申报项目简介

1、研究背景

大型流体机械作为能源技术装备的重要组成部分,是国民经济诸多支柱性行业中的主要耗能设备,是国家多项超大型工程中的关键技术装备,是名符其实的大国重器、国之砝码。在充分肯定我国大型流体机械行业在产品国产化方面取得了多项从"无"到"有"的巨大成就的同时,必须清醒地认识到国产大型流体机械研发过程粗放,行业普遍使用的基于小规模并行商业计算流体力学软件无法准确描述流体机械真实几何和复杂流动现象,使得国产机器的节能减排与安全可靠水平与国外先进技术相比还存在明显差距,如根据国家节能中长期专项规划(2006-2020)资料,80%以上国产大型流体机械的设计效率低于国外同类产品 2-4%,一些重要领域中的大型流体机械还高度依赖进口。为提高我国大型流体机械共性关键技术的自主化水平,本项目面向国产 E 级计算机,通过自主研发大型流体机械大涡模拟(LES)并行计算软件及优化设计系统,为大型流体机械行业提供高效高精度计算工具,促进高性能计算与能源技术重大装备研制的深度融合。

2、研究目标

针对国家能源技术重大装备自主化对大型流体机械节能优化设计的重大需求,以及流体机械复杂流动的学术前沿,面向 E 级计算系统,重点突破多重旋转坐标系下非定常流动的高效高精度高可扩展性基础并行算法及其在大规模混合异构并行计算系统上的映射方案,研制出适合于大型流体机械真实流动的 LES 并行计算软件,在超大型空分装置、超大型风洞、大型核电站中的大型流体机械优化设计和高精度数值模拟取得示范应用,展示高性能计算机及大规模并行软件对国家重大行业技术升级的支撑能力。

3、研究内容

围绕项目研究目标,凝练出两项关键问题:

关键问题 1: 大型流体机械复杂流动的精细建模及高效、高精度、可扩展并行算法;

关键问题 2: 大型流体机械并行计算软件的高可扩展技术及应用示范。 设置 3 个课题:

课题 1: 大型流体机械复杂流动的精细建模及高可扩展并行算法;

课题 2: 面向 E 级计算机的大型流体机械并行计算软件研制;

课题 3: 大型流体机械并行软件的应用示范。

4、技术路线

项目以研究目标为导向,以基础并行算法的高可扩展性为出发点,以并行计算软件研发、验证和示范为主线,联合国内在流体机械、计算机和计算数学等学科的优势研究力量,以及大型透平压缩机和泵行业中的排头兵企业,研制大型流体机械真实流动的高效高精度高扩展性并行计算软件,重点突破算法及软件的 E 级可扩展性并行技术,解决制约大型流体机械节能优化设计和高精度数值模拟水平大幅度提高的瓶颈性问题。

5、研究基础和团队

项目组成员自"十一五"以来,主持完成国家 973、863、科技支撑计划和国家自然科学基金重点项目 11 项,获得国家科技进步二等奖 4 项。在"十一五"863 计划"面向千万亿次高效能计算机的大型流体机械整机非定常流动并行计算软件研发及应用"课题的支持下,提出了全速度流动并行有限体积法和异构多核可扩展性优化技术,完成了流体机械非定常雷诺平均 Navier-Stokes 模型(URANS)的万核级并行计算。研究团队来自国内

在流体机械、计算机和计算数学等领域内具有研究优势的 2 家公司、4 所大学和 2 个研究所,以及所依托建设的 7 个国家级科研基地,在流体机械和高性能计算领域具有重要影响力。

6、预期成果和效益

软件系统部署在国家高性能计算环境的超级计算机上;实现 10 级流体 机械 LES 模型的 60 万核并行计算,计算精度超过国外同类软件水平;以万核为基准的并行效率在 60 万处理器核规模达到 30%;并行软件在国产首套制氧量达 10 万立方米/小时的空分压缩机优化设计、国内唯一实验段尺寸达 2.4 米的连续式跨音速风洞压缩机高精度模拟、第三代核主泵水力模型优化设计等示范应用。充分展示高性能计算对国家重要行业技术自主创新的支撑能力,在大型流体机械 LES 的 E 级并行计算方面处于国际先进水平。

第一部分 国内外现状及趋势分析

包括本项目相关国内外总体研究情况和水平、最新进展和发展前景。限 1500 字以内,并填写下表。

1、大涡模拟将是未来5-10年内大型流体机械精细分析设计的主要流动模型

研发大型流体机械真实流动的高效高精度高可扩展性并行计算软件是攻克大型流体机械核心关键技术、保障能源技术重大装备自主可控研制的根本出路。目前,广泛应用的商业计算流体力学(CFD,Computational Fluid Dynamics)软件如 ANSYS-CFX、ANSYS-Fluent、Numeca 等都已具备流体机械 RANS 流动模型的计算能力,但普遍存在如下不足:

- (1) RANS 模型不能准确捕捉与流体机械真实几何,如叶根倒角、叶顶间隙、轮盘空腔、密封、粗糙形貌等细微流区的湍流及其转捩现象,其预测精度已难以满足日益增长的大型流体机械精细化分析和设计需求;
- (2) 核心求解算法格式精度低,并行规模小且价格昂贵,更无法充分发挥现代高性能计算机的异构并行加速优势。

在这种大背景下,具有更高湍流捕捉能力、更强普适性的 LES 模型将是未来 5-10 年内大型流体机械分析设计的主要求解模型。

2、大规模并行是目前实现大型流体机械大涡模拟计算的唯一选择

大型流体机械 LES 计算对格式精度和网格规模提出了巨大挑战,在单处理器核计算速度逐渐接近物理极限、高性能计算机普遍采用大规模混合异构加速技术的发展趋势下,采用大规模并行计算技术是实现大型流体机械大涡模拟计算的唯一选择。表1列出了目前国际上主要研究机构在流体机械并行计算软件开发方面的研究内容、研究成果和应用情况,以及与本项目的对照。其中,美国能源部(DOE)、国防部(DOD)支持相关国家实验室和大学开发出了适合于多级流体机械部分叶道 RANS/URANS 并行计算软件,并在基础并行算法和流体机械非定常流动机理中取得了研究进展;2015年法国宇航研究院(ONERA)支持欧洲科学计算研究中心(CERFACS)开展了单级压气机、2个叶片排取7个叶道、8.57亿个网格单元、4096核的 LES 并行计算。最近,美国宇航局(NASA)发布了雄心勃勃的"CFD 2030愿景:通往革命性计算空气动力学",其中的核心问题是大涡模拟的E级并行计算。此外,开源CFD软件OpenFOAM(Open Source Field Operation

and Manipulation)对 GPU 和 MIC 平台提供了一定支持; 2013 年美国能源部支持 Stanford 大学湍流研究中心,利用其下属国家实验室的 3 台互连并行计算机 Sequoia、Vulcan 和 Vesta Blue Gene/Q 系统开展了立方体内各向同性可压缩湍流的大规模直接数值模拟,网格数 4.1 万亿、处理器核数 197 万,这也是目前并行 CFD 领域中的最高并行规模。本项目拟开发的大型流体机械并行计算软件将对 10 级压缩机 LES 模型进行能力型计算,参照 CERFACS 网格布置密度,该计算任务需要网格数 600 亿、处理器核数 60 万核。表 2 列出了国内从事与大规模并行计算流体软件相关的研究工作,目前国内在大型流体机械并行计算领域的最大规模是网格数 1.6 亿、处理器核数 1 万。

这些应用充分说明大规模并行计算在大型流体机械中具有广阔应用前景,但并行计算软件开发还面临以下主要挑战:

- (1)大型流体机械精细建模及高效高精度高扩展性基础并行算法,其研究涉及流体机械、计算机和计算数学等多个学科,需要对应用对象、高性能计算机、算法等有深入的理解和把握,一种既能精细刻画湍流细节、又能充分利用现代高性能计算系统加速性能的基础并行算法是研究关键;
- (2)混合异构并行软件编程复杂,软件开发效率低,高性能计算机的成功研制离高性能计算软件的成功应用还有相当长的距离。

3、大型流体机械的 E 级并行软件将有效支持能源技术重大装备的自主可控研制

大型流体机械研发水平是衡量一个国家能源技术装备综合实力的重要标志,国外大公司如美国 GE、德国西门子、日本三菱等都把大型流体机械核心技术作为战略性技术对华实施严格的禁止转让。为保障能源技术装备研发的自主可控,我国政府和相关行业部门出台的许多重大科技发展规划都对大型流体机械予以高度重视和关注。国家发改委和国家能源局于 2016 年 4 月发布的《能源技术革命创新行动计划(2016-2030 年)》,明确指出:"到 2020 年,能源自主创新能力大幅提升,一批关键技术取得重大突破,能源技术装备、关键部件及材料对外依存度显著降低",重点支持的 11 项能源技术关键装备中有 8 项需要大型流体机械配套,本项目研发出面向 E 级计算机的大型流体机械并行软件,将直接应用于其中的 4 项:核岛关键设备、大型空分、大型压缩机、特种用途的泵,将在能源技术装备制造业领域产生巨大影响。

表 1 国外从事相关研究的主要机构(不超过 5 家)

序号	机构名称	相关研究内容	相关研究 成果	成果应用情 况	本项目与国外机构相 关研究内容自评价 (请在框里打√)
1	美国能 源部 DOE	4.5 级透平, 11 叶道, RANS 模 型, 9400 万网 格, 1024 核	TFLO 软件	算法研究	√领跑□并跑□跟跑
2	美国国 防部 DOD	5.5 级压气机, 部分叶道, URANS 模型, 2 亿网格, 1992 核	Turbo 软件	旋转失速机 理研究	√领跑□并跑□跟跑
3	法国宇 航研究 院 ONERA	1 级压气机, 7 叶道, LES 模型, 8.57 亿网格, 4096 核	elsA 软件	模型级计算	√领跑□并跑□跟跑
4	美国宇 航局 NASA	航机 LES,E 级 计算	预计 2020 年 启动,仍处于 规划阶段	预计用于航 机优化设计	□领跑☑并跑□跟跑
5	本项目	10 级流体机械, 600 叶道, LES 模型, 600 亿网 格, E 级计算	2019-2020 年开发出自 主软件	大型流体机 械优化设计	√领跑□并跑□跟跑

表 2 国内从事相关研究的主要机构(不超过 5 家)

序号	机构名称	相关研究内容	相关研究成果	成果应用情况
1	北京应用物理与计 算数学研究所	并行自适应结构网 格支撑软件框架	并行软件框架 JASMIN, JAUMIN、 JCOGIN	无流体机械优 化设计应用
2	国防科学技术大学	扩展了 JASMIN 的异 构混合并行功能	改进的 JASMIN 框架	无流体机械优 化设计应用
3	中国科学院数学与 系统科学研究院	三维自适应有限元 设计的并行程序开 发平台	PHG 编程框架	无流体机械优 化设计应用
4	中国航空工业集团 公司	数值飞行器	/	无流体机械优 化设计应用
5	西安交通大学	4.5 级压缩机,整 圈, URANS 模型, 1.6 亿网格, 1 万核	已自主研发出大型 流体机械 URANS 并 行软件	复合式压缩机 首级气动优化 设计

表 3 项目研发相关的主要文献、专利、标准(不超过10项)

序号	类型(文 献、专利、 标准)	名称	机构	作者
1	文献	CFD Vision 2030 Study: A Path to Revolutionary Computational Aerosciences	NASA、波音公司、P&W 公司、 Stanford 大 学、MIT等	Slotnick J等
2	文献	Large Eddy Simulation of Flows in Industrial Compressors - A Path from 2015 to 2035	欧洲科学计算 研究中心 (CERFACS)	Gourdain N等
3	文献	Solving the Compressible Navier-Stokes Equations on up to 1.97 Million Cores and 4.1 T Grid Points	Stanford 大学 湍流研究中 心、Lawrence Livermore 国 家实验室	Bermejo-Moreno I 等
4	文献	JASMIN: A Parallel Software Infrastructure for Scientific Computing	北京应用物理 与计算数学研 究所	莫则尧等
5	文献	基于"天河一号"的万核级并行 计算流体力学方法及实现	西安交通大学	赵磊,张楚华等

第二部分 研究目标及内容

一、项目目标及考核指标

(一) 申报项目与所属指南方向的关联关系

包括项目与所属指南方向的匹配性,对指南方向目标的支撑作用。限 1500 字以内。

本项目紧密围绕"高性能计算"重点专项"2.3 重大行业高性能应用软件系统研制及应用示范:(2)大型流体机械节能优化设计能力型高性能计算应用软件系统"指南内容而提出申请。

大型流体机械作为能源技术装备的重要组成部分,广泛应用于能源化工、冶金电力、航空航天、国防军事等国民经济诸多支柱性行业,同时也是航机燃机、西气东输、南水北调、深海开发等国家超大型工程中的核心部件,是名符其实的大国重器、国之砝码。此外,包括压缩机、鼓风机、通风机和泵(俗称三机一泵)在内的各类流体机械属于面大量广的通用机械,它们在创造巨大的经济效益的同时,又消耗着全国总工业用电量的30-40%的电能。按照我国目前的工业运行规模,流体机械节能1%,则国家每年节约电能210亿度,相应地减少二氧化碳排放量670万吨,减少二氧化硫排放量23万吨,是节能减排的重要抓手。

正因为大型流体机械在国民经济和国家能源安全领域占据着如此特殊重要的地位,国外大公司如美国 GE、德国西门子、日本三菱公司等都把大型流体机械关键核心技术作为战略性技术机密对中国实施严格的禁止转让。为保障大型流体机械研制的自主可控,我国政府和行业部门颁发的重大发展规划对大型流体机械予以高度重视和关注:(1)国务院于 2015 年 5 月印发的《中国制造 2025》,明确要求"提高国家制造业创新能力,推进信息化与工业化深度融合",将高性能计算技术与大型流体机械制造业深度融合,符合装备制造业技术创新和行业升级的国家发展规划;(2)国家科学技术部 2016 年颁布的"高性能计算"重点专项项目申报指南中,重点支持研发一批重大关键领域/行业的高性能计算应用软件,其中明确规划通过产学研合作,研发大型流体机械节能优化设计能力型高性能计算应用软件系统;(3)国家发改委和国家能源局于 2016 年 4 月发布的《能源技术革命创新行动计划(2016-2030 年)》,明确了能源技术革命在"十三五"期间的总体目标是:到 2020 年,能源自主创新能力大幅提升,一批关键技术取得重大突

破,能源技术装备、关键部件及材料对外依存度显著降低,重点支持的 11 项能源技术 关键装备包括:非常规油气开采装备、海上能源开发利用平台、大型原油和液化天然气 船舶、核岛关键设备、燃气轮机、智能电网用输变电及用户端设备、大功率电力电子器 件、大型空分、大型压缩机、特种用途的泵、阀,其中有 8 项需要大型流体机械的配套 和支持,本项目成果直接应用于其中的 4 项:核岛关键设备、大型空分、大型压缩机、 特种用途的泵,将在能源技术装备制造业领域产生巨大影响。

本项目紧密围绕指南方向,充分发挥各参加单位的雄厚研究实力和大型流体机械行业排头兵的地位,集中多学科、跨部门优势研究力量,对大型流体机械真实流动的大规模可扩展性并行计算软件及其关键技术进行产学研联合攻关,解决大型流体机械节能优化设计及高精度模拟仿真的计算难题。通过在 E 级计算机上大规模的数值模拟,获得一批重要的有显示度的数值模拟成果,并在国产首套 10 万等级空分压缩机优化设计、国内唯一 2.4 米连续式跨音速风洞压缩机高精度模拟、第三代核主泵水力模型优化设计等能源技术重大装备研制中获得示范应用。项目将充分展示高性能计算对国家重要行业自主创新的支撑能力,特别在大型流体机械 LES 的 E 级并行计算方面处于国际先进水平。

(二)项目目标及考核指标、评测方式/方法

限 3000 字以内, 并填写下表。

1、项目目标

针对大型流体机械节能优化设计及能源技术装备自主化研发的重大需求、流体机械非定常流动的学术前沿,面向 E 级计算机,重点解决如下两项关键问题: (1) 大型流体机械复杂流动的精细建模及高效、高精度、可扩展并行算法; (2) 大型流体机械并行计算软件的高可扩展技术及应用示范。提出大型流体机械 LES 模型的高效高精度高扩展性基础并行算法及其 E 级高扩展性并行软件技术,研制适合于 E 级计算机的大型流体机械真实流动并行计算软件,完成国产首套 10 万等级空分压缩机优化设计、国内唯一 2.4 米连续式跨音速风洞压缩机高精度模拟、第三代核主泵水力模型优化设计的应用示范,研究成果有效支撑超大型空分装置、超大型风洞、第三代核电站等能源技术重大装备中的大型流体机械自主化研发,提升我国大型流体机械共性关键技术及其所配套的重大技术装备自主化水平,充分展示高性能计算对国家重要行业自主创新的支撑能力。在大型流体机械 LES 的 E 级并行计算方面处于国际先进水平。

2、考核指标

约束性指标包括:

- (1) 并行软件系统部署在国家高性能计算环境的超级计算机上:
- (2) 以万核为基准的并行效率在60万处理器核规模达到30%:
- (3) 实现 10 级大型流体机械 LES 模型的大规模并行计算,设计工况下的流量、压比、效率预测精度在 1%以内,调节工况下的预测精度在 2%以内,计算精度达到国外同类软件水平;
- (4)并行软件系统在国产首套 10 万等级空分压缩机优化设计、国内唯一 2.4 米连续式跨音速风洞压缩机高精度模拟、第三代核主泵水力模型优化设计中获得示范应用。

预期性指标主要包括:

- (5) 授权或申请发明专利 6 项:
- (6) 登记或申请软件著作权 4 项;
- (7) 发表学术论文 45 篇, 其中 SCI 收录 25 篇;
- (8) 出版专著或教材1部;
- (9) 培养博士生、硕士生 34 人;

(10) 培养优秀青年教师或博士后4人。

3、评测方式/方法

- (1) 软件的部署及使用情况由国家高性能计算中心出具证明材料;
- (2) 软件的并行效率由专业软件性能评测机构出具;
- (3) 软件的并行精度评测方式是由具有国家风机性能检测资质的评估中心出具的性能检测报告:
- (4)软件在产品研发中应用情况的考核办法为专家验收会形式或者用户实测报告, 其中验收或者实测报告结论中体现软件对产品研发的支撑度,产品关键性能指标及其在 国内外同领域所处的水平;
 - (5) 发明专利考核方法是授权书或实质审查通知书复印件;
 - (6) 软件著作权考核方法是登记证书或申请书复印件;
 - (7) 论文考核办法是论文首页或录用通知书、致谢页复印件;
 - (8) 专著教材考核方法是正式出版物的封面及目录复印件;
 - (9) 研究生培养指标考核方法是学位论文封面、致谢页复印件;
- (10) 优秀青年教师及博士后培养指标考核方法是人才支持计划证明材料、职称证书、博士后进站通知书等复印件。

表 4 项目目标、成果与考核指标表

		成果 类型	对应的课题 (任务) ²	考核指标 ³				****
项目目标 1	成果名称			指标 名称	立项时已 有指标值/ 状态	中期指标值/状态4	完成时指标值/状态	考核方式 (方法) 及评 价手段 ⁵
针对大型流体机械节				流动模型	URANS	LES/URANS	LES	发表的论文
能优化设计及能源技	1: 大型流体	□新理论□新原理□ 新产品 √ 新技术 √ 新	课题 1: 大型	格式精度	2 阶	4 阶	4 阶	发表的论文
术重大装备自主研发	机械真实流	新广品[▼]新技术[▼]新 方法□关键部件□数	流体机械复	处理器核数	1万	10万	60万	超算中心出具
的行业重大需求,面	动的高效高	据库✓软件□应用解	杂流动的精	验证装置	/	2	3	专业机构出具
向 E 级计算机,重点	精度高扩展		细建模及高	SCI 论文	/	4	10	首页及致谢页
解决如下两项关键问	性基础并行	决方案✓实验装置/系	可扩展并行	发明专利	/	1	2	授权证书或实审书
题: (1) 大型流体机	算法	统□工程工艺□标准 √专利 √论文□其他	算法	软件著作权	/	/	1	登记证书
械复杂流动的精细建				专著教材	/	/	1	首页及目录页
模及高效、高精度、		□新理论□新原理□		软件架构	求解器	+前处理	+后处理	超算中心出具
可扩展并行算法;(2) 大型流体机械并行计	2: 大型流体机械并行计	方法□关键部件□数	课题 2: 面向 E 级计算机的	处理器核数	1万	10万	60万	超算中心出具
算软件的高可扩展技				并行效率	/	/	30%	专业机构出具
术及应用示范。形成	算软件及其 E	据库√软件□应用解	大型流体机	SCI 论文	/	3	8	首页及致谢页
如右列所示的 3 项主	级高可扩展	决方案□实验装置/系	械并行计算	发明专利	/	1	2	授权证书或实审书
要成果,有效支撑超大型空分装置、超大	技术	统□工程工艺□标准 √专利√论文□其他	软件研制	软件著作权	/	1	2	登记证书
型风洞、第三代核电	. +	□新理论□新原理 √		并行精度	2-5%	2-3%	1-2%	专业机构出具
站等能源技术重大装	3: 基于大规	新产品√新技术□新	课题 3: 大型	模拟级数	4级	4级	10 级	用户出具
备自主研发, 充分展	模并行计算	方法√关键部件□数		压缩机效率	83%	/	86%以上	专业机构出具
示高性能计算对大型	软件的大型	据库√软件□应用解	流体机械并	产品数量	无	1	3	用户出具
流体机械共性关键技	流体机械多 参数并行优	决方案√实验装置/系 统□工程工艺□标准	行 软 件 的 应 h 用示范	SCI 论文	/	2	5	首页及致谢页
术自主创新和行业升	参			发明专利	/	1	2	授权证书或实审书
级的支撑能力。		√专利√论文□其他	*****	软件著作权	/	/	1	登记证书

其他目标与考核指标(对于难以采取上述表格细化的项目目标及其考核指标,可在此细化填写。)

¹⁾ 软件的部署及运行情况: 国家高性能计算中心出具证明材料;

²⁾ 对国家重大工程和社会民生支撑情况: 用户出具的证明材料及新闻媒体报道材料。

备注:

- 1. "项目目标",应从以下方面明确描述: (1)项目研发主要针对什么问题和需求; (2)将要解决哪些科学问题、突破哪些核心/共性/关键技术; (3)预期成果; (4)成果将以何种方式应用在哪些领域/行业/重大工程等,并拟在科技、经济、社会、环境或国防安全等方面发挥何种的作用和影响。限 500 字以内。
- 2. "对应的课题(任务)",指将由项目内哪些课题(任务)支撑取得某项成果。
- 3. "考核指标",指相应成果的数量指标、技术指标、质量指标、应用指标和产业化指标等,其中,数量指标可以为论文、专利、产品等的数量;技术指标可以为关键技术、产品的性能参数等;质量指标可以为产品的耐震动、高低温、无故障运行时间等;应用指标可以为成果应用的对象、范围和效果等;产业化指标可以为成果产业化的数量、经济效益等。同时,对各项考核指标需填写立项时已有的指标值/状态以及项目完成时要到达的指标值/状态。同时,考核指标也应包括支撑和服务其他重大科研、经济、社会发展、生态环境、科学普及需求等方面的直接和间接效益。如对国家重大工程、社会民生发展等提供了关键技术支撑,成果转让并带动了环境改善、实现了销售收入等。若某项成果属于开创性的成果,立项时已有指标值/状态可填写"无",若某项成果在立项时已有指标值/状态难以界定,则可填写"/"。
- 4. "中期指标", 各专项根据管理特点, 确定是否填写, 鼓励阶段目标明确的专项项目填写中期指标。
- 5. "考核方式方法", 应提出符合相关研究成果与指标的具体考核技术方法、测算方法等。

(三) 项目成果的呈现形式及描述

限 1000 字以内。

本节对表 4 中项目成果的主要呈现形式及描述展开论述。

1、大型流体机械真实流动的高效高精度高扩展性基础并行算法

该项成果以基础并行算法及其实验验证为主,基础特色明显,主要为后续E级大规模并行计算软件及优化设计系统提供高效高精度高扩展性基础并行算法,研究成果以高水平论文发表为主要呈现形式。具体来说,将在透平压缩机LES模型及高阶数值离散格式、泵内两相LES/LBM 计算方法及汽蚀模型、大型流体机械分层并行混合异构方法、多参数并行优化设计方法、并行算法精度的实验验证和技术成熟度模型等研究成果方面,在国际权威期刊如 Journal of Computational Physics等上发表高水平SCI论文;在"流体机械非定常流动理论及并行计算方法"方向上出版著作/教材1部,扩大项目成果的影响力。

2、大型流体机械并行计算软件及其 E 级高可扩展技术

该项成果以并行软件开发和性能优化为主,技术特色明显,主要为流体机械行业提供一种大规模高可扩展性并行计算软件,研究成果以高水平论文发表、发明专利和软件著作权为主要呈现形式。具体来说,将在大规模并行计算"分层弹性映射、层间协调通信、层内动态优化"的高可扩展并行软件框架上发表高水平论文、申请发明专利,在大型流体机械并行计算软件的前处理、求解器、后处理等方向上申请软件著作权。同时充分利用项目组在行业中的技术优势,动员更多用户使用部署在超算中心上的并行计算软件,扩大软件的影响力。

3、基于大规模并行计算软件的大型流体机械多参数并行优化设计系统

该项成果以并行软件应用示范为主,应用特色显著,主要是利用所研发的大规模并行计算软件和优化设计系统,解决能源技术重大装备中的大型流体机械计算量巨大的难题,研究成果以产品开发为主要呈现形式。具体来说,将对国内首台套 10 万等级超大型空分装置用 10 级压缩机进行 60 万处理器核并行计算,验证软件的并行精度和效率;在此基础上,结合国外同等生产规模空分装置的技术特点,进行节能紧凑化改造,利用并行优化设计系统完成该类型压缩机的 6 级轴流+1 级离心的气动优化设计,产品关键技术指标达到国际先进水平;对国内唯一的 2.4 米连续式跨音速风洞压缩机进行大规模并行高精度模拟,为超大型风洞试验段气流品质的精确控制和调节提供高精度流场数据:

对第三代核主泵水力模型进行优化设计,利用实验数据验证方法和模型。示范对象均位于由国家发改委和国家能源局 2016 年 4 月发布的《能源技术革命创新行动计划(2016-2030 年)》所重点建设的能源技术关键装备名单中,将在能源技术装备制造业领域产生巨大影响。

二、项目研究内容、研究方法及技术路线

(一) 项目的主要研究内容

拟解决的关键科学问题、关键技术问题,针对这些问题拟开展的主要研究内容,限 3000 字以内。

高效高精度基础并行算法及其可扩展性方法是研制大型流体机械E级并行计算软件 要解决的两个基本难题。目前商业 CFD 软件已实现了小规模并行求解 URANS 流动模型获得主要性能数据的功能,但 URANS 对湍流描述的精度不能满足流体机械精确设计的要求,其核心算法也不能充分发挥 E级计算机的加速性能与架构优势,且销售价格随着并行核数急剧上升。针对行业重大需求和技术现状,项目拟重点解决如下两个关键问题:

- 1) 大型流体机械复杂流动的精细建模及高效、高精度、高可扩展并行算法;
- 2) 大型流体机械并行计算软件的高可扩展技术及应用示范。

针对上述两个关键问题,拟开展如下三方面的主要研究内容:

研究内容 1: 大型流体机械真实流动的精细模型及其高效高精度高可扩展并行算法

为提高流体机械真实流动的求解精度,以 LES 为主、结合 URANS 和 LBM(Lattice Boltzmann Method)流动模型,研究流体机械真实模型的大规模区域分解方法和适合于不同模型的网格自动生成方法、高效高精度基础并行算法、动静部件交接面的高精度处理方法,并通过不同流体机械对象不同层次实验数据验证,确保求解精度的提高;为提高并行算法的可扩展性,研究大型流体机械优化设计多样机、多叶片排、多叶道、多区域、多维等多层并行机制,结合 E 级计算机系统、机柜、节点、处理核、专用加速众核的多层次逻辑架构特征,提出适合于大型流体机械和 E 级计算机特点的"多层并行、混合异构"计算模型,确保并行算法在 E 级计算机上的高可扩展性。

具体研究内容包括:

- (1) 流体机械复杂流动的精细模型
- (2) 高效高精度基础并行算法及其高可扩展性方法
- (3) 大型流体机械多参数并行优化设计方法
- (4) 流体机械精细建模和高精度算法的技术成熟度模型及实验验证

研究内容 2: 大型流体机械高可扩展并行计算软件的研制及优化

针对大型流体机械高可扩展并行计算软件的研制及优化问题,为提高并行软件的可扩展性,以MPI+OpenMP为主、结合加速处理单元的混合并行编程模型,研究面向E级

计算机的多层次异构并行软件框架,提出大型流体机械并行计算模型的弹性映射方案、层间自聚类通信模型、层内自感知资源分配方法,结合大型流体机械不同计算模型的数据特性,验证并行软件框架的高可扩展性;为提高并行软件的计算效能,研究基于向量化、层次化缓存数据分块、计算与通信重叠、数据复用等优化技术,实现并行软件的高效能。在此基础上,研究大型流体机械并行软件各模块间接口规范,实现各模块松耦合、高内聚集成,研制面向E级计算机的国产大型流体机械高可扩展并行计算软件。

具体研究内容包括:

- (1) 面向 E 级计算机系统的多层次可扩展异构并行软件框架
- (2) 面向 E 级计算机系统的分层弹性映射
- (3) 面向 E 级系统大型流体机械真实流动应用特点的动态能效优化
- (4) 基于大型流体机械真实流动精细模型的并行算法库
- (5) 大型流体机械高可扩展并行计算软件前后处理

研究内容 3: 大型流体机械并行计算软件系统的应用示范

为开展软件的验证与示范,研究大型流体机械的"全局快速定位、局部精确寻优" 多参数并行优化设计模型及其与国产大型并行软件耦合技术,通过 10 级压缩机的 60 万 核能力型并行计算,验证并行软件的技术指标;在此基础上,选择在能源技术重大装备 业中具有技术挑战性的大型流体机械进行集中攻关,完成 10 万等级空分压缩机气动优 化设计、2.4 米连续式跨音速风洞压缩机高精度模拟、第三代核主泵水力模型优化设计 等应用示范,为软件的完善和推广提供支撑。

具体研究内容包括:

- (1) 10 级压缩机高精度数值模拟与软件性能的实验验证
- (2) 10 万等级空分压缩机节能优化设计示范
- (3) 2.4 米连续式跨音速风洞压缩机高精度数值模拟示范
- (4) 第三代核主泵节能优化设计示范

(二)项目拟采取的研究方法

1、针对项目研究拟解决的问题,拟采用的方法、原理、机理、算法、模型等限 2000 字以内。

项目将在已有研究基础上,紧密围绕所凝练出的关键问题,立足于提高大型流体机械并行计算软件的计算精度、并行效率和可扩展性,找准需攻克的主要研究难点,将软

件基础算法研究、软件集成开发和软件应用示范相结合,走混合异构服务器上的模型、算法和软件的设计与验证→超算环境下的并行软件测试与优化→E级计算机上的软件能力型示范→企业生产与工业化应用的技术路线,确保研究方法的可行性、研究成果的先进性和研究目标的可实现性。项目实施的技术路线如图 1 所示。

1) 关键问题 1 的研究方法

- (1)为精确模化亚网格尺度湍流的动力学行为及其对可解尺度湍流的作用效果,综合考虑流场变形率与旋转率的影响,引入壁面自适应局部涡粘(WALE)模型,结合流体动力学本构关系,计算与真实物理表现符合较好的亚格子湍流应力;针对 LES 对近壁区网格密度的严苛要求,基于显式时间过滤思想,借鉴部分平均 Navier-Stokes (PANS)模型的实施策略,通过求解关于未解尺度湍流参数的偏微分方程,实现对可控时间尺度下湍流应力的准确模化。
- (2)通过合理引入与流动变量当地梯度相关的权重函数,发展WENO-中心混合格式,用于重构网格界面的物理变量,使用Fourier精度分析法对该格式在宽波数范围内的误差特性进行解析;利用低耗散Roe分裂格式,通过对原始Roe格式附加耗散项进行分解和衰减,显式控制其数值耗散,保证求解格式对湍流与间断均有较高分辨率;以所求解的湍能谱为评估指标,标定WENO-中心重构格式与低耗散Roe格式中的参数;基于离散Fourier变换技术,发展时间谱-空间有限体积求解方法,实现对流体机械典型多谐波周期性流动的高效、高精度求解。
- (3)针对流体机械几何特征,提出由整机、叶片排、叶道、子区域和空间维度构成的多层次分区准则和网格划分策略,将几何结构映射于高性能计算机系统、机柜、节点、处理器核、专用加速众核的多层逻辑架构上,保证 E 级并行计算的可扩展性。
- (4)根据流场数据的丰富程度,建立由总体力学参数、性能曲线、时均流场参数、湍流二阶矩、两点时空相关量和高阶时空相关量构成的6级技术成熟度模型,通过实验获得流体机械模型级的高精度和高分辨率测试数据,并以此为依据,评估流动预测模型及数值方法的技术成熟度等级。

2) 关键问题 2 的研究方法

(1)将大型流体机械真实流动应用特征和 E 级系统异构特点相结合,根据大规模应用的特点,通过合理的任务划分使 E 级系统不同架构计算核资源高效协同地进行任务计算,提高数据局部性以高效执行更高级别的细粒度并行任务,充分利用 E 级系统计算

资源。

- (2)设计结合 MPI、OpenMP 和专用加速设备编程方法的混合编程模型,充分利用 节点间、节点内处理器之间、处理器内计算核之间多级并行,高效开发应用的任务级和 数据级并行性能。
- (3)针对E级系统,设计能够表达大规模科学计算应用并行性、数据局部性及弹性、表达能力更强、动态感知的分层弹性映射方案。解决大规模并行性的问题,从任务划分及任务到计算单元的映射层面为实现大规模并行软件可扩展性提供支撑。
- (4)设计能够支持动态细粒度并行性,能够充分利用 E 级系统不同层次异构计算资源,支持不同层次计算资源间低交互、高效异构协同的不同计算节点及不同处理核之间多层次的通信优化机制,实现系统内高效的数据传输,缓解大规模并行时的通信瓶颈问题,从信息交互层面为实现大规模并行软件的可扩展性提供支撑。
- (5)为提高并行软件的计算效能,研究基于向量化、层次化缓存数据分块、计算与通信重叠、数据复用等优化技术,确保并行软件的高效能;设计面向 E 级系统大规模科学计算应用的能效优化方法,通过局部性感知,从负载均衡、访存、通信、能源管理等方面进行系统优化,实现计算性能最大化并降低能耗。
- (6)通过定制并行软件各模块间接口规范,应用软件可以与前后处理模块无缝对接,并在此基础上,实现各模块松耦合、高内聚集成,定制应用软件的前后处理用户界面,从而大幅度地提升软件的易用性。
- (7) 基于项目研制的大型流体机械真实流动并行计算软件,对8级轴流+2级离心压缩机及2.4米跨音速风洞4级主压缩机的内部非定常流动及气动性能进行高精度数值模拟;提取压缩机进出口截面的时均压力和温度数值,计算整机多变效率和压比,并同实验数据进行对比;采用本征正交分解(POD)方法对获取的非定常流场进行时空解耦特征分析,获得流场中不同模态的涡系结构及其分布规律;利用离散Fourier变换技术分析压缩机叶道内的湍能谱及压力脉动的频谱特性。
- (8)将并行计算软件与多参数并行优化设计模型相耦合,利用并行计算软件对多目标遗传算法的历代种群或高维代理模型训练样本进行流场计算,建立集几何参数化建模、网格生成、并行流场计算与并行优化求解于一体的大型流体机械多层嵌套式并行优化设计系统;采用平行坐标方法、自组织映射方法将高维优化数据可视化,分析优化目标与几何设计变量之间的关联性及不同几何设计变量之间的相关性,识别对优化目标起

决定作用的几何参数及其变化规律。

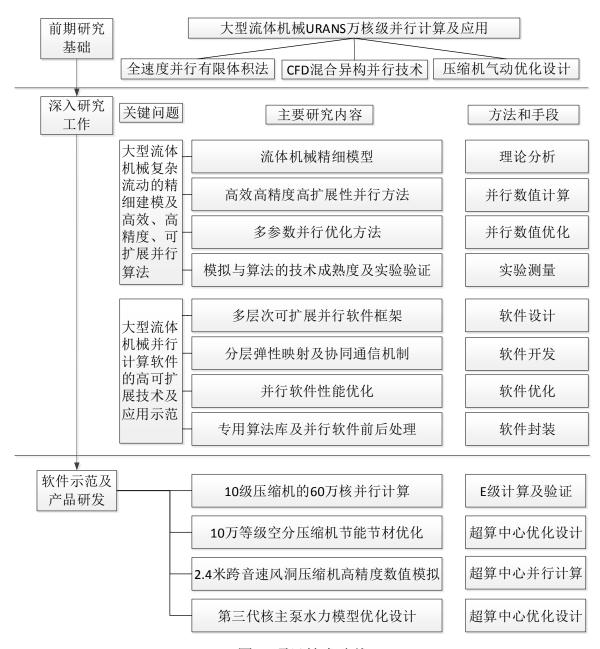


图 1 项目技术路线

2、项目研究方法(技术路线)的可行性、先进性分析 限 2000 字以内。

1) 关键问题 1 的技术路线可行性、先进性分析

(1) 在项目组已有的并行计算流体力学研究基础之上,开发适合于流体机械内流高精度数值模拟的基础并行算法库,是研制大型流体机械大规模并行计算软件的必要依托和有力支撑,为此,须发展适合于大型流体机械的精细流动预测模型和高精度数值方法。基于唯象论的涡粘型亚格子应力模型通常具有构造形式简单且健壮性强的特点,特

别适合于 LES 工程计算,作为该类模型的典型代表,WALE 模型综合考虑了可解尺度湍流变形率与旋转率的影响,计算的涡粘系数在近壁区自动衰减,对求解壁面剪切湍流具有显著优势,并能适应转捩流动,曾被应用于 NASA 低速离心压缩机、NASA Rotor 37 跨音速转子和轴流压缩机级的 LES 研究。

- (2) 高精度 WENO 格式是基于不同插值模版加权组合思想,满足总变差有界条件,能够较好地捕捉流场间断,在此基础上发展的 WENO-中心混合格式在光滑区域耗散近似为零,间断附近则保留合理的数值粘性以抑制非物理振荡,在求解压缩机内部激波-湍流干涉流动方面具有较大潜力;时间谱-空间有限体积法结合了谱方法的高精度优势和空间有限体积法对复杂几何区域的适应能力,由 Gopinath 和 Jameson 提出并用于求解多级流体机械内部周期性非定常流动,项目组使用该方法研究了平面扩压叶栅的受迫非定常流动问题。基于非结构化网格上全速度流动并行有限体积法,结合针对异构多核的可扩展性优化技术,项目组完成了 4 级流体机械流动的万核级全通道并行计算,为本项目的研究工作奠定了坚实基础。
- (3) 参考剑桥大学 Whittle 实验室的相关工作,建立适合于流体机械 LES 流动模型和高精度算法的涵盖宏观外特性数据、时均量、湍流量和时空相关量的 6 级技术成熟度模型,从而为后续 E 级并行计算软件预测能力提供明确的多层次考核指标体系。

2) 关键问题 2 的技术路线可行性、先进性分析

- (1)针对大型流体机械高可扩展并行计算软件的研制及优化的问题,为提高并行软件的可扩展性,以 MPI+OpenMP 为主、结合加速处理单元的混合并行编程模型,对运行时优化、数据通信、负载平衡、并行 I/O 等高性能计算相关工作进行抽象,为应用领域专家屏蔽超级计算机体系结构和显式并行编程的复杂性,这方面已有的研究成果,如 JASMIN 框架、Uintah 软件计算框架和通用可扩展编程框架 Zippy 等,为软件框架的实现提供了参考和借鉴。
- (2)项目组前期提出了非结构化网格上全速度流动并行有限体积法的基础并行算法和针对异构多核的可扩展性优化技术,完成了流体机械非定常雷诺平均 Navier-Stokes 模型的万核级并行计算; 开发了基于异构众核系统的层次化计算模型 HmPlogP、面向 GPU 异构并行系统的多任务流编程模型及对应的运行时支持系统原型 GMMP、面向MIC 异构众核系统的线程映射及性能优化技术,为实现面向 E 级的大型流体机械高可扩展并行计算软件的分层弹性映射、多层次协调通信、综合能效优化奠定了坚实基础。

- (3)项目组多年来一直紧密跟踪高性能计算技术发展特点,分析国内外相关研究和项目的研究动态,充分了解相关项目中的应用模式和各自特点,对国内外相关研究和技术发展有比较扎实的掌握,这些都为本项目研究方法的可行性和先进性提供了必要的保证。
- (4)项目组长期致力于流体机械优化设计方法及其应用的研究,在该领域荣获了国家 973、863、国家科技支撑计划课题、国家自然科学基金等多项国家级科技项目的支持,为本项目大型流体机械优化设计的顺利实施打下了坚实基础。项目在着力研制大型流体机械真实流动并行计算软件的基础上,提出将并行求解思想注入优化设计的各环节之中,研究"全局快速定位、局部精确寻优"的多参数并行优化设计方法,攻克业界广泛面临的"维数灾难"难题,并进一步突破多参数并行优化设计模型与大型并行计算软件的耦合技术,建立面向大型流体机械的多层嵌套式并行优化设计系统,有望在大型流体机械多参数并行优化方面取得突破性成果。
- (5) 项目研究的 10 万等级空分压缩机、2.4 米连续式跨音速风洞压缩机和第三代 核主泵,均属国家能源技术关键装备中的大型流体机械设备。其中,用于并行计算软件 性能验证的国产首套 10 万等级空分装置用 8 级轴流+2 级离心压缩机由沈阳透平机械股 份有限公司研发, 而国外能够设计制造出此类大型空压机的也仅有德国曼透平和西门子 两家公司。目前,该空压机与西门子公司相关产品的技术水平相当,而同曼透平公司的 MAX1 空压机系列产品相比,存在级数较多、重量较大、效率较低的缺点,有待进行节能 紧凑化改造。 鉴于此, 项目利用研制的并行优化设计系统完成 6 级轴流+1 级离心压缩机 的气动优化设计,产品关键技术指标达到国际先进水平。中航工业气动院 2.4 米连续式 跨声速风洞是国内在建难度最大、投资最大、周期最长的风洞项目,而动力系统主风机 采用的超大流量压缩机,是实现风洞设计指标领先于国外同等量级风洞的关键。考虑到 此类压缩机的超大流量、超大结构尺度、低总压、低雷诺数流动、宽调节运行工况特征, 使得采用传统 CFD 计算平台已无法真实模拟其内部流场,项目利用研制出的并行计算软 件完成该压缩机的高精度数值模拟,为风洞试验段气流品质的精确控制和调节提供高精 度流场数据。此外,针对我国自主研发的第三代核主泵与国外先进水平的差距,采用并 行优化设计系统完成沈阳鼓风机集团核电泵业有限公司第三代核主泵产品水力模型的 优化设计,产品关键技术指标达到国际先进水平。

三、项目任务(课题)分解方案

(一) 项目任务(课题) 分解情况

围绕项目目标,根据需要可对项目目标进行任务分解,并简要说明各任务(课题)在项 目中的具体作用,相互之间的逻辑关系,建议用图表描述。限 2000 字以内。

本项目针对凝炼出的两个关键问题: 1) 大型流体机械复杂流动的精细建模及高效、 高精度、高可扩展并行算法: 2) 大型流体机械并行计算软件的高可扩展技术及应用示 范,设置3个课题。课题设置思路如图2所示。

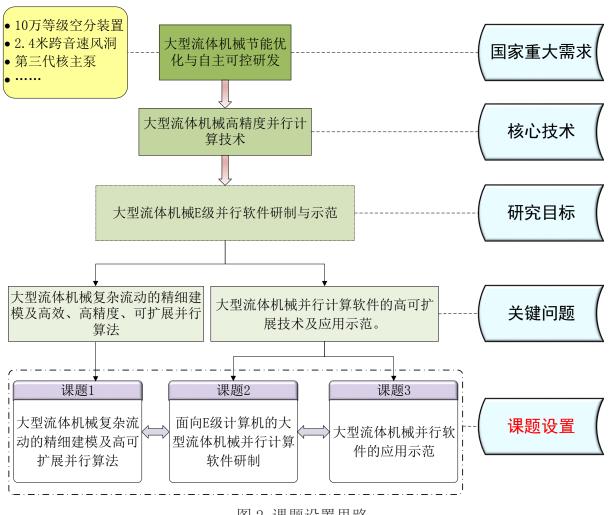


图 2 课题设置思路

围绕大型流体机械复杂流动的精细建模及高效、高精度、高可扩展并行算法,设置 课题 1"大型流体机械复杂流动的精细建模及高可扩展并行算法"。提出适合于大型流 体机械节能优化设计和性能预测的 LES 流动模型和高效高精度高可扩展性基础并行算 法,为研制大型流体机械并行软件提供算法支撑。

围绕大型流体机械并行计算软件的高可扩展技术及应用示范,分别设置课题 2 "面向 E 级计算机的大型流体机械并行计算软件研制"和课题 3 "大型流体机械并行软件的应用示范"。其中,课题 2 基于课题 1 的基础并行算法,提出适合于 E 级计算机的多层次异构并行软件框架及优化技术,研发大型流体机械大规模并行计算软件,为开展并行软件应用示范提供计算工具;课题 3 完成大型流体机械高精度数值模拟和优化设计的应用示范,展示 E 级计算机对大型流体机械及能源技术装备核心技术自主化的支撑能力。

(二)项目各任务(课题)内容

逐项分段说明各任务(课题)的研究目标、主要研究内容、拟解决的重大科学问题或关键技术、考核指标及评测手段/方法等。每个任务(课题)限3000字以内。

1、课题 1: 大型流体机械复杂流动的精细建模及高可扩展并行算法

1) 研究目标

针对大型流体机械节能优化设计和精确性能预测对E级并行计算软件的需求,重点解决大型流体机械真实几何和真实流动的精细建模及其高效高精度高扩展性基础并行算法问题。建立适合于大型流体机械复杂流动的LES模型、LES/URANS模型和LES/LBM模型;提出大型流体机械LES模型的高效高精度高扩展性基础并行算法,及其面向E级计算机的"分层并行、混合异构"高扩展性并行模型;形成大型流体机械多参数并行优化设计模型及高效高维全局优化求解方法;构建能够评估流体机械不同层次的流动模型和计算方法的技术成熟度模型,并结合典型流体机械的高保真实验数据,验证LES模型和基础并行算法的预测特性;研发适合于混合异构并行计算机的节点级专用算法库,为研制大型流体机械大规模并行计算软件提供算法支撑。

2) 主要研究内容

(1) 流体机械复杂流动的精细模型

为实现 LES 对流体机械复杂真实内流的精细刻画,研究囊括叶根倒角、叶顶间隙、轮盘空腔和密封等细微流区在内的流体机械真实几何模型、区域分解方法和网格生成技术;研究适合于湍流及转捩流动、在近壁区具有自适应耗散特性、健壮性强且易于实施并行计算的亚格子模型;标定适合于流体机械旋转、弯曲和逆压流动特征的模型系数;研究亚格子模型与不同数值求解格式的匹配特性。

为解决 LES 对壁面内层网格的高敏感性问题,同时降低 LES 的计算量,基于显式时间过滤思想,研究适用于流体机械内流模拟的 LES/URANS 混合模型,评估混合模型对降

低近壁区网格密度依赖程度的有效性; 研究混合模型对流体机械附着和分离流动的预测特性。

基于 LBM 在处理复杂边界和两相界面的优越性及其内在并行机制,结合空间过滤思想,构建泵内复杂空化流动的 LES/LBM 模型,实现对旋转坐标系下气液两相粘性流动的介观描述;利用 LES/LBM 模型对泵内空化流动的精确预测结果,测试并发展适合于泵内空化流动的宏观汽蚀预测模型,为研究泵内汽蚀现象提供高效高精度流动模型。

(2) 高效高精度基础并行算法及其高可扩展性方法

针对流体机械真实内流的宽频带特性,研究不同空间重构格式在波数空间内的耗散与频散误差性质,提出适合于高速压缩机跨音速流动的耗散可控、高激波分辨率的对流通量分裂格式,研究空间离散格式对 LES 湍能谱的捕捉能力;探讨高阶紧致格式、保熵格式等先进数值方法对流体机械高精度计算的适用性;结合时间谱方法的高精度优势和有限体积法对复杂几何区域的适应能力,发展时间谱-空间有限体积法离散方法,研究其在求解流体机械 LES/URANS 流动模型的预测特性;针对流体机械特有的动/静叶片排交替排列的特性,基于滑移网格法和非匹配型界面网格法,提出适用于大规模并行计算、能够同时满足质量、动量和能量守恒的动/静交接面高效高精度处理方法;为进一步提高区域分解算法的收敛速度,研究 Schwarz 方法的 Robin 型过渡条件实现方式,为高效并行计算奠定算法基础。

为保证大型流体机械基础并行算法的 E 级可扩展性,研究大型流体机械非定常流动计算的几何、数学和数值模型的多层并行体系,重点突破大型流体机械的多样机、多叶片排、多叶道、多区域、多维的多层几何结构到高性能计算机系统、机柜、节点、处理器核、专用加速众核的多层逻辑架构上的映射技术;提出大型流体机械"分层并行、混合异构"的 E 级可扩展性模型及其优化技术。

(3) 大型流体机械多参数并行优化设计方法

为攻克大型流体机械优化设计面临的"维数灾难",深入挖掘多参数优化问题中数学模型、多目标优化算法的内在并行性,建立高维高效全局并行优化求解方法;研究流体机械复杂流道的精确灵活的几何参数化表征模型、适合于不同流动模型的全自动网格生成方法;研究高维高效代理模型方法,探究流场特性与几何参数的内在关联;将流体机械非定常流动的并行求解策略移植到伴随场变量的求解中,建立局部精确寻优的并行伴随优化方法,形成"全局快速定位、局部精确寻优"的多参数并行优化设计方法。

(4) 流体机械精细建模和高精度算法的技术成熟度模型及实验验证

为确保流体机械流动精细模型和高精度算法的有效性,开展典型流体机械包括 1.5 级轴流压气机、离心压缩机模型级、混流泵水力模型内部流动的详尽测量,为模型和算法验证提供高保真流场实验数据;根据流动模型和并行算法对流场细节的捕捉程度,建立适合于评估模型和算法的从宏观外特性数据、时均量、湍流量到高阶时空相关量的分级技术成熟度模型,为评估和完善流体机械并行 LES、LES/URANS、LES/LBM 模型和方法提供依据;提出基于高精度流场计算结果的性能预测模型。

3) 拟解决的重大科学问题或关键技术问题

(1) 适合于 LES 的高精度并行算法及实验验证

流体机械内部非定常流动现象异常复杂,包括旋转失速、时序效应、叶片-尾迹相干、尾迹涡脱落、湍流等,并在时空维度均具有宽频带特征,同时,高转速压缩机的高马赫数会使叶道内产生激波等流场间断,LES 旨在实现对该跨尺度、宽速域流动的高精度模拟,故对数值离散格式的精度和并行性能提出极高要求;此外,随着计算规模达到数十万处理器核,模拟流场细节逐步逼近真实物理流动,如何全面客观衡量流动模型和数值方法的准确性和可靠性就显得非常重要了。为此,须研究具有自适应耗散特性且插值模版长度适中的高效并行算法,及其技术成熟度模型,全面衡量流动模型和并行算法对流体机械精细化计算的有效性。

(2) 大型流体机械高扩展性并行计算模型

大型流体机械呈现多叶片排、多叶道、多区域、多维的分层几何特征,且数值计算所需网格数目庞大,故须发展针对多网格、多方程的高效、高可扩展性并行算法,并结合 E 级计算机的系统、机柜、节点、处理核和专用加速众核的多层次逻辑架构,提出"多层并行、混合异构"大规模并行计算模型,为大型流体机械的 E 级计算提供高性能基础算法。该并行计算模型的映射方案如图 3 所示。

(3) 高维高效全局并行优化求解方法

大型流体机械的优化设计是一个典型的高维优化问题,面临"维数灾难",采用常规的优化求解算法已难以保证优化结果的精准性。基于并行求解思想,将高维优化问题进行降维分组,分配给多个并行处理器进行处理,是求解高维优化问题的有效途径。为此,研究高效并行的降维方法与协同自主的迁移策略,深入挖掘多参数优化问题中数学模型和多目标遗传算法的内在并行机制,是从根本上解决"维数灾难"、确保全局优化

精度与效率的关键。

4) 考核指标及评测手段/方法

约束性指标包括:

(1) 开发出并行 LES、LES/URANS、LES/LBM 的节点级专用算法库,支持混合异构并行计算功能。

预期性指标主要包括:

- (2) 授权或申请发明专利 2 项;
- (3) 登记软件著作权 1 项;
- (4) 发表学术论文 20 篇, 其中 SCI 收录 10 篇;
- (5) 出版专著1部:
- (6) 培养博士生 6 名、硕士生 12 名:
- (7) 培养优秀青年教师和博士后3人。

评测方式/方法:

- (1) 专用算法库的功能由第三方具有软件检测资质的机构出具;
- (2) 发明专利考核方法是授权书或实质审查通知书复印件;
- (3) 软件著作权考核方法是登记证书或申请书复印件:
- (4) 论文考核办法是论文首页或录用通知书、致谢页复印件;
- (5) 专著教材考核方法是正式出版物的封面及目录复印件;
- (6) 研究生培养指标考核方法是学位论文封面、致谢页复印件;
- (7) 优秀青年教师及博士后培养指标考核方法是人才支持计划证明材料、职称证书、博士后进站通知书等复印件。

5)参加单位任务分工

课题牵头单位: 西安交通大学

课题参与单位:中国科学院工程热物理研究所,江苏大学,兰州理工大学课题负责人:张楚华

课题骨干: 席光,何银年,毛义军,宫武旗,刘小民,李国君,王娴,张宏武,刘 厚林,张人会

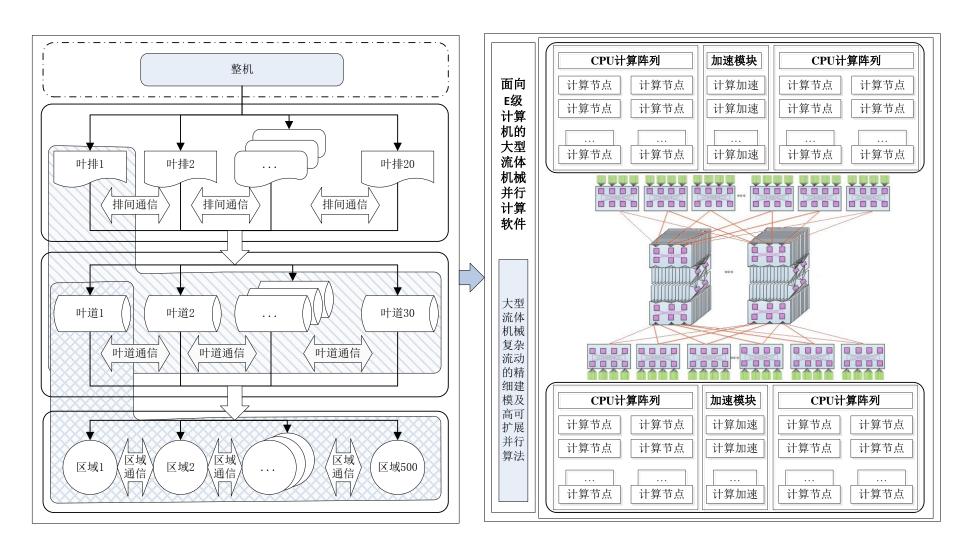


图 3 大型流体机械"多层并行、混合异构"并行计算模型及映射方案

2、课题 2: 面向 E 级计算机的大型流体机械并行计算软件研制

1) 研究目标

针对大型流体机械 E 级高可扩展性并行计算的问题,为提高并行软件的可扩展性,以 MPI+OpenMP 为主、结合加速处理单元的混合并行编程模型,研究面向 E 级计算机的 多层次异构并行软件框架,提出大型流体机械并行计算模型的弹性映射方案、层间自聚 类通信模型、层内自感知资源分配方法,通过分析大型流体机械不同计算模型的数据特性,验证并行软件框架的高可扩展性;开发基于向量化、层次化缓存数据分块、计算与通信重叠、数据复用等优化技术,实现并行软件的高效能;在此基础上,制定大型流体机械并行软件各模块间接口规范,实现各模块松耦合、高内聚集成,研制出具有完全自 主知识产权的大型流体机械 E 级并行计算软件。

2) 主要研究内容

(1) 面向 E 级计算机系统的多层次可扩展异构并行软件框架

针对大型流体机械真实流动高保真模拟方法、流体机械真实流道的高质量网格生成方法及其高效高精度可扩展并行算法的特点,结合 E 级超级计算机系统呈现出的多层嵌套和异构加速的典型特征,研究面向 E 级系统,能够表达大型流体机械真实流动精细模型及其高效高精度可扩展并行算法的并行性、数据局部性,能够支持动态细粒度并行性、支持自动计算资源感知、分层弹性映射、多层次协调通信、综合能效优化的多层次可扩展异构并行计算软件框架。

(2) 面向 E 级计算机系统的分层弹性映射

结合 E 级系统架构异构特征及大型流体机械真实流动预测模型的应用特点,研究能自适应于计算任务并行粒度、能深度开发应用任务和数据级并行性、能充分利用 E 级计算机系统节点间、节点内处理核之间、处理核和加速核之间多级计算资源的分层弹性可扩展映射方案。研究计算节点内不同层次存储架构的粗细粒度分块并行任务的有效映射机制;研究并行程序中嵌套循环结构的多级分块与高性能计算机节点的层次存储系统的映射关系,挖掘多级访存架构的性能优势;针对不同层次存储资源映射的任务提取合适的并行粒度,提高多级循环分块的访存效率和并行性能。

(3) 面向 E 级系统大型流体机械真实流动应用特点的动态能效优化

结合大型流体机械真实流动应用特点和 E 级系统存储架构特征,研究能够支持动态 细粒度并行性,能够充分利用 E 级系统不同层次异构计算资源,支持不同层次计算单元 间低交互、优化数据传输、并移除全局同步、高效异构协同的不同计算节点及不同处理

核之间多层次的高效通信机制,降低系统内的数据传输及通信开销;研究基于向量化、层次化缓存数据分块、计算与通信重叠、多级循环分块、数据复用等优化技术,保证并行软件的高计算效能。在以上优化策略的基础上,研究面向 E 级系统大型流体机械并行应用软件的综合能效优化机制,通过局部性感知,从负载均衡、访存、通信、能源管理等方面进行系统优化,实现计算性能最大化并降低能耗。研究面向 E 级系统故障感知的可扩展性错误检测机制,当检测到单个节点或互联网络失效时能及时借助并配合 E 级系统本身的容错机制保证应用向大规模计算节点扩展时系统的可用性。

(4) 基于大型流体机械真实流动精细模型的并行算法库

研究大型流体机械真实流动精细模型中具有不同应用特点的典型核心算法及数值 代数等共性问题的抽取方法,针对核心算法及数据代数的不同特点进行针对性优化和并 行化,并将其封装成完整的核心函数库。开发接口规范、易于扩展、性能良好的算法库, 从而提高程序开发效率并保证核心计算任务的性能。

(5) 大型流体机械高可扩展并行计算软件前后处理

针对大型流体机制并行计算处理流程,设计用于复杂几何建模、区域分解、大规模 网格生成的前处理模块,及用于数值模拟的数据集分析及可视化的后处理模块。通过定制并行软件各模块间接口规范,实现应用软件求解模块与前后处理模块的无缝对接,并 在此基础上,实现各模块松耦合、高内聚集成,定制应用软件的前后处理用户界面,提 升软件的易用性。

3) 拟解决的重大科学问题或关键技术问题

(1) 面向E级系统大规模并行可扩展分层弹性映射机制

如何针对E级系统,设计出能够表达大型流体机械真实流动计算应用的任务及数据并行性、数据局部性,能够动态感知计算资源的分层弹性映射机制,是确保E级并行应用可扩展性的基础。通过设计结合MPI、OpenMP和专用加速设备编程方法的混合编程模型,充分利用节点间、节点内处理核之间、处理核内计算核之间多级并行,深度开发应用的任务和数据级并行性;针对E级系统,整合分层任务管理机制与计算任务划分方法,研究合理的任务划分机制,使E级系统不同层次级别的计算核资源高效协同计算,提高数据局部性,以高效执行更高级别的细粒度并行任务。从任务划分及任务到计算单元的映射层面为实现大规模并行软件可扩展性提供支撑。E级并行软件的逻辑框架见图4。

(2) 面向 E 级系统大规模并行多层次协同通信优化机制 如何针对 E 级大型流体机械真实流动模型的并行应用设计出多层协同通信的机制,

将对整个E级系统大型流体机械真实流动并行应用的计算性能起决定性的作用,也将最终决定大型流体机械并行软件能否达到E级可扩展性规模的要求。为此,须设计能够支持动态细粒度并行性,能够充分利用E级系统不同层次异构计算资源,支持不同层次计算资源间低交互、高效异构协同的不同计算节点及不同处理核之间多层次的通信优化机制,以实现系统内高效的数据传输,缓解大规模并行时的通信瓶颈问题,从信息交互层面为实现大规模并行软件的可扩展性提供支撑。

(3) 面向 E 级系统大规模并行可扩展的负载平衡机制

在E级系统的大规模计算中,可能会需要十亿级的计算并发性和系统各层级的激进并行性。在算法和平台的各个层次结构维持负载平衡是高效执行的关键,在用加速设备组建的异构并行超级计算机系统中,通用CPU是多核结构,加速设备通常是众核架构,两者在单核计算能力、整体性能等体系结构特征方面存在很大区别,如何合理划分任务和负载,如何实现负载均衡,使得应用能够实现高效的多节点多设备并行计算是极其复杂的问题。因此,需要研究自我感知资源分配的动态自适应运行时机制,实现动态优化,以容忍算法中的不平衡,同时能动态处理硬件性能和可靠性的变化。

4) 考核指标及评测手段/方法

约束性指标包括:

- (1) 并行软件系统部署在国家高性能计算环境的超级计算机上;
- (2) 以万核为基准的并行效率在60万处理器核规模达到30%。

预期性指标主要包括:

- (3) 授权或申请发明专利 2 项:
- (4) 软件著作权登记 2 项;
- (5) 发表学术论文 13 篇, 其中 SCI 收录 8 篇;
- (6) 培养博士生3人、硕士生8人。

评测方式/方法:

- (1) 软件的部署及使用情况由国家高性能计算中心出具证明材料;
- (2) 软件的并行效率由专业软件性能评测机构出具:
- (3) 发明专利考核方法是授权书或实质审查通知书复印件;
- (4) 软件著作权考核方法是登记证书或申请书复印件;
- (5) 论文考核办法是论文首页或录用通知书、致谢页复印件:
- (6) 研究生培养指标考核方法是学位论文封面、致谢页复印件。

5) 任务分工

课题牵头单位: 西安交通大学

课题参与单位:中山大学

课题负责人: 张兴军

课题骨干:相明,魏恒义,刘海湖,孙中国,张曦,吴贺俊

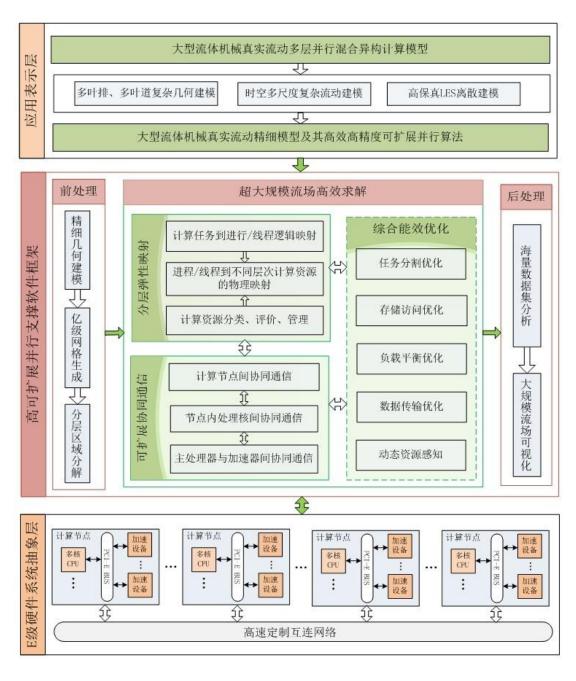


图 4 大型流体机械并行软件框架

3、课题 3: 大型流体机械并行软件的应用示范

1) 研究目标

针对大型流体机械节能优化设计及高精度数值模拟的行业重大需求,突破多参数并行优化设计模型与大型并行计算软件的耦合技术;在国产 E 级计算机上,完成 10 级流体机械 LES 流动模型的 60 万核并行计算与实验验证;实现并行软件在国产首套 10 万等级空分压缩机优化设计、国内唯一 2.4 米连续式跨音速风洞压缩机高精度模拟、第三代核主泵水力模型优化设计的示范应用。研究成果有效支撑国产超大型空分装置、超大型风洞、大型核电站等能源技术重大装置中的大型流体机械研发,充分展示高性能计算对国家重要行业自主创新的支撑能力。在大型流体机械 LES 的 E 级并行计算方面处于国际先进水平。

2) 主要研究内容

(1) 10 级压缩机高精度数值模拟与软件性能的实验验证

基于研制的大型流体机械真实流动并行计算软件,在国家高性能计算环境的超级计算机上对国产首套 10 万等级空分装置用 8 级轴流+2 级离心压缩机内部非定常可压缩流动开展全通道高精度大涡数值模拟,测试并行计算软件的加速比和并行效率; 研究海量流场计算数据的快速提取和特征分析方法; 计算压缩机整机、各段、各级在多工况点的气动布局、多变效率和压比; 研究段间、级间、动静叶排间非定常流动的相互影响机制,叶片排间时序效应、旋转失速先兆特征及叶道内的拟序结构和叶片尾迹区湍流能谱特性; 研究叶顶间隙、角区、叶片前后缘、腔体等细微几何部位非定常流动的产生、发展和演变; 根据计算所得的通流部件损失参数,完善现有压缩机性能损失模型; 调试性能测试系统并对该套 10 级压缩机开展性能测试,验证并行计算软件的预测精度。

(2) 10 万等级空分压缩机节能优化设计示范

针对上述 10 万等级空分压缩机装置的紧凑化设计需求,开展 6 级轴流+1 级离心压缩机的气动优化设计示范研究。重点突破多参数并行优化设计模型与大型并行计算软件的耦合技术,建立面向大型流体机械的多层嵌套式并行优化设计系统;建立 7 级压缩机优化设计命题,包括各排叶片子午型线空间解析几何模型、轴流叶片弯、掠、扭规律、离心叶轮进出口倾斜角等的几何参数化表征,及与压缩机非定常气动性能及流场特性评估指标相关的多运行工况点、多目标函数、多约束条件的选取;分析优化设计结果,提炼大型压缩机紧凑化设计准则。

(3) 2.4 米连续式跨音速风洞压缩机高精度数值模拟示范

针对国内唯一 2.4 米跨音速风洞 4 级主压缩机的计算研究需求,对其内部非定常可压缩流动开展高精度数值模拟示范研究。计算风洞测试段马赫数在 0.15-1.6 区间变化时,主压缩机在进口总压 (0.2bar、1.0bar、2bar、3bar、4bar)与进口总温 (293K、310K、333K)相互组合的 15 种进口条件下的多变效率和压比曲线;通过对主压缩机的简化单通道模型、全通道模型的高精度数值模拟,研究该超大型跨音速风洞压缩机在低总压、低雷诺数、宽调节运行工况下特有的复杂非定常流动现象;将数值计算结果同实验数据进行对比,评估所研制的并行计算软件的通用性、精确性和可扩展性。

(4) 第三代核主泵节能优化设计示范

针对国内在第三代核主泵自主研发中面临的技术瓶颈,基于研制的并行优化设计系统,开展第三代核主泵水力模型的优化设计示范研究。建立适用于第三代核主泵的全工况优化设计命题,包括混流式叶轮、径流式导叶、环形腔结构泵壳等的精细几何参数化表征,及与核主泵水力特性评估指标相关的多运行工况点、多目标函数、多约束条件的选取;探究影响核主泵效率、扬程、二次流、分离流、环量流、非定常脉动等的关键几何因素;提出核主泵动静叶匹配、导叶与泵壳匹配的设计准则;对优化前后的核主泵水力模型进行实验加工与性能测试,评估并行优化设计系统的有效性和先进性。

3) 拟解决的重大科学问题或关键技术问题

(1) 多参数并行优化设计模型与大型并行计算软件的耦合技术

大型流体机械的几何设计变量规模庞大(数目高达数百个),加之其内部流动异常复杂,使得基于 CFD 流场分析的优化设计面临成本、效率和精度的多重考量。为此,将并行计算软件嵌入多参数并行优化设计模型中,利用并行计算软件对多目标遗传算法的历代种群或高维代理模型训练样本进行性能评价,建立集参数化建模、网格生成、并行CFD 计算与并行优化求解于一体的大型流体机械多层嵌套式并行优化设计系统; 为充分、合理利用高性能计算资源,研究各层并行计算格式在高性能计算机系统、机柜、节点、处理核、专用加速众核的多层逻辑架构上的映射方案。研究成果有望在大型流体机械并行优化设计方法方面取得突破性进展。多参数并行优化设计模型与并行计算软件的耦合模型如图 5 所示。

(2) 大型跨音速风洞压缩机高精度数值模拟

国内唯一 2.4 米跨音速风洞主压缩机的转子外径约为 5.6 米,最大容积气量为 550 万 m³/h,属于超大型非常规流体机械。该压缩机在低总压宽调节运行工况下,叶片表面呈现出类似于高空低密度气体条件下的流动状态,具有低雷诺数、超大特征尺度及小尺

度流动共存等复杂流动特征,要真实模拟其内部流场,对湍流模拟方法及计算资源提出了很高的要求,利用传统的商用 CFD 软件及目前国内现有的常规并行 CFD 计算平台已不能满足这种计算需求。为此,基于研制的大型流体机械真实流动并行计算软件,对该压缩机内部特有的非定常流动进行高精度数值模拟,为超大型风洞试验段气流品质的精确控制和调节提供高精度流场数据。

4) 考核指标及评测手段/方法

约束性指标包括:

- (1)实现 10级流体机械大涡模拟(LES)流动模型的大规模并行计算,设计工况下的流量、压比、效率预测精度在 1%以内,调节工况下的预测精度在 2%以内,计算精度达到国外同类软件水平;
- (2) 并行软件系统在国产首套 10 万等级空分压缩机优化设计、国内唯一 2.4 米连续式跨音速风洞压缩机高精度模拟、第三代核主泵水力模型优化设计中获得示范应用。

预期性指标主要包括:

- (3) 授权或申请发明专利 2 项;
- (4) 登记软件著作权 1 项;
- (5) 发表学术论文 12 篇, 其中 SCI 收录 5 篇;
- (6) 培养研究生 5人。

评测方式/方法:

- (1) 软件的并行精度由具有国家风机性能检测资质的单位出具;
- (2)软件在产品研发中应用情况的考核办法为专家验收会形式或者用户实测报告, 其中验收或者实测报告结论中体现软件对产品研发的支撑度,产品关键性能指标及其在 国内外同领域所处的水平;
 - (3) 发明专利考核方法是专利授权书或实质审查通知书的复印件;
 - (4) 软件著作权考核方法是登记证书或申请书复印件:
 - (5) 论文考核办法是正式发表论文首页或录用通知书、致谢页复印件;
 - (6) 研究生培养指标考核方法是学位论文封面、致谢页复印件。

5) 任务分工

课题牵头单位: 沈阳透平机械股份有限公司

课题参与单位:西安交通大学,中国航空工业集团公司沈阳空气动力研究所,沈阳 鼓风机集团核电泵业有限公司 课题负责人:张勇

课题骨干: 孙玉莹,姜大任,郑志国,卢傅安,谭佳健,琚亚平,钱战森,史万里, 孙世文,仲作文

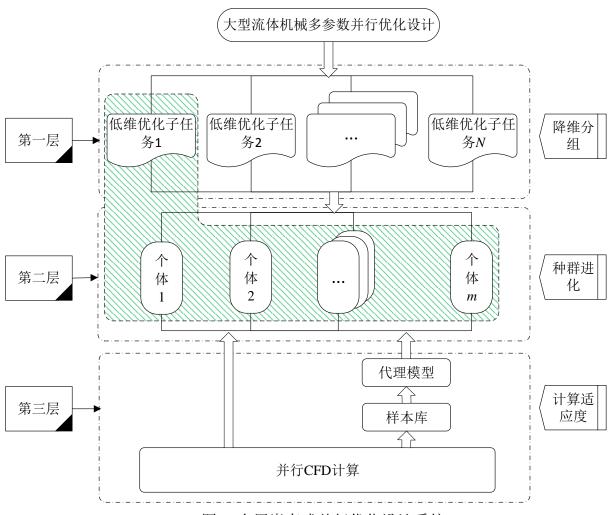


图 5 多层嵌套式并行优化设计系统

四、主要创新点

围绕基础前沿、共性关键技术或应用示范等层面,简述项目的主要创新点。每项创新点的描述限 500 字以内。

创新点 1: 大型流体机械非定常流动 LES 的高可扩展并行模型

针对大型流体机械多叶片排、多叶道、多区域、多维的分层几何特征,以及多网格、多方程的高效高精度并行算法,结合 E 级计算机系统、机柜、节点、处理核和专用加速 众核的多层次逻辑架构,提出适合于大型流体机械"多层并行、混合异构"的大规模并行计算模型,有效解决大型流体机械精细流动模型的高效高精度并行算法在 E 级计算机

上的可扩展问题。

创新点 2: 面向 E 级计算机的大型流体机械高可扩展并行计算软件设计方法

针对大型流体机械复杂流动的高可扩展并行计算模型,提出适合于 E 级计算机大规模并行计算"分层弹性映射、层间协调通信、层内动态优化"的高可扩展并行软件框架,有效解决大型流体机械并行软件在 E 级计算机上的可扩展问题。

创新点 3: 国产首台套 10 万等级空分压缩机的多参数并行优化设计技术

10 万等级空分压缩机的精确几何描述需要数百个独立设计参数,其优化设计涉及的 CFD 计算量急剧上升,导致业界普遍面临维数灾难的问题。为解决该技术难题,提出大型流体机械"全局快速定位、局部精确寻优"的多参数优化设计模型及其与国产大型 CFD 并行软件紧密结合的自动优化设计方法,有效提高优化设计的精度和效率,确保优化设计产品的技术先进性。

五、预期经济社会效益

项目的科学、技术、产业预期指标及科学价值、社会、经济、生态效益。限 1500 字以内。

流体机械内部流动本质上为三维非定常粘性流动,其复杂性主要表现在湍流脉动、 尾缘涡脱落、尾迹一叶片相互干扰、颤振、时序效应、旋转失速、喘振及瞬态工况等宽 广变化范围内的非定常流动结构,其中,从最小的湍流脉动结构,到最大的瞬态工况流 动结构(发生在起动、停机、调节、进口畸变等动态过程)的时空尺度跨越 5-6 个数量 级,这些复杂流动结构以不同的时空尺度相互耦合和激励,遵循着不同的发展规律,构 成了流体机械特有的流动现象和丰富的科学内涵。实验测量尤其是在旋转失速、喘振及 瞬态工况下的流场数据,仍具有代价高、风险大、不可测因素多等局限性。项目研发大 型流体机械 LES 模型的 E 级并行计算软件,对深刻认识流体机械内部复杂流动现象具有 重要的科学意义。

流体机械的节能水平与内部流动分析手段密不可分,按照计算量从小到大,流体机械内部流动模型先后从早期的流道平均一维方法,叶栅/子午流道的二维方法,两类相对流面理论的准三维方法,全三维粘性流动方法,发展到目前处于学术前沿的多级三维非定常粘性流动方法。相应地,以典型离心压缩机级的多变效率为例,采用一维模型仅为 70%左右,准三元流设计理论可达到 80-82%左右,全三维粘性流动方法可提高到 83-85%左右,预计三维非定常粘性流动方法可高达 86-87%左右。项目开发出的基于流体

机械非定常粘性流动并行计算软件的优化设计系统,对提高流体机械节能设计及关键共性技术水平具有重要的应用价值。

经过 60 多年的发展,我国流体机械行业已初步形成集教学、科研、设计、制造、成套服务等门类齐全、规模庞大的生产体系。目前,制约我国大型流体机械自主化水平大幅度提高的关键因素是缺乏可靠的模型数据及大规模流动分析软件,产品节能减排与安全可靠运行水平与国外先进技术还存在差距,甚至在一些重要领域的大型流体机械还高度依赖于进口。以超大型空分装置为例,国产 10 万等级空分设备尚无实际运行业绩,我国"十三五"期间需要 8-10 万等级超大型空分装置 100 多套,总投资额 200 多亿元。项目成果对自主研发大型流体机械装置、促进行业技术自主创新具有重要的行业带动作用。

同时,基于高精度大规模并行模拟结果的现代优化设计技术将打破国外对大型流体机械核心技术的垄断局面,使新研制产品的流动效率普遍提高 3%,具有重要推广价值。按每年在 200 套大型流体机械(平均功率 6000kW)的应用,每年可节省 3 亿度电力。对保障能源技术重大装备自主化、推动节能减排的顺利实施具有重要的经济效益与社会作用。此外,研究成果对高性能计算软件编程与性能优化技术基础理论问题的解决,对整个计算机行业及应用领域都有技术参考价值。

第四部分 进度安排

包括项目主要研究任务的研发进度、年度及重点节点("里程碑")安排、中期目标等。鼓励重大共性关键技术和应用示范研究类项目,采用甘特图等图表细化描述,限 2000 字以内。

项目年度研究任务、预期目标如表 5 和图 6 所示。总体来讲,在中期检查前主要完成基础并行算法设计、专用算法库开发、算法精度验证、软件框架设计等基础性研究任务,在中期检查后在 E 级计算机上完成并行软件能力型计算示范及优化设计应用等。

表 5 年度进展表

年度		研究任务		预期目标	
	1	发展流体机械复杂流道的几何	1	掌握流体机械复杂流道的网格生成	
2	参数化表征模型和网格自动生成技		和区	区域分解方法;	
$\begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$	术;		2	形成流体机械复杂流动的 LES 模型	
1	2	标定适合于旋转、弯曲和逆压流	及非	其高精度计算格式;	
6	动的	勺亚格子模型系数;			
年	3	研究 LES 模型的高阶空间重构			
	格式;				
	1	发展时间谱-空间有限体积法;	1	提出动静交接面的高精度处理方	
	2	研究滑移网格法和非匹配型界	法;		
	面网格法;			提出适用于大型流体机械大规模并	
	3	研究 Robin 型内界面条件及其	行计	十算的动/静交接面及内界面的高效	
2	特性;		高精度处理方法;		
0	4	研究基础并行算法的并行性、数	3	形成多层次可扩展异构并行软件框	
1	据局部性;		架;		
7 年	5	研究并行计算软件框架;	4	建立高维高效全局并行优化求解方	
' -	6	挖掘多参数优化问题数学模型、	法;		
	多目	目标优化算法数值模型的内在并	(5)	发表论文10篇,申请发明专利2项;	
	行性	± ;	6	培养硕士5名;	
	7	发展高维高效代理模型;			

年度	研究任务	预期目标				
	① 研究 LES/URANS 混合模型及预	① 提出适合于流体机械高效计算的				
	测特性;	LES/URANS 及 LES/LBM 混合模型;				
	② 研究泵内汽蚀流动的 LES/LBM	② 掌握大型流体并行计算方法到高性				
	模型,利用预测结果和实验数据,完	能计算机异构并行系统上的映射技术;				
	善泵内汽蚀流动的宏观预测模型;	③ 建立流体机械内流模型和计算方法				
	③ 分析高阶紧致格式、保熵格式等	的技术成熟度模型,为全面评估数值模				
	先进格式对流体机械高精度计算的	拟结果的可靠性提供依据;				
2	适用性;	④ 形成面向 E 级计算机的分层弹性映				
0	④ 研究大型流体机械非定常流动	射;				
1	计算的几何、数学和数值计算模型的	⑤ 发表论文 10 篇,申请发明专利 2 项,				
8 年	多层并行体系;	申请软件著作权 1 项;				
度	⑤ 建立 1.5 级轴流压气机、离心压	⑥ 培养博士后1名,博士3名,硕士6				
	缩机模型级、混流泵水力模型内部流	名;				
	动测量台位;	⑦ 项目中期报告;				
	⑥ 开发多级计算资源的分层弹性					
	可扩展映射方案;					
	⑦ 10级压缩机的气动性能实验测					
	量;					
	⑧ 项目中期总结,撰写中期报告;					

年度	研究任务	预期目标				
	① 发展基于控制理论的伴随优化	① 构建面向大型流体机械的多层嵌套				
	求解方法;	式并行优化设计系统;				
	② 获得 1.5 级轴流压气机和离心	② 提出大型流体机械"分层并行、混				
	压缩机模型级、混流泵水力模型内部	合异构"的 E 级可扩展性模型及其优化				
	流动的详尽测量数据,验证并行计算	技术;				
	软件的精度;	③ 掌握典型流体机械高精度并行计算				
	③ 优化数据传输模型,降低系统	及技术成熟度考证技术;				
	内的数据传输及通信开销;	④ 掌握 E 级系统动态能效优化技术;				
0	④ 研究并行计算软件的效能优化	⑤ 研制大型流体机械 E 级并行计算模				
$\begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$	技术;	块;				
1	⑤ 封装核心函数库,开发接口规	⑥ 实现 10 级流体机械大涡模拟(LES)				
9	范、易于扩展、性能良好的专用算法	流动模型的60万核并行计算,设计工况				
年	库;	下的流量、压比、效率预测精度在 1%以				
度	⑥ 开展 10 级压缩机的 60 万核能	内,调节工况下的预测精度在2%以内,				
	力型并行计算及软件精度和并行效	计算精度达到国外同类软件水平; 以万				
	率的实验验证;	核为基准的并行效率在60万核达到30%;				
	⑦ 开展 2.4 米连续式跨音速风洞	⑦ 完成并行软件在第三代核主泵的节				
	压缩机流场实验测量;	能优化设计示范;				
	⑧ 开展第三代核主泵节能优化设	⑧ 发表论文10篇,申请发明专利1项,				
	计;	申请软件著作权1项;				
		⑨ 培养博士后1名,博士3名,硕士6				
		名;				
2	① 完善大型流体机械精细流动模	① 提出大型流体机械"全局快速定位、				
0	型及其高效高精度高扩展性并行算	局部精确寻优"的多参数优化设计模型;				
2	法;	② 开发大型流体机械并行计算软件完				
0	② 设计用于复杂几何建模、区域分	整界面;				
年	解、大规模网格生成的前处理模块;	③ 完成并行软件在 10 万等级空分压缩				
度	③ 设计用于数值模拟的数据集分	机的节能紧凑化优化设计示范;				

年度	研究任务	预期目标				
	析及可视化的后处理模块;	④ 完成并行软件在 2.4 米连续式跨音				
	④ 通过定制并行软件各模块间接	速风洞压缩机的高精度数值模拟示范;				
	口规范,实现应用软件求解模块与前	⑤ 发表论文 15 篇,申请发明专利 1 项,				
	后处理模块的无缝对接;	申请软件著作权2项,出版专著/教材1				
	⑤ 开发各模块松耦合、高内聚集	部;				
	成、快速定制的应用软件界面,提升	⑥ 培养博士后2名,博士3名,硕士8				
	软件的可用性;	名;				
	⑥ 开展 6+1 大型空分压缩机节能	⑦ 全面实现预定的其他目标。				
	优化设计;					
	⑦ 开展 2.4 米连续式跨音速风洞					
	压缩机高精度数值模拟;					
	⑧ 开展第三代核主泵水力性能试					
	验;					
	⑨ 项目结题总结,撰写项目结题报					
	告。					

ID	任务名称	开始时间	完成	2016年 Q1 Q2 Q3 Q	2017年 4 Q1 Q2 Q3 Q4	2018年 Q1 Q2 Q3 Q4	2019年 Q1 Q2 Q3 Q4	2020年 Q1 Q2 Q3 Q4
	课题1	2016/7/1	2020/12/31	V				
1	流体机械复杂流动的精细模拟	2016/7/1	2018/6/30				LES模型的高	精度并行算法
2	基础并行算法及其可扩展方法	2016/7/1	2018/12/31					
3	多参数并行优化设计方法	2017/1/1	2018/12/31				技力	大成熟度验证
4	技术成熟度模型及实验验证	2018/7/1	2020/12/31					
	课题2	2017/1/1	2020/12/31					
1	多层次可扩展异构并行软件框架	2017/1/1	2017/12/31				1 E C + <-	· >1
2	并行软件的性能优化	2017/7/1	2018/12/31				LES弄打	计算软件 /
3	专用并行软件算法库	2018/7/1	2019/12/31					
4	并行软件前后处理	2019/1/1	2020/12/31		10级压缩机			
	课题3	2018/1/1	2020/12/31		60万核计算			
1	10级压缩机模拟与软件性能验证	2018/1/1	2019/12/31					
2	10万等级空分压缩机节能优化设计示范	2019/1/1	2020/12/31	大型泵水 力优化设	大型压缩机	优		
3	2.4米风洞压缩机模拟示范	2019/7/1	2020/12/31	计与示范	化设计与示	范		
4	第三代核主泵节能优化设计示范	2019/1/1	2020/6/30					

图 6 年度进展图