливание



- **Опытная эксплуатация кода**
- **Детонация**

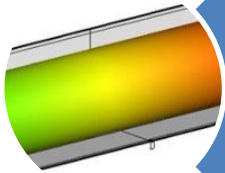


- Диффузия компонент
- Горение
- Двухфазность (испарение, конденсация)

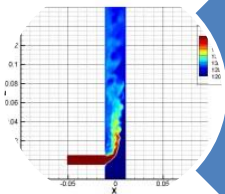
# Верификационные тесты



Определение КГС сопротивления в дросселе



Неизотермическое течение жидкометаллического теплоносителя в круглой трубе



Моделирование смешения разнотемпературных потоков модельного ТМЖТ в Т-образном смесителе



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

# Определение КГС в дросселе реакторной установки МБИР

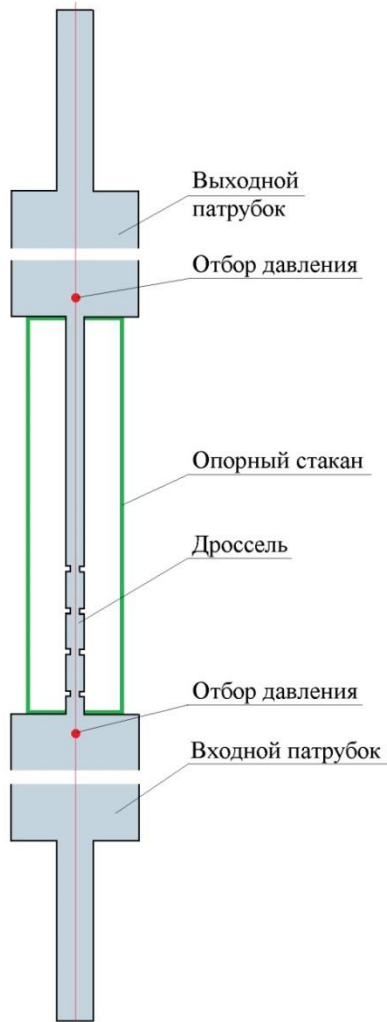
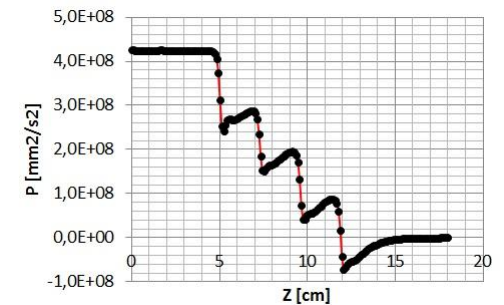
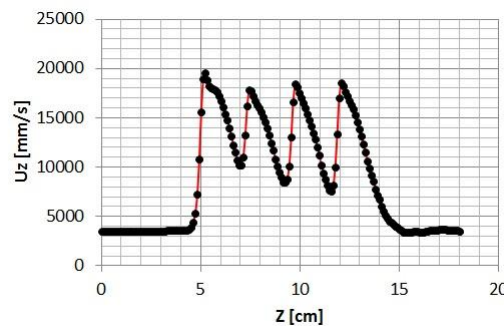
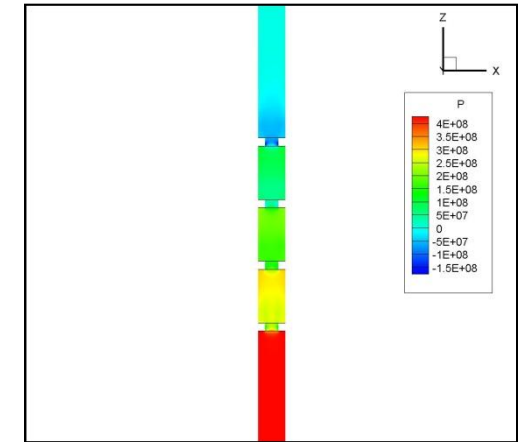
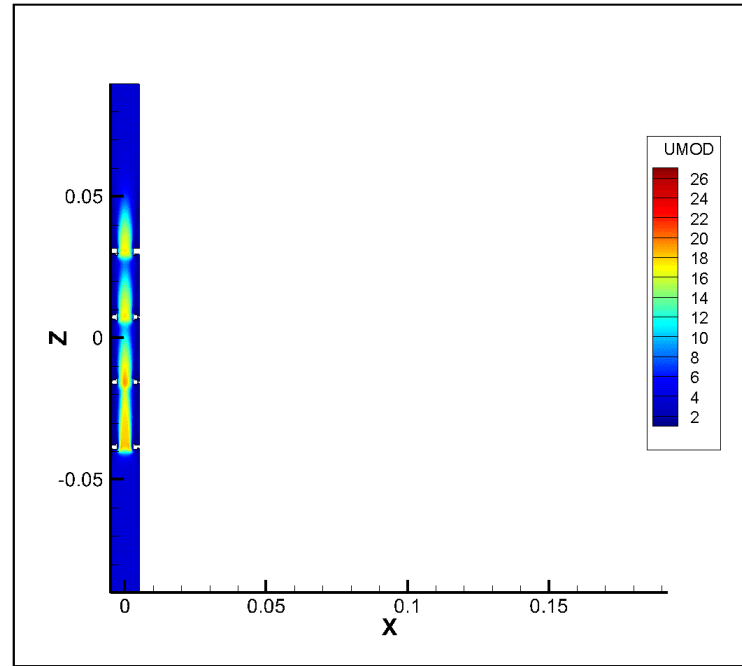


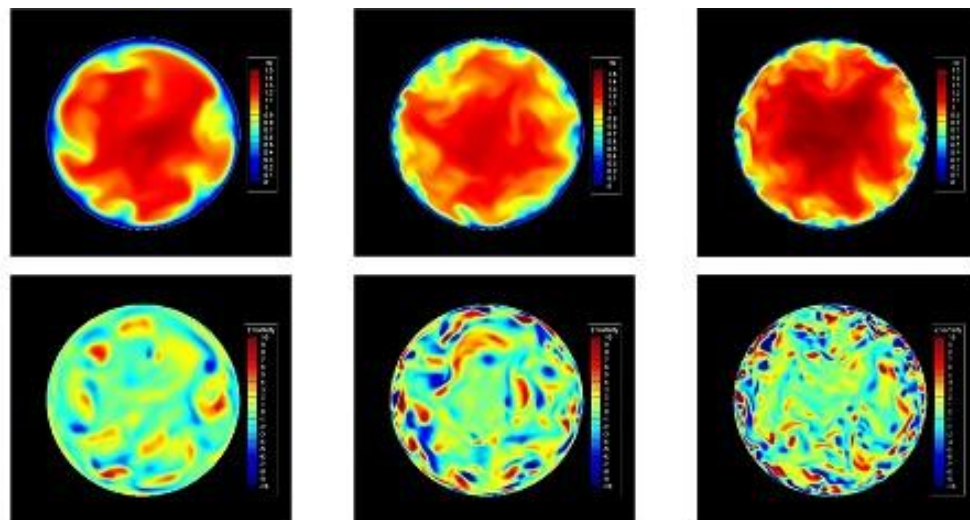
Схема рабочего участка



$$\xi = \frac{2 \cdot \Delta P}{\rho \cdot \bar{w}^2} = 4,34$$

Ошибка: □ 1%

# Течение ЖМТН



Re=5300

Re=11700

Re=19000

Рис.11. Поля скорости (сверху) и завихренности (снизу) в сечении XY

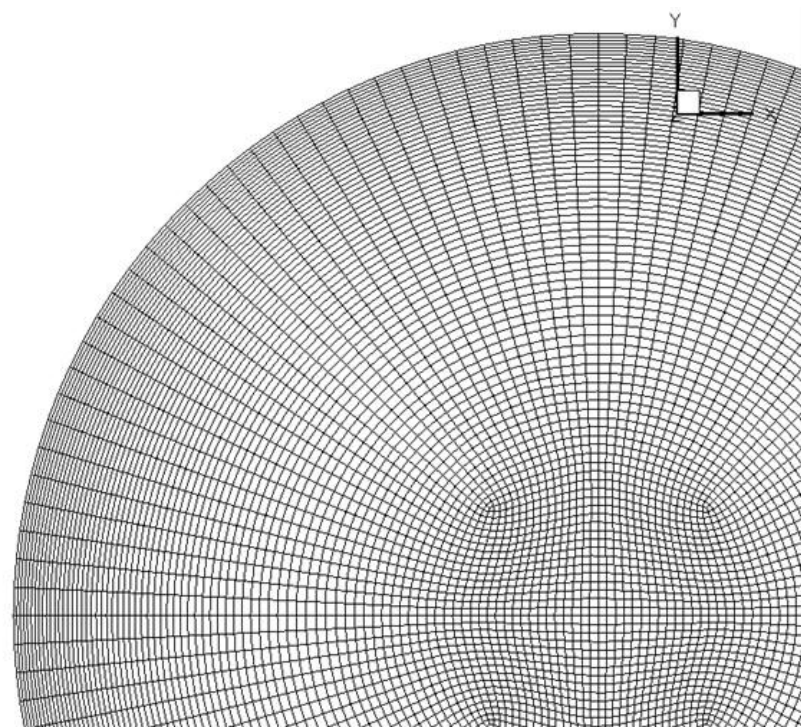
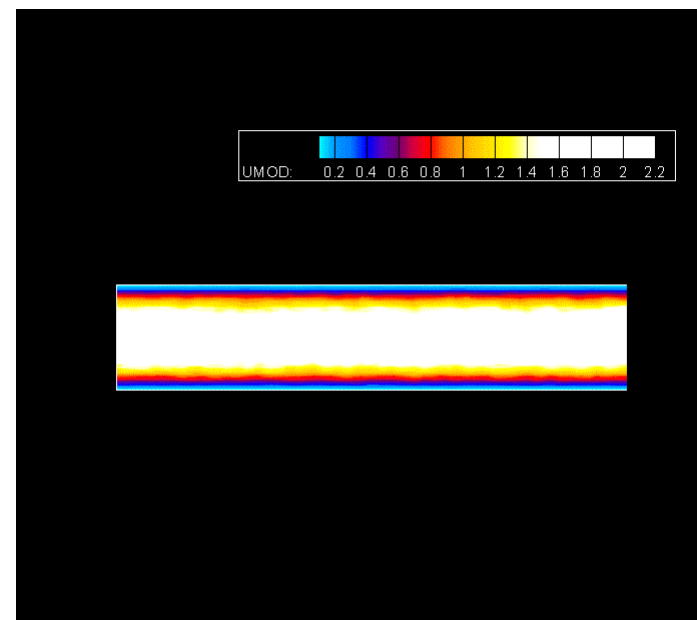


Таблица 3. Параметры сеточной модели

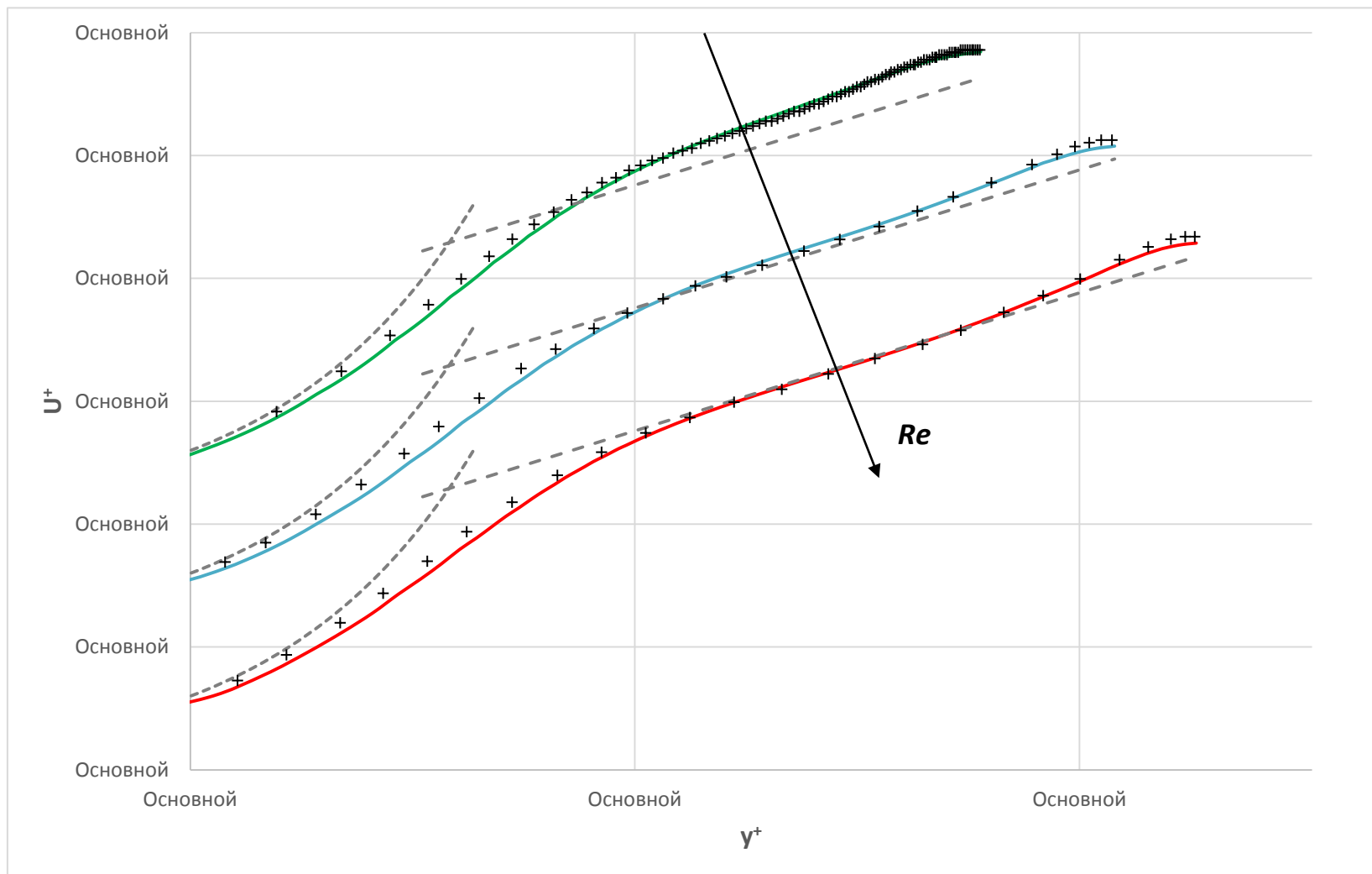
Re	$L/R$	$N_{cell}$	$N_\theta$	$N_z$	$\Delta r_{min}^+$	$\Delta R\theta_{min}^+$	$\Delta z_{center}^+$	$\Delta z^+$
5300	10	$1.61 \times 10^6$	128	220	2,9	8,8	3,0-3,5	8,1
5300	20	$2.98 \times 10^6$	128	440	1,0	8,8	3,1-3,5	8,1
11700	10	$5.22 \times 10^6$	200	320	3,0	11,2	4,4-5,0	11,2
11700	10	$10.86 \times 10^6$	256	408	1,0	8,8	3,1-5,6	8,8
19000	10	$19.52 \times 10^6$	320	500	3,0	10,8	4,4-5,0	11,0



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

# Профиль скорости. Сравнение с DNS. (Сетки с размером ячейки на стенках $y^+=3$ )



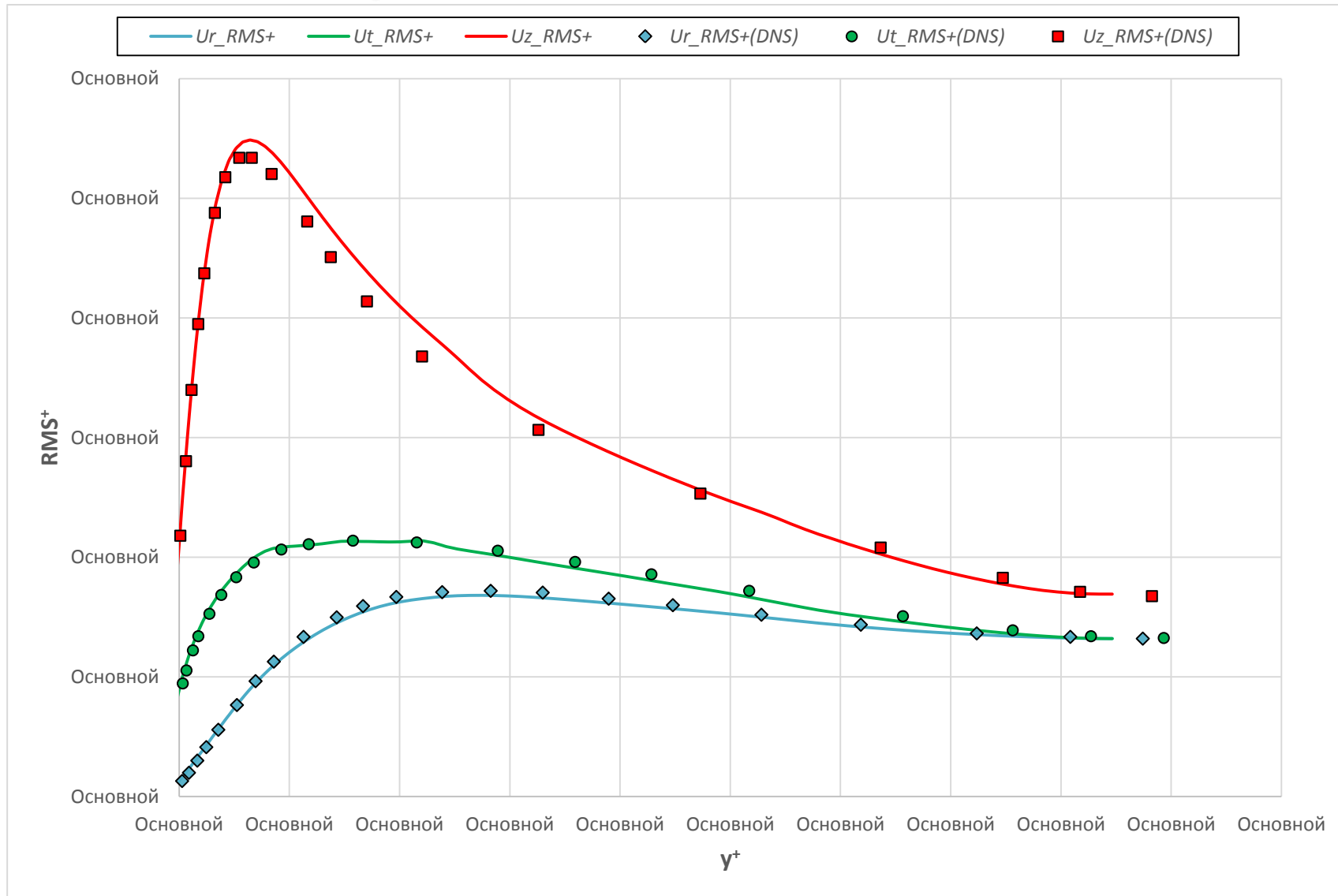


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

ИБРАЭ

# RMS скоростей $Re=5300$





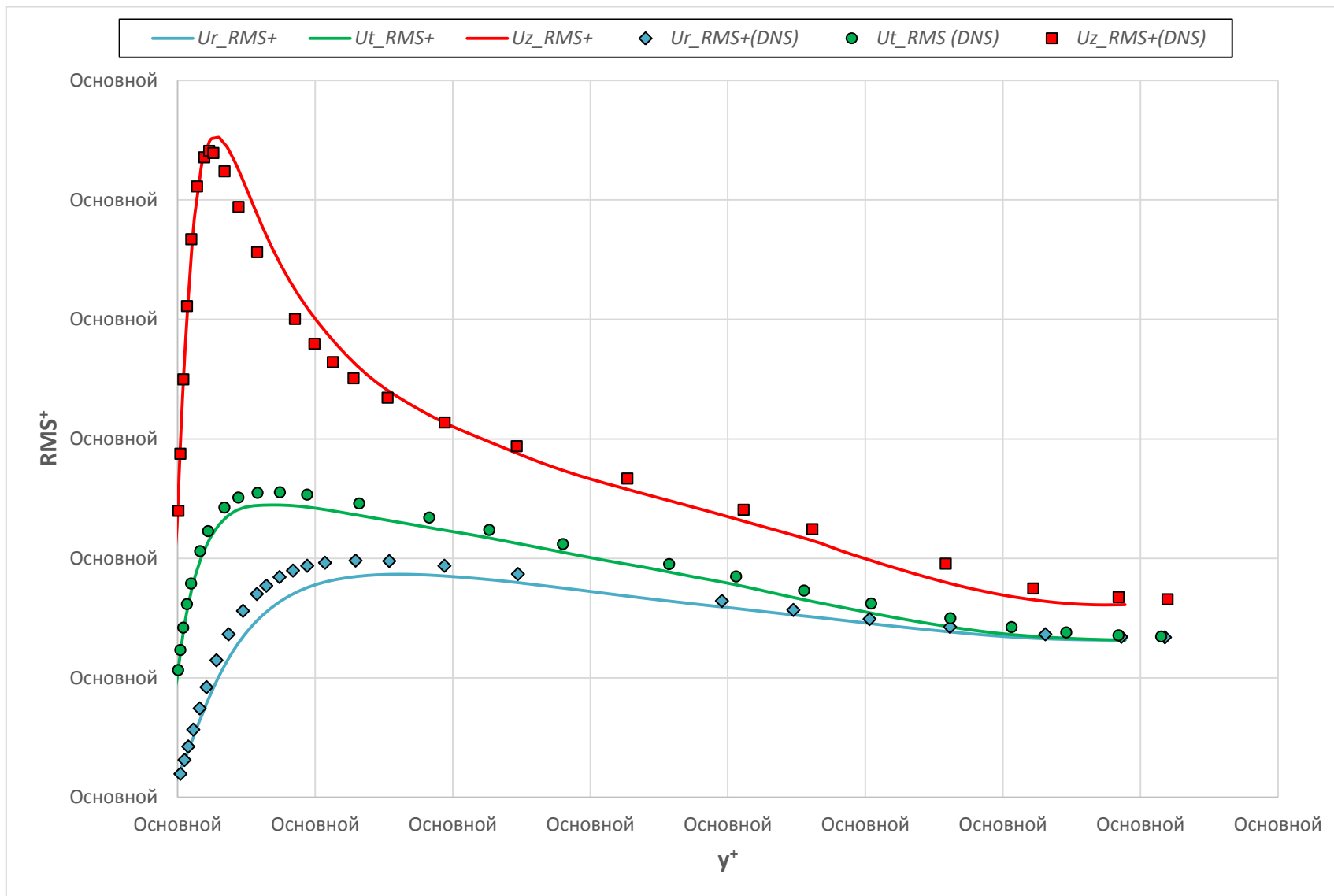


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

ИБРАЭ

# RMS скоростей $Re=11700$





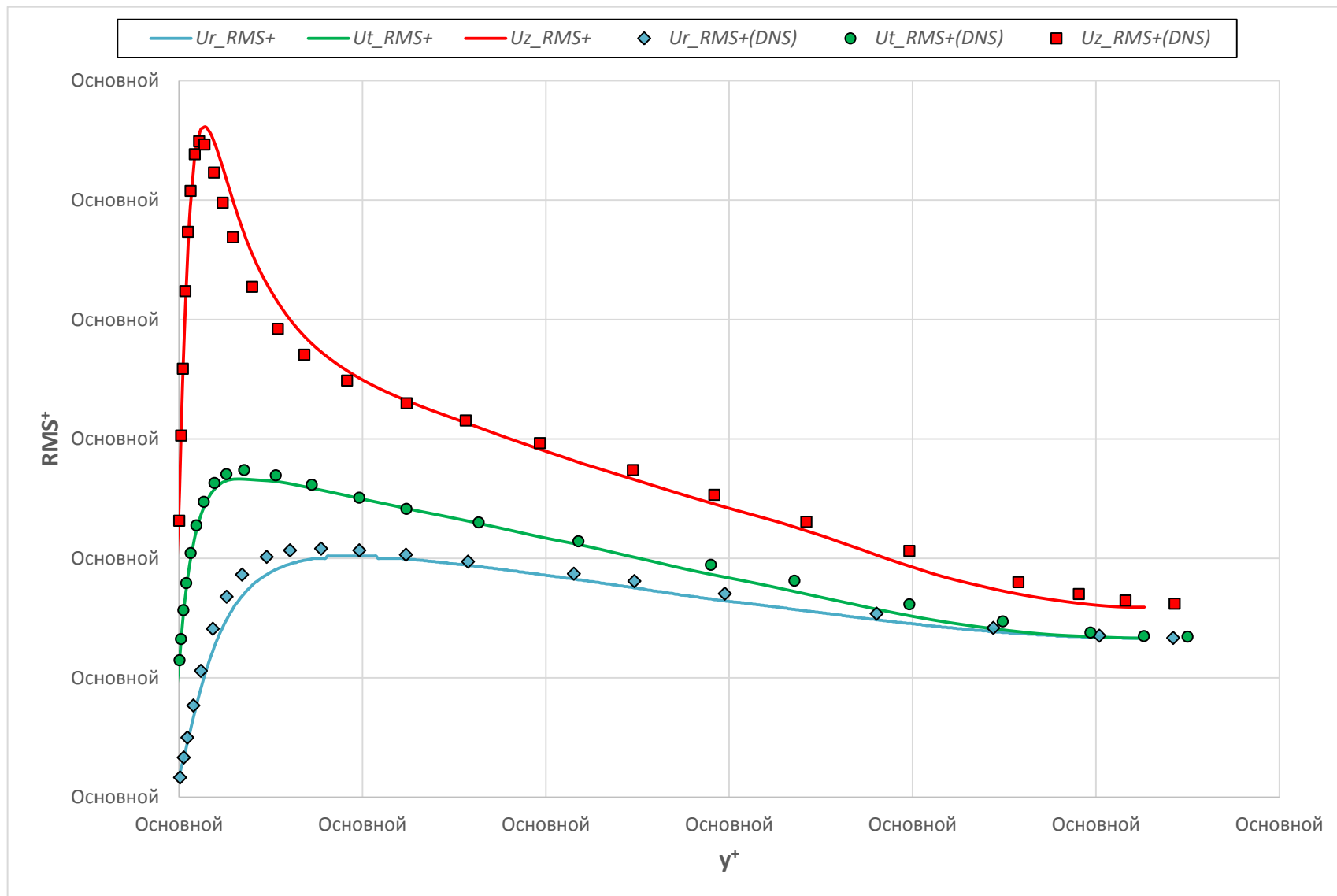


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

ИБРАЭ

# RMS скоростей $Re=19000$



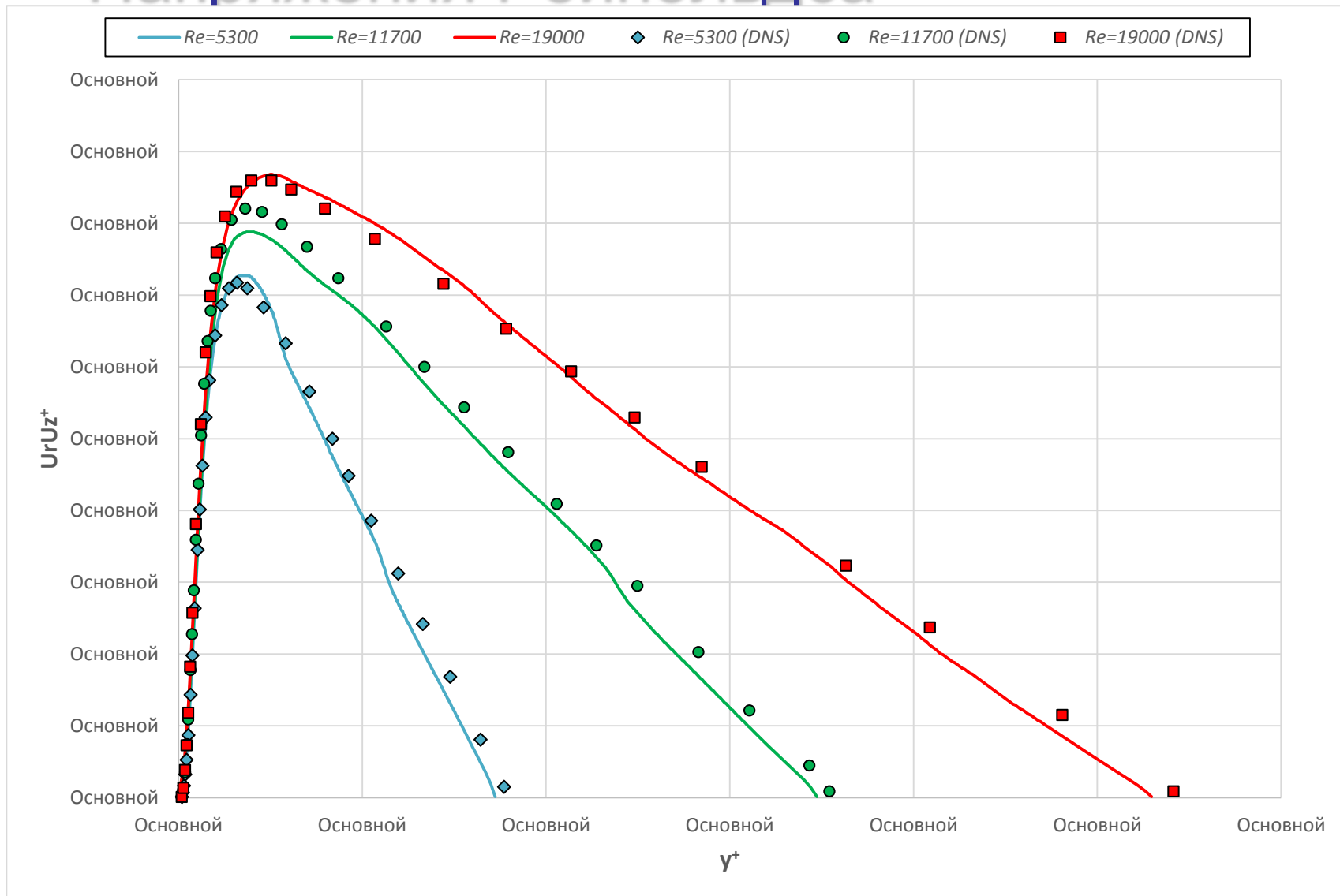


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

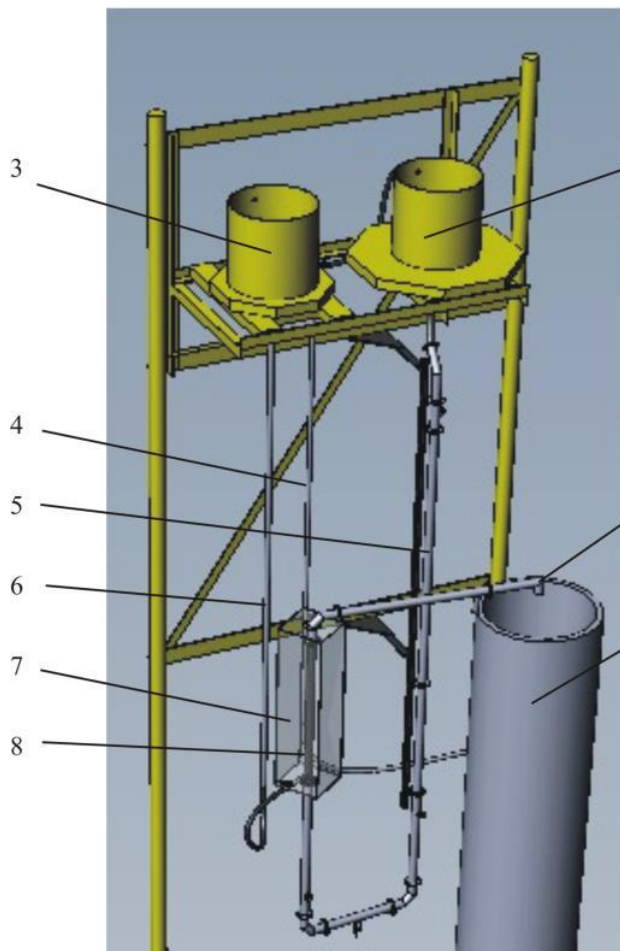
ИБРАЭ

# Напряжения Рейнольдса

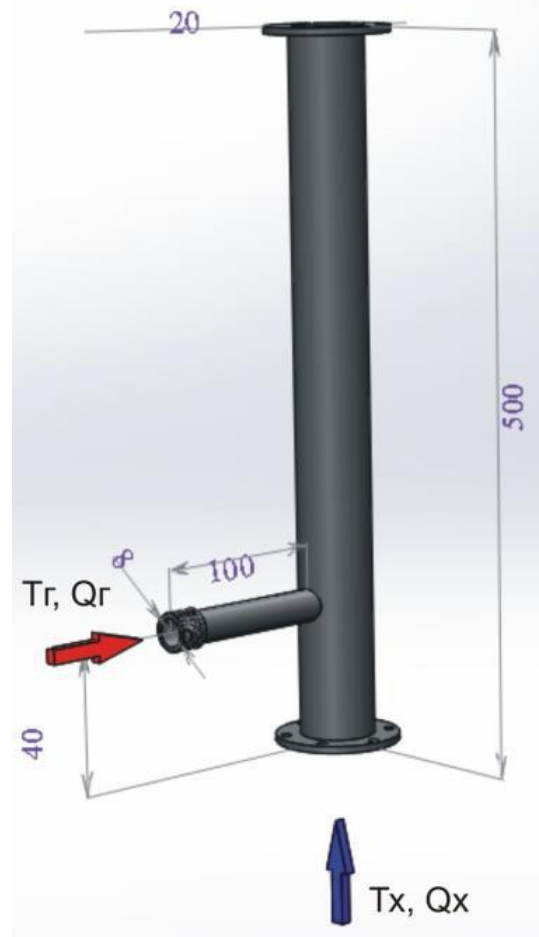




## Схема экспериментальной установки\*



- 1 – основной бак;
- 2 – бак для «горячей» жидкости;
- 3 – бак для «холодной» жидкости;
- 4 – линия подвода жидкости к бакам;
- 5 – линия подвода «холодной» жидкости;
- 6 – линия подвода «горячей» жидкости;
- 7 – бокс с подводом горячего воздуха;
- 8 – смеситель;
- 9 – точка слива.



- Экспериментальный стенд в институте теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск
- О.Н. Кашинский, П.Д. Лобанов, А.С. Курдюмов, Н.А. Прибатурин. Журнал технической физики, 2016, том 86, вып. 5

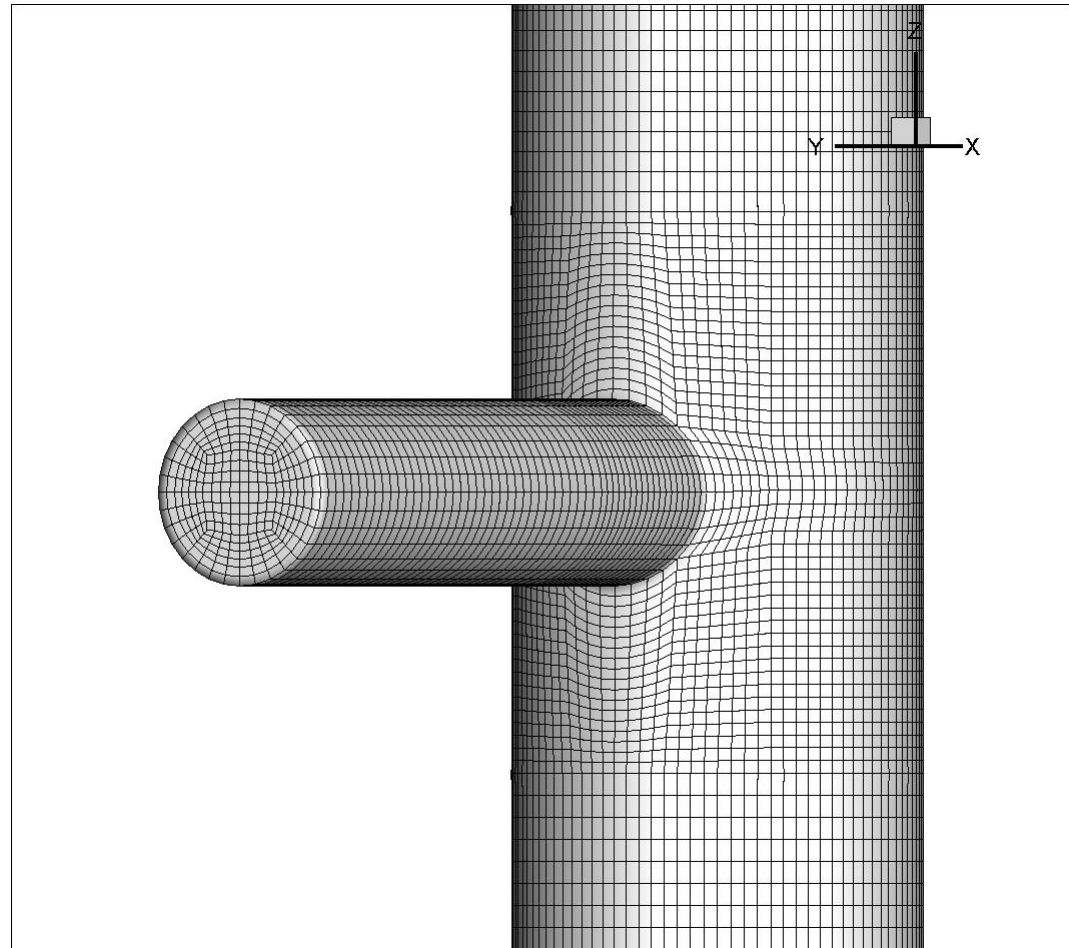
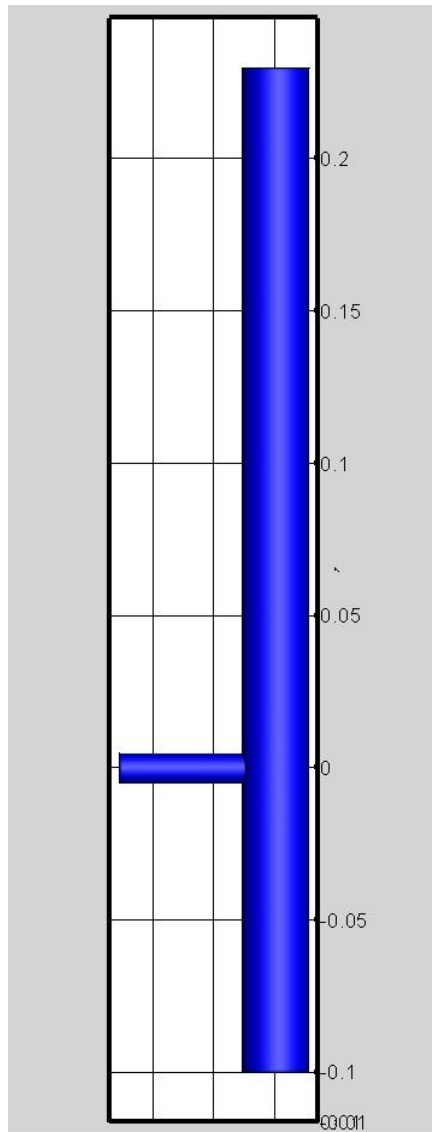


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

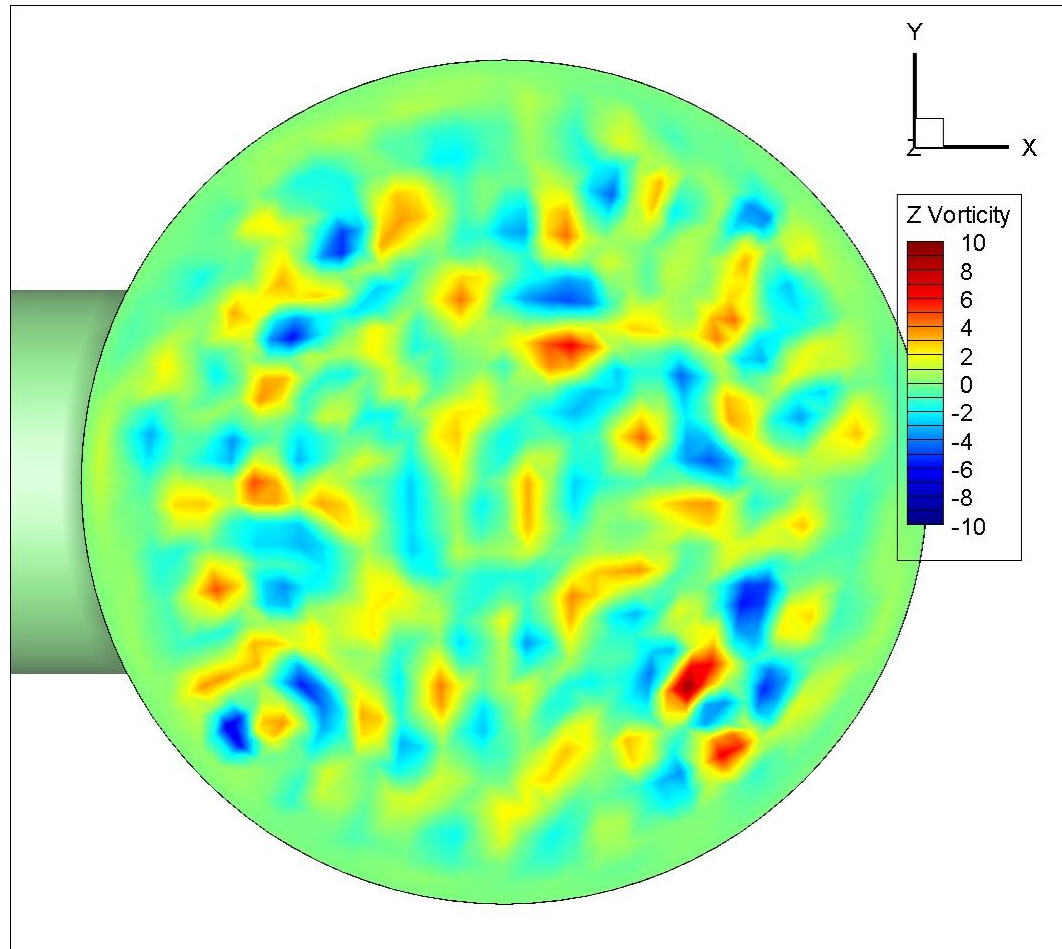
ИБРАЭ

## Сеточная модель тройника



*Сеточная модель содержит  
377 000 гексаэдральных ячеек*

## Случайные квазитурбулентные пульсации на входе



*Пульсации на входе обладают рядом свойств, настраиваемых пользователем вручную: интенсивностью, характерным масштабом, спектральной плотностью*

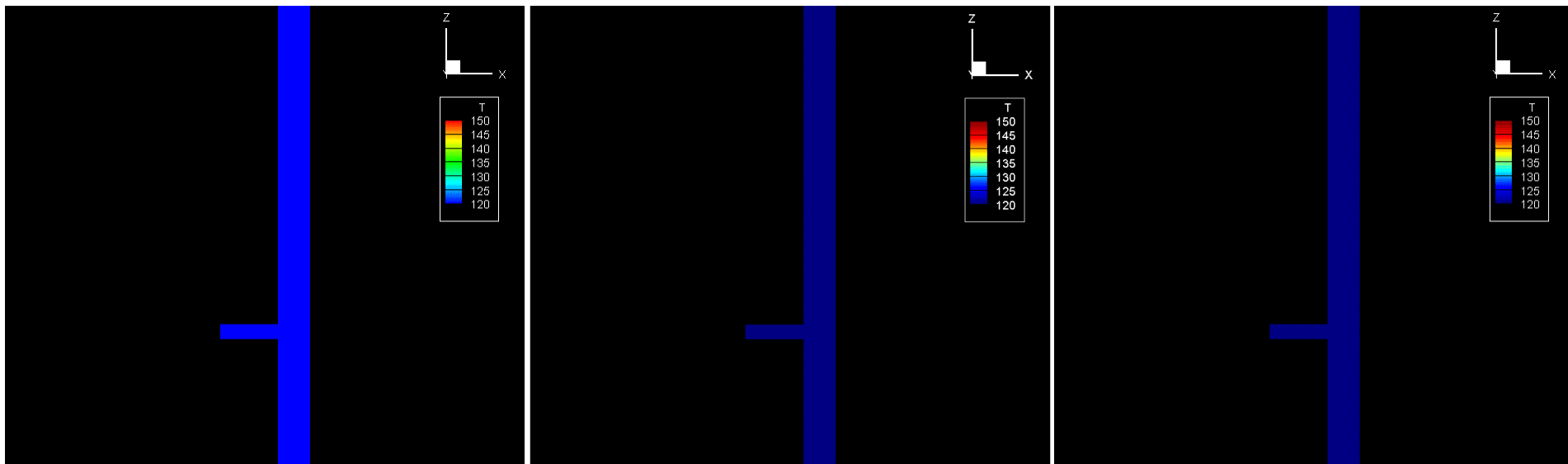


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

ИБРАЭ

## 3 режима течения



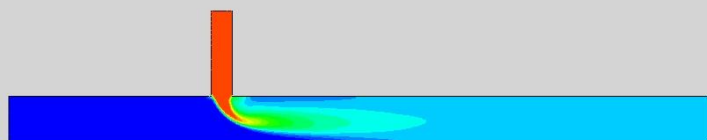
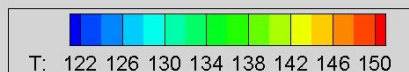
Название	Расход холодной жидкости, (г/с)	Расход горячей жидкости, (г/с)
режим 1	949	298
режим 2	470	298
режим 3	678	45



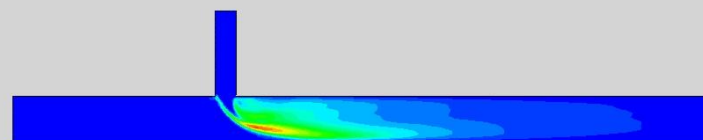
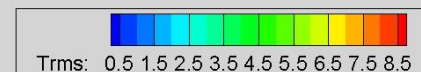
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

# 1. Поле осредненных величин



Средняя температура

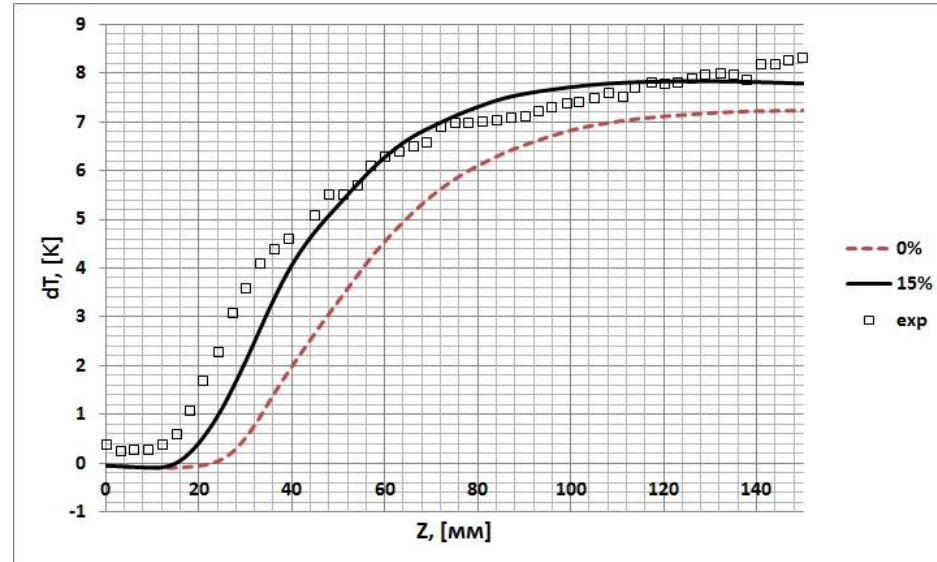
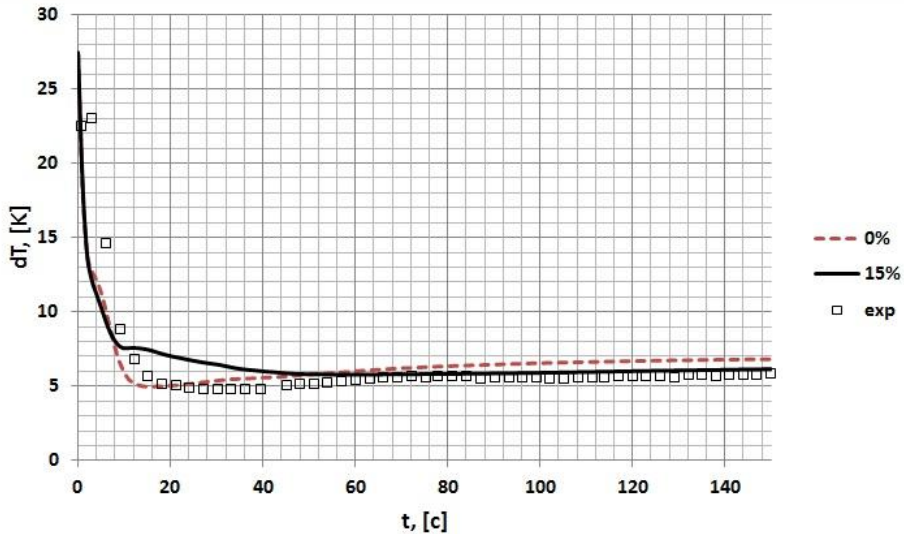


RMS температуры





# 1. Температура на ближней и дальней стенках



**Красная пунктирная линия** – без турбулентных пульсаций на входе

**Черная сплошная** – с пульсациями 15%

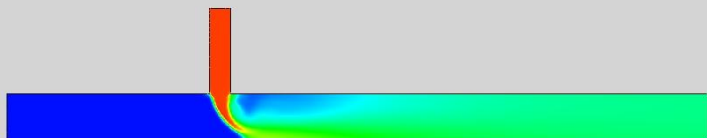
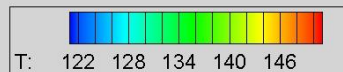




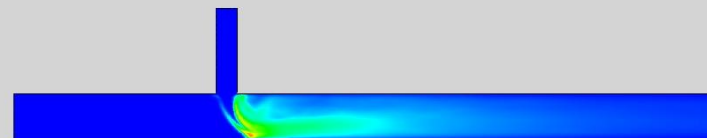
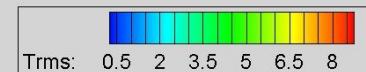
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

## 2. Поле осредненных величин



Средняя температура



RMS температуры

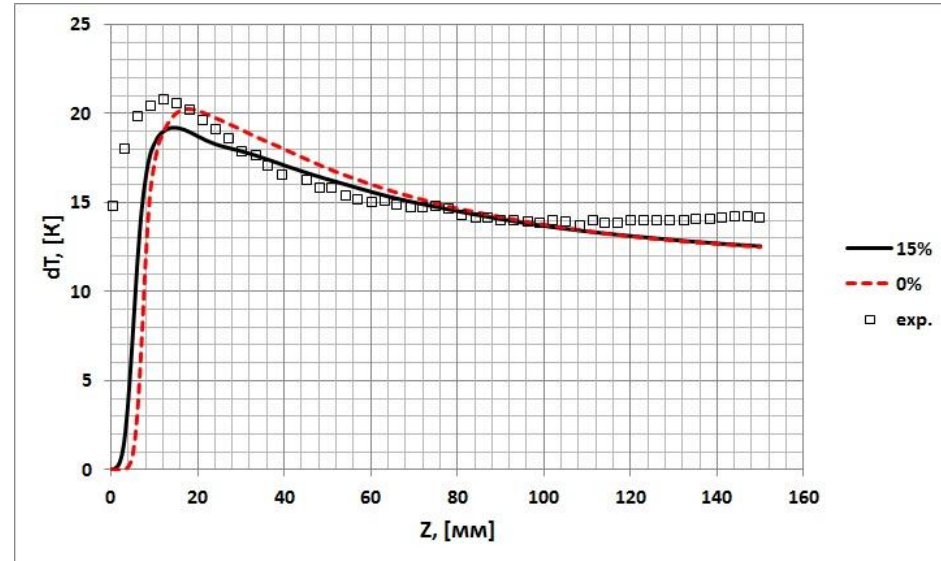
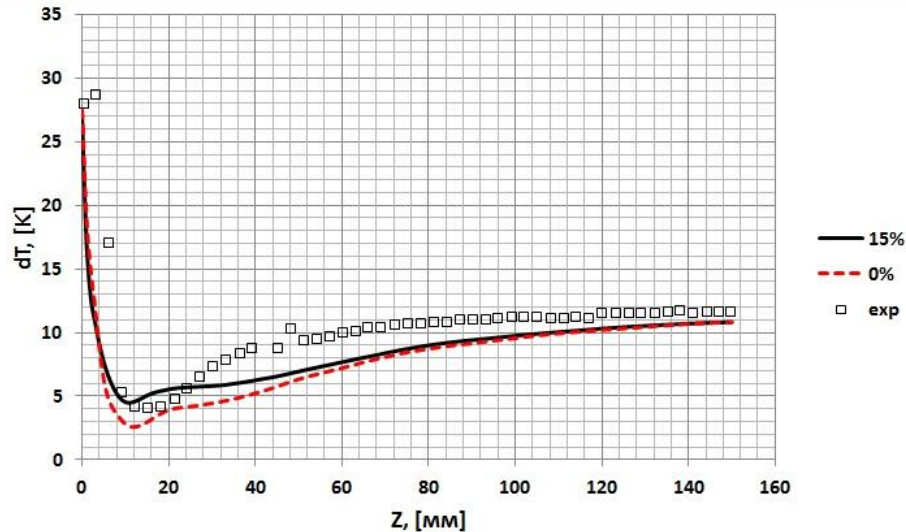


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

ИБРАЭ

## 2. Температура на ближней и дальней стенках



**Красная пунктирная линия** – без пульсаций на входе

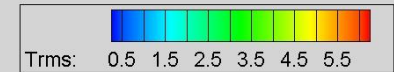
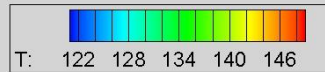
**Черная сплошная** – с пульсациями 15%



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

### 3. Поле осредненных величин

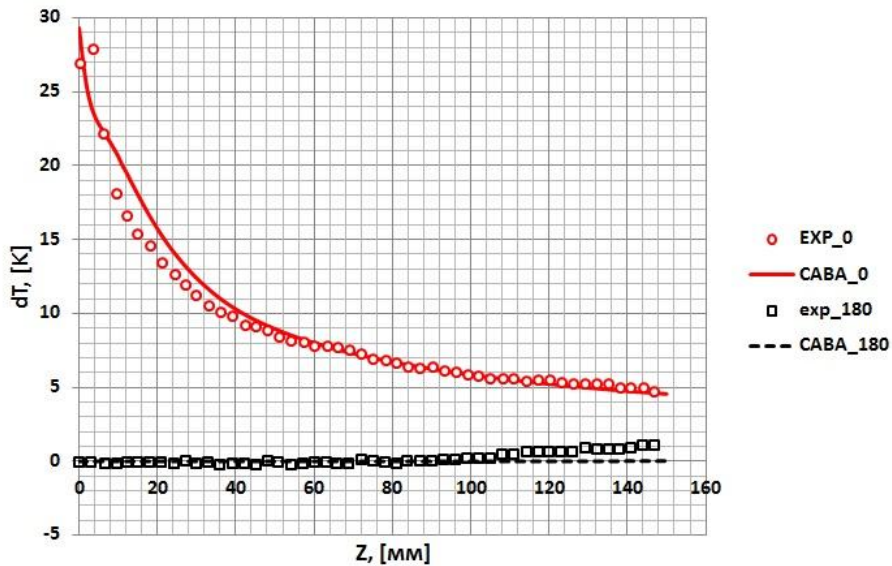


Средняя температура

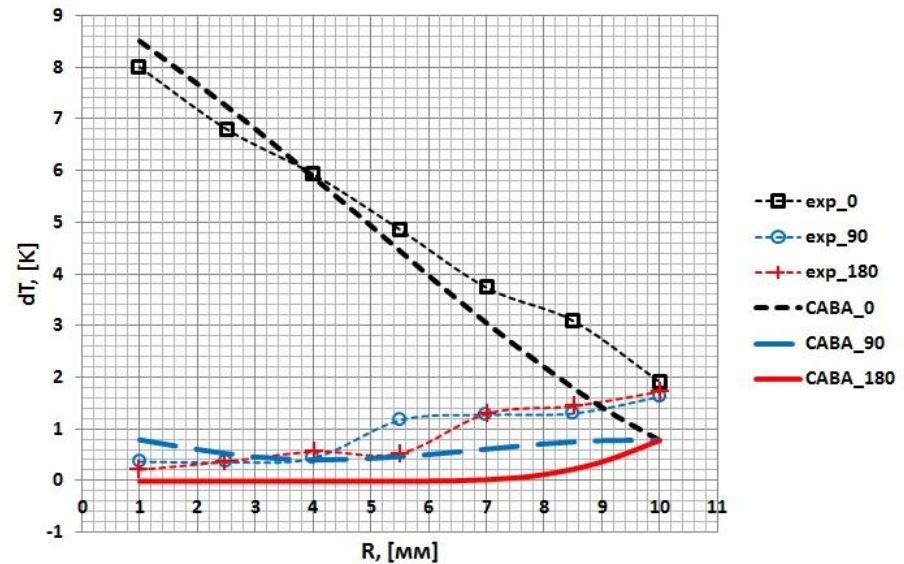
RMS температуры



### 3. Температура на ближней и дальней стенках и вдоль тракта течения на отметке $Z=50$ мм



**Красная линия** – ближняя стенка  
**Черная линия** – дальняя стенка



**Красная линия** –  $\phi=180$   
**Синяя линия** –  $\phi=90$   
**Черная линия** –  $\phi=0$

# Детонация

## Уравнение переноса компонент

$$\frac{\partial Z \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(Z \rho \vec{u}) = \boxed{-AZ \rho^2 \exp(-T_a / T)}$$

$Z$  – массовая доля топлива,

$\rho$  – плотность горючей смеси,

$u$  – скорость,  $A$  – константа реакции,

$T$  – температура,  $T_a$  – температура активации,

$\exp(-T_a/T)$  – множитель Аррениуса,

$p = (\gamma - 1)C_V T \rho$  – давление,

$C_V$  – теплоемкость смеси при постоянном объеме,

$E = u^2/2 + C_V T + ZQ$  – сумма полной удельной энергии  
и скрытой тепловой энергии,

$Q$  – тепловой эффект реакции.



# Детонация. Задача 1

## Одномерная детонация в условной ацетилено-воздушной смеси

- Расчетная область – отрезок  $[0, 0.8]$
- Граничные условия – непроницаемые стенки
- Расчетная сетка –  $160000 \times 1 \times 1$  ячеек
- Размер ячейки – 5 мкм
- Инициализация детонации на отрезке  $[0, 0.01]$
- Число Куранта  $CFL = 0.3$



# Детонация. Задача 1D

## Параметры газа и химической кинетики в условной ацетилено-воздушной смеси

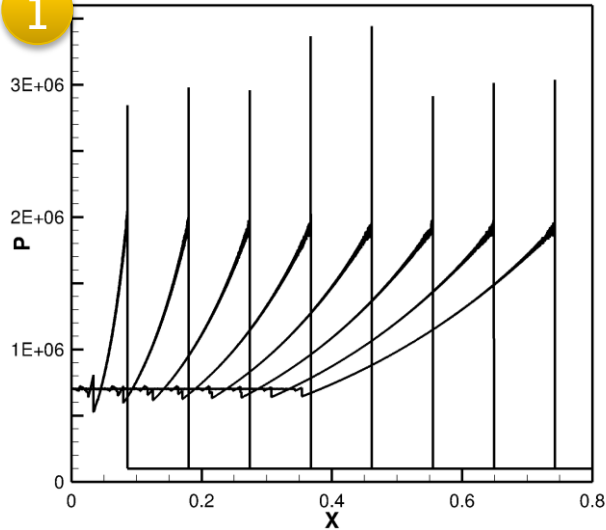
Показатель адиабаты	Молярная масса, г/моль	Константа реакции, $\text{м}^3/(\text{кг} \cdot \text{с})$	Температура активации, К	Тепловой эффект реакции, Дж/кг	Теплоемкость, Дж/кг
1.25	21	$10^9$	8543.9	$2.94 \cdot 10^6$	1582.86

Область	Давление, Па	Температура, К	Плотность, $\text{кг}/\text{м}^3$
Инициация детонации	$10^6$	1500	1.6847
Фон	$10^5$	293	0.8625

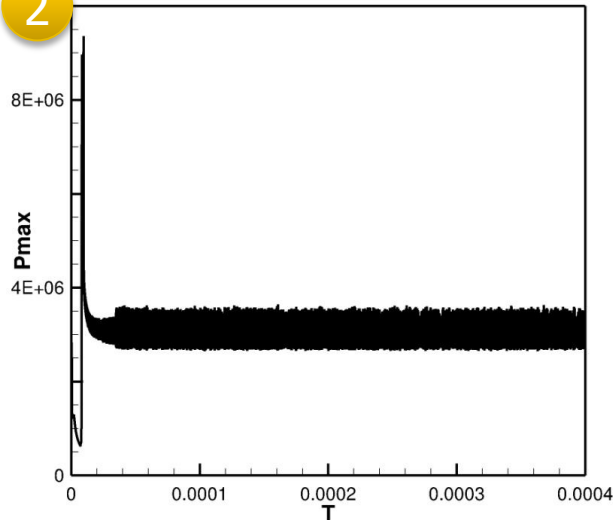


# Детонация. Задача 1D

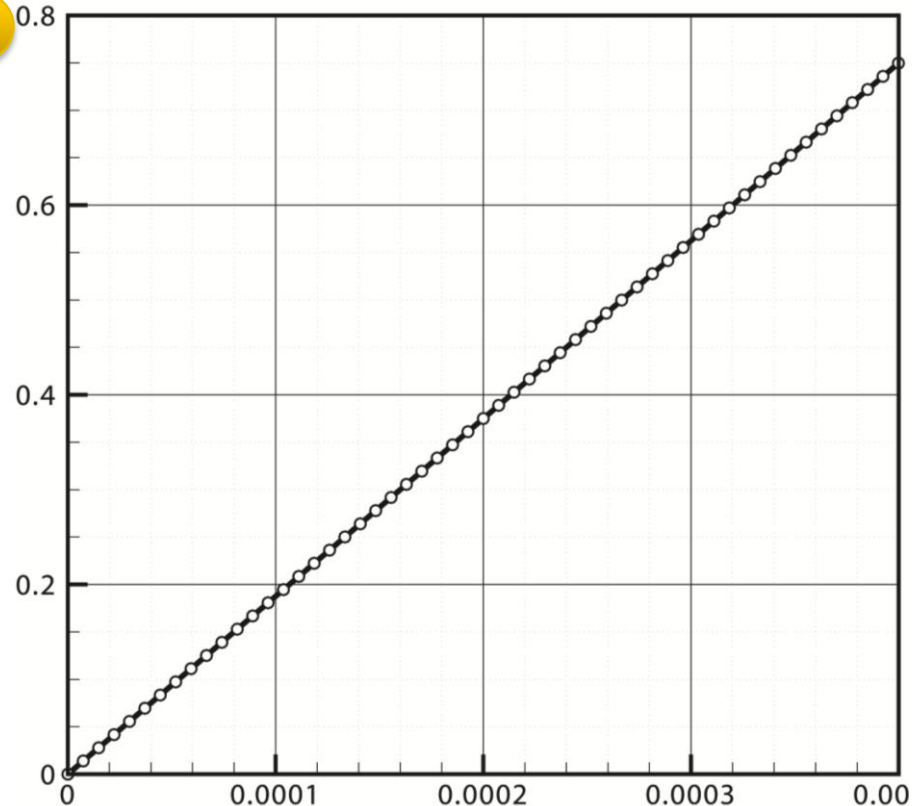
1



2



3



1.  $p(x)$  через равные интервалы времени
2.  $p_{\max}(t)$  – колебания максимума давления
3.  $x_f(t)$  – движение фронта





# Детонация. Задача 2D

## Двумерная ячеистая детонация

- Расчетная область – прямоугольник  $[0,0.5] \times [0,0.02]$
- Граничные условия – непроницаемые стенки
- Расчетная сетка –  $10000 \times 400 \times 1 = 4$  млн. ячеек
- Размер ячейки – 50мкм
- Инициализация детонации в области  $[0,0.01] \times [0,0.02]$
- Число Куранта  $CFL = 0.3$

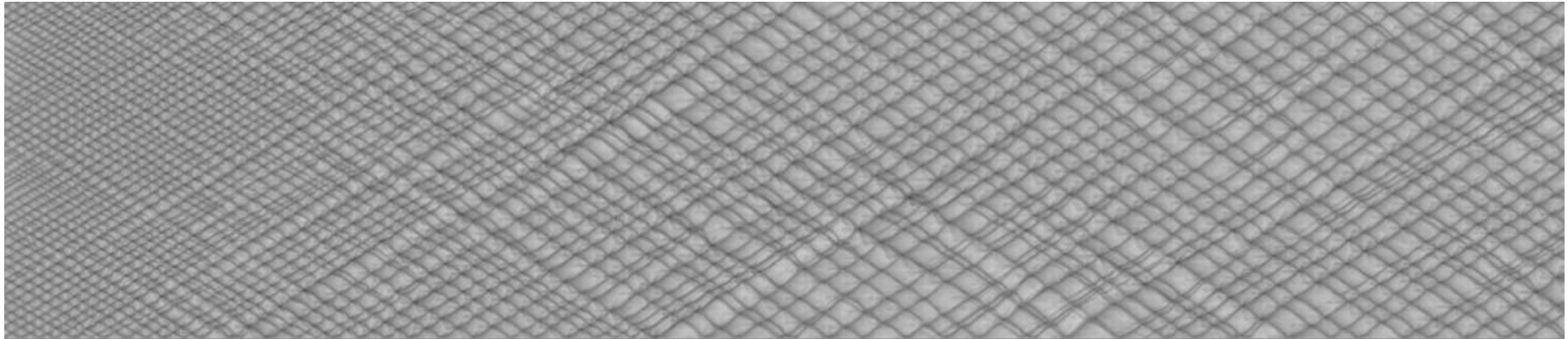


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

# Детонация. Задача 2D

## Двумерная ячеистая детонация



Распространение детонационной волны через однородную стехиометрическую смесь

### **Gas-phase detonation propagation in mixture composition gradients**

D. A. Kessler, V. N. Gamezo, E. S. Oran

Published 2 January 2012. DOI: 10.1098/rsta.2011.0342

<http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/370/1960/567>



# Детонация. Задача 2D

## Параметры газа и химической кинетики в условной водородо-воздушной смеси

Показатель адиабаты	Молярная масса, г/моль	Константа реакции, м <sup>3</sup> /(кг с)	Температура активации, К	Тепловой эффект реакции, Дж/кг	Теплоемкость, Дж/кг
1.15	29	$6.85 \cdot 10^9$	13598.0	$5.02 \cdot 10^6$	1685.6

Область	Давление, Па	Температура, К	Плотность, кг/м <sup>3</sup>
Инициация детонации	$1.5 \cdot 10^7$	15000	1.6847
Фон	$10^5$	293	0.8625



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

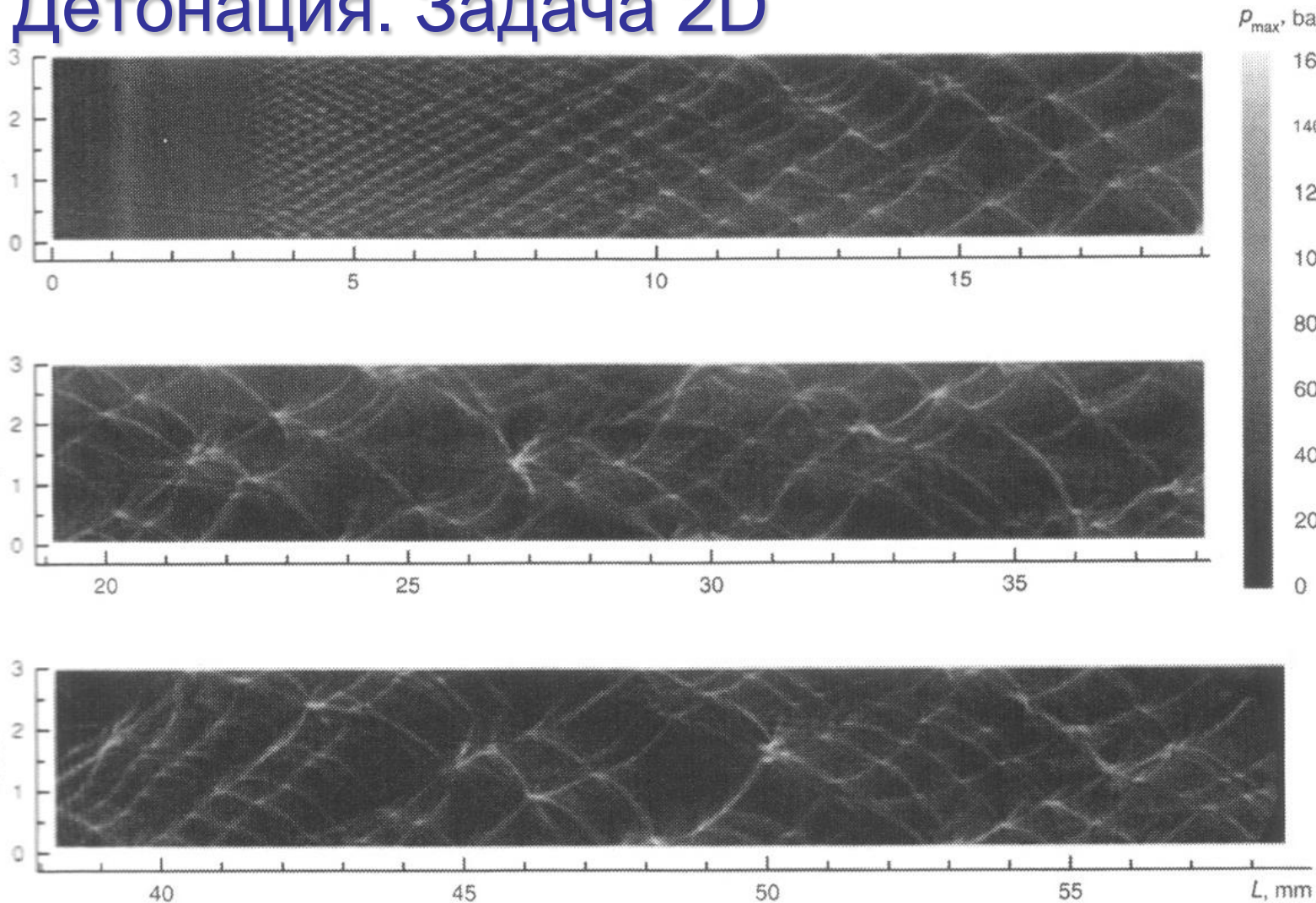
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

# Детонация. Задача 2D

$P_{\max}$  на время  $t=200\text{мкс}$



# Детонация. Задача 2D

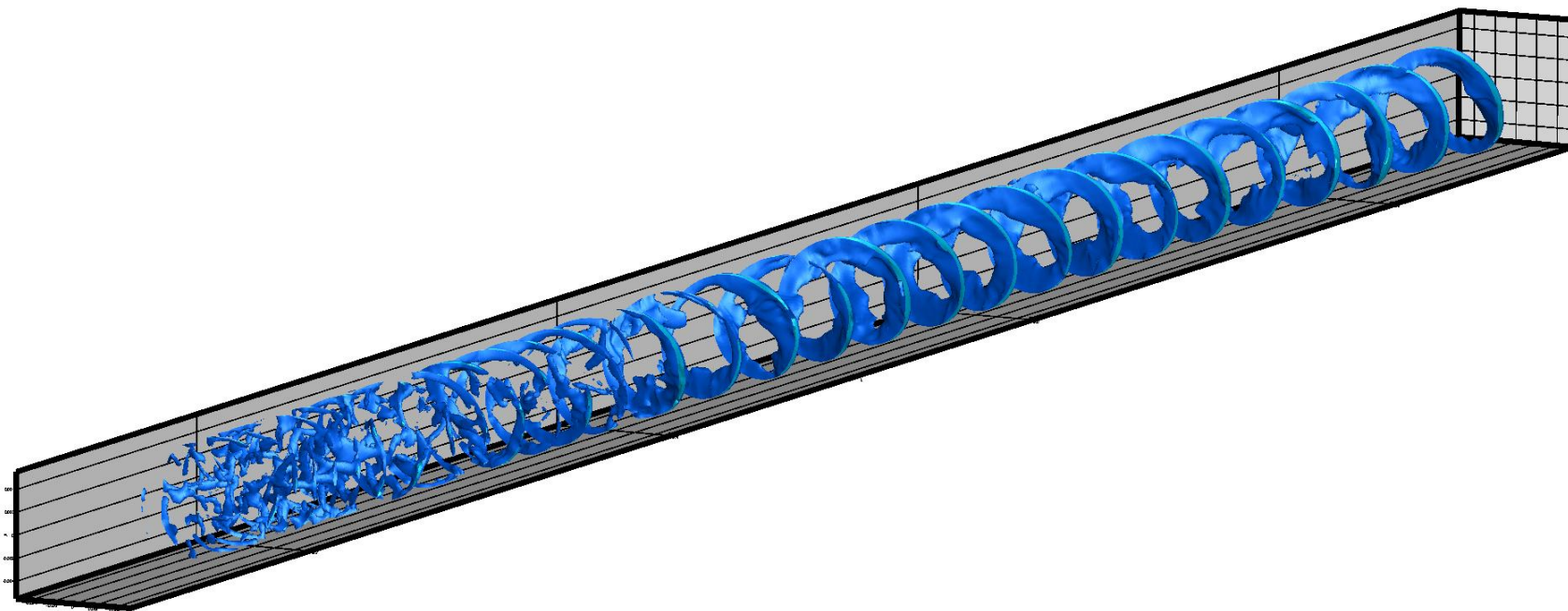


*John H.S. Lee: The Detonation Phenomenon  
Cambridge University Press, 2008*



# Детонация. Задача 3D

## Детонация в цилиндре



# Перспективный код

## Проблемы кода на гексоэдральных сетках

- Сгущение у границы

- Кривизна сетки

нелинейная неустойчивость,  
добавление искусственной диссипации

- Сложность кода

$$\begin{cases} R = (\vec{u}, \vec{n}_B) + G_B \cdot p \\ Q = (\vec{u}, \vec{n}_F) - G_F \cdot p \\ S_{1,2} = (\vec{u}, \vec{m}_{1,2}) \end{cases}$$

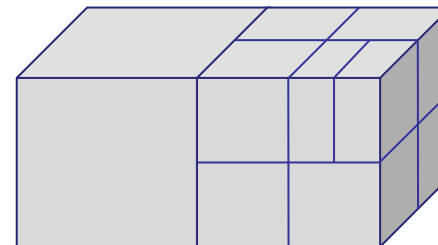
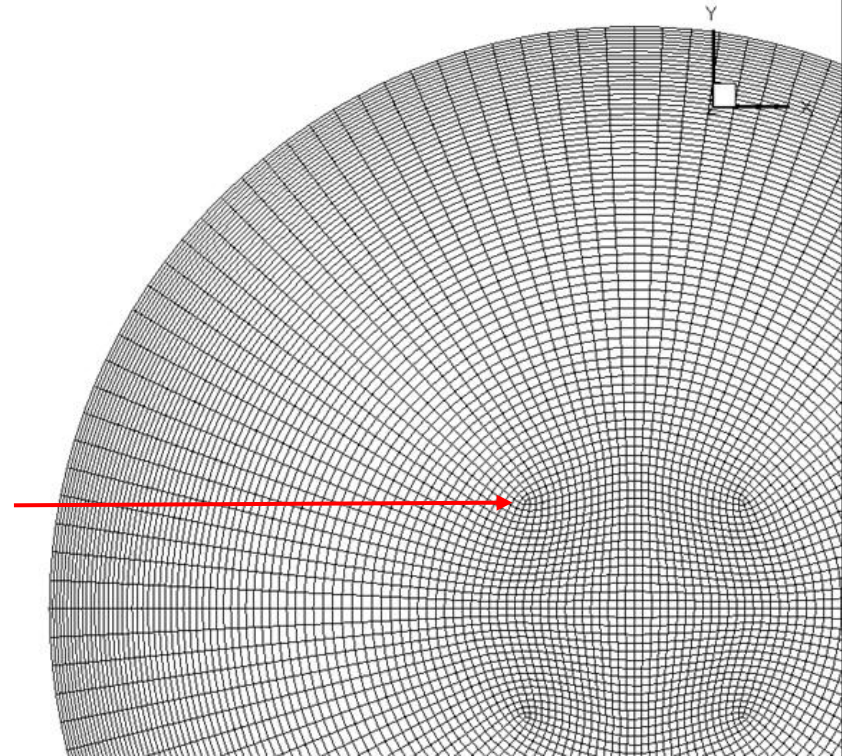
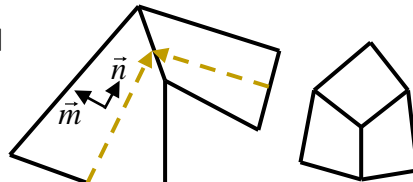
Решение системы из 3 уравнений для каждой грани

## От двух последних недостатков свободен код на прямоугольных сетках

Но как сгущать сетку около границы?

**Восьмидерево! (octree)**

**Вложенные сетки**





РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

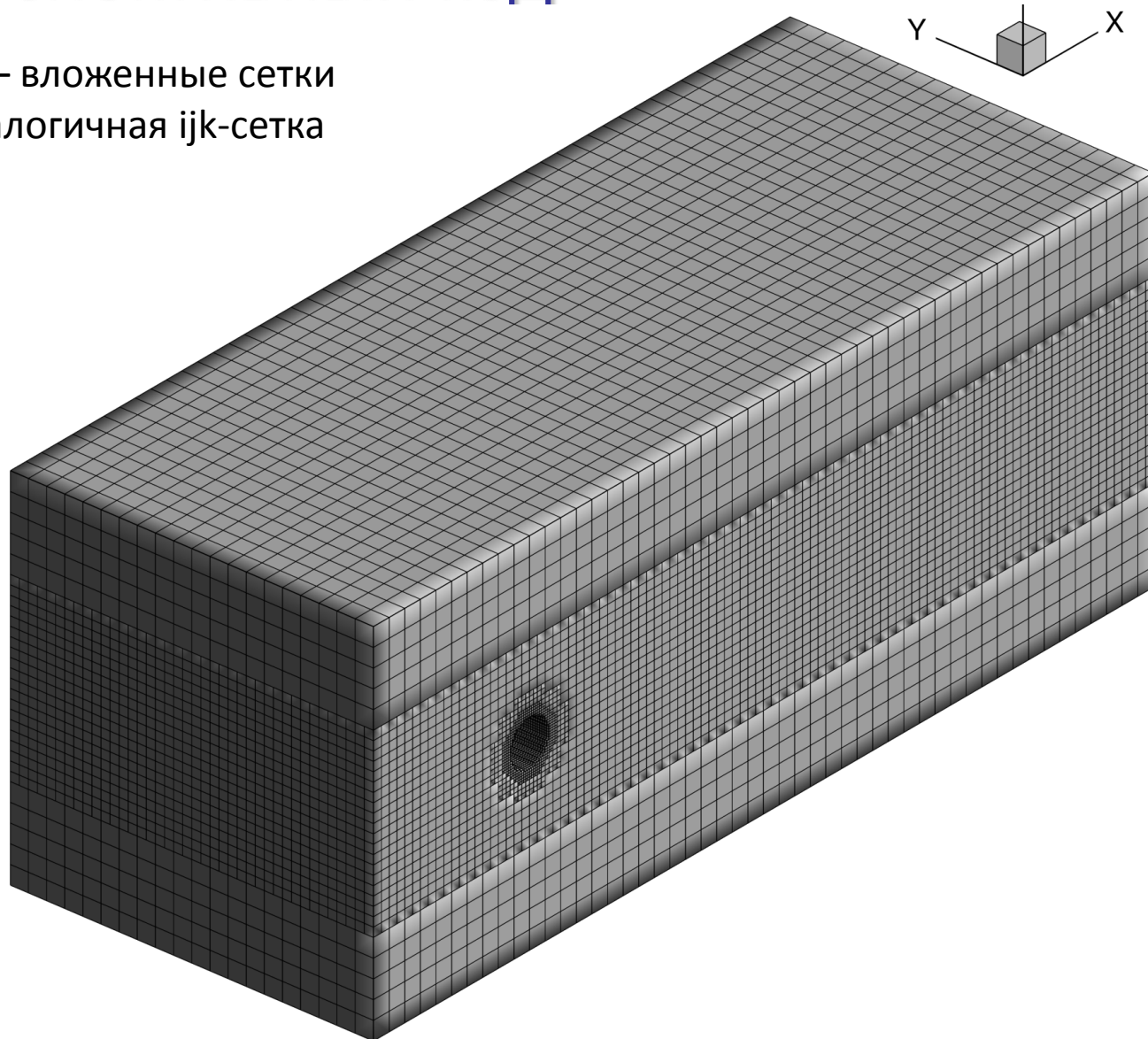
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

ИБРАЭ

# Перспективный код

105.680 ячеек – вложенные сетки

2.560.000 – аналогичная ijk-сетка



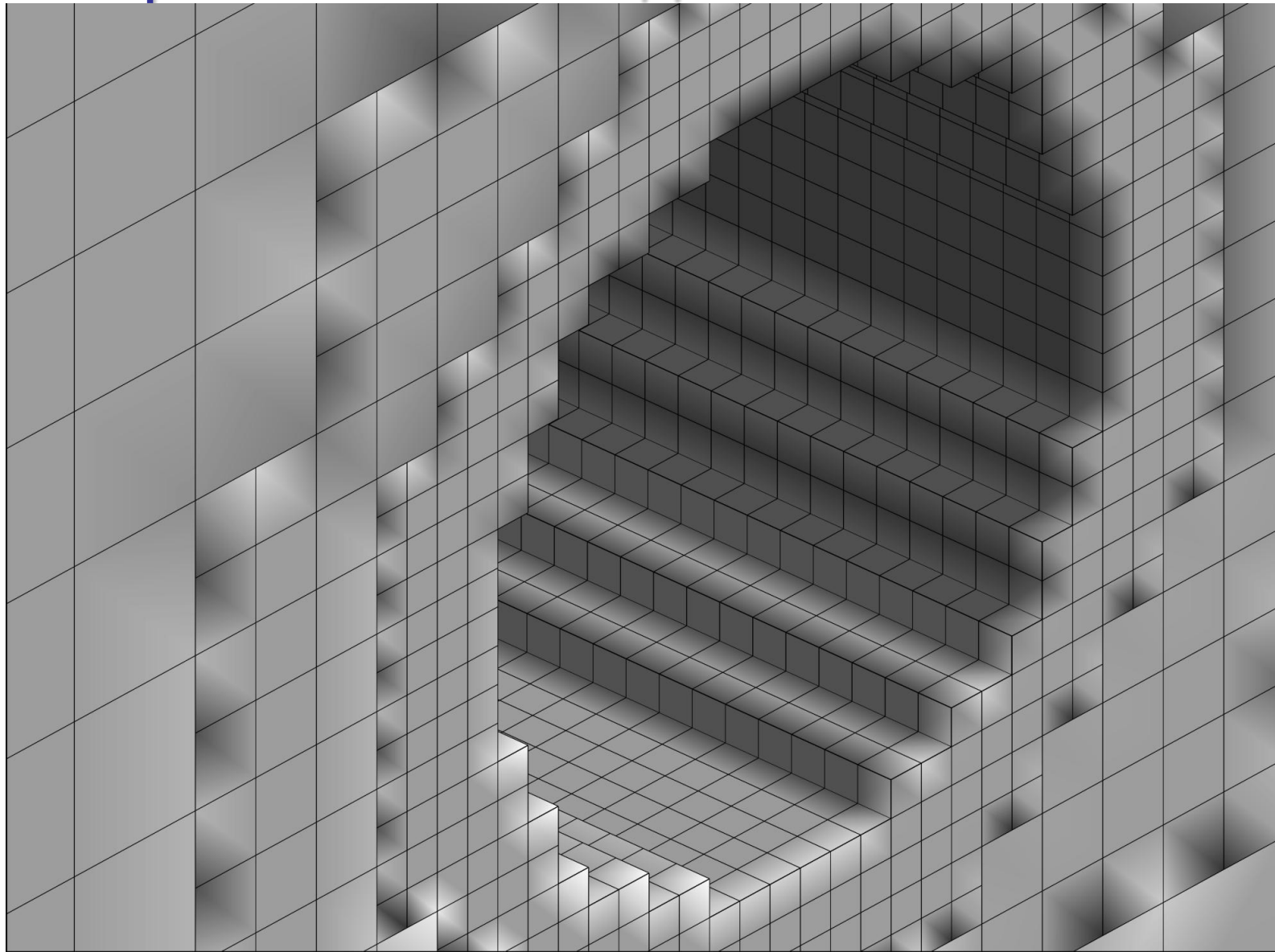


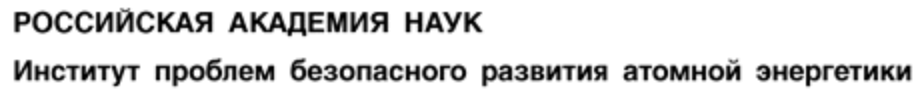


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

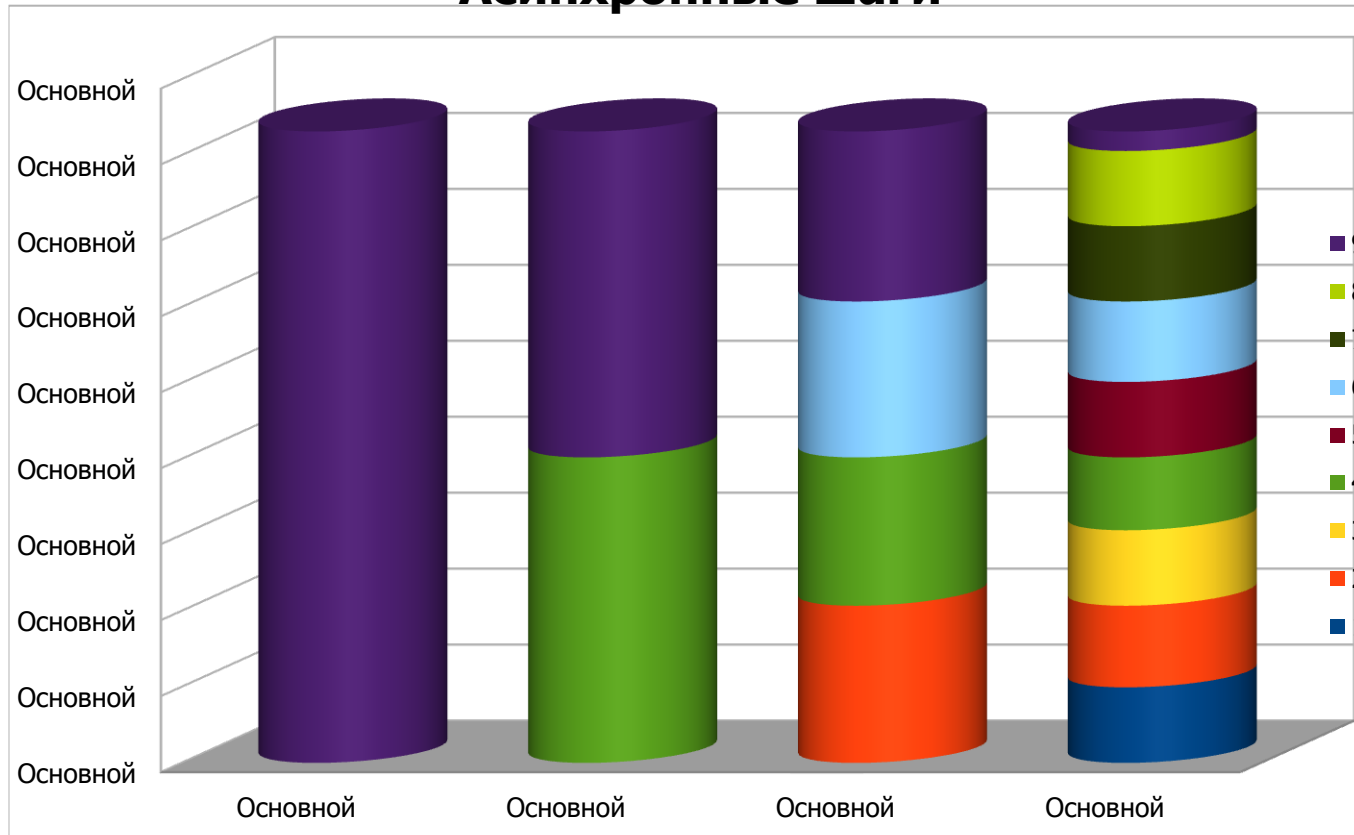
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

# Перспективный код





## Асинхронные шаги





РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

ИБРАЭ

# Асинхронное интегрирование по времени

## Эффективность

Сетка 105680 ячеек

Распределение по вычислительной сложности:  $10000 + 76800 + 6560 + 12320$

### 8 шагов по времени

#### Синхронные шаги

$$10000 \cdot 8 + 76800 \cdot 8 + 6560 \cdot 8 + 12320 \cdot 8 = 845440$$

#### Асинхронные шаги

$$10000 \cdot 1 + 76800 \cdot 2 + 6560 \cdot 4 + 12320 \cdot 8 = 288400$$

Ускорение:  $\frac{845440}{288400} \approx 2.93$

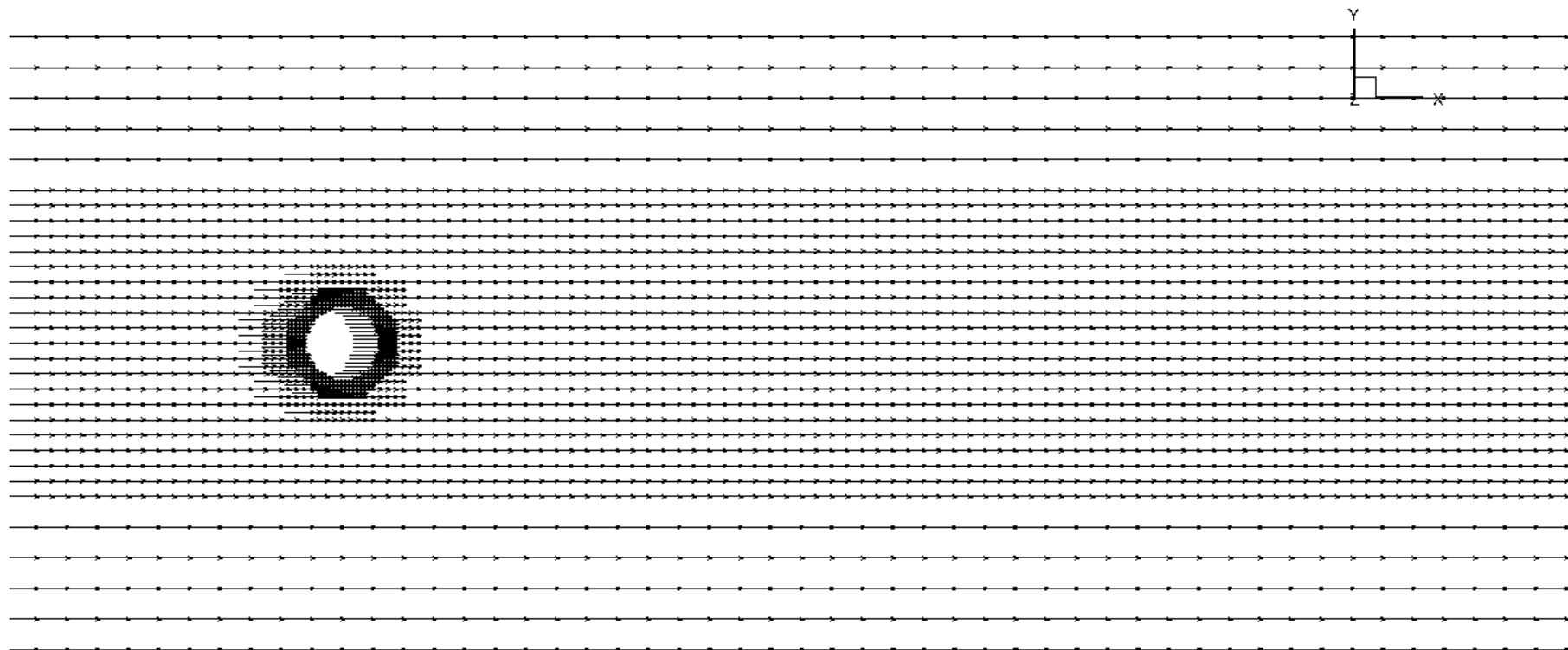


РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

ИБРАЭ

# Обтекание цилиндра





# Перспективный код

## Свойства кода:

- Локальный шаблон
- 2 порядок аппроксимации по пространству и времени
- **Бездиссипативный** в области непересекающихся характеристик
- Эффективность кода на одинаковых сетках по сравнению с Cabaret stages за счёт применения параллелепедных сеток: **x6**
- Эффективность асинхронного интегрирования по времени: **x3** (оценка)





В.М. Головизнин



В. Кондаков



А. Зайцев



В. Глотов



А. Канаев



А.В. Соловьев



М.А. Зайцев



Д. Асфандияров



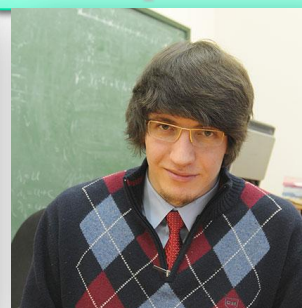
С. Карабасов



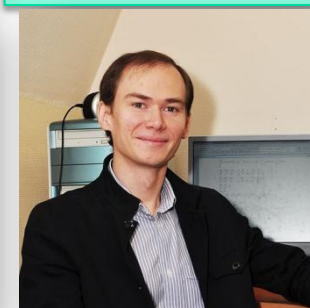
А. Данилин



С.А. Финогенов



А. Рязанов



И. Короткин