

На правах рукописи

Чеванин Валерий Сергеевич

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ ТУРБУЛЕНТНОГО  
ПЕРЕМЕШИВАНИЯ НА ОСНОВЕ КВАЗИМОНОТОННОЙ СХЕМЫ  
ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ**

Специальность 05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва - 2012

Работа выполнена в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор

***Тишкин Владимир Федорович***

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор

***Лебо Иван Германович***

доктор физико-математических наук

***Рогов Борис Вадимович***

Ведущая организация:

***Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН***

Защита диссертации состоится " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2012 г. в \_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета "Д.002.024.03" при Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН по адресу: 125047, Москва, Миусская пл., 4, ауд. конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института прикладной математики

им. М.В.Келдыша РАН по адресу: 125047, Москва, Миусская пл., 4.

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2012 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь диссертационного совета:

доктор физико-математических наук

***Змитренко Н.В.***

## **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

### **Актуальность темы**

Работа посвящена математическому моделированию, созданию численных методик и разработке параллельного комплекса программ для проведения вычислительных экспериментов по моделированию турбулентного перемешивания при развитии гидродинамических неустойчивостей. Под этим понимается перемешивание сред как при наличии поля внешних сил, так и в случае присутствия ударных волн.

С практической точки зрения исследования данных видов турбулентного перемешивания с различными начальными и граничными условиями являются важными, например, для создания источников энергии на основе термоядерного синтеза или при проектировании конструкций, в которых происходит нестационарный нелинейный перенос вещества и т. д.

Для обеспечения необходимого качества математического моделирования таких задач необходимо использовать численные методы высокого порядка точности и в то же время сохраняющие монотонность решения.

Также эффективное численное исследование турбулентной стадии перемешивания в трехмерном случае требует проведения расчетов на достаточно подробных сетках, что приводит к необходимости вычислений на современных многопроцессорных вычислительных системах. При этом для решения предлагаемых задач количество используемых вычислительных узлов может достигать нескольких сотен и тысяч. В таком случае достаточно большую негативную роль начинают играть различные «издержки» на синхронизацию параллельных вычислений. Повышение эффективности вычислений в этом случае может быть достигнуто с помощью использования новых архитектур многопроцессорных систем и соответствующей оптимизации расчетных алгоритмов.

## **Цель работы**

Основными целями данной диссертационной работы являются разработка нового метода повышенного порядка точности [1], создание на основе этого метода эффективного параллельного трехмерного программного комплекса для моделирования развития гидродинамических неустойчивостей [2], а также исследование развития неустойчивостей Рихтмайера–Мешкова и Рэля-Тейлора посредством разработанного комплекса программ.

## **Научная новизна**

- 1) Разработана и исследована новая квазимонотонная схема повышенного порядка точности. Произведено сравнение с классическими схемами ENO и WENO на примере серии одномерных тестовых расчетов. В ряде случаев достигнута большая сравнительная эффективность разработанного метода третьего порядка точности.
- 2) Проведено моделирование развития гидродинамических неустойчивостей Рихтмайера–Мешкова и Рэля-Тейлора, в ходе которого было произведено уточнение некоторых основных турбулентных характеристик. В задаче моделирования развития неустойчивости Рэля-Тейлора был получен достаточно четкий Колмогоровский спектр.

## **Практическая ценность**

Реализованный программный комплекс может быть эффективно использован для численного моделирования различных стадий развития гидродинамических неустойчивостей с различными граничными и начальными условиями на многопроцессорных вычислительных системах с общей или распределенной памятью, а также с гибридной архитектурой. Также использование гибридной техники распараллеливания (одновременное применение MPI и OpenMP) может позволить построить универсальную платформу для создания параллельных

программных комплексов, оптимизированных под вычислительные системы на многоядерных процессорах.

Помимо этого, использование разработанного квазимонотонного метода повышенного порядка точности дает возможность с незначительными изменениями применять реализованный программный комплекс для математического моделирования более широкого класса современных газо- и гидродинамических задач, требующих повышенной монотонности.

### **Защищаемые положения**

- 1) Разработана и исследована на примере нескольких тестовых расчетов квазимонотонная схема повышенного порядка точности.
- 2) Построен многоплатформенный параллельный алгоритм для расчетов трехмерных задач развития гидродинамических неустойчивостей, использующий гибридную технологию MPI и OpenMP. Показана сравнительная эффективность примененного гибридного способа распараллеливания на примере тестовых расчетов.
- 3) Произведено моделирование развития гидродинамических неустойчивостей Рихтмайера–Мешкова и Рэлея–Тейлора. Уточнены некоторые турбулентные характеристики.

### **Апробация работы**

Результаты работы докладывались и обсуждались:

- На XXXVIII Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС (г. Звенигород, 2011);
- На XVIII Международной конференции «Математика. Компьютер. Образование» (г. Пущино, 2011);
- На XIII Всероссийской конференции-школе «Современные проблемы математического моделирования», (г. Абрау-Дюрсо, 2009);
- На семинаре ИПМ РАН «Математическое моделирование» под руководством В.Ф. Тишкина, А.А. Кулешова (г. Москва, 2010).

## Публикации

По теме диссертации опубликованы работы [1] – [5].

## Структура диссертации

Диссертация состоит из введения и трех глав, заключения и списка литературы. Текст изложен на 107 страницах, диссертация содержит 40 иллюстраций и 6 таблиц. Список литературы включает 95 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

### Глава 1

В начале первой главы диссертации представлен исторический обзор развития численных методов, применяемых при моделировании задач гиперболического типа.

Первые схемы для решения задач гиперболического типа, обладающие свойством монотонности, такие как классическая схема Годунова [6], имели первый порядок точности. Среди ранних монотонных схем, имевших порядок точности выше первого, можно отметить MUSCL схему Ван Лира [7], использующую кусочно-линейную интерполяцию с ограничением наклона интерполирующей функции для потоковых величин на границах ячеек. При этом для получения монотонного решения при построении схем типа MUSCL следует выбирать ограничение наклонов кусочно-линейных функций, в том числе основываясь на соблюдении условия TVD [8]:

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n),$$

где  $TV = \sum_j |u_{j+1} - u_j|$  - полная вариация.

Существует ряд популярных схем типа MUSCL, использующих различные интерполяции с соответствующими ограничителями для потоковых величин и удовлетворяющих условию TVD (например, схема Курганова и Тедмора [9]). Среди

первых монотонных схем повышенного порядка точности, основанных на анализе дифференциальных свойств решения, можно отметить схему Колгана [10].

Одной из ключевых работ в области построения универсальных квазимонотонных (существенно неосциллирующих) схем высокого порядка точности для разрывных задач гиперболического типа является работа Хартена, Энkvиста, Ошера и Чакраварти [11], в которой рассмотрен метод ENO.

Суть метода ENO заключается в восстановлении значений расчетных величин (поточковых функций) на границах ячеек с помощью интерполяционного полинома заданного порядка, выбираемого из нескольких возможных для ячейки на основе анализа гладкости. Количество возможных полиномов для ячейки совпадает с порядком метода.

Развитием метода ENO стал метод WENO [12], который использует несколько модифицированный способ построения интерполяционного полинома, основанный не на выборе одного из возможных полиномов для расчетной ячейки, а на комбинации всех «кандидатов» с некоторыми весами. Таким образом в областях гладкости используется расширенный интерполяционный полином, обеспечивающий наивысший возможный порядок точности, а вблизи разрывов используется полином, соответствующий ENO. Переход от «гладкой» к «негладкой» интерполяции производится на основе специального «анализатора гладкости» -

$$\beta_r = \sum_{l=1}^{k-1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \Delta x^{2l-1} \left( \frac{\partial^l p_r(x)}{\partial x^l} \right)^2 dx. \quad \text{Благодаря такому способу построения}$$

интерполяционного полинома, метод WENO в целом обладает большей точностью по сравнению с ENO соответствующего порядка.

Рассмотренные в первой главе методы ENO и WENO не всегда способны обеспечить необходимую монотонность решения. Для повышения монотонности был предложен новый квазимонотонный метод повышенного порядка точности [1], описанию которого посвящена большая часть первой главы диссертации.

Суть идеи метода основывается на следующих фактах:

1. Схема, основанная на интерполяции потоковых величин кусочно-постоянными функциями, монотонна, но имеет 1-ый порядок.
2. Для схем выше первого порядка точности чем ближе интерполяционный полином к константе, тем схема ближе к монотонной.

В рамках предложенного метода для расчета значений на границах расчетных ячеек используется интерполяционный полином  $p(x) = \alpha_1 p_1(x) + \alpha_2 p_2(x) + \dots + (1 - \alpha_1 - \alpha_2 - \dots - \alpha_{k-1}) p_k(x)$ , где  $p_1(x), \dots, p_k(x)$  - некоторые простые базисные полиномы, а коэффициенты  $\alpha_1, \dots, \alpha_{k-1}, 0 \leq \alpha_i \leq 1, i = 1, \dots, k-1, \sum_{i=1, k-1} \alpha_i \leq 1$ , выбираются таким образом, чтобы отклонение искомого интерполяционного полинома от интегрального среднего соответствующей

переменной  $\bar{u}_i(x_i, t) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(\xi, t) d\xi$  внутри ячейки в норме  $L_2$  было наименьшим:

$$\delta = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (p(x) - \bar{u}_i)^2 dx = \min .$$

Для нахождения  $\alpha_1^*, \dots, \alpha_{k-1}^*$ , реализующих минимум указанного функционала,

вычислим интеграл  $\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \{p_i(x) - \bar{u}_i\}^2 dx$  точно, продифференцируем по каждому из искомых коэффициентов  $\alpha_1, \dots, \alpha_{k-1}$  и приравняем к нулю каждую из полученных частных производных, после чего из полученной системы уравнений найдем  $\alpha_1^*, \dots, \alpha_{k-1}^*$ .

В рамках диссертационной работы подробно рассмотрено построение полинома второго порядка и соответствующей ему разностной схемы третьего порядка.

Построенная схема третьего порядка была реализована численно и протестирована на ряде одномерных модельных задач, таких как одномерное

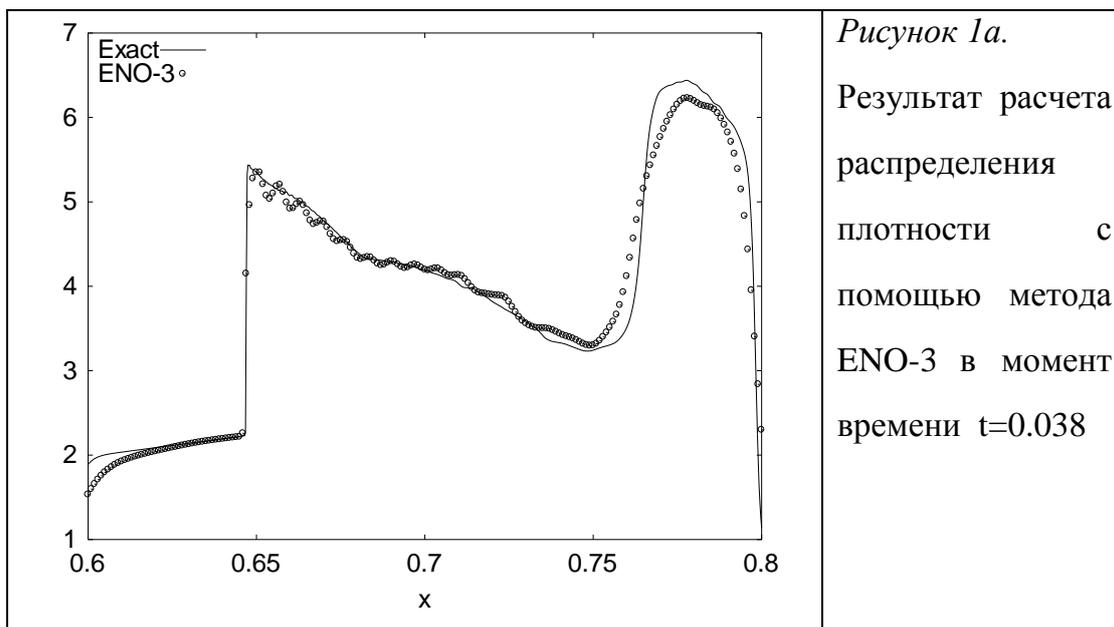
линейное уравнение переноса и уравнение Бюргерса, а также для некоторых задач одномерной газовой динамики.

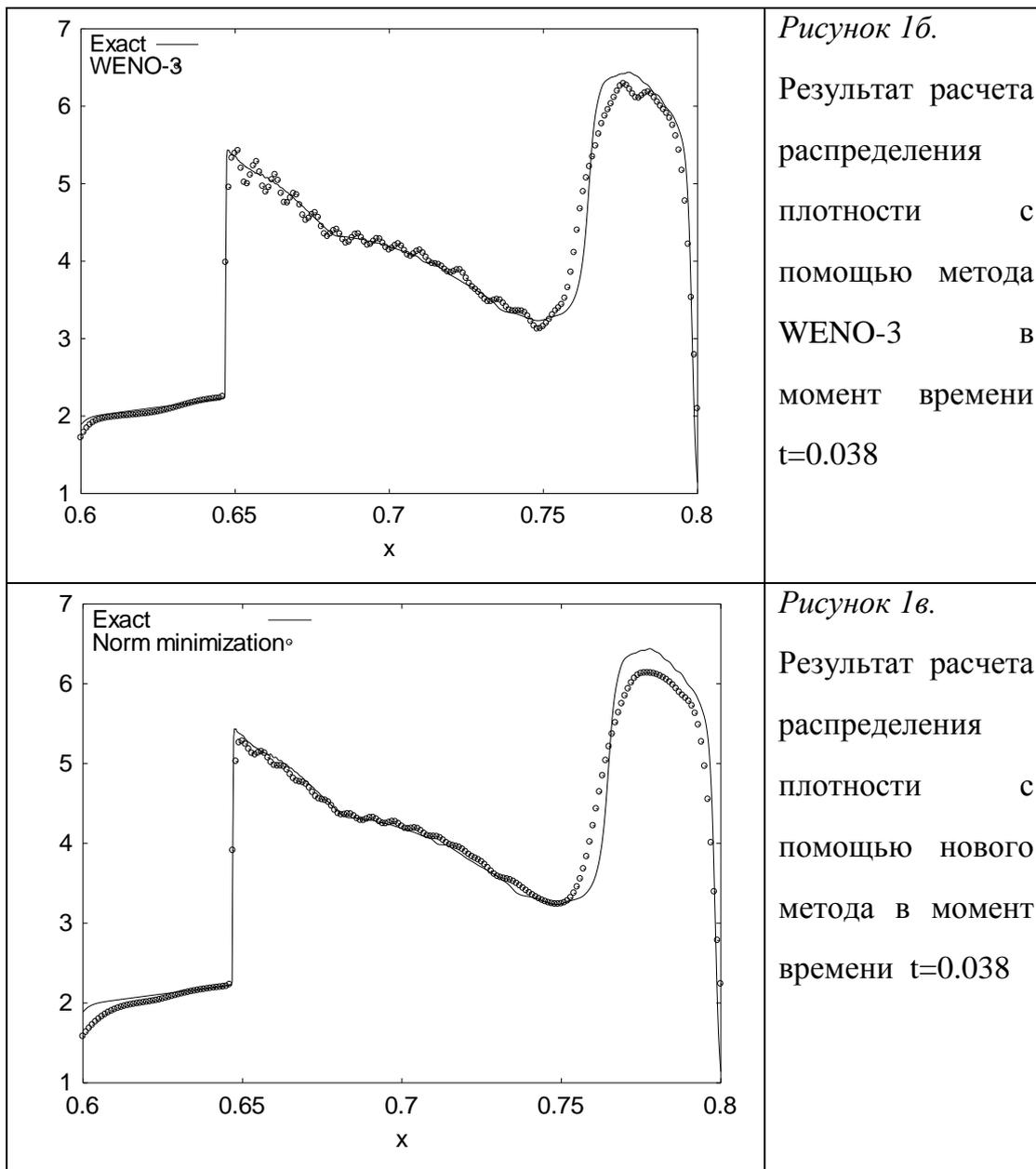
При расчетах линейного уравнения переноса и уравнения Бюргерса полученные результаты сравнивались с расчетами, выполненными с использованием методов ENO и WENO 3-его порядка, и показали сходный общий порядок точности схемы. Интегрирование по времени производилось с помощью метода Рунге-Кутты 4-ого порядка.

В рамках тестирования нового метода применительно к моделированию одномерной газовой динамики были рассчитаны задача Римана, задача Лакса, а также задача “Woodward-Colella blast waves” [13], представляющая собой аналог столкновения (перемешивания) двух ударных волн.

Расчеты задач одномерной газовой динамики также производились с использованием нового метода и методов ENO-3 и WENO-3, и в большинстве случаев новый метод обеспечил большую монотонность решения по сравнению с ENO и WENO.

На рисунках 1а-1в приведены сравнительные результаты расчетов задачи “blast waves”. Сплошная линия (аналог точного решения) представляет собой решение, полученное с помощью метода ENO-3 с использованием 4000 пространственных ячеек, остальные расчеты приведены для 1000 ячеек (круги на рисунках 1а-1в).





Следует отметить, что при моделировании одномерной газовой динамики был использованы потоки в форме Роу и Лакса-Фридрихса, а интегрирование по времени производилось с помощью метода Рунге-Кутты 3-его порядка.

## Глава 2

Во второй главе диссертации описан алгоритм разработанного параллельного программного комплекса, использованного при решении интересующих нас трехмерных задач турбулентного перемешивания при развитии гидродинамических неустойчивостей [2].

Основой программного комплекса является ядро, отвечающее за численное решение трехмерной системы гидродинамических уравнений с заданными начальными и граничными условиями.

Разработанный комплекс программ предназначен для выполнения параллельных расчетов на подробных сетках с использованием схем повышенного порядка точности, что подразумевает большое число распределенных вычислительных операций и необходимость частой синхронизации вычислений. Во второй главе диссертации подробно описан процесс распараллеливания и синхронизации вычислений, а также способы записи/чтения промежуточных данных.

Также во второй главе рассмотрены основные типы архитектур параллельных вычислительных машин (с общей и распределенной памятью), а также рассмотрен пример «гибридной» архитектуры, сочетающей в себе комбинирование общей и разделенной памяти.

Эффективное использование распределенных вычислений на многопроцессорных системах с гибридной архитектурой во многих случаях требует специальной модификации программного кода. С этой целью при создании комплекса программ был реализован гибридный способ использования технологий MPI и OpenMP, при котором более «грубое» распараллеливание осуществляется с помощью MPI, а более «глубокое» - между OpenMP. При правильном подборе соотношения процессов (нитей) OpenMP на процесс MPI такая схема может позволить избежать лишних пересылок данных между параллельными процессами при помощи обменов через области общей памяти.

Приведенная выше схема совместного использования общей и разделенной памяти с помощью комбинирования MPI и OpenMP была использована для

распределения вычислений на платформе, построенной на многоядерных процессорах. В этом случае MPI используется для распараллеливания по процессорам (или отдельным самостоятельным подобластям процессора), а OpenMP - для распараллеливания по ядрам процессора.

С использованием указанного комбинирования MPI и OpenMP был разработан комплекс программ для моделирования развития гидродинамических неустойчивостей, а также произведены тестовые расчеты некоторых задач с замерами расчетного времени и получены основные характеристики для оценки эффективности использования параллельных расчетов (скорость и эффективность). Для сравнения аналогичные оценки были получены для расчетов с использованием только MPI. Сравнительные результаты приведены в таблицах 1 и 2.

<b>Кол-во узлов</b>	<b>MPI</b>	<b>MPI+OpenMP</b>
1	1.0	1.0
2	2.0	2.0
4	4.0	4.0
8	8.0	8.0
16	15.8	15.9
32	31.5	31.8
64	45.6	61.9
128	86.6	108.3

*Таблица 1.* Сравнительные показатели ускорения немасштабируемых расчетов при распараллеливании с помощью MPI и MPI+OpenMP для моделирования развития Рэлей-Тейлоровской неустойчивости

Кол-во узлов	MPI	MPI+OpenMP
1	1.0	1.0
2	1.0	1.0
4	1.0	1.0
8	1.0	1.0
16	1.0	1.0
32	1.0	1.1
64	0.7	1.0
128	0.7	0.8

*Таблица 2.* Сравнительные показатели эффективности немасштабируемых расчетов при распараллеливании с помощью MPI и MPI+OpenMP для моделирования развития Рэлей-Тейлоровской неустойчивости

### Глава 3

В третьей главе данной работы приведены результаты расчетов развития неустойчивостей Рихтмайера-Мешкова и Рэля-Тейлора.

В первой части третьей главы рассмотрена задача, предложенная Погги [14]. Целью данной задачи является исследование возникновения и развития неустойчивости Рихтмайера-Мешкова при наличии возмущенной контактной границы и ударной волны.

Для решения этой задачи был использован разработанный программный комплекс, решающий систему уравнений гидродинамики с учетом наличия жидкостей с различным значением показателя адиабаты (совместно с системой уравнений гидродинамики, рассмотренной во второй главе, решается уравнение для массовой концентрации).

Также следует отметить, что расчет потоковых величин на границах ячеек производился на основе решения задачи о распаде произвольного разрыва.

Одной из основных целей численного моделирования данной задачи является получение временной зависимости амплитуд пульсаций продольной компоненты скорости в выбранных участках расчетной области.

Все расчеты проводились как с использованием разработанной, описанной в первой главе, квазимонотонной схемы повышенного порядка точности, так и с использованием предложенных ранее TVD-схем. Сравнительные результаты нормированных максимумов рассчитанных амплитуд пульсаций для различных сеток, выполненные с использованием указанных методов, представлены в таблице 3. Также в таблице 3 приведены соответствующие экспериментальные значения, взятые из работы [14].

Номер пика	Эксперимент	TVD схема		Новая схема	
		s=0.5	s=1.0	s=0.5	s=1.0
1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
2	0.79	0.47	0.53	0.50	0.56
3	0.59	0.25	0.33	0.30	0.36

*Таблица 3.* Сравнение нормированных максимумов амплитуд пульсаций, рассчитанных с помощью TVD-схемы, а также квазимонотонной схемы повышенного порядка точности, с экспериментом.

Также для задачи Погги были рассчитаны ширина зоны турбулентного перемешивания, тонкая структура турбулентности, спектральные характеристики. Результаты этих расчетов, а также трехмерный график изоповерхности массовой концентрации приведены в первой части третьей главы.

Вторая часть третьей главы диссертации посвящена численному решению задачи гравитационного перемешивания двух жидкостей с возмущенной контактной границей в начальный момент времени (неустойчивость Рэля-Тейлора).

Как и в предыдущем случае задача численного исследования развития неустойчивости Рэля-Тейлора решалась с помощью описанного во второй главе

комплекса программ на основе разработанного метода повышенного порядка точности.

При моделировании рассмотренных задач турбулентного перемешивания были также построены спектры кинетической энергии согласно методике, приведенной во второй главе диссертации.

При исследовании спектра кинетической энергии на различных стадиях развития неустойчивостей (в частности, Рэлея-Тейлора) было отмечено, что в определенном временном интервале спектр имеет характерный вид – в достаточно широкой области абсолютных значений волновых векторов спектральная плотность имеет близкую к линейной зависимость с наклоном  $-5/3$  (Колмогоровский спектр), которая сменяется аналогичной линейной зависимостью с наклоном  $-11/3$  (рисунок 2).

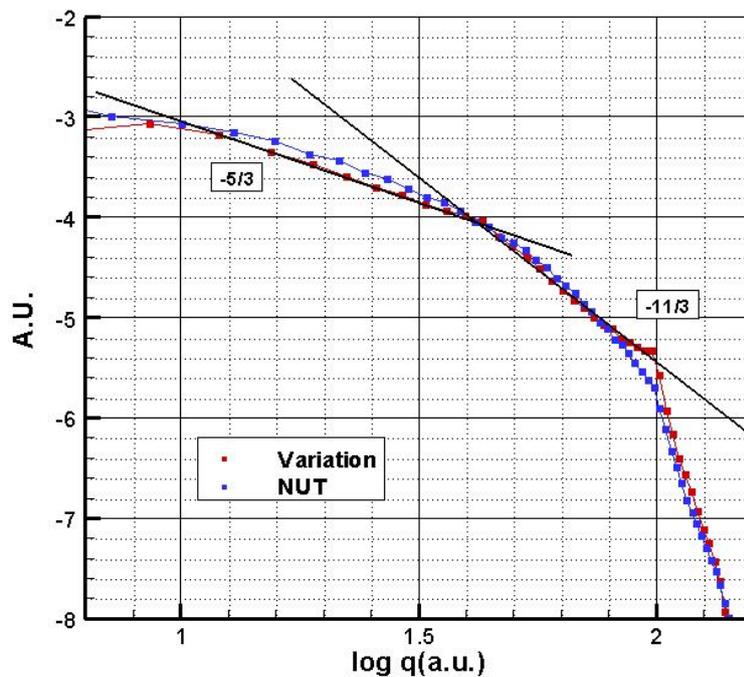


Рисунок 2. Спектральная плотность кинетической энергии, наблюдаемая в задаче развития неустойчивости Рэлея-Тэйлора

Подобные результаты в том или ином виде наблюдались при моделировании аналогичных задач с использованием разработанных ранее TVD-схем.

Резкое затухание спектра в области  $q \geq 2$  не имеет физического смысла, а связано со спецификой усреднения и отсутствием всех гармоник для всех волновых чисел в дискретном представлении.

При исследовании ширины зоны турбулентного перемешивания в этой задаче было также получено уменьшение скорости роста ширины зоны при переходе к более подробным сеткам.

Во второй части третьей главы представлены результаты расчетов изоповерхностей массовой концентрации тяжелой и легкой жидкостей с характерными «провалами» тяжелого газа в виде струй и «подъемами» легкого газа в виде пузырей.

В конце третьей главы также приведены результаты расчетов тонкой структуры турбулентности в задаче развития неустойчивости Рэлея-Тейлора.

## **ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ**

- 1) Разработана квазимонотонная схема повышенного порядка точности для задач гидродинамики, содержащих разрывы. Произведены сравнительные тестовые расчеты с использованием разработанной схемы и схем ENO и WENO, показана эффективность разработанной схемы.
- 2) С использованием разработанной квазимонотонной схемы создан параллельный программный комплекс, использующий гибридный интерфейс распараллеливания MPI+OpenMP. Произведено тестирование реализованной гибридной техники распараллеливания на системе, построенной на современных многоядерных процессорах, достигнута большая эффективность параллельных вычислений по сравнению с чистым MPI. Сформулирована идея построения универсальной платформы для создания эффективных параллельных программных комплексов для разных архитектур МВС.
- 3) Реализованный программный комплекс был использован при моделировании развития гидродинамических неустойчивостей Рихтмайера–Мешкова и Рэлея-Тейлора. Были уточнены некоторые характеристики турбулентной стадии развития неустойчивостей. В задаче моделирования гравитационного перемешивания был получен четкий Колмогоровский спектр.

## ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. М.Е. Ладонкина, О.А. Неклюдова, В.Ф. Тишкин, В.С. Чеванин, Об одном варианте существенно неосциллирующих разностных схем высокого порядка точности для систем законов сохранения. // Математическое Моделирование, том 21, номер 11, 2009, С. 19-32.
2. В.С. Чеванин, Численное моделирование задач турбулентного перемешивания на основе квазимонотонной схемы повышенного порядка точности. // Математическое Моделирование, том 24, номер 2, 2012, С. 17-32.
3. В.С. Чеванин, Численное моделирование задач турбулентного перемешивания на основе квазимонотонной схемы повышенного порядка точности // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша РАН. 2011. № 32.
4. В.Ф. Тишкин, В.С. Чеванин, Численное моделирование задач турбулентного перемешивания на основе квазимонотонной схемы повышенного порядка точности. // Тезисы докладов XVIII Международной конференции «Математика. Компьютер. Образование», г. Пущино, 2011 г.
5. В.С. Чеванин, Численное моделирование задач турбулентного перемешивания на основе квазимонотонной схемы повышенного порядка точности. // Тезисы докладов XXXVIII Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, г. Звенигород, 2011 г.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

6. Godunov S. K., A Difference Scheme for Numerical Solution of Discontinuous Solution of Hydrodynamic Equations. // Math. Sbornik, **47**, 271–306, translated US Joint Publ. Res. Service, JPRS 7226, 1969.
7. B. van Leer., Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A Second-Order Sequel to Godunov's Method. // Journal of Computational Physics. 1979, v.32, p. 101-136.
8. Harten, Ami., High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. // Journal of Computational Physics. 1983, v.49, p. 357-393.

9. Kurganov, A., Tadmor, E., New high-resolution central schemes for non-linear conservation laws and convection-diffusion equations. // Journal of Computational Physics. 2000, v.160, p. 241–282.
10. Колган В.П., Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики. // Ученые записки ЦАГИ. 1972. т. 3. 1; 6. с. 68 - 77
11. Harten, B. Engquist, S. Osher and S. Chakravarthy, Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes, III. // Journal of Computational Physics, v. 71 (1987), pp.231-303
12. X.-D. Liu, S. Osher and T. Chan, Weighted essentially nonoscillatory schemes. // Journal of Computational Physics, v. 115 (1994), pp.200-212
13. P. Woodward and P. Colella, The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. // Journal of Computational Physics, 1984, v. 54, pp.115-173.
14. G.Lacassin, F.Poggi, G.Rodriguez, Experiment and Numerical Computation on a Large-Scale Richtmyer-Meshkov Instability. // Proc. of 6-th IWPCTM, Marseille, France, 1997, pp.289-294.