

«Отечественные CFD коды 2015»



Комплекс программ исследования линейной устойчивости конвективных течений

Ермаков М.К.

Институт проблем механики им. А.Ю.Ишлинского РАН

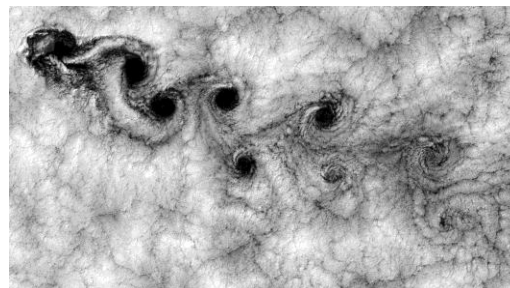
ermakov@ipmnet.ru

28-29 ноября 2015 г., ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, Москва

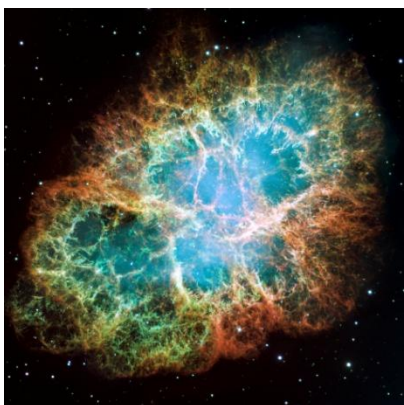
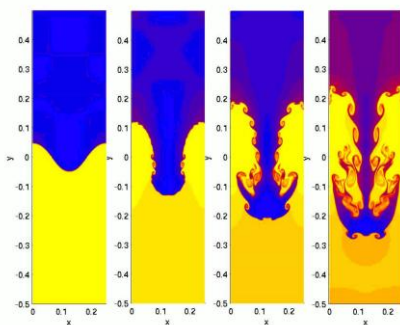
Конвективные неустойчивости



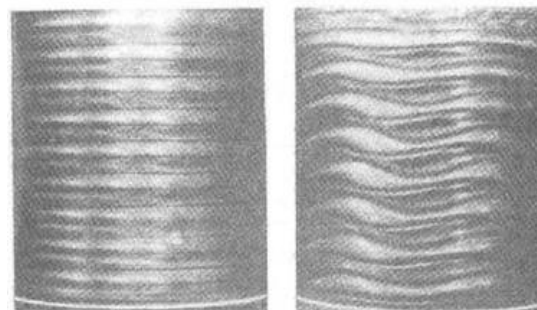
Неустойчивость Кельвина-Гельмгольца



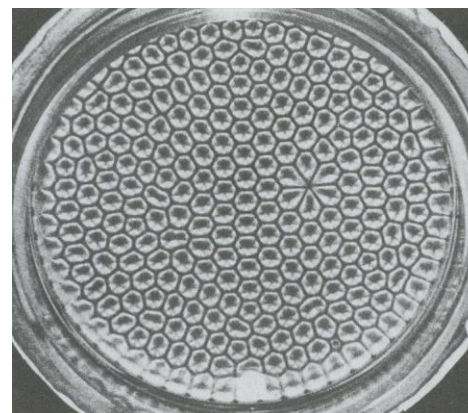
Дорожка вихрей Кармана вокруг острова



Неустойчивость Релея-Тейлора

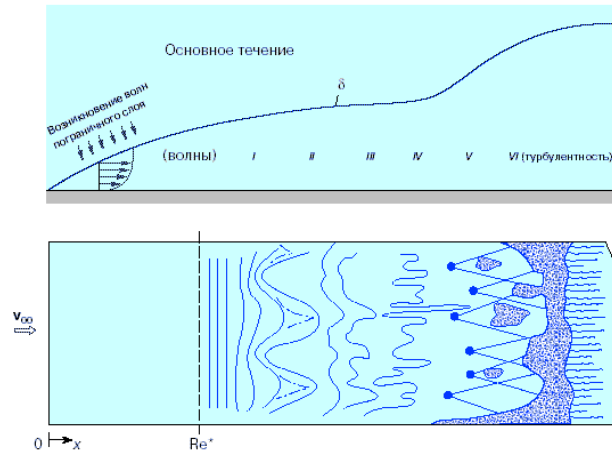


Неустойчивость Тейлора-Куэтта



Неустойчивость Релея-Бенара

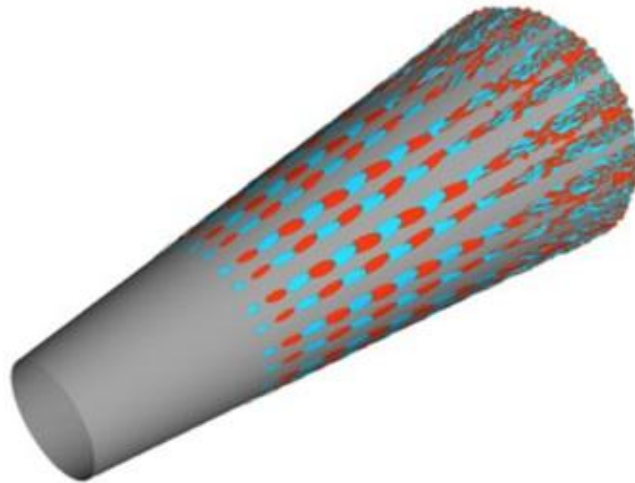
Пограничный слой, ламинарно-турбулентный переход



Пограничный слой на пластине:
волны Толмина-Шлихтинга,
альфа структуры



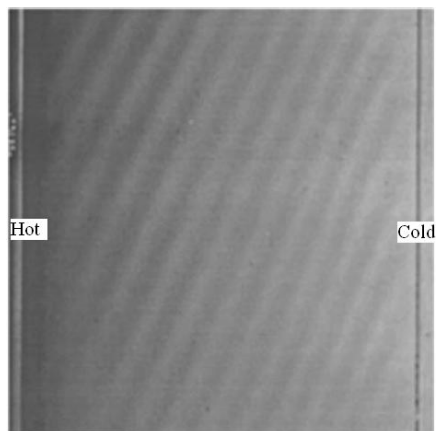
Горение в гиперзвуковом двигателе



Oblique breakdown on a 7 degree cone at Mach 3.56 initiated by azimuthal mode $k_c = 12$ and $F = 4.0 \times 10^{-5}$ at NASA Langley M3.5QT conditions.



Ламинарно-турбулентный переход в восходящей струе от горящей свечи



Неустойчивость Марангони

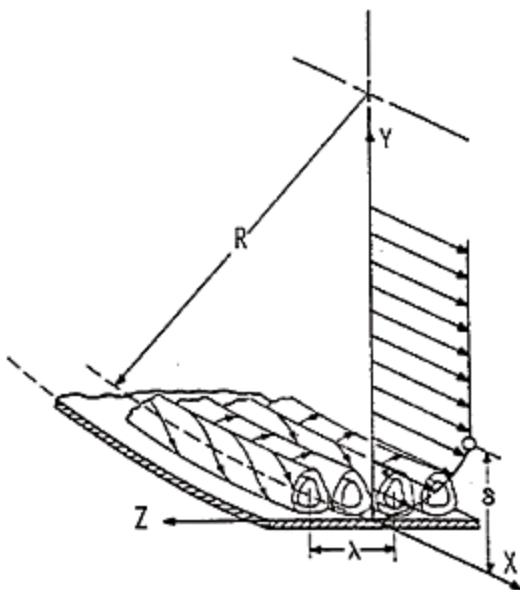
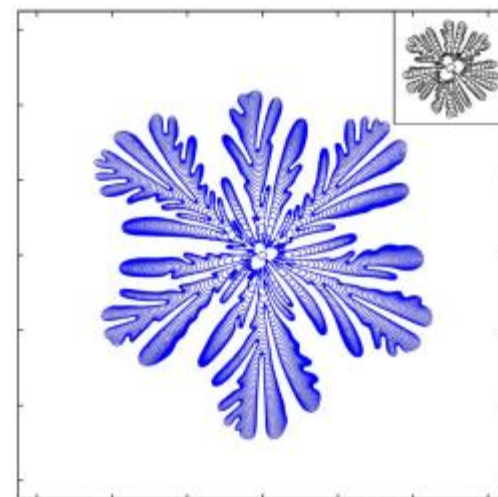


Figure 1. Görtler vortices over a concave wall.

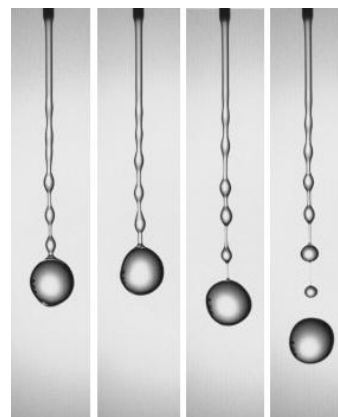
Centrifugal instability (Görtler instability)
И. Липатов, 1990



Морфологическая неустойчивость



Слоистые структуры в
стратифицированной жидкости



Неустойчивость Плато-Релея



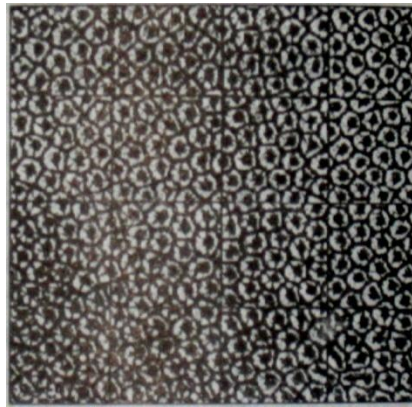
Эффект и неустойчивость Марангони



«Слезы вина», Марангони, 1855

$$\mu \frac{\partial V_{\tau}}{\partial n} = \sigma_T \frac{\partial T}{\partial \tau}$$

$$Pr = 0.01 \div 500$$



Подогрев снизу

Rigid walls: $Ra_{cr} = 1708$

Stress-free walls: $Ra_{cr} = 657.5 = \frac{27\pi^4}{4}$

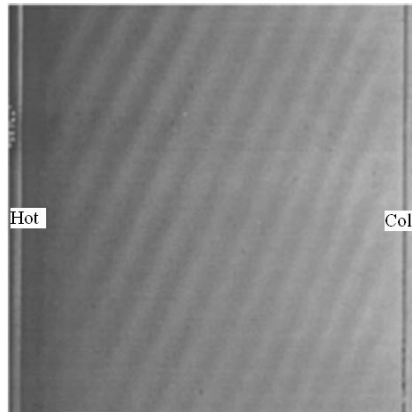
Polygonal convective cells in a thin layer 0.81 mm.

Original Bernard's photograph,
H. Benard, Les tourbillons cellulaires dans une
nappe liquide, *Rev. Gen. Sciences Pure Appl.*
11 (23) 1261-1271, **11** (24) 1309-1328 (**1900**).

$$Ra = \frac{g \beta \Delta T d^3}{\nu \alpha} \quad Ma = \frac{\sigma_T \Delta T d}{\rho \nu \alpha}$$

M. Block, *Nature*, **1956**.

J. Pearson, *J. Fluid Mechanics*, **1958**



Подогрев сбоку

Smith, Davis, *J. Fluid Mechanics*, **1983**

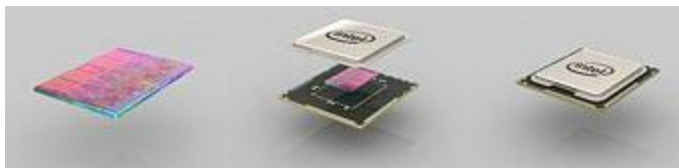
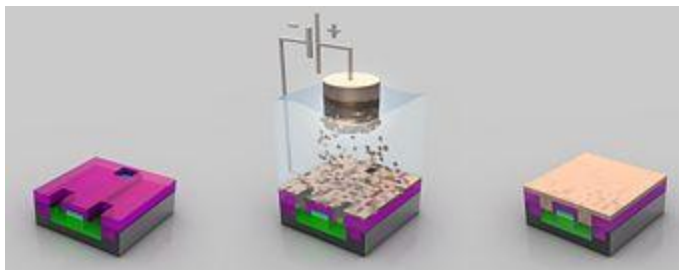
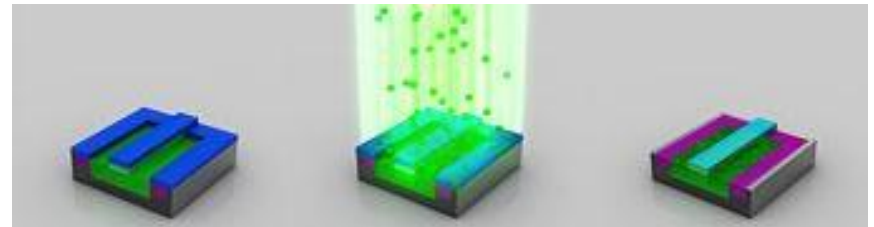
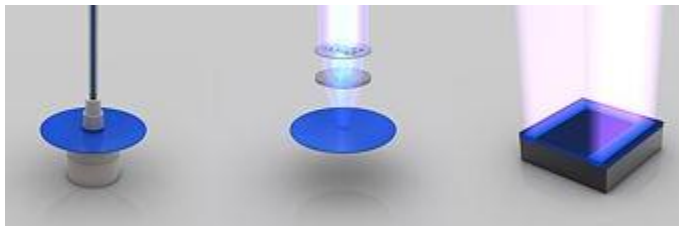
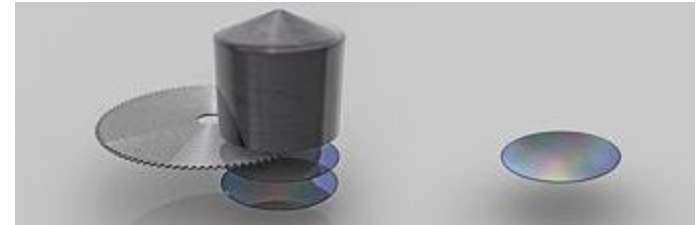
Условия теоремы Сквайра (1933) не выполняются

Более низкое качество кристаллов,
выращенных в космосе

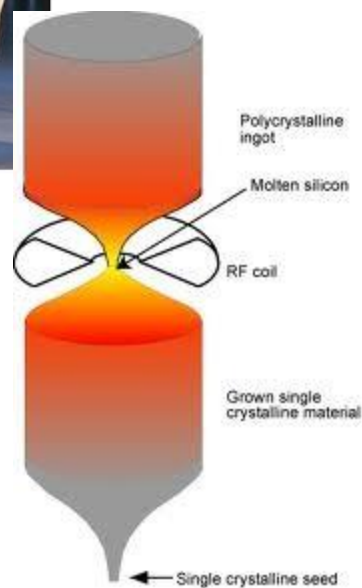
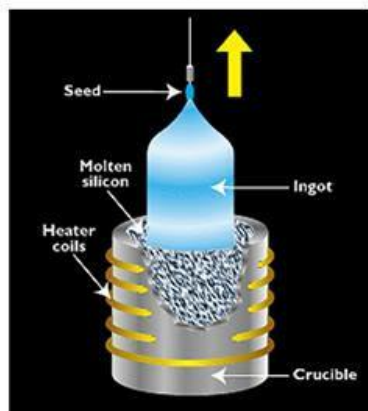
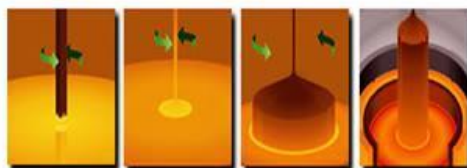
Эксперименты в космосе (смена направления
возмущений)

I. Ryzhkov, *Phys. Fluids*, **2011**

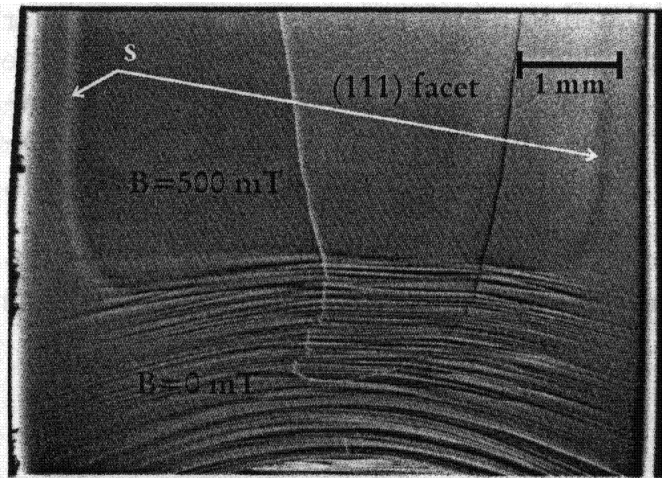
From Sand to Silicon “Making of a Chip” (Intel)



Методы Чохральского и плавающей зоны роста кристаллов

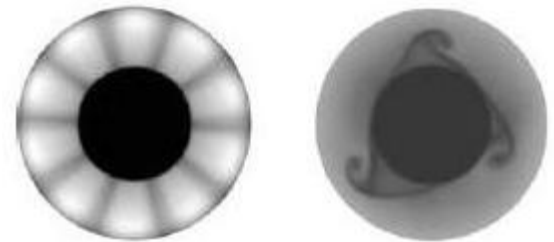


Неустойчивости при росте кристаллов



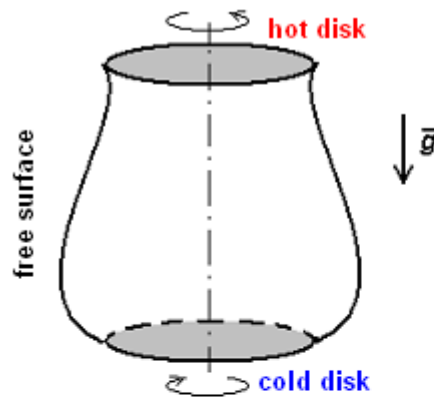
Конвекция при росте кристаллов:

- хорошее перемешивание
- отсутствие неустойчивостей

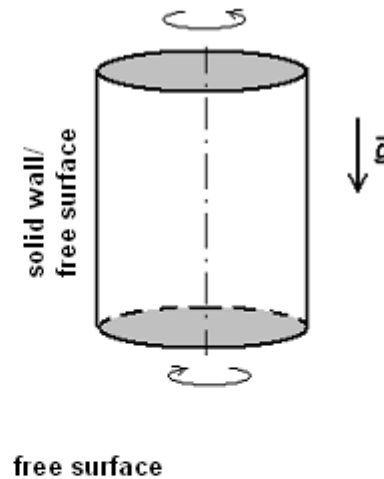


Гидродинамические модели роста кристаллов

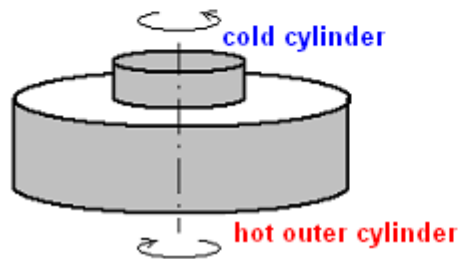
Жидкий мост



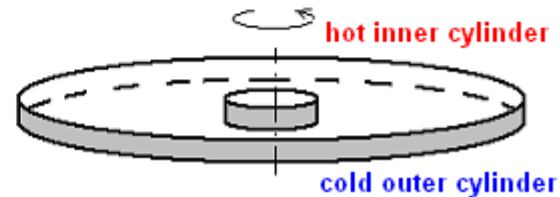
Метод плавающей зоны



Метод
Чохральского



Круговой
бассейн



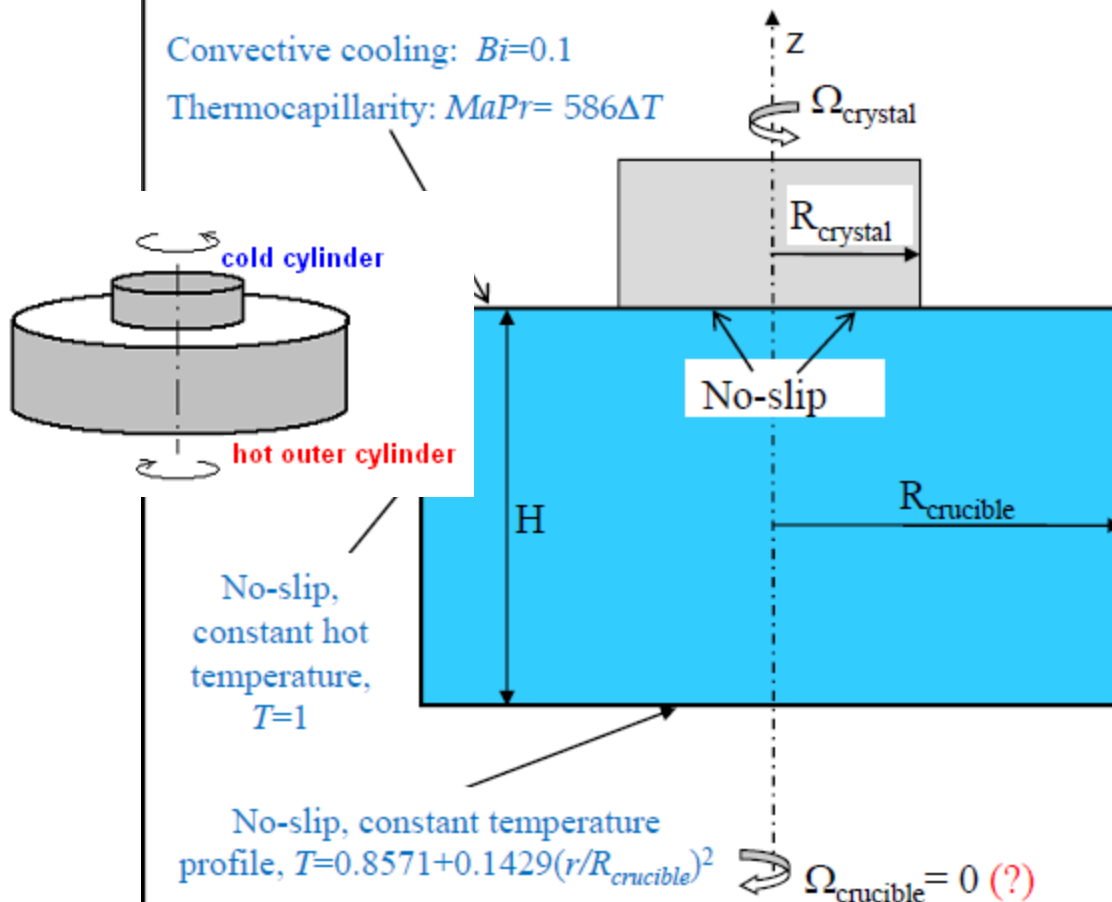
Бенчмарк по методу Чохральского для большого числа Прандтля

Motivation: Experiment of Sumathi, Schwabe & Wilke

JCG, 2004, vol. 265, 440-452

Convective cooling: $Bi=0.1$

Thermocapillarity: $MaPr = 586\Delta T$



NaNO₃ melt:

$$Pr = 9.2, \Delta T = 0 \div 10^\circ\text{C}$$

$$H = R_{crystal} = 0.5 R_{crucible} = 19 \text{ mm}$$

$$\Omega_{crystal} = 0 \div 2 \text{ rps}, \Omega_{crucible} = 0 (?)$$

$$Gr = \frac{g\beta\Delta TR_{crucible}^3}{\nu^2} = 1.9 \times 10^5 \Delta T$$

$$Mn = MaPr = -\gamma \frac{R_{crucible} \Delta T}{\rho \nu^2} = 586 \Delta T$$

$$Re_{crystal} = \frac{\Omega_{crystal} R_{crucible}^2}{\nu} = 247 \Omega_{crystal}$$

$$Re_{crucible} = \frac{\Omega_{crucible} R_{crucible}^2}{\nu} = 247 \Omega_{crucible}$$

Анализ линейной устойчивости

Уравнения Буссинеска:

$$\operatorname{div} \vec{U} = 0$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + (\vec{U} \nabla) \vec{U} = -\nabla P + \Delta \vec{U} + Gr T \vec{k}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{U} \nabla T = \frac{1}{Pr} \Delta T$$

$$\begin{pmatrix} \vec{U} \\ P \\ T \end{pmatrix}(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \vec{U}_0 \\ P_0 \\ T_0 \end{pmatrix}(\vec{x}) + \begin{pmatrix} \vec{u} \\ p \\ \theta \end{pmatrix}(\vec{x}) \times e^{\lambda t}$$

Базисное решение:

$$\operatorname{div} \vec{U}_0 = 0$$

$$(\vec{U}_0 \nabla) \vec{U}_0 = -\nabla P_0 + \Delta \vec{U}_0 + Gr T_0 \vec{k}$$

$$\vec{U}_0 \nabla T_0 = \frac{1}{Pr} \Delta T_0$$

Устойчивость -

задача на собственные значения:

$$\operatorname{div} \vec{u} = 0$$

$$\lambda \vec{u} + (\vec{U}_0 \nabla) \vec{u} + (\vec{u} \nabla) \vec{U}_0 = -\nabla p + \Delta \vec{u} + Gr \theta \vec{k}$$

$$\lambda \theta + \vec{u} \nabla T_0 + \vec{U}_0 \nabla \theta = \frac{1}{Pr} \Delta \theta$$

+ граничные условия

Анализ линейной устойчивости (матричный подход)

1. Стационарное осесимметричное течение (2D) – базисное решение

Приложение метода Ньютона в матричном виде для $f(\vec{x}) = 0$

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0)$$

$$f'(x^{[k]}) \cdot x^{[k+1]} = -f(x^{[k]}) + f'(x^{[k]}) \cdot x^{[k]}$$

2. Устойчивость малых возмущений (3D)

Линеаризация около базисного решения. Метод нормальных мод в азимутальном направлении:

$$(\vec{u}, p, T)^T(r, \varphi, z) = (\vec{u}, p, T)^T(r, z) \exp(\lambda t + im\varphi), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Обобщенная задача на собственные значения:

$$Ax = \lambda Bx, \quad x \in C^n, \quad A - \text{комплексная матрица, } B - \text{диагональная вырожденная матрица}$$

Метод решения: обратная итерация со сдвигами,
метод Арнольди (Arpack)

Матричные методы

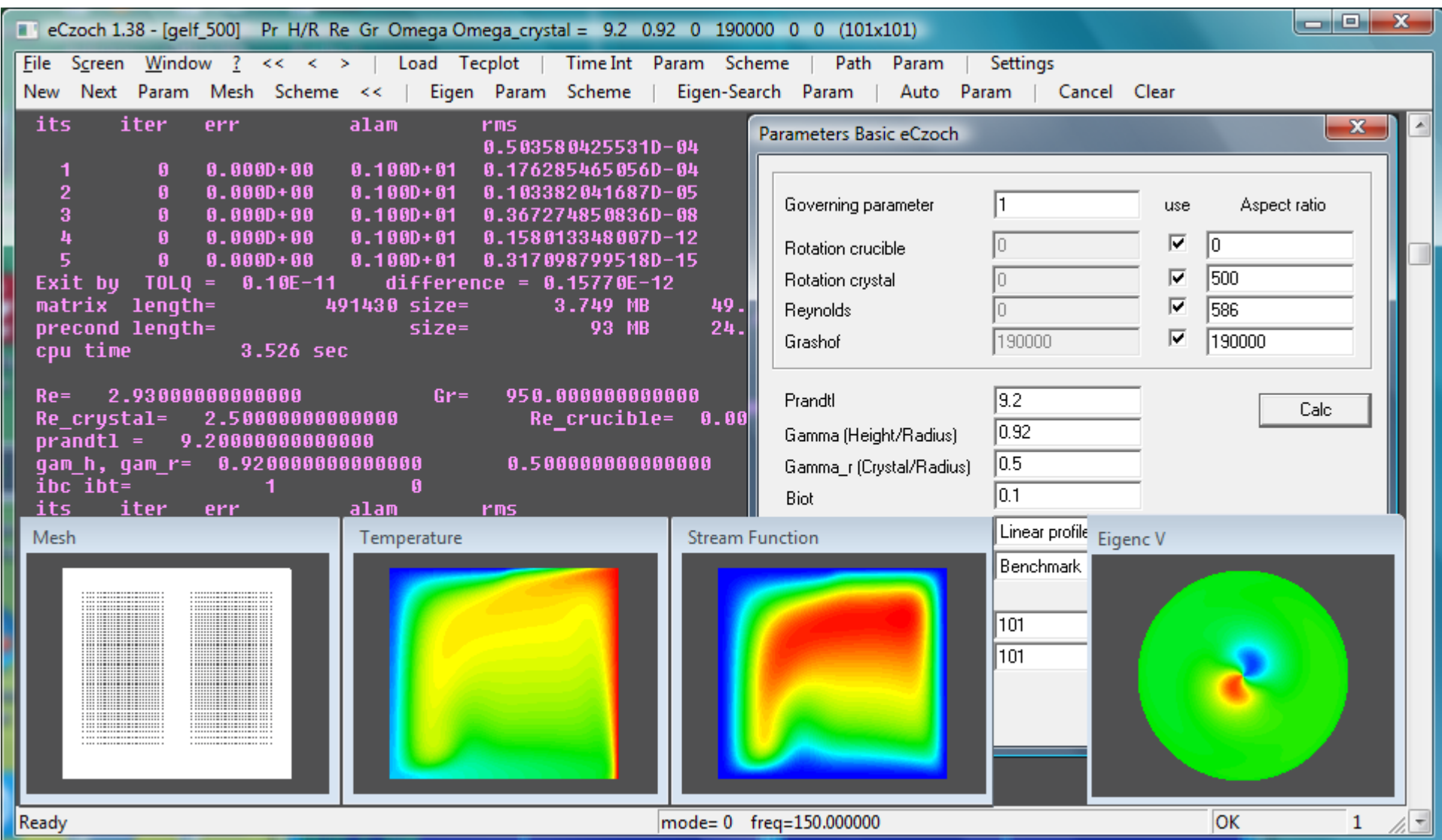
1. Не нужно разрабатывать метод решения уравнений
2. Отсутствие расщепления
3. Высокая скорость сходимости
4. Возможность получения стационарных решений, которые для нестационарных уравнений являются неустойчивыми
5. Естественны для задач линейной устойчивости
6. Высокие требования к памяти при использовании прямых методов решения линейных систем

Методика была реализована в последовательном варианте при использовании пакета SRARSEKIT (итерационный метод)

Для 12 ГБ ПК доступная сетка составляла 300×300 узлов.

Цель: сетка до 5000×5000 .

Программная оболочка



Freely Available Software for Linear Algebra

<http://www.netlib.org/utk/people/JackDongarra/la-sw.html>

SPARSE DIRECT SOLVERS	License	Support	Type	Language	Mode	Dense	Sparse Direct	Sparse Iterative	Sparse Eigenvalue	Last release date									
			Real	Complex	F77/F95	C	C++	Shared	Accel.	Dist		SPD	SI	Gen	SPD	Gen	Sym	Gen	
DSCPACK	PD	yes	X			X		X		M		X							?
KKTDirect	PD	yes	X			X	X	X				LDL ^T							2010-04-21
MUMPS	CeCILL-C	yes	X	X	X	X		X		M		X	X	X					2015-02-20
PaStiX	CeCILL-C	yes	X	X	X	X	X	X	C	M		X	X	X	X	X			2014-12-18
PSPASES	Own	yes	X		X	X				M		X							1999-05-09
QR-MUMPS	LGPL	yes	X	X	X	X		X						X					2012-08-01
Quern	PD	yes	X			X	X	X						X		X			2009-02-04
SPARSE	Own	?	X	X		X		X				X		X					1988-04-01
SPOOLES	PD	?	X	X		X		X		M				X		X			1999-04-08
SPRAL	New BSD	yes	X	X	X	X		X	C			X	X				X		2015-04-20
SuiteSparse	LGPL	yes	X	X		X		X	C			X		X					2015-03-24
SuperLU	Own	yes	X	X	X	X		X	C	M				X					2015-05-01
TAUCS	Own	yes	X	X		X		X				X		X	X	X			2003-09-04
Trilinos/Amesos	LGPL	yes	X			X	X	X		M		X		X					2015-05-07
Trilinos/Amesos2	BSD	yes	X	X			X	X		M		X		X					2015-05-07
Y12M	?	yes	X		X			X				X		X					?



Multifrontal parallel distributed symmetric and unsymmetric solvers ([MUMPS](#))

Современный структурированный пакет решения разреженных линейных систем, с открытым кодом, поддерживает распределенное хранение матрицы и LU разложения, основан на шаблонах BLAS и использует MPI.

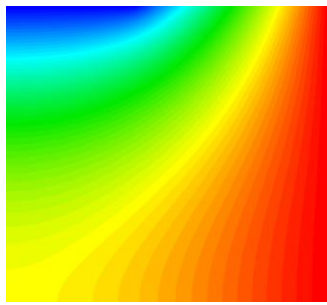
Включает стадию предварительного анализа матрицы для её переупорядочивания с целью уменьшения объема LU разложения. Помимо встроенных приближенных подходов для переупорядочивания возможно использование специализированных внешних пакетов работы с графами METIS и SCOTCH.

Ускорение для последовательной версии составило $10x \div 100x$.

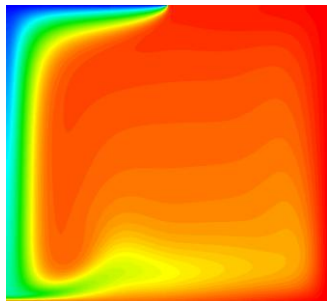
С точки зрения программирования требуется только заполнение распределенной матрицы и синхронное обращение к MUMPS в программе.

Конфигурации течений

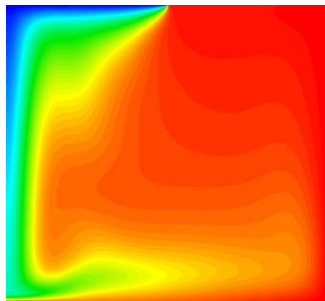
$Gr=Re=0$



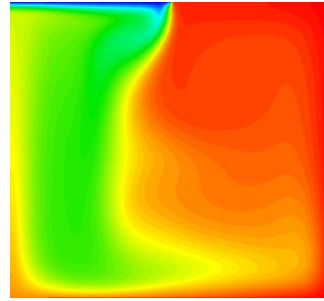
Re=0



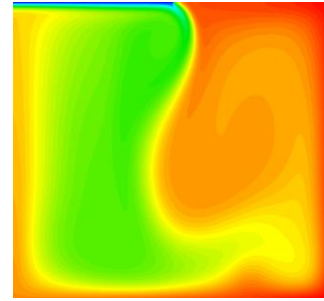
Re=500



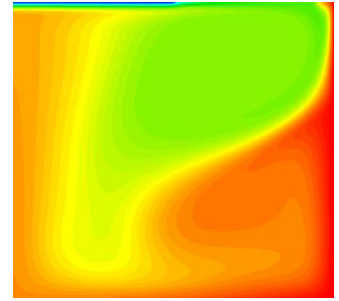
Re=1000



Re=1500

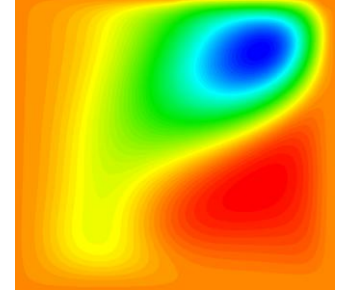
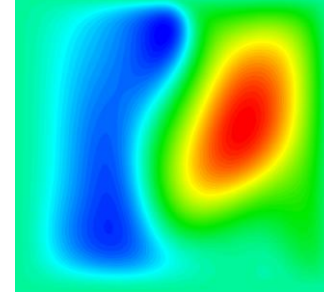
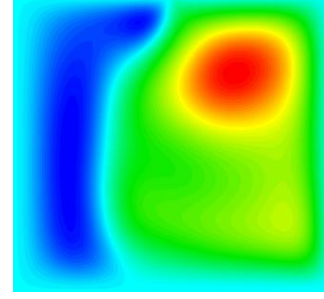
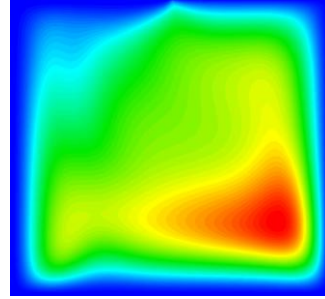
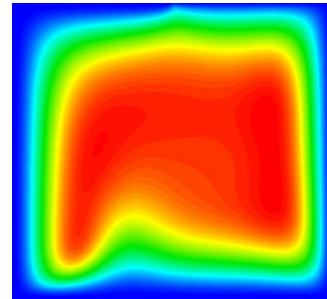


Re=2000

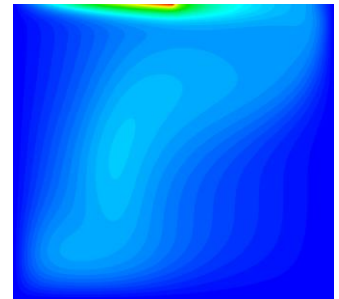
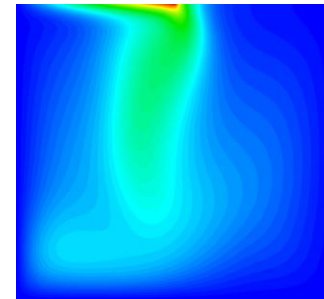
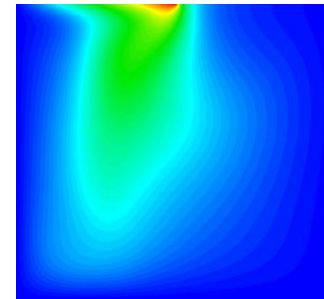
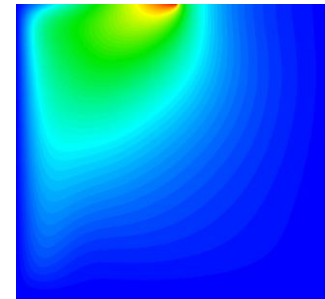


Температура

Функция тока



Азимутальная
скорость



Результаты на различных сетках

	сетка	psi_min	psi_max	u_min	u_max	w_min	w_max
Re=0	201×201	-1.509168	0.0	-36.3208	14.6050	-230.9170	15.7189
	1001×1001	-1.529003	0.0	-52.2606	14.7333	-232.0528	15.9482
	2001×2001	-1.533083	0.0	-56.0440	14.7580	-232.2550	15.9902
	3001×3001	-1.534639	0.0	-57.4799	14.7674	-232.3312	16.0061
	беск. сетка	-1.538914					
Re=2000	201×201	-2.186575	12.743824	-60.4212	191.0589	-26.5429	85.6441
	1001×1001	-2.172347	12.767028	-60.6481	191.1468	-26.5565	85.4437
	2001×2001	-2.171820	12.768741	-60.6559	191.1682	-26.5648	85.4118
	3001×3001	-2.171706	12.769186	-60.6578	191.1756	-26.5678	85.4010
	беск. сетка	-2.171595	12.779751	-60.6599	191.1916	-26.5754	85.3787

Ведущие собственные значения для азимутальных мод $m=0\div 3$

	сетка	$m=0$	$m=1$	$m=2$	$m=3$
Re=0	201×201	(20.558, 457.718)	(-27.860, 496.822)	(-30.238, 102.882)	(-43.060, 120.064)
	1001×1001	(18.984, 460.879)	(-35.766, 503.328)	(-30.207, 103.343)	(-42.766, 120.393)
Re=500	201×201	(265.490, 146.52)	(221.449, -251.408)	(127.105, -1069.192)	(48.604, -1520.996)
	1001×1001	(256.690, 151.90)	(212.943, -247.481)	(119.836, -1091.355)	(41.982, -1547.494)
Re=1000	201×201	(241.164, 353.58)	(248.204, -120.173)	(203.529, -566.380)	(46.692, -2203.209)
	1001×1001	(244.035, 358.84)	(251.080, -117.944)	(204.690, -568.771)	(46.440, -2221.724)
Re=1500	201×201	(115.338, 391.57)	(174.029, -22.166)	(199.206, -383.248)	(15.330, -129.513)
	1001×1001	(115.010, 390.05)	(173.823, -22.520)	(199.319, -384.006)	(14.909, -127.671)
Re=2000	201×201	(70.630, -200.92)	(93.540, -11.711)	(67.061, -228.260)	(-9.924, -151.529)
	1001×1001	(70.384, -201.39)	(94.246, -11.748)	(66.353, -228.851)	(-10.346, -152.051)
Re=5000	201×201	(-30.792, 576.42)	(-14.021, 54.585)	(33.165, -130.752)	(18.561, -1242.345)
	1001×1001	(-31.476, 577.27)	(-13.316, 54.849)	(33.432, -131.241)	(18.822, -1246.261)

Матричные методы. Память.

Размер матрицы Якобиана – $10 \times$ размер вектора неизвестных (сильно разреженная)

Размер LU-разложения - $100 \times$ размер матрицы Якобиана

Класс задачи – Memory bound **критический ресурс - память**

Масштабируемость по процессорам – относительно использования памяти

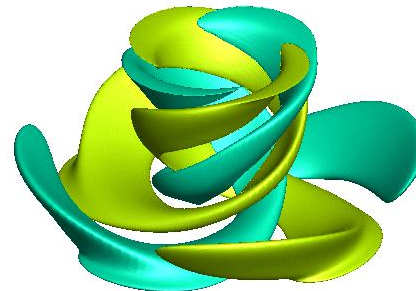
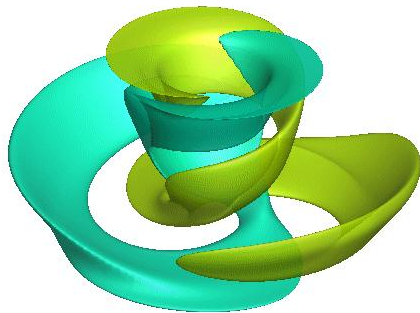
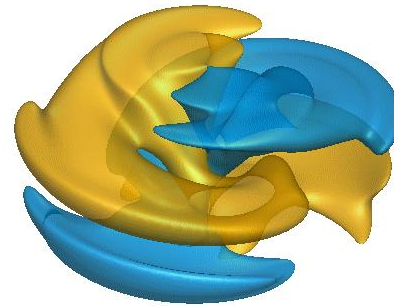
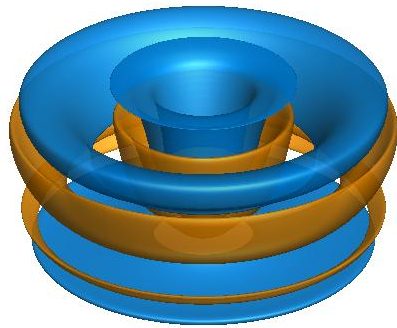
Проблема - Измерение памяти при использовании пакетов

1. Intel VTune Amplifier
2. MPI Performance Snapshot

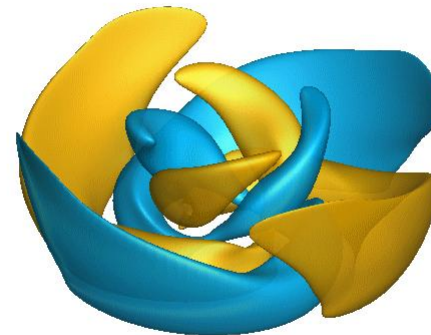
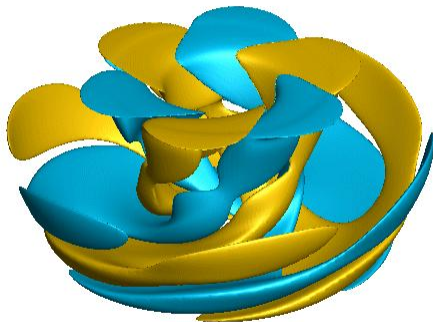
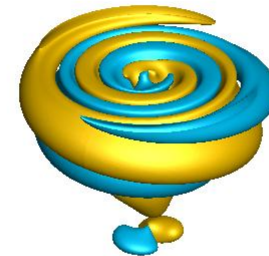
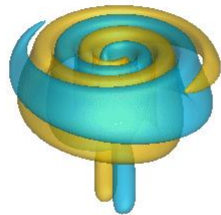
Использование ресурсов

Расчетная сетка	Размерность вектора неизвестных	Память для LU разложения	Конфигурация (кол-во процессоров × оперативная память)	Время анализа матрицы	Время LU разложения и обратного хода
201×201	0.1 M	0.8 GB	1 × 12 GB	3"	3"
1001×1001	5 M	40 GB	1 × 64 GB	35"	50"
			8 × 12 GB	1'	1'
			16 × 12 GB	25"	45"
			33 × 12 GB	45"	3'
2001×2001	20 M	160 GB	8 × 24 GB	8'	7'
			17 × 24 GB	3'	5.5'
			33 × 12 GB	1'	4'
3001×3001	45 M	360 GB	16 × 48 GB	34'	17'
			32 × 24 GB	7'	10'
4001×4001	64 M	512 GB	17 × 48 GB	3'	16'
			33 × 24 GB	2'	9'
5001×5001	100 M	800 GB	17 × 72 GB (вирт.)	8'	24'
			33 × 48 GB	9'	14'

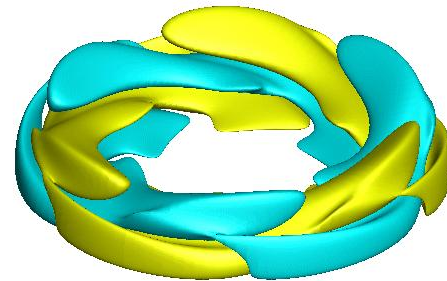
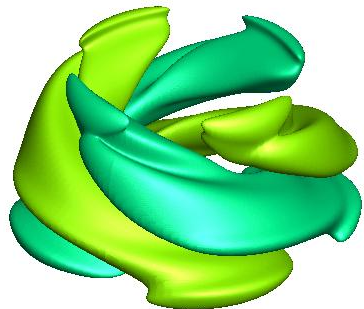
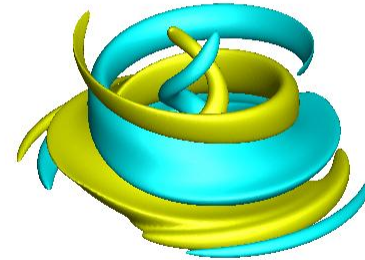
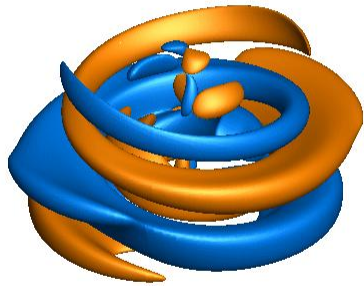
Собственные функции температура, компоненты скорости для различных азимутальных мод (1/4)



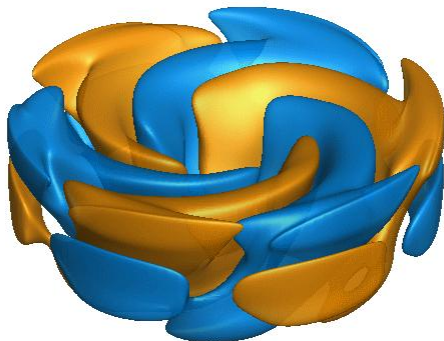
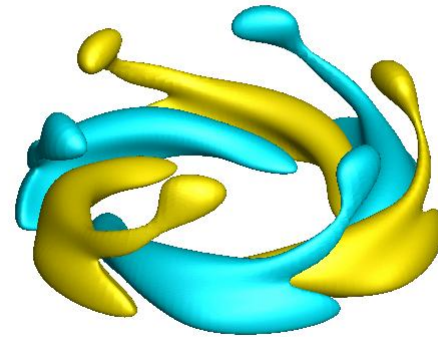
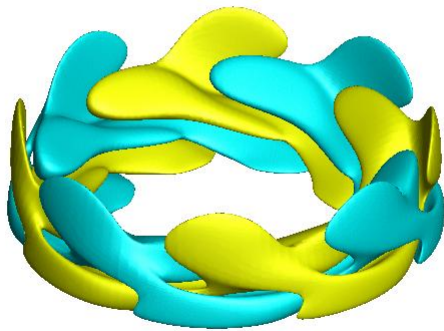
Собственные функции температура, компоненты скорости для различных азимутальных мод (2/4)



Собственные функции температура, компоненты скорости для различных азимутальных мод (3/4)



Собственные функции температура, компоненты скорости для различных азимутальных мод (4/4)



Выводы:

1. Выполнены расчеты на СК «Ломоносов» на основе метода Ньютона и прямого солвера для линейных систем MUMPS для 100М неизвестных с использованием до 33 процессоров с памятью 48 ГБ для бенчмарка по методу Чохральского при больших числах Прандтля.
2. Получены сходящиеся по сетке результаты и интерполяция на «нулевую» сетку для бенчмарка по методу Чохральского.
3. Узким местом использования пакета MUMPS является объем памяти на нулевом узле на этапе «анализа» - минимизации объема LU-разложения методом теории графов.



Спасибо за внимание