



Восьмой профессиональный слёт
разработчиков отечественных CFD кодов
«Отечественные CFD коды – 2021»
(CFD Weekend-2021)



Компьютерная лаборатория COMGA : использование матричных методов

М.К. Ермаков

Институт проблем механики им. А.Ю.Ишлинского РАН
ermakov@ipmnet.ru

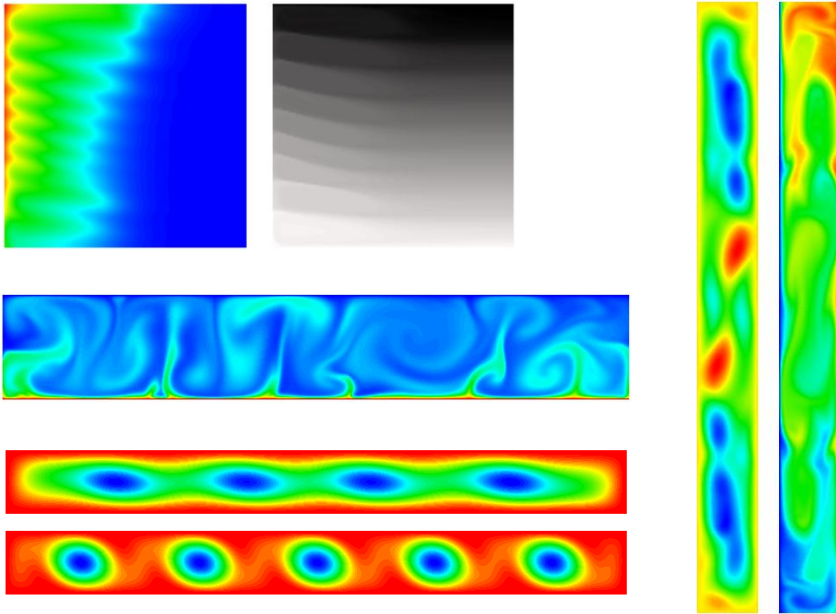
Москва, 18-19 декабря 2021 г.

Comga : анкета кода-участника

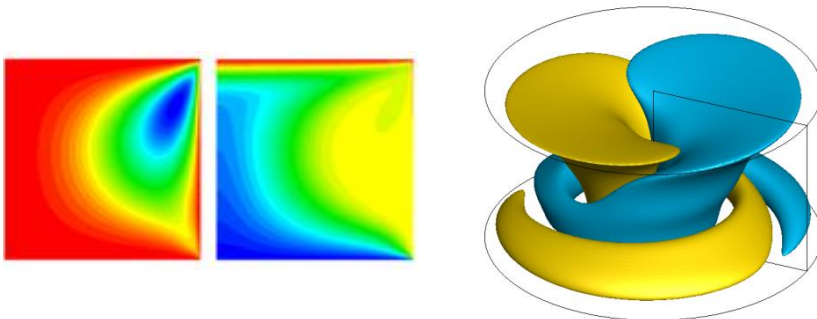
- Исследовательский код, решение фундаментальных задач
- Несжимаемые течения со свободной поверхностью, ламинарные и переходные режимы
- Уравнения Навье-Стокса (приближение Обербека-Буссинеска)
- Моделирование DNS + решение задач устойчивости LSA
- Структурированные декартовы (криволинейные) сетки
- Методы : FV (Chorin + полунеявные) + матричные методы (MUMPS)
- Специализации : сложное гравитационное поле, конвекция Марангони, метод Чохральского, liquid bridge, направленная кристаллизация
- Компьютерная лаборатория 2D течений (exe-free)
- Большое количество тестов (бенчмарки)
- Fortran/C++, OpenMP/MPI

Хронология

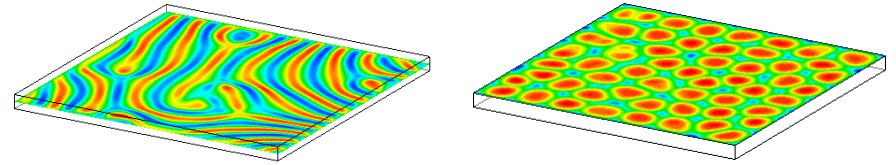
1. Компьютерная лаборатория 2D : DNS



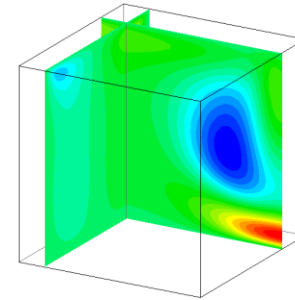
2. Устойчивость осесимметричных течений LSA – матричный метод



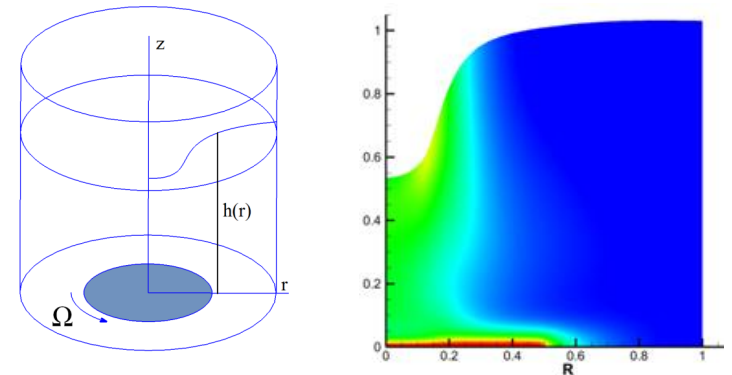
3. Нестационарные 3D : DNS



4. Стационарные 3D - матричный метод

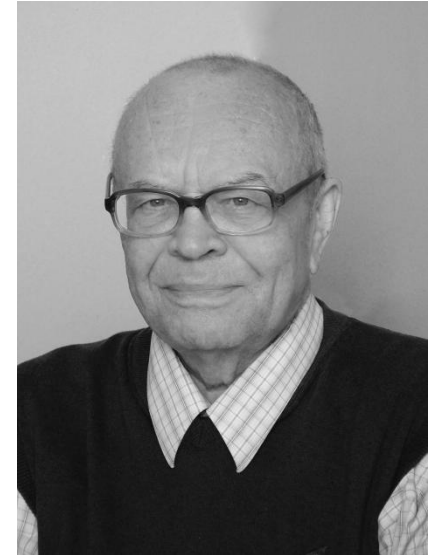


5. Стационарные 2D со свободной поверхностью – матричный метод



Компьютерная лаборатория 2D

Разработана в лаборатории Математического и физического моделирования в гидродинамике под рук. В.И. Полежаева



Проф. Полежаев
Вадим Иванович

Ermakov M.K., Gryaznov V.L., Nikitin S.A., Pavlovsky D.S., Polezhaev V.I. A PC-based system for modelling of convection in enclosures on the basis of the Navier-Stokes equations. *Int. J. for Numerical Methods in Fluids*, том 15, № 9, с. 975-984, 1992.

Ермаков М.К., Никитин С.А., Полежаев В.И. Система и компьютерная лаборатория процессов конвективного тепло- и массообмена. *Изв. РАН, МЖГ*, № 3, с.22-28, 1997.

Ermakov M.K., Nikitin S.A., Polezhaev V.I., Yaremchuk V.P. Education and tutorial in modeling of elementary flows, heat and mass transfer during crystal growth in ground-based and microgravity environment. *J. Crystal Growth*, том 266, № 1-3, с. 388-395, 2004.

Компьютерная лаборатория 2D/3D

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

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

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

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{U} \nabla C = \frac{1}{Sc} \Delta C$$

Уравнения Обербека-Буссинеска

Finite volume, метод Чорина

Центральные/направленные/

QUICK

Явные, полунявные схемы

FFT

Граничные условия:

1. Непротекание
2. Прилипание, «движущая крышка», условие Марангони
3. Температура и концентрация: I, II или III рода

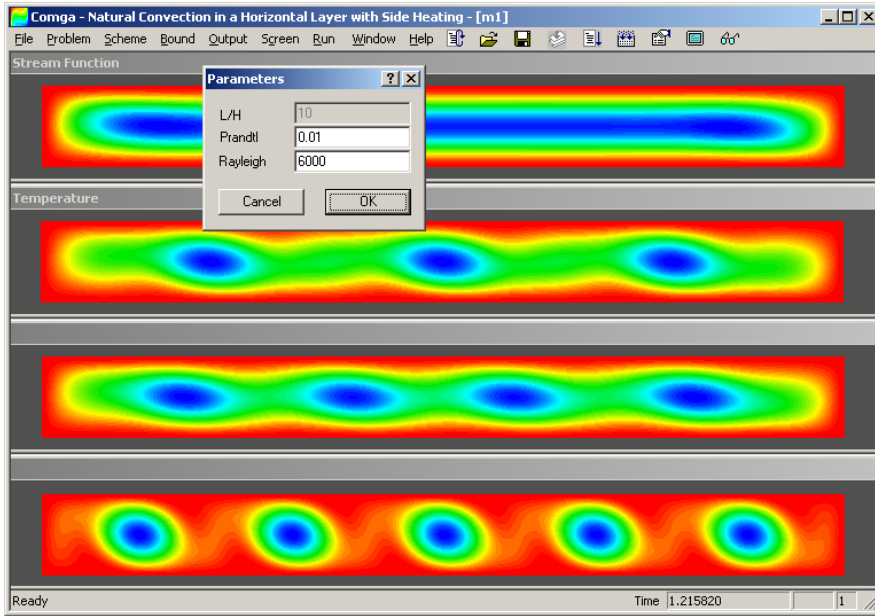
Декартова или осесимметричная СК

Прямоугольные области, прямоугольная сетка

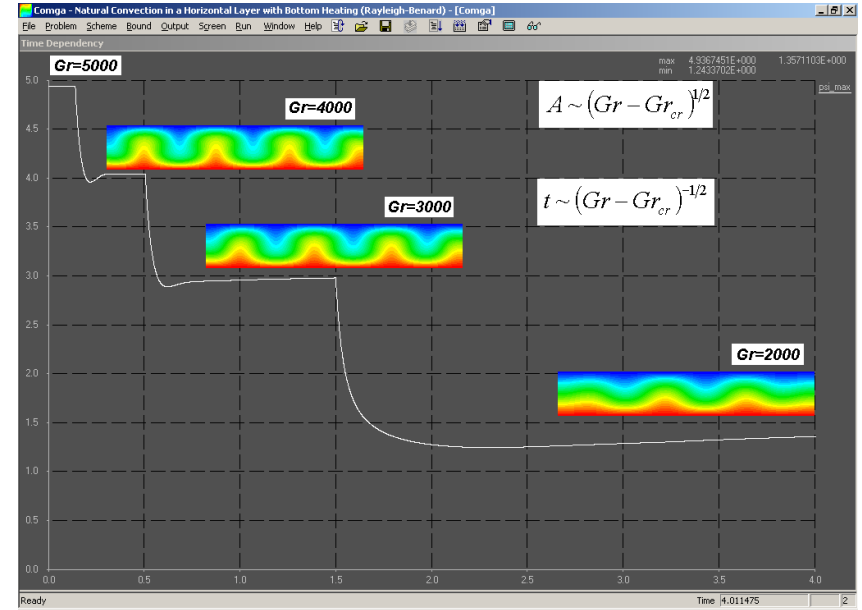
Переменная сила тяжести (микрогравитация)

Изучение элементарных течений естественной конвекции

Компьютерная лаборатория 2D



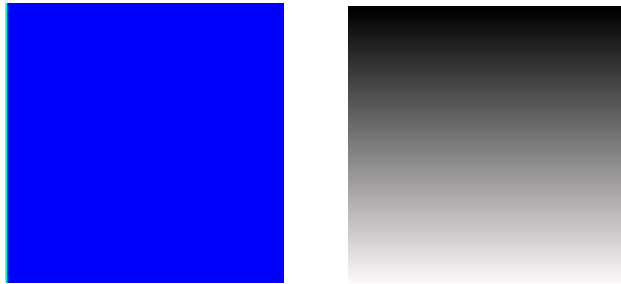
Подогрев сбоку (функция тока)



Подогрев снизу (температура, функция тока по времени)

1. Предустановленные типы задач (уравнения, граничные, начальные условия)
2. Задание параметров в безразмерном виде
3. Решение задачи в реальном времени (компьютерный эксперимент)
4. Одновременная визуализация (поля, графики по времени)
5. Галерея решенных задач
6. Тщательно протестирована для ламинарных и переходных режимов

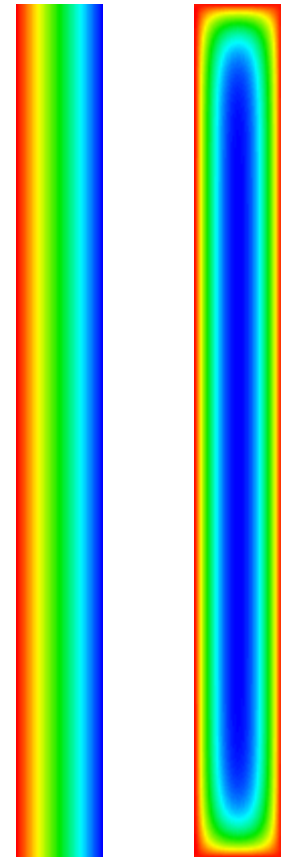
Компьютерная лаборатория 2D



Слоистые структуры

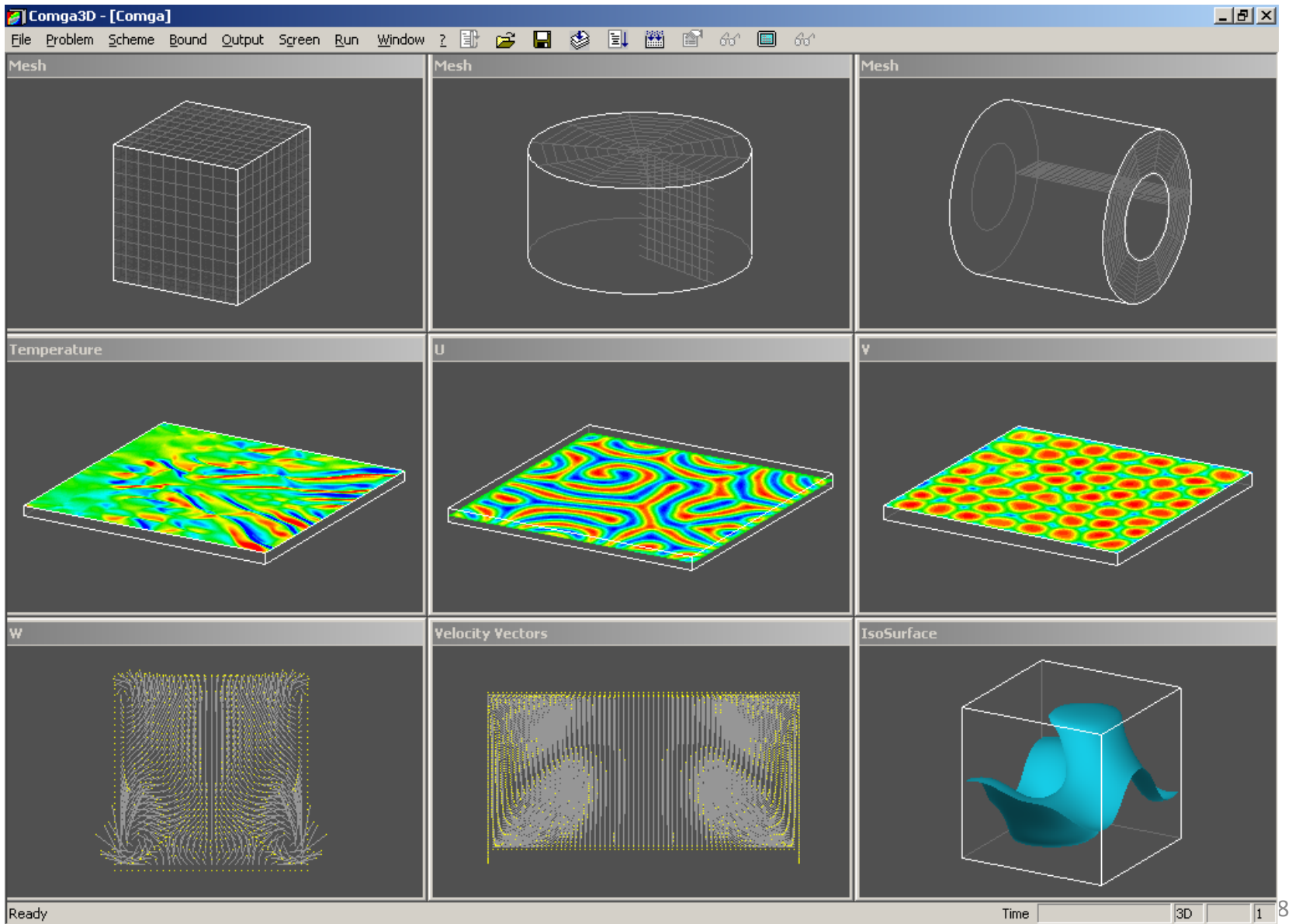


Подогрев снизу, $Ra=10^6$



Подогрев сбоку, $Ra=10^6$

Компьютерная лаборатория 3D



Компьютерная лаборатория 3D

The screenshot shows the Comga3D software interface. The main window displays a 3D simulation of natural convection in a vertical layer. The interface includes a menu bar, a 'Problem category' dropdown, a 'Parameters' dialog box, and an 'Isolines' dialog box. The main window displays a 3D mesh and a color-coded temperature field.

Problem category

- Common statement
 - Forced Convection
 - Natural Convection**
 - Natural Convection in a Vertical Layer with Side Heating
 - Natural Convection in a Vertical Cylinder with Upper Free Surface
 - Natural Convection in a Horizontal Layer with Side Heating
 - Natural Convection in a Horizontal Layer with Bottom Heating (Rayleigh-Benard)
 - Thermoconcentrational Convection
 - Marangoni Convection
 - Convection with Variable Gravity
- Convection in Straight Liquid Bridge
- Convection in Curved Liquid Bridge
- Convection in Annular Pool
- Czochralski Crystal Growth
- Porous Medium
- Directional Solidification
- Directional Solidification Conjugate
- List of All
- Channel Flow
- Thermics
- Compressible Flow
- Thermodiffusion
- Steady
- Implicit
- Enthalpy method
- Level Set
- Glow Discharge
- User Defined

Parameters

| | |
|----------|------|
| L/H | 6 |
| Prandtl | 1 |
| Rayleigh | 5000 |

Isolines

Levels

- Auto selection min/max
- Section min/max
- Max: 305.106
- Min: -387.599
- Step: 76.9672
- Draw inside min/max only
- Insert zero level
- Legend

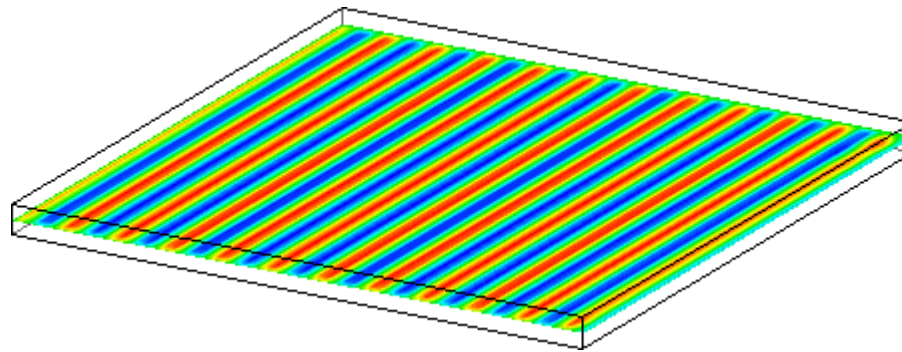
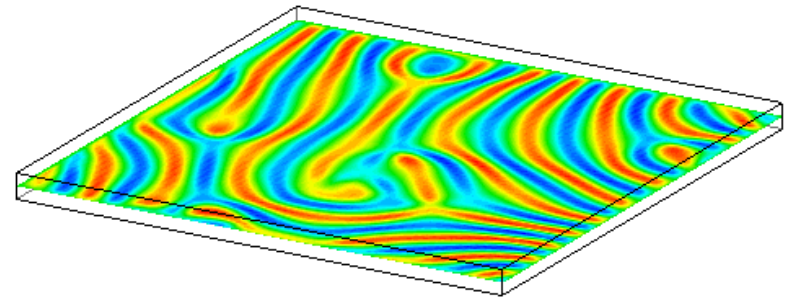
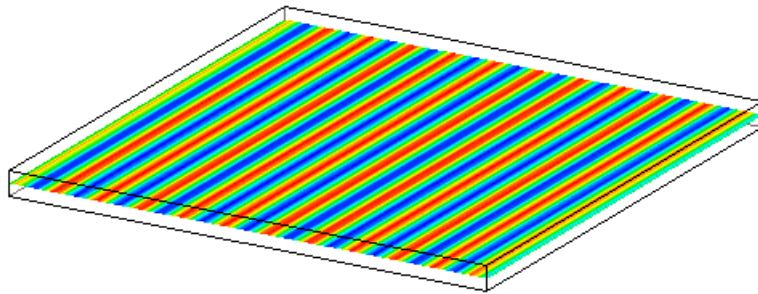
Section

- XY z= 0.5
- YZ x= 0.5
- XZ y= 0.5

Ready Time 3D 1 9

Компьютерная лаборатория 3D

Подогрев снизу - потеря устойчивости стационарных валов (изотермы)



Ra=3000

Бенчмарки

- «Движущаяся крышка» (moving lid)
- Естественная конвекция квадратной полости (G. de Vahl Davis) 1981
- Естественная конвекция в жидкостях для малых Prandtl в горизонтальной полости 4:1 (Bernard Roux) 1990
- Вынужденная конвекция в цилиндре с вращающимися в противоположных направлениях «крышками» (C. Nore, L. Tuckerman) 2003
- Термокапиллярная конвекция в прямых жидких мостах (H. Kuhlmann) 1995, (M. Levenstam) 2001
- Термокапиллярная конвекция в искривленных жидких мостах для малых Prandtl (V. Shevtsova) 2004
- Гидродинамическая модель роста кристаллов по Чохральскому:
 - low-Prandtl (A. Wheeler) 1990
 - high-Prandtl (A. Gelfgat) 2008

Устойчивость осесимметричных течений : мотивация



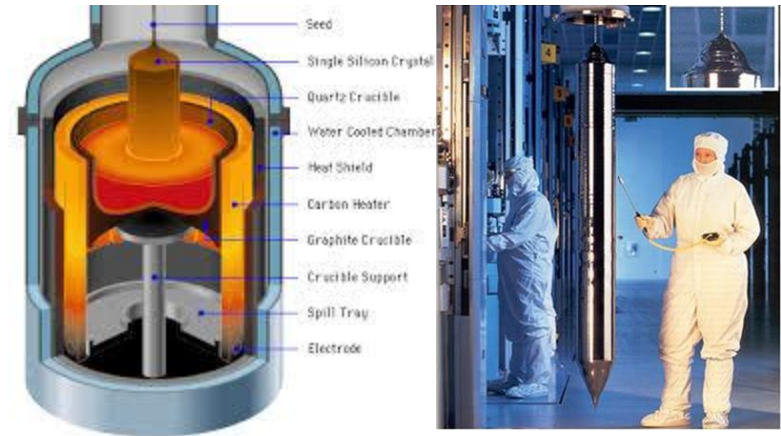
Слоистые структуры



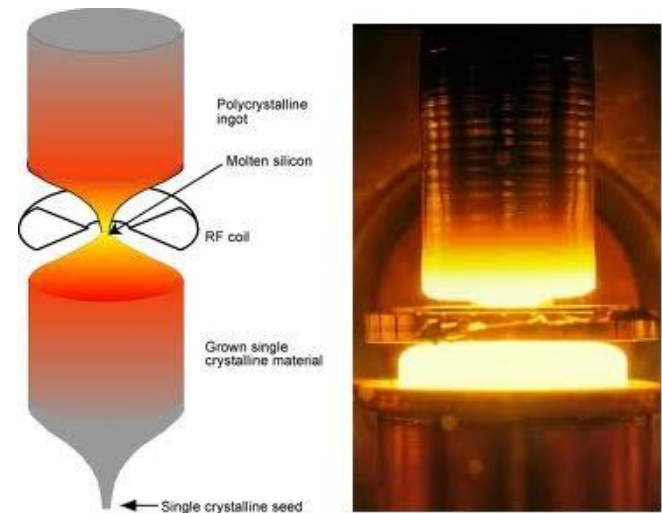
«Слезы вина»,
Марангони, 1855



Рост кристалла

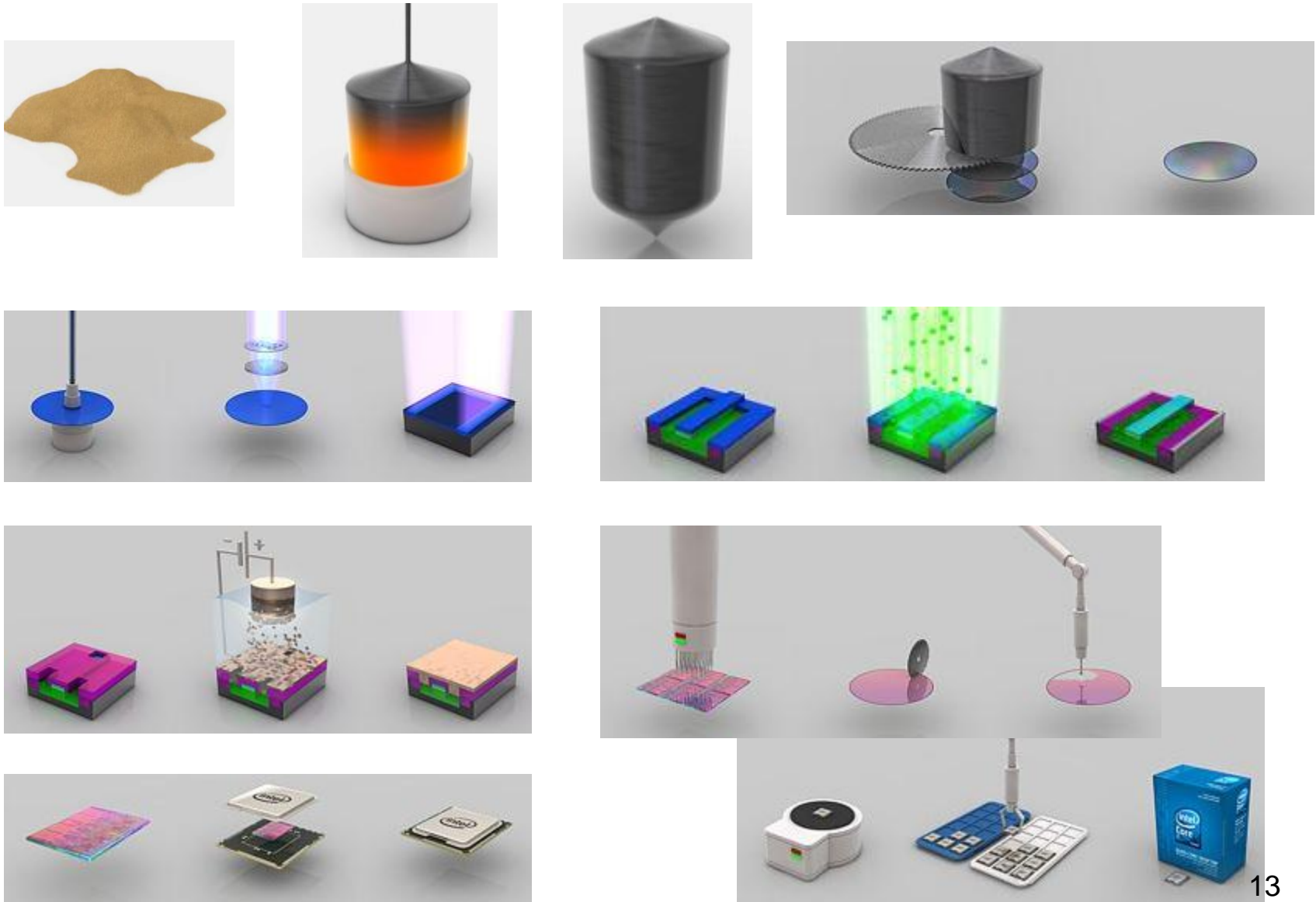


Рост кристаллов по Чохральскому



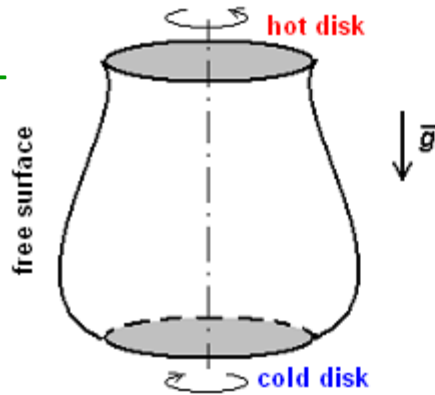
Рост кристаллов методом
плавающей зоны

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

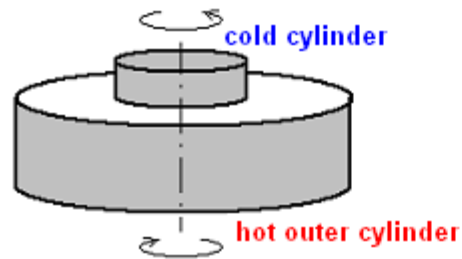
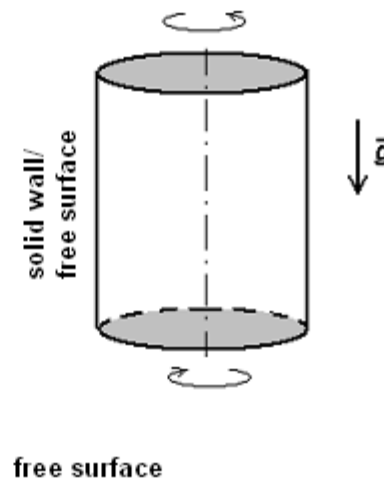


Устойчивость осесимметричных течений

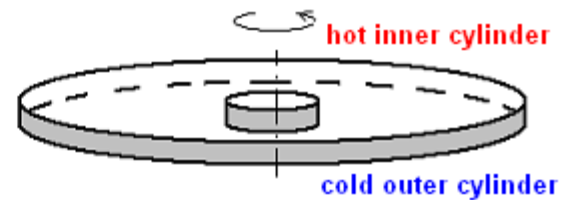
«Жидкий» мост



Круговой цилиндр



Метод Чохральского



Круговой бассейн

1. Ermakov MK, Ermakova MS. J. Cryst. Growth, 2004.
2. Nishino K, Yano T, ..., Ermakov MK. J. Cryst. Growth, 2015.
3. Imaishi N, Ermakov MK, Shi WY. Int. J. Heat/Mass Transfer, 2020.

Устойчивость осесимметричных течений

Уравнения Буссинеска:

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

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

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

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

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

Матричный метод

Дифференциальные (интегральные) уравнения



Дискретизация уравнения : residuals



Нелинейный набор (векторных) уравнений + вектор
неизвестных



Применяем метод Ньютона (backtracking)



Решаем **$Ax=b$** на каждой итерации

Достоинства и недостатки матричных методов

Достоинства

- Совершенно общий подход
- Не нужно разрабатывать метод решения уравнений (используется стандартный)
- Полностью неявные схемы (нет расщепления, ограничения на шаг по времени)
- Высокая степень сходимости
- Очень полезный (дополнительный) инструмент для «вычислительной кухни»
- Легко модифицируется для разных задач
- Легко обобщается для задач LSA

Недостатки

- Стационарные задачи (в основном)
- Значительные объемы оперативной памяти для предобуславливателя матрицы
- Значительное время решения линейной системы

$$f(\vec{x}) = 0 \quad f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0)$$

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

Метод Ньютона, вычисление матрицы Якоби

$$f(\bar{x}) = 0 \quad f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0)$$

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

$$A \cdot x = b$$

$$A_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \quad \text{- Матрица Якоби} \quad 1000 \text{ единиц времени}$$

Прямое вычисление матрицы Якоби очень затратное,
 проще аналитическое вычисление для разреженной (ленточной) матрицы

Пакет MUMPS для решения линейной системы:
 прямое решение разреженной системы (multifrontal)

- | | | | |
|---------------------------------------|-----|----------------|---------|
| 1) Анализ структуры матрицы ленты) | 100 | единиц времени | (ширина |
| 2) LU декомпозиция | 100 | ----- «» ----- | |
| 3) Решение системы (обратной ход) | 5 | ----- «» ----- | |

Moving lid

$$\text{Re} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial \Delta \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \Delta \Psi}{\partial y} \right) = \Delta \Delta \Psi$$

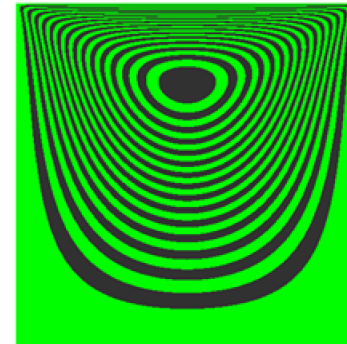
initial residual norm = 0.134415883464D-02 (Re=100)

| its | iter | err | alan | rms |
|-----|------|-----------|-----------|--------------------|
| 1 | 3 | 0.487E-24 | 0.100E+01 | 0.568664259772E-06 |
| 2 | 3 | 0.555E-25 | 0.100E+01 | 0.242484005819E-07 |
| 3 | 3 | 0.408E-26 | 0.100E+01 | 0.207387367260E-09 |
| 4 | 3 | 0.455E-28 | 0.100E+01 | 0.368899384626E-13 |

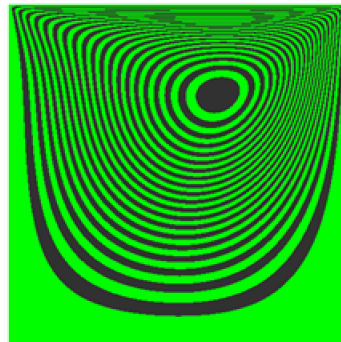
Re=500 1025x1025

Calculation time - 15 s i7-9700, 3.5 GB памяти

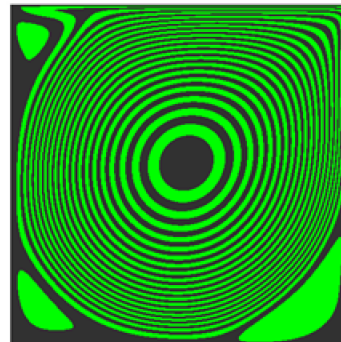
Re=0
→



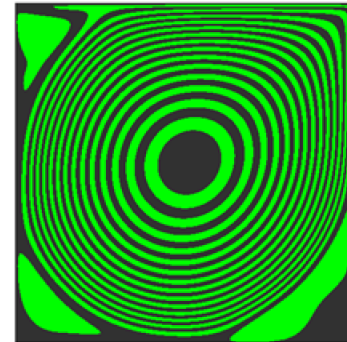
Re=100



Re=5000



Re=10000



Естественная конвекция – подогрев сбоку

Gr=10⁵, Pr=5, 1025x1025 : 2.5 минут, 10 ГБ памяти
129x129 : 1.5 сек

```
D:\eComgaf\_Decm4\I\dmumps>main
Start eDec/A I: 3.02 26.04.2020          09/12/2021   19:27:07
dmumps:4.10.0   mkl:2017.0.3   core: 8   threads: 8
nx nz=         1025           1025
Newton: maxits= 10   eps= 0.10E-06   ijac= 2
nmax=      39852055

                                19.299   5/5   30
Re= 0.0000000000000000E+000      Gr= 100000.000000000
Pr= 5.0000000000000000          Bi= 0.000000000000000E+000
its  iter  err          alam          rms
                                0.312195270527D-01
 1      0  0.000D+00  0.100D+00  0.281320181262D-01  14.502  1.172
 2      0  0.000D+00  0.100D+01  0.151888099077D-02  14.736  1.032
 3      0  0.000D+00  0.405D+00  0.102767296647D-02  14.735  0.984
 4      0  0.000D+00  0.100D+01  0.383314894430D-03  14.767  1.047
 5      0  0.000D+00  0.100D+01  0.824969520936D-04  14.782  1.046
 6      0  0.000D+00  0.100D+01  0.147498462285D-04  14.752  1.016
 7      0  0.000D+00  0.100D+01  0.483190366000D-06  14.829  1.063
 8      0  0.000D+00  0.100D+01  0.676904302656D-09  14.799  1.016
 9      0  0.000D+00  0.100D+01  0.258857922293D-14  14.752  1.047
Exit by TOLQ = 0.10E-06   difference = 0.67690E-09
matrix length=      39852055 size=      304.047 MB   100.0 %
precond length=          size=      10135 MB    33.3 x
cpu time      2/26
```

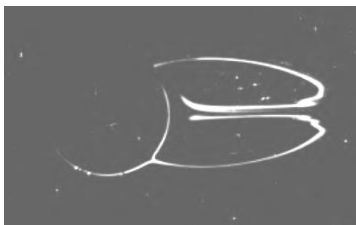
Обтекание цилиндра

$$\operatorname{Re} \left[\frac{1}{r} \left(\frac{\Psi_\theta^2}{r} \right)_{r\theta} - \frac{1}{r^2} (\Psi_r \Psi_\theta)_{\theta\theta} - \frac{1}{r} (\Psi_r^2)_\theta + (\Psi_r \Psi_\theta)_{rr} - (\Psi_r^2)_{\theta\theta} + \left(\frac{\Psi_r \Psi_\theta}{r} \right)_r \right] =$$

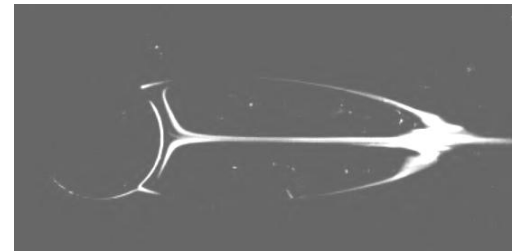
$$= \frac{1}{r} \left[r \left(\frac{\Psi_\theta}{r} \right)_r \right]_{r\theta} + \frac{1}{r^3} (\Psi_{\theta\theta} - \Psi)_{\theta\theta} + \frac{2}{r^3} \Psi_{r\theta\theta} + r (r \Psi_{rr})_{rr} + \left(\frac{1}{r} \Psi_{r\theta\theta} - \Psi_r \right)_r - \left(\frac{2}{r^2} \Psi_{\theta\theta} \right)_r$$

Уравнение движения
функция тока
полярная с.к.

Re=28.4



Re=41



M. Van Dyke. An Album of Fluid Motion. 1982.

Устойчивость осесимметричных течений

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:

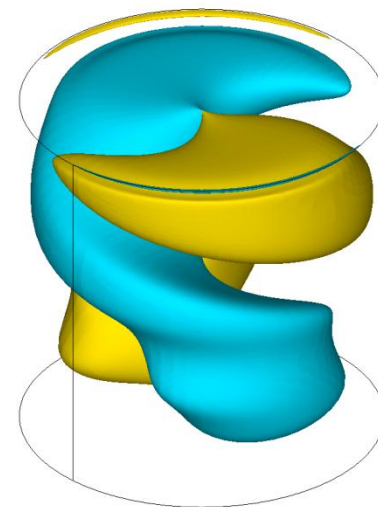
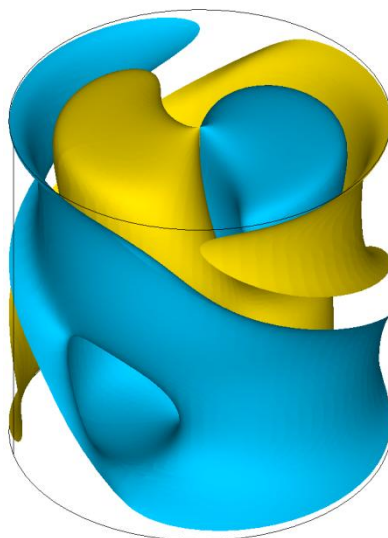
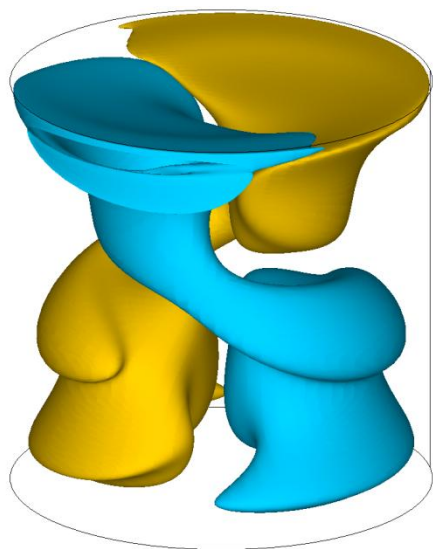
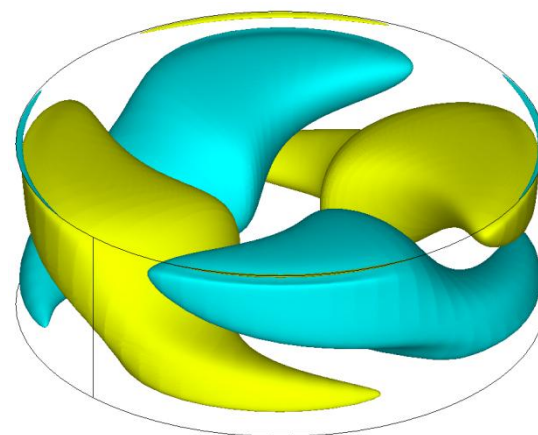
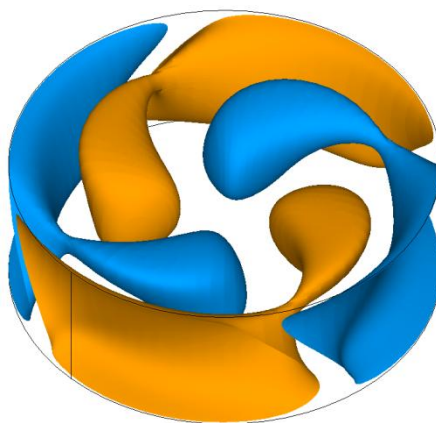
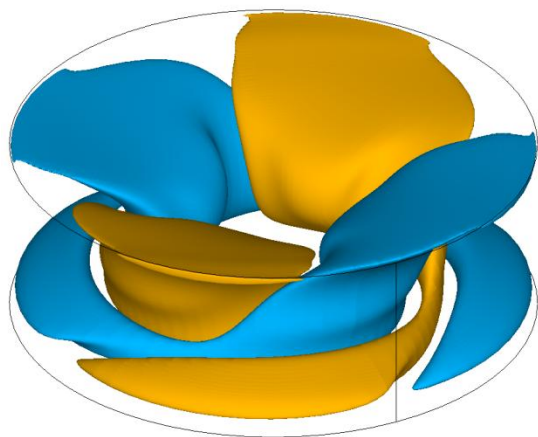
$$(\vec{u}, p, T)^T(r, \varphi, z) = (\vec{u}, p, T)^T(r, z) \exp(\lambda t + im\varphi), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Обобщенная задача на собственные значения:

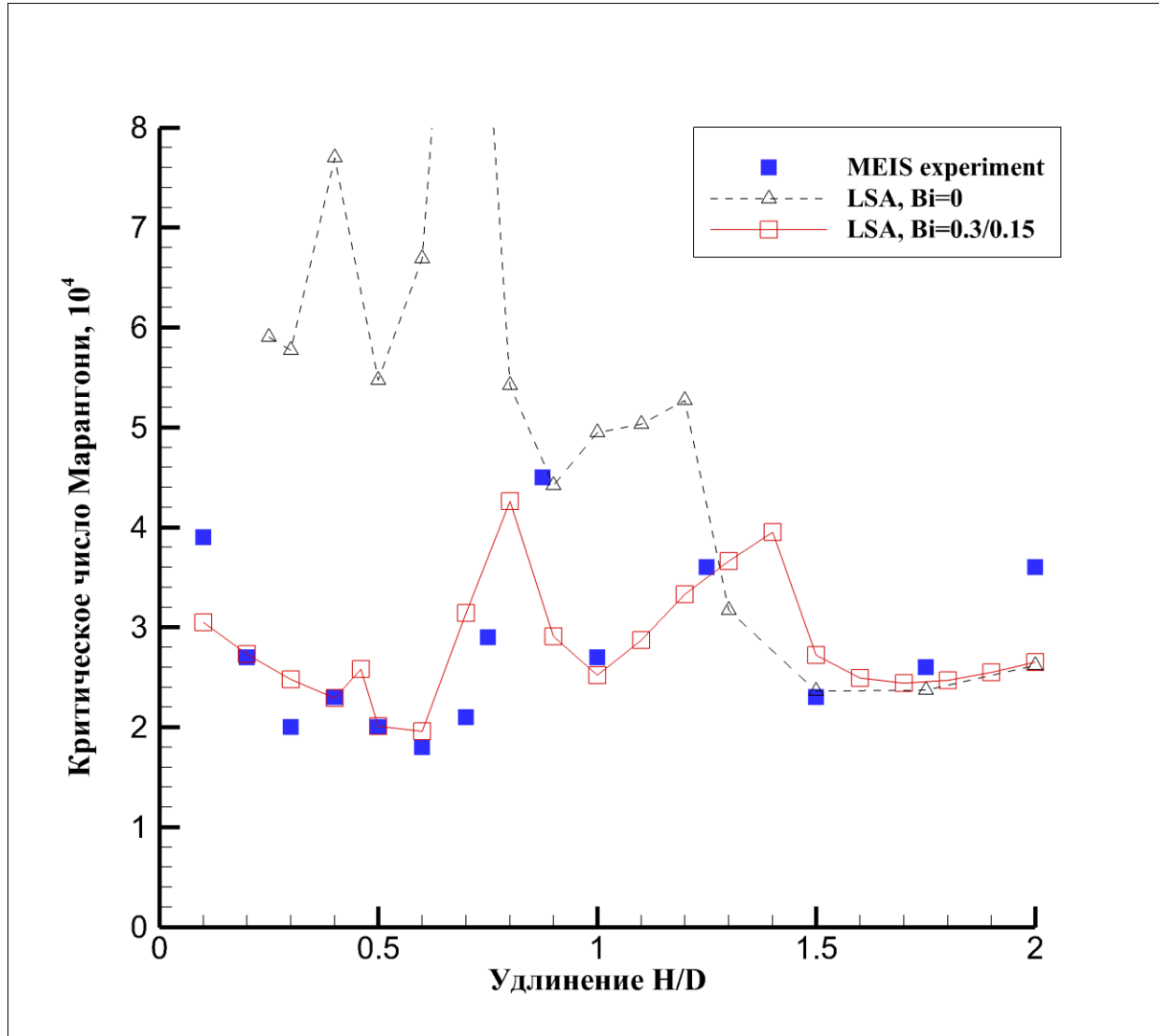
$$Ax = \lambda Bx, \quad x \in C^n, \quad A - \text{комплексная матрица, } B - \text{диагональная вырожденная матрица}$$

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

Собственные функции: температура, азимутальная и радиальная скорости



Влияние теплообмена через свободную поверхность для космического эксперимента MEIS - $Pr=67$



Характерные времена:

- эксперимент – 1 год
- DNS – 1 месяц
- LSA – 1 день

3-D задачи и задачи со свободными поверхностями

2-D : исходные переменные – 1
 разреженная матрица – 10x
 предобуславливатель – 1000x

3-D :
 1) увеличивается размерность задачи
 2) увеличивается ширина матрицы

Свободная поверхность :

- 1) нужно вычислять матрицу Якоби
- 2) матрица перестает быть ленточной (нормировка на толщину слоя, интегральное условие на объем жидкости)
- 3) увеличение объема предобуславливателя

3-D : матричный метод

Block low-rank (BLR) multifrontal factorization

- приближенная факторизация с пороговым значением
- эффективная только для очень больших матриц
- эффективная (10x), но могут быть проблемы со сходимостью

3-D каверна с «крышкой», Re=200, 51x51x51, 5 минут, 12 ГБ памяти

```
D:\eComgaf\_MovingLid3d\I\dmumps>main.exe
Start MovingLid3d/  I: 3.03 26.04.2020          09/12/2021    19:11:01
dmumps:4.10.0
nx ny nz=          51          51          51
Newton: maxits= 10 eps= 0.10E-06 ijac= 2
nmax=      6503640

                                3.407    5/5    30
Re= 200.00000000000000          Gr= 0.0000000000000000E+000
Pr= 1.0000000000000000          Bi= 0.0000000000000000E+000
its  iter  err          alam          rms
      1     0  0.000D+00  0.100D+01  0.104298116278D+00    34.248    0.453
      2     0  0.000D+00  0.100D+01  0.360937257879D-01    34.316    0.422
      3     0  0.000D+00  0.100D+01  0.102473451461D-01    34.442    0.407
      4     0  0.000D+00  0.100D+01  0.468762430010D-02    34.192    0.391
      5     0  0.000D+00  0.100D+01  0.430602425161D-03    34.097    0.406
      6     0  0.000D+00  0.100D+01  0.810888667792D-05    34.061    0.375
      7     0  0.000D+00  0.100D+01  0.238699538629D-08    34.113    0.375
      8     0  0.000D+00  0.100D+01  0.541728230971D-13    34.055    0.390
Exit by TOLQ = 0.10E-06 difference = 0.23869E-08
matrix length=      6503640 size=      49.619 MB    100.0 %
precond length=          size=      11992 MB    241.7 x
cpu time          4/46
```

Свободная поверхность

$$\frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial rw}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial ru^2}{\partial r} + \frac{\partial ruw}{\partial z} - v^2 = -r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + r \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{u}{r}$$

$$\frac{\partial ruv}{\partial r} + \frac{\partial rvw}{\partial z} + uv = \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + r \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - \frac{v}{r}$$

$$\frac{\partial ruw}{\partial r} + \frac{\partial rw^2}{\partial z} = -r \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial w}{\partial r} \right) + r \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}$$

$$-uh' + w = 0$$

Условие непротекания

$$p + C - Ga \cdot h = \frac{2}{1 + h'^2} \left(h'^2 \frac{\partial u}{\partial r} - h' \left(\frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{Ga}{Bo} \frac{1}{\sqrt{1 + h'^2}} \left(\frac{h'}{r} + \frac{h''}{1 + h'^2} \right)$$

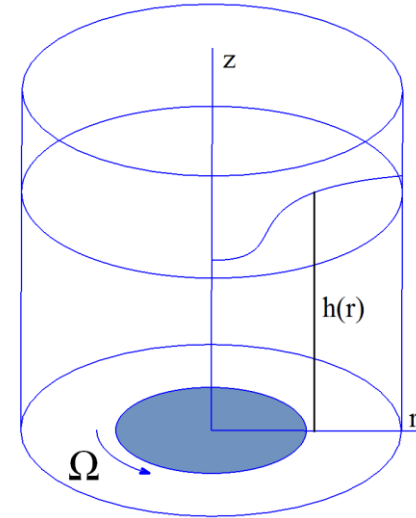
Баланс нормальных напряжений

$$(1 - h'^2) \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) - 2h' \left(\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{\partial w}{\partial z} \right) = 0$$

Баланс касательных напряжений

$$\int_0^{\kappa} rh(r) dr = Vol$$

Объем жидкости



$$\vec{U} = \{u, v, w\}$$

$$F(r, z)$$

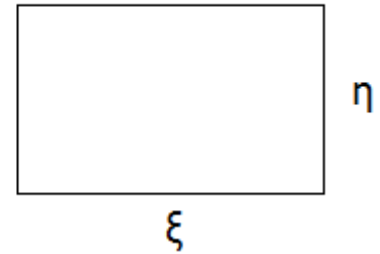
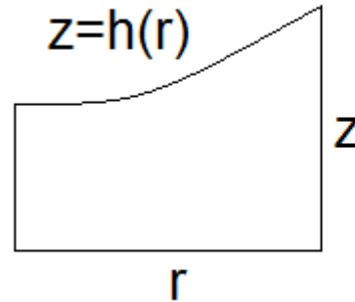
$$h(r)$$

$$\{r, \varphi, z\}$$

+ BC : на оси, диске и твердых границах, контактный угол с твердой поверхностью

Преобразование координат

$$\xi = r, \eta = z/h(r)$$



$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial \xi} - \eta \frac{h'}{h} \frac{\partial}{\partial \eta}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial \eta}$$

Приводим уравнения в новых переменных к дивергентному виду, согласно

$$\frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0 \quad \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{E \xi_x + F \xi_y}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{E \eta_x + F \eta_y}{J} \right) = 0$$

где $J = \frac{\partial(\xi, \eta)}{\partial(x, y)} = \frac{1}{h(\xi)}$ - Якобиан преобразования

Использование матричного метода

Переменные дискретной задачи:

- скорости и давления во всех точках (r,z)
- высота h во всех точках (r)
- константа C

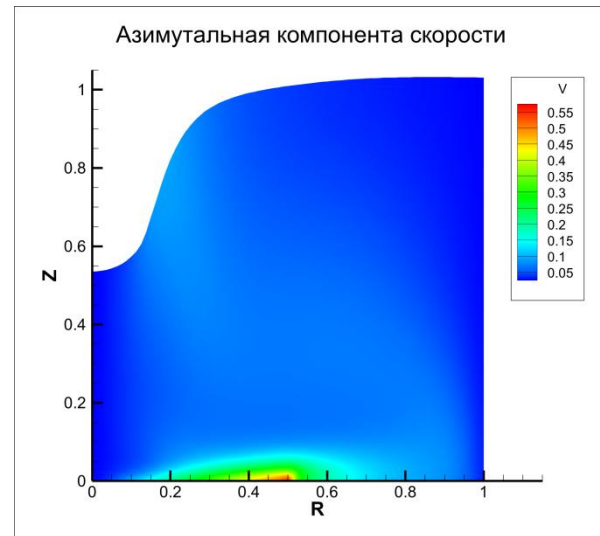
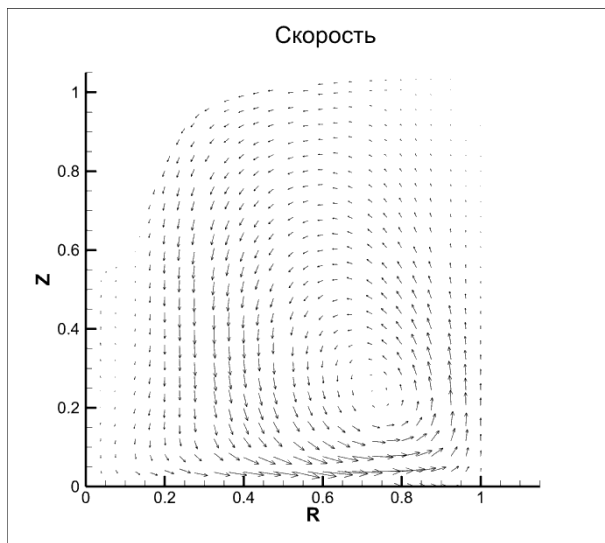
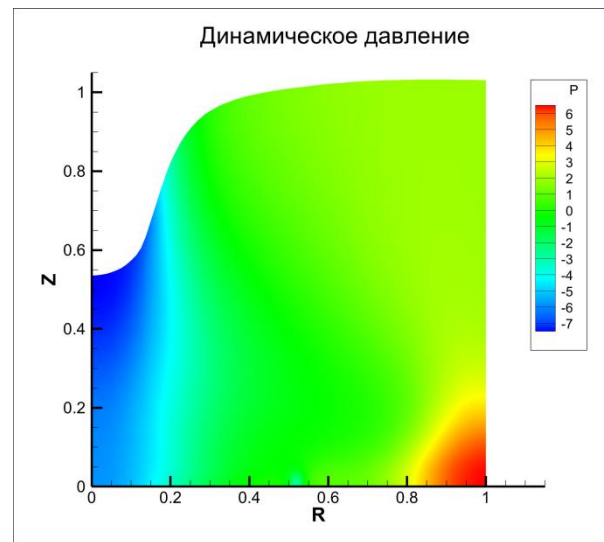
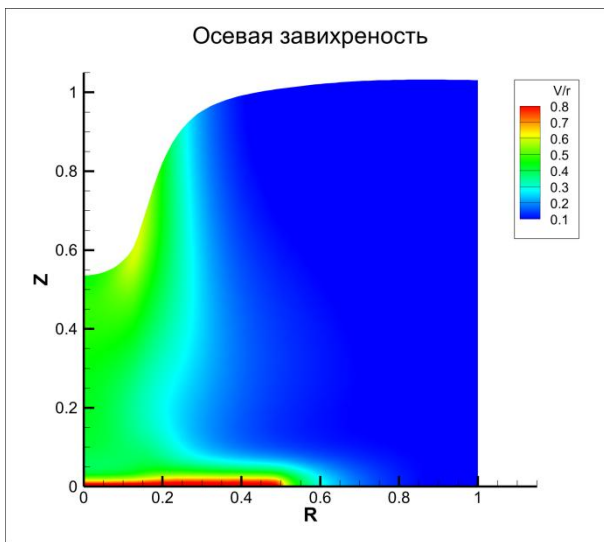
Уравнения:

- определяющие уравнения
- граничные условия
- интегральное условия для объема жидкости

Используем метод Ньютона в матричном виде:

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

Результаты для 81x81, Re=1000



Выводы

Продемонстрирована возможность математического моделирования стационарных трехмерных течений и течений со свободной поверхностью на основе матричного подхода.

Спасибо за внимание