



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 239 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Шатров О.А., Щерица О.В.,
Мажорова О.С.

Параллельный алгоритм
для решения уравнений
термогравитационной
конвекции

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Шатров О.А., Щерица О.В., Мажорова О.С. Параллельный алгоритм для решения уравнений термогравитационной конвекции // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 239. 21 с. doi:[10.20948/prepr-2018-239](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-239)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-239>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. Келдыша
Российской академии наук

О.А. Шатров, О.В. Щерица, О.С. Мажорова

Параллельный алгоритм для решения уравнений
термогравитационной конвекции

Москва — 2018

Шатров О.А., Щерица О.В., Мажорова О.С.

Параллельный алгоритм для решения уравнений термогравитационной конвекции

В работе предложен алгоритм типа предиктор-корректор для решения трехмерных нестационарных уравнений термогравитационной конвекции. В нем используется явная разностная схема для аппроксимации уравнений Навье–Стокса в естественных переменных. Уравнение для давления решается методом дискретного преобразования Фурье. В случае больших и умеренных значениях числа Прандтля уравнение теплопроводности также аппроксимируется с помощью явной схемы. При малых значениях числа Прандтля используется неявная схема. Программный комплекс, реализующий предложенный алгоритм, выполнен в двух вариантах: OpenMP и OpenACC. Показано, что технология OpenACC позволяет существенно сократить затраты машинного времени на расчет задачи. Проведено сравнение с неявными совместными разностными алгоритмами.

Ключевые слова: термогравитационная конвекция, уравнения Навье – Стокса, математическое моделирование, дискретное преобразование Фурье.

**Oleg Alexandrovich Shatrov, Olga Vladimirovna Shcheritsa,
Olga Semenovna Mazhorova**

Parallel algorithm for the solution of thermogravitational convection equations

This paper presents projection method for the solution of three dimensional unsteady thermogravitational convection equations. An explicit finite-difference scheme is used for approximation Navier–Stokes equations in the natural variables. The Poisson equation for pressure is solved by the discrete Fourier transform method. An explicit finite-difference scheme is also used to solve heat transfer equation in the case of large and medium Prandtl numbers. For small Prandtl number an implicit scheme is used. Program is written for two cases: OpenMP and OpenACC. It is shown that OpenACC technology significantly reduces the computation time. The comparison with the fully implicit coupled method is made.

Key words: thermogravitational convection, Navier–Stokes equations, mathematical modeling, discrete Fourier transform.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-01-00436.

1. Введение

Быстрое развитие многопроцессорной вычислительной техники сопровождается все возрастающим интересом к разработке и использованию явных разностных схем для решения многомерных нестационарных задач математической физики. Явные алгоритмы легко поддаются распараллеливанию, позволяя тривиальным образом разбивать расчетную область на подобласти и рассчитывать неизвестные величины во всех подобластях независимо и параллельно.

В отличие от явных алгоритмов, вычислительные методы, в основе которых лежат неявные разностные схемы, требуют дополнительных усилий для реализации параллельного кода. В первую очередь это связано с необходимостью решать на каждом временном слое систему сеточных уравнений. Эта процедура занимает большую часть машинного времени. Время счета и затраты оперативной памяти растут непропорционально быстро с ростом числа узлов сетки, что существенно ограничивает возможность использования подробных сеток [1].

Явные формулы расчета значений искомых функций на новом временном слое дают возможность избежать трудоемкой процедуры решения системы сеточных уравнений. Вместе с тем возникают жесткие ограничения на величину шага по времени $\tau \sim h^2$, связанные с устойчивостью разностной схемы. Современные многоядерные процессоры и графические ускорители позволяют на пространственных сетках с большим числом узлов очень быстро вычислять на каждом слое искомые неизвестные и тем самым компенсировать недостаток устойчивости разностной схемы.

В данной работе предложен явный алгоритм типа предиктор-корректор для решения трехмерных нестационарных уравнений Навье–Стокса в естественных переменных. Уравнение Пуассона для давления решается с помощью дискретного преобразования Фурье. Возможности метода продемонстрированы на примере решения задачи о конвективном движении жидкости в горизонтальном слое несжимаемой жидкости. В работе также приведены сравнительные времена расчета задачи на различных сетках при использовании технологий OpenMP и OpenACC.

Авторы выражают благодарность Бахтину В.А. за ценные предложения

и рекомендации по вопросам оптимизации параллельного кода, а также за помощь в организации расчетов на современном графическом ускорителе.

2. Постановка задачи

Рассматривается математическая модель движения вязкой несжимаемой жидкости в трехмерном случае. В основе модели лежит система уравнений гидродинамики, которая состоит из уравнений Навье–Стокса и уравнения конвективной теплопроводности. В безразмерном виде система уравнений термогравитационной конвекции имеет вид [2]:

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V}\nabla)\mathbf{V} = -\nabla p + \Delta \mathbf{V} + \frac{Ra}{Pr} T \boldsymbol{\gamma}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V}\nabla)T = \frac{1}{Pr} \Delta T + \frac{1}{Pr} Q. \quad (3)$$

В системе уравнений (1) – (3) используются следующие обозначения: $\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$ — скорость движения жидкости, t — время, p — давление, ν — вязкость, g — модуль ускорения свободного падения, β — коэффициент объемного расширения, T — температура, $\boldsymbol{\gamma}$ — единичный вектор, направленный вертикально вверх, \varkappa — коэффициент теплопроводности, Q — внутренний источник теплоты, считающийся постоянным во всей области.

Задача рассматривается в декартовой системе координат (x_1, x_2, x_3) в области $\Omega = [0, L_1] \times [0, L_2] \times [0, L_3]$. Температура на верхней и нижней границах фиксирована, соответственно T_{top} и T_{bot} , $T_{top} < T_{bot}$. Боковая поверхность теплоизолирована. На всех границах заданы условия прилипания и непротекания. В начальный момент времени ($t = 0$):

$$\mathbf{V} = 0, \quad T = T_{bot}(1 - x_3) + 0.5x_3(Q + 2T_{top} - Qx_3).$$

В качестве независимых параметров обезразмеривания выбраны: высота области $L_* = L_3$, перепад температуры $\Delta T = T_{bot} - T_{top}$, время $t_\nu = L_*^2/\nu$; $Ra = g\beta\Delta TL_*^3/(\nu\varkappa)$ — число Рэлея, $Pr = \nu/\varkappa$ — число Прандтля.

3. Разностная схема

3.1. Сетка и сеточные функции

Вдоль каждого направления x_α введем одномерную сетку по пространству $\Omega_\alpha^h = \{0 = x_{\alpha,0} < x_{\alpha,1} < \dots < x_{\alpha,N_\alpha} = L_\alpha\}$, $\alpha = 1, 2, 3$ с шагами $h_{i+1/2}^\alpha = x_{\alpha,i+1} - x_{\alpha,i}$, $i = \overline{0, N_\alpha - 1}$. Обозначим $x_{\alpha,i+1/2} = (x_{\alpha,i} + x_{\alpha,i+1})/2$, $i = \overline{0, N_\alpha - 1}$ и шаги $\bar{h}_0^\alpha = h_{1/2}^\alpha/2$, $\bar{h}_{N_\alpha}^\alpha = h_{N_\alpha-1/2}^\alpha/2$, $\bar{h}_i^\alpha = (h_{i-1/2}^\alpha + h_{i+1/2}^\alpha)/2$, $i = \overline{1, N_\alpha - 1}$. Введем дополнительные сетки $\bar{\Omega}_\alpha^h = \{x_{\alpha,i+1/2}, i = \overline{0, N_\alpha - 1}\}$, $\alpha = 1, 2, 3$ и сетку по времени $\Omega_t = \{t_l = \tau l, l = 0, 1, 2, \dots\}$.

Разностная схема для задачи (1) – (3) строится на разнесенных сетках. Скорость V_1 будем рассматривать на множестве $\Omega_{V_1}^h = \Omega_1^h \times \bar{\Omega}_2^h \times \bar{\Omega}_3^h$, V_2 на $\Omega_{V_2}^h = \bar{\Omega}_1^h \times \Omega_2^h \times \bar{\Omega}_3^h$, V_3 на $\Omega_{V_3}^h = \bar{\Omega}_1^h \times \bar{\Omega}_2^h \times \Omega_3^h$, давление на множестве $\Omega_p^h = \bar{\Omega}_1^h \times \bar{\Omega}_2^h \times \bar{\Omega}_3^h$, температуру будем относить к узлам основной сетки $\Omega^h = \Omega_1^h \times \Omega_2^h \times \Omega_3^h$. Структура разнесенной сетки изображена на рисунке 1. Вершины ячейки для давления отмечены кружками, а для компоненты скорости V_2 – квадратами.

Каждой сетке $\Omega_{V_\alpha}^h$, Ω_p^h и Ω^h сопоставим систему ячеек с центрами в узлах соответствующей сетки. Пусть $\mu = (\mu_1, \mu_2, \mu_3)$, $\mu^{(0)} = (\mu_1 + 1/2, \mu_2 + 1/2, \mu_3 + 1/2)$, $\mu^{(1)} = (\mu_1, \mu_2 + 1/2, \mu_3 + 1/2)$, $\mu^{(2)} = (\mu_1 + 1/2, \mu_2, \mu_3 + 1/2)$, $\mu^{(3)} =$

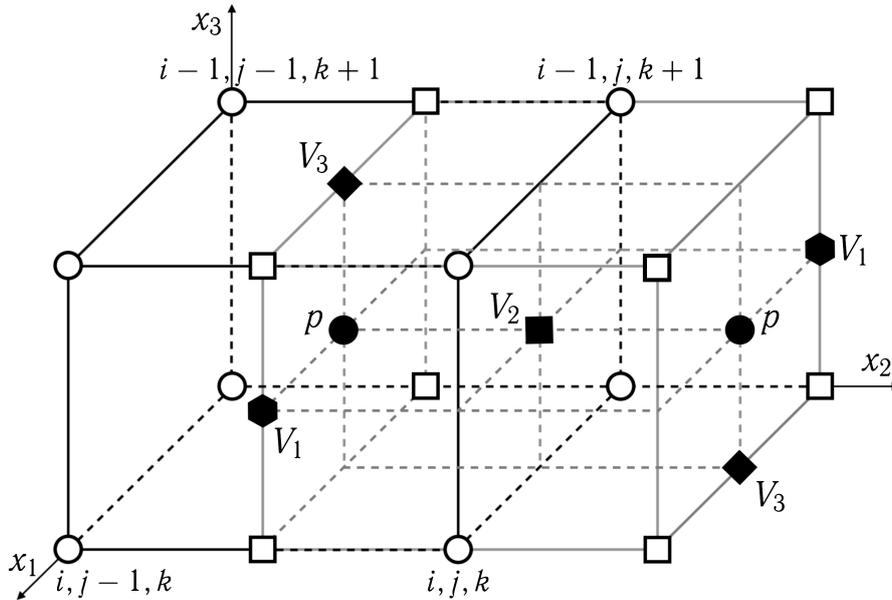


Рис. 1: Структура разнесенной сетки.

$(\mu_1+1/2, \mu_2+1/2, \mu_3)$. Точка $x_{\mu^{(\alpha)}} \in \Omega_{V_\alpha}^h$, $\alpha = 1, 2, 3$, где задается компонента V_α вектора скорости, лежит в центре ячейки $\Omega_{\mu^{(\alpha)}}$, которая имеет объем $d\Omega_{\mu^{(\alpha)}} = \hbar_{\mu_\alpha}^\alpha \prod_{\beta \neq \alpha} h_{\mu_\beta+1/2}^\beta$. Точка $x_{\mu^{(0)}}$ является центром ячейки $\Omega_{\mu^{(0)}} \in \Omega_p^h$, ее объем $d\Omega_{\mu^{(0)}} = \prod_\alpha h_{\mu_\alpha+1/2}^\alpha$. Аналогично для температуры: точка x_μ является центром ячейки $\Omega_\mu \in \Omega^h$, ее объем $d\Omega_\mu = \prod_\alpha \hbar_\mu^\alpha$. Введем также $dS_{\mu^{(\alpha)}}^\beta = \prod_{\gamma \neq \beta} h_{\mu^{(\gamma)}+1/2}^\gamma$, если $\alpha = \beta$, $dS_{\mu^{(\alpha)}}^\beta = \hbar_{\mu^{(\beta)}}^\beta h_{\mu^{(\gamma)}+1/2}^\gamma$, причем $\gamma \neq \alpha \neq \beta$, $dS_\mu^\alpha = \prod_{\beta \neq \alpha} \hbar_{\mu^{(\beta)}}^\beta$, $dS_{\mu^{(0)}}^\alpha = \prod_{\beta \neq \alpha} h_{\mu^{(\beta)}+1/2}^\beta$.

Таким образом, количество ячеек для V_1 равняется $(N_1 + 1) \times N_2 \times N_3$, для V_2 : $N_1 \times (N_2 + 1) \times N_3$, для V_3 : $N_1 \times N_2 \times (N_3 + 1)$, для p : $N_1 \times N_2 \times N_3$, а для температуры $(N_1 + 1) \times (N_2 + 1) \times (N_3 + 1)$.

Разностные производные от сеточных функций определим обычным образом [3, стр.18]. Если по переменной x_α функция f задана на сетке $\bar{\Omega}_\alpha^h$, то

$$\frac{\partial f}{\partial x_\alpha} \sim L_{\tilde{x}_\alpha} f = f_{\tilde{x}_\alpha} = \frac{f(x_{\alpha, \mu_\alpha+1/2}) - f(x_{\alpha, \mu_\alpha-1/2})}{\hbar_{\mu_\alpha}^\alpha}; \quad (4)$$

для функций, заданных в узлах сетки Ω_α^h ,

$$\frac{\partial f}{\partial x_\alpha} \sim L_{x_\alpha} f = f_{x_\alpha} = \frac{f(x_{\alpha, \mu_\alpha+1}) - f(x_{\alpha, \mu_\alpha})}{h_{\mu_\alpha+1/2}^\alpha}. \quad (5)$$

В формулах (4), (5) указаны только изменяющиеся переменные. Результат действия операторов $L_{\tilde{x}_\alpha}$ и L_{x_α} будем относить, соответственно, к точкам x_{α, μ_α} и $x_{\alpha, \mu_\alpha+1/2}$.

3.2. Аппроксимация по пространству

Разностная аппроксимация уравнения для скорости V_α получается интегрированием уравнения (1) по ячейке $\Omega_{\mu^{(\alpha)}}$. При этом производная от давления и оператор Лапласа записываются на сетке естественным образом:

$$\frac{\partial p}{\partial x_\alpha} \sim L_{\tilde{x}_\alpha} p, \quad \Delta V_\alpha \sim \Delta_\alpha^h V_\alpha = (V_\alpha)_{x_\alpha \tilde{x}_\alpha} + \sum_{\beta \neq \alpha} (V_\alpha)_{\tilde{x}_\beta x_\beta}. \quad (6)$$

Построим теперь аппроксимацию конвективных членов. Следуя стандартной процедуре применения интегро-интерполяционного метода, проинтегрируем

дивергентную форму записи конвективных членов в уравнении для V_α по ячейке $\Omega_{\mu^{(\alpha)}}$. После деления на объём ячейки получим:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_\alpha(\mathbf{V})V_\alpha &= \frac{\partial}{\partial x_\beta}(V_\alpha V_\beta) \sim \\ &\sim \mathcal{K}_\alpha^h(\mathbf{V})V_\alpha = L_{\tilde{x}_\alpha}(V_{\alpha,\mu^{(0)}}V_{\alpha,\mu^{(0)}}) + \sum_{\beta \neq \alpha} L_{x_\beta}(V_{\alpha,\mu^{(\alpha\beta)}}V_{\beta,\mu^{(\alpha\beta)}}). \end{aligned} \quad (7)$$

В данной записи используются значения компонент вектора скорости в точках, в которых они не определены. Необходимо доопределить скорость в этих точках так, чтобы полученный сеточный оператор конвективного переноса обладал свойством кососимметричности. Для этого компоненты вектора скорости в операторе $\mathcal{K}_\alpha^h(\mathbf{V})V_\alpha$ должны вычисляться по формулам [4]

$$\begin{aligned} V_{\alpha,\mu_\alpha+1/2} &= \frac{V_{\alpha,\mu^{(\alpha)}}(+1_\alpha) + V_{\alpha,\mu^{(\alpha)}}}{2}, \\ V_{\alpha,\mu_\beta+1/2} &= \frac{V_{\alpha,\mu^{(\alpha)}} + V_{\alpha,\mu^{(\alpha)}}(-1_\beta)}{2}, \quad \alpha \neq \beta, \\ V_{\beta,\mu_\alpha} &= \frac{V_{\beta,\mu^{(\beta)}}h_{\mu_\alpha+1/2}^\alpha + V_{\beta,\mu^{(\beta)}}(-1_\alpha)h_{\mu_\alpha-1/2}^\alpha}{2\tilde{h}_\mu^\alpha}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь и в дальнейшем $f_{\mu^{(\alpha)}}(\pm 1_\beta)$ — значение функции f в точке, сдвинутой относительно узла сетки $x_{\mu^{(\alpha)}}$ на ± 1 в направлении β . Интерполяция (8) обеспечивает равенство нулю дивергенции по ячейкам сетки, связанным с компонентами вектора скорости: $\Omega_{\mu^{(\alpha)}}$, $\alpha = 1, 2, 3$.

Дифференциально-разностная аппроксимация уравнения (1), основанная на разностных операторах (6) и (7) с учетом (8), выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial V_\alpha}{\partial t} + \mathcal{K}_\alpha^h(\mathbf{V})V_\alpha = -L_{\tilde{x}_\alpha}p + \Delta_\alpha^h V_\alpha + \frac{Ra}{Pr}T\gamma. \quad (9)$$

Аналогично строится аппроксимация уравнения теплопереноса (3):

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathcal{K}^h(\mathbf{V})T = \frac{1}{Pr}\Delta^h T + \frac{1}{Pr}Q.$$

Оператор конвективного переноса в уравнении (3) также является кососимметричным. Следовательно, для того чтобы дискретный аналог $\mathcal{K}^h(\mathbf{V})T$ наследовал свойства непрерывного оператора, компоненты вектора скорости и

температуры необходимо переинтерполировать следующим образом [5]:

$$\begin{aligned} T_{\mu_\alpha+1/2} &= \frac{T_\mu(+1_\alpha) + T_\mu}{2}, \\ V_{\alpha,\mu_\alpha+1/2} &= \frac{V_{\alpha,\mu^{(\alpha)}}(+1_\alpha) + V_{\alpha,\mu^{(\alpha)}}}{2}, \\ V_{\alpha,\mu_\alpha} &= \frac{1}{4dS_\mu^\alpha} \sum_{\substack{\mu=\mu_\beta\pm 1/2 \\ \beta\neq\alpha}} V_{\alpha,\mu} dS_\mu^\alpha. \end{aligned}$$

3.3. Аппроксимация по времени

3.3.1. Уравнения Навье–Стокса

Для решения задачи используется явная разностная схема, причем для решения системы уравнений Навье–Стокса применяется классическая схема типа предиктор–корректор [6]. Система уравнений (1) – (2) решается в два этапа:

1) Предиктор

Предиктор давления выбирается следующим образом:

$$\tilde{p} = p,$$

где p – давление с предыдущего временного слоя. В начальный момент времени предполагается, что давление находится в равновесии с полем температуры. По полю давления \tilde{p} вычисляется предиктор скорости \tilde{V}_α :

$$\tilde{V}_\alpha = V_\alpha + \tau \left(\Delta_\alpha^h V_\alpha - \mathcal{K}_\alpha^h(\mathbf{V}) V_\alpha - L_{\tilde{x}_\alpha} \tilde{p} + \frac{Ra}{Pr} T \gamma \right).$$

Каждая компонента вектора скорости может быть вычислена независимо, и, следовательно, их можно вычислять параллельно. Для того чтобы поле скоростей удовлетворяло условию несжимаемости (2), его необходимо откорректировать.

2) Корректор

Внутри области скорость подправляется, используя давление на следующем временном слое:

$$\hat{V}_\alpha = \tilde{V}_\alpha - \tau \nabla(\hat{p} - \tilde{p}), \quad x \in \Omega \setminus \partial\Omega. \quad (10)$$

Поскольку давление \widehat{p} неизвестно, а скорость \widehat{V}_α должна удовлетворять условию несжимаемости, то, применяя оператор ∇ к обеим частям равенства (10), получаем следующее уравнение для поправки давления $\delta p = \widehat{p} - \widetilde{p}$:

$$\Delta(\delta p) = \frac{\nabla \cdot \widetilde{V}}{\tau}, \quad (11)$$

$$\left. \frac{\partial(\delta p)}{\partial n} \right|_{\partial\Omega} = 0. \quad (12)$$

По вычисленной поправке давления из (10) определяется скорость на следующем временном слое. Таким образом, этап коррекции обеспечивает соленоидальность поля скоростей внутри области.

3.3.2. Способ решения уравнения Пуассона для давления

Для численного решения уравнения Пуассона (11) с граничными условиями (12) используется метод дискретного преобразования Фурье [7]. В дискретном виде уравнение (11) можно записать следующим образом:

$$\Delta^h u = f_{i,j,k}, \quad (i, j, k) \in \{0 : N_1 - 1\} \times \{0 : N_2 - 1\} \times \{0 : N_3 - 1\}, \quad (13)$$

где $u = \delta p$, $f = (\nabla \cdot \widetilde{V}) / \tau$. Собственными функциями оператора Лапласа с граничными условиями $\partial u / \partial n = 0$ являются функции вида

$$\psi_k^\alpha(i) = \cos \frac{\pi k (i + \frac{1}{2})}{N_\alpha}, \quad i, k = 0, \dots, N_\alpha - 1, \quad \alpha = 1, 2, 3,$$

а соответствующие им собственные числа

$$\lambda_k^\alpha = \frac{4}{h_\alpha^2} \sin^2 \frac{\pi k}{2N_\alpha}, \quad k = 0, \dots, N_\alpha - 1.$$

Применяя прямое преобразование Фурье к левой и правой частям уравнения (13), получим:

$$-|\lambda_l^1 + \lambda_m^2 + \lambda_n^3| U_{l,m,n} = F_{l,m,n},$$

где

$$F_{l,m,n} = \sum_{i=0}^{N_1-1} \sum_{j=0}^{N_2-1} \sum_{k=0}^{N_3-1} f_{i,j,k} \psi_l^1(i) \psi_m^2(j) \psi_n^3(k).$$

Далее,

$$U_{l,m,n} = -\frac{F_{l,m,n}}{|\lambda_l^1 + \lambda_m^2 + \lambda_n^3|}. \quad (14)$$

Задача (11) – (12) вырождена, то есть ее решение можно найти с точностью до константы. При $l = m = n = 0$ собственные значения $\lambda_0^1 = \lambda_0^2 = \lambda_0^3 = 0$, следовательно, соответствующая собственная функция может быть произвольной, и в выражении (14) допустимо делить на любое отличное от нуля число. После этого выполняется обратное преобразование:

$$u_{i,j,k} = \frac{8}{N_1 N_2 N_3} \sum_{l=0}^{N_1-1} \sum_{m=0}^{N_2-1} \sum_{n=0}^{N_3-1} U_{l,m,n} \psi_l^1(i) \psi_m^2(j) \psi_n^3(k).$$

Ядром этого алгоритма является одномерное преобразование Фурье. Таким образом, вычисление трехмерного преобразования сводится к последовательности трех одномерных. Для вычисления одномерного преобразования используется алгоритм быстрого преобразования Фурье, который для своей работы требует, чтобы число узлов N_1, N_2, N_3 было степенью двойки.

3.3.3. Уравнение конвективной теплопроводности

После того как уравнение (11) решено и скорость подправлена по формуле (10), определяется поле температуры:

$$\hat{T} = T + \tau \left(\frac{1}{Pr} \Delta^h T - \mathcal{K}^h(\mathbf{V})T + \frac{1}{Pr} Q \right). \quad (15)$$

Предлагаемый алгоритм накладывает ограничения на максимально возможное значение шага по времени τ . Для того чтобы явная разностная схема для системы уравнений Навье–Стокса была устойчивой, необходимо, чтобы $\tau < h^2 Re/4$ [8], где Re – число Рейнольдса, которое при текущем обезразмеривании равно единице, а для устойчивости разностной схемы для уравнения теплопереноса требуется выполнение условия $\tau < h^2 Pr/2$ [9]. Таким образом, выбираемый шаг по времени должен удовлетворять обоим этим критериям.

Поскольку устойчивость разностной схемы для уравнения теплопроводности зависит от числа Прандтля, то при малых значениях этого параметра на шаг τ могут накладываться очень строгие ограничения. В этом случае вместо схемы (15) можно использовать полностью неявную схему вида

$$T_t + \mathcal{K}^h(\mathbf{V})\hat{T} = \frac{1}{Pr} \Delta^h \hat{T} + \frac{1}{Pr} Q. \quad (16)$$

При этом для решения сеточных уравнений использование стабилизированного метода бисопряженных градиентов [10] или обобщенного метода мини-

мальных невязок [11] дает приблизительно одинаковый результат по скорости сходимости. Также допустимо использовать полунеявную схему вида

$$T_t = \frac{1}{Pr} \Delta^h \widehat{T} + \left(\frac{1}{Pr} Q - \mathcal{K}^h(\mathbf{V})T \right). \quad (17)$$

В этом случае при использовании равномерных сеток матрица системы уравнений становится симметричной и положительно определенной, поэтому сеточные уравнения оптимально решать методом сопряженных градиентов. При использовании обеих аппроксимаций (16) и (17) устойчивость алгоритма перестает зависеть от числа Прандтля. В данной работе при малых числах Прандтля используется аппроксимация (16), сеточные уравнения решаются стабилизированным методом бисопряженных градиентов, где в качестве предобуславливателя применяется метод неполного LU разложения без заполнения [12].

4. Результаты расчетов

4.1. Расчет течений с малой надкритичностью

Описанный выше алгоритм применялся для решения задачи об установлении стационарного течения в горизонтальном слое жидкости с внутренними источниками теплоты, верхняя и нижняя границы которого поддерживаются при постоянной температуре. Расчеты проводились для области: $L_1 = L_2 = 15$, $L_3 = 1$. На верхней границе поддерживается постоянная температура $T_{top} = 0$, а на нижней $T_{bot} = 1$, внутренний источник теплоты $Q = 6$. Для того чтобы ускорить развитие течения, в стационарный профиль температуры на высоте $x_3 = z_0 = 0.8$ вносится случайное возмущение:

$$T(z_0) = T(z_0)(1 + a\xi),$$

где a – амплитуда возмущения, ξ – случайная величина, находящаяся в диапазоне $(0, 1)$. Данное возмущение не навязывает структуру течения и вносится лишь для того, чтобы ускорить развитие течения.

Вычисления проводились на одном узле вычислительного кластера К-60, который установлен в ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. Узел располагает 256Gb оперативной памяти и двумя процессорами Intel Xeon E5-2690v4, что

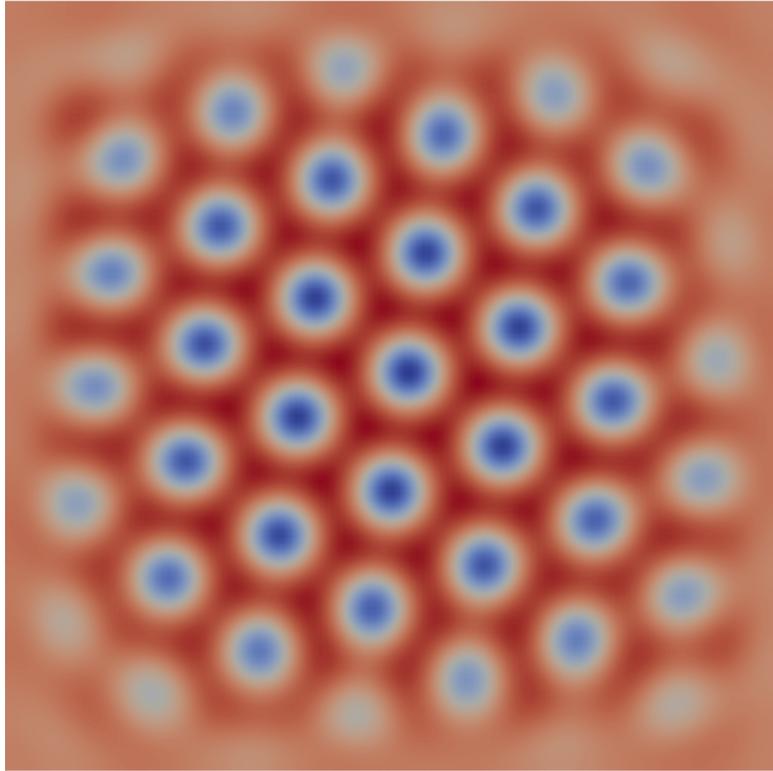


Рис. 2: Поле температуры. $x_3 = 0.5$, $Ra = 1640$, $Pr = 1$.

позволяет вести расчет на 28 ядрах с общей памятью. Задавались следующие безразмерные параметры: $Ra = 1640$, $Pr = 1$. Будем считать, что течение вышло на стационар, если за одно конвективное время энергия течения изменилась не более чем на 10^{-5} . Так, расчет на сетке $128 \times 128 \times 16$ занял 845.81 секунд. При этом шаг по времени $\tau = 0.0005$, а общее количество вычисленных временных слоев составляет более трехсот тысяч. При увеличении количества узлов в два раза по всем направлениям, шаг по времени необходимо уменьшить в 5 раз. Время расчета при этом увеличилось в 33.6 раз и составило 28419.44 секунд. Количество временных слоев, которые необходимо вычислить до наступления стационарного режима, составило 1270000.

На рисунке 2 изображено распределение температуры на высоте $x_3 = 0.5$. Здесь и далее красным цветом отмечена горячая жидкость, а синим, соответственно, холодная.

Результаты, получаемые с помощью явного алгоритма, сравнивались с результатами расчетов, которые были получены с использованием чисто неявной схемы, описание которой приводится в [1]. В работе [1] система уравнений Навье–Стокса решалась совместно относительно вектора неизвестных

(V_α, p) , $\alpha = 1, 2, 3$. Поскольку наличие большого количества нулей на главной диагонали не позволяет использовать итерационные методы, был применен метод LU -разложения для решения систем сеточных уравнений. Главным результатом стало то, что чисто неявная схема оказалась в 2.5 раза быстрее полунеявной схемы типа предиктор-корректор, где для решения всех систем уравнений используются итерационные методы. Главными достоинствами предлагаемого в данной работе алгоритма являются: малые затраты оперативной памяти и высокая скорость нахождения всех неизвестных на каждом временном слое.

На рисунке 3 показано поле температуры в плоскости $x_3 = 0.5$, которое получается при расчете по неявной схеме при $Pr = 1$. Получаемое течение внешне напоминает картину течения, которая получается при использовании явной аппроксимации, однако отличаются друг от друга способом расположения ячеек внутри области, при этом размер и количество ячеек совпадают.

Сравнение алгоритмов проходило на сетке $128 \times 128 \times 16$. Расчет по чисто неявной схеме выполнялся с шагом $\tau = 1$, и на выход на стационарное тече-

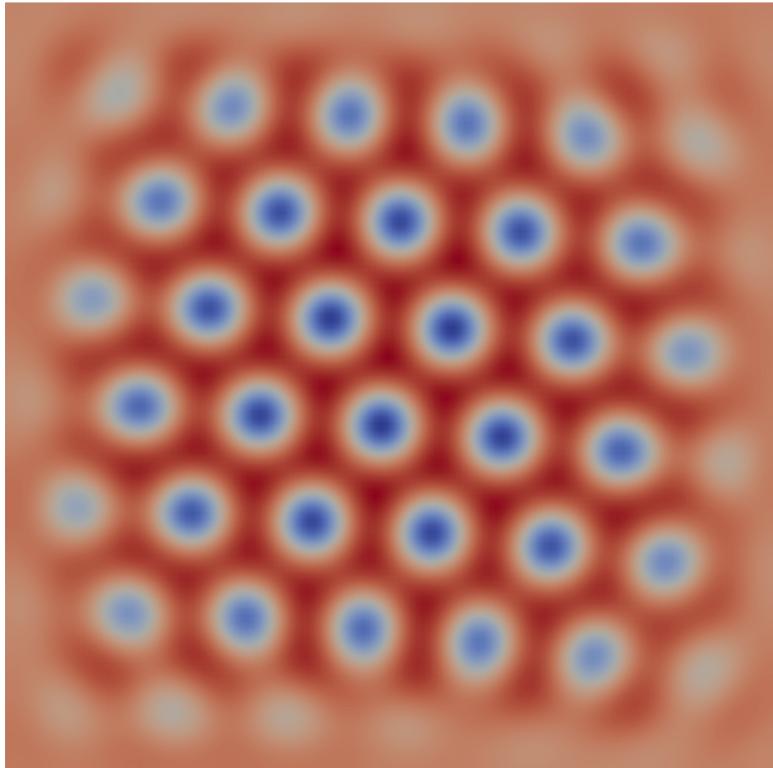


Рис. 3: Поле температуры. $x_3 = 0.5$, $Ra = 1640$, $Pr = 1$.
(расчет по неявному алгоритму)

ние потребовалось 21.2 часов. Для явной схемы шаг по времени был в 2000 раз меньше, и для выхода на стационарное решение оказалось достаточно всего лишь 14 минут. Таким образом, расчет по явной схеме оказался почти в 100 раз быстрее.

В то же время при расчете течения с малым числом Прандтля ($Pr = 0.001$, $\tau = 0.0005$) отставание по скорости расчета неявного алгоритма сокращается и составляет 10.5 раз. Так, на расчет по явной схеме для уравнений Навье–Стокса и неявной схеме для уравнения теплопереноса потребовалось 190 минут, а расчет по полностью неявной схеме с шагом $\tau = 1$ занял 1991 минуту.

Отдельно стоит отметить, что в обоих случаях несжимаемость жидкости сохраняется с точностью до ошибок округления. В неявной схеме это следует из непосредственного решения уравнения (2), а в случае явной схемы это связано с тем, что для решения уравнения Пуассона для давления используется метод дискретного преобразования Фурье, который является прямым методом.

4.2. Скорость расчета одного конвективного времени

Явная схема для решения поставленной задачи позволяет использовать параллелизм не только многоядерных процессоров, но и графических ускорителей. Поэтому параллельный программный комплекс для предлагаемого алгоритма был выполнен в двух вариантах: OpenMP и OpenACC. В таблице 1 приведены результаты расчетов одного конвективного времени в зависимости от числа узлов сетки. В расчетах с $Pr = 1$ и для решения уравнения теплопроводности используется явная схема. Шаг по времени изменяется в диапазоне от 0.0005 до 0.00005. При этом растет количество временных слоев, которые необходимо вычислить до выхода на стационар. Так, на самой грубой сетке их число равно 2000, а на самой подробной 20000. Для технологии OpenMP по-прежнему используется два 14-ядерных процессора, а в качестве графического ускорителя для технологии OpenACC используется NVIDIA Tesla P100.

Таким образом, использование графического ускорителя позволяет получить значительное ускорение при расчете одного конвективного времени, а

Таблица 1: Время расчета одного конвективного времени $Pr = 1$ [сек]

$N_1 \times N_2 \times N_3$	τ	OpenMP	OpenACC
$128 \times 128 \times 16$	0.0005	5.82	3.02
$256 \times 256 \times 32$	0.0001	225.99	76.15
$512 \times 512 \times 64$	0.00005	5053.11	1264.23

следовательно, и всей задачи в целом. В таблице 2 показано, что при возникающем на малых числах Прандтля строгом ограничении на шаг по времени целесообразно использовать неявную схему в уравнении теплопроводности и решать соответствующую систему сеточных уравнений итерационным методом. Это позволяет избавиться от зависимости устойчивости разностной схемы от значения числа Pr .

Таблица 2: Время расчета одного конвективного времени $Pr = 0.001$ в зависимости от способа аппроксимации уравнения теплопроводности [сек]

$N_1 \times N_2 \times N_3$	Аппроксимация (15)		Аппроксимация (16)	
	τ	OpenMP	τ	OpenMP
$128 \times 128 \times 16$	0.000001	2757.44	0.0005	404.12
$256 \times 256 \times 32$	0.0000004	54237.31	0.0001	2800.31
$512 \times 512 \times 64$	0.0000001	2425492.86	0.00005	33377.34

4.3. Расчет течений с высокой надкритичностью

Приведенные выше результаты расчетов показали высокую эффективность явного алгоритма для моделирования конвективного течения вблизи порога устойчивости. В этом случае энергия нарастает монотонно и выходит на стационар (рис. 4(а)). Однако существует широкий класс задач, в которых нет стационарного течения и течение быстро изменяется во времени. Энергия таких течений может изменяться, как показано на рисунке 4(б). При расчете таких задач целесообразно использовать маленький шаг по времени для того, чтобы иметь возможность отследить все стадии развития нестационарного течения. Использовать в этом случае полностью неявный алгоритм нецелесообразно, поскольку такой подход будет заведомо проигрывать потому, что применение LU разложения несколько сотен, а то и тысяч раз на каждом

конвективном времени требует очень больших затрат машинного времени.

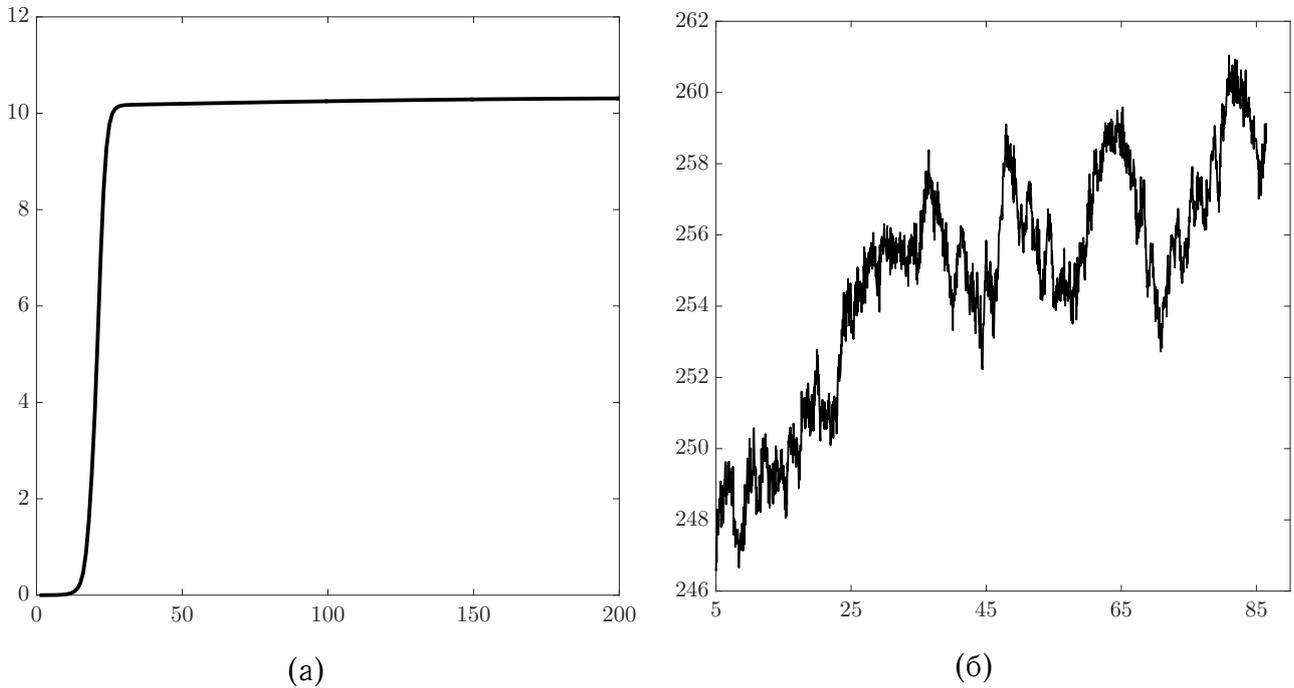
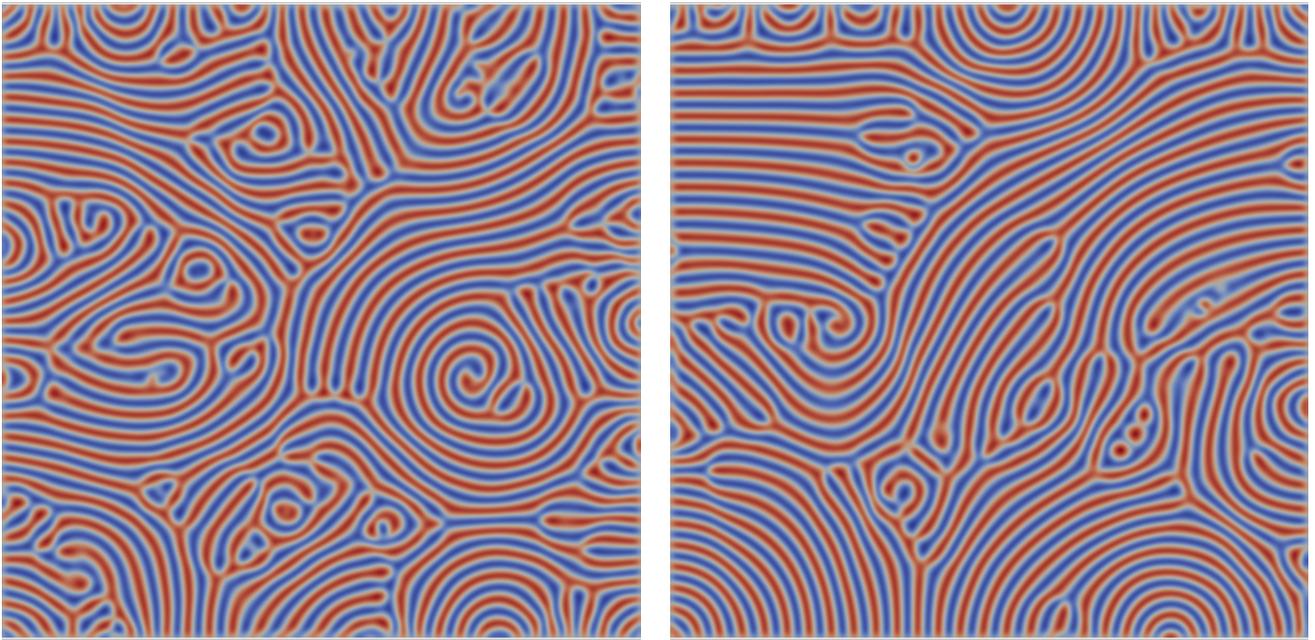


Рис. 4: Изменение кинетической энергии течения со временем. (а) Порог устойчивости, $Ra = 1.02Ra_{cr}$, (б) Высокая надкритичность, $Ra = 8Ra_{cr}$

Для демонстрации возможностей явного алгоритма выбрана классическая задача Рэля–Бенара. Расчет проводился на сетке $512 \times 512 \times 16$ в области $\Omega = [0, 64] \times [0, 64] \times [0, 1]$. Расчет одного конвективного времени на такой сетке в области Ω при использовании OpenMP занимает всего 93 секунды, что позволяет проводить моделирование нестационарного течения, которое возникает на больших интервалах времени. Число Рэля изменяется в диапазоне от $1.5Ra_{cr}$ до $8Ra_{cr}$, $Pr = 0.71$. На рисунках 5 — 9 показано поле температуры в различные моменты времени. Также динамику развития нестационарного течения можно посмотреть по ссылке <https://youtu.be/1Br249Gk-0s>. В данном расчете $Ra = 8Ra_{cr}$, $Pr = 1$.

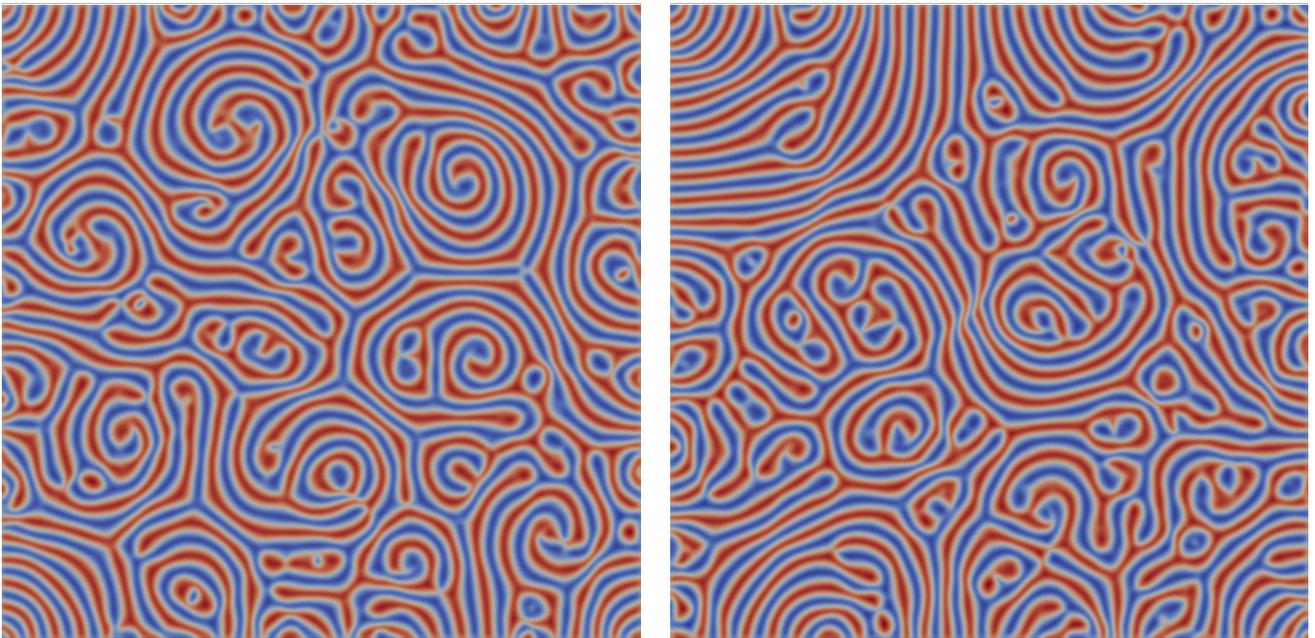


(a)

(б)

Рис. 5: Распределение температуры. $x_3 = 0.5$, $Ra = 1.5Ra_{cr}$, $Pr = 0.71$.

(a) $t = 50t_\nu$, (б) $t = 200t_\nu$



(a)

(б)

Рис. 6: Распределение температуры. $x_3 = 0.5$, $Ra = 2Ra_{cr}$, $Pr = 0.71$.

(a) $t = 50t_\nu$, (б) $t = 200t_\nu$

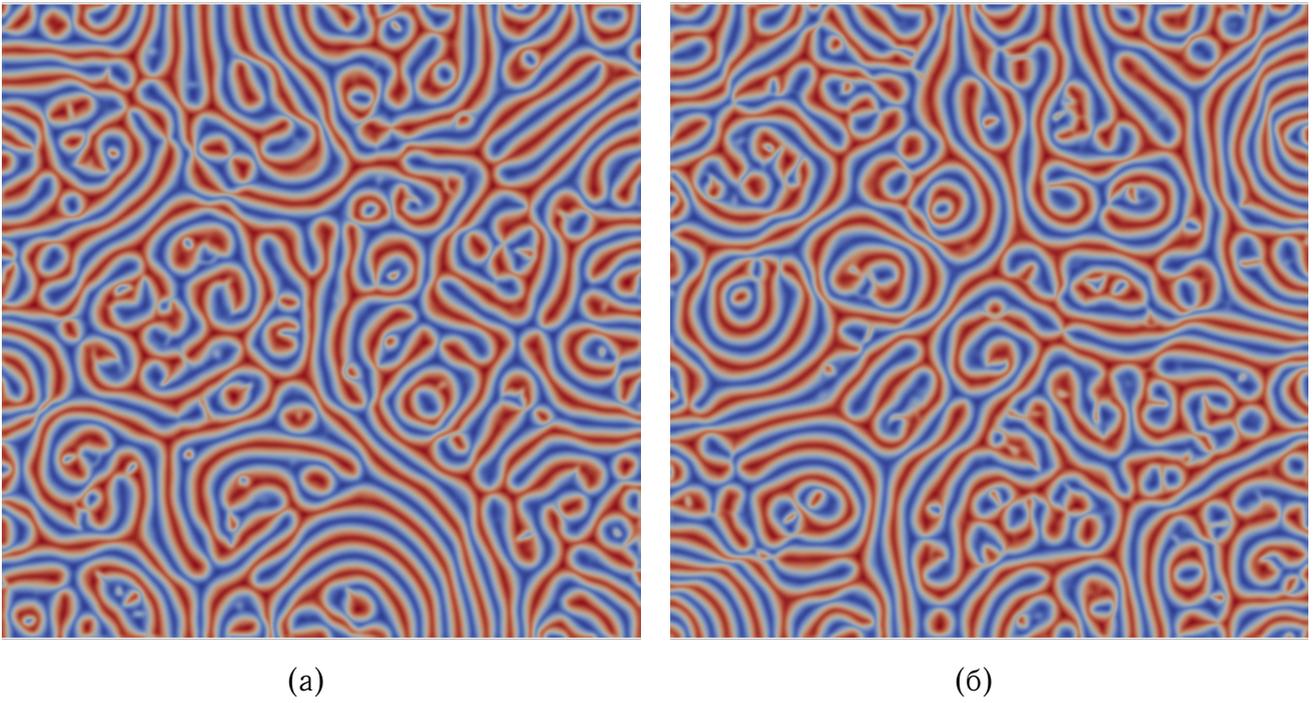


Рис. 7: Распределение температуры. $x_3 = 0.5$, $Ra = 3Ra_{cr}$, $Pr = 0.71$.
 (a) $t = 50t_\nu$, (б) $t = 200t_\nu$

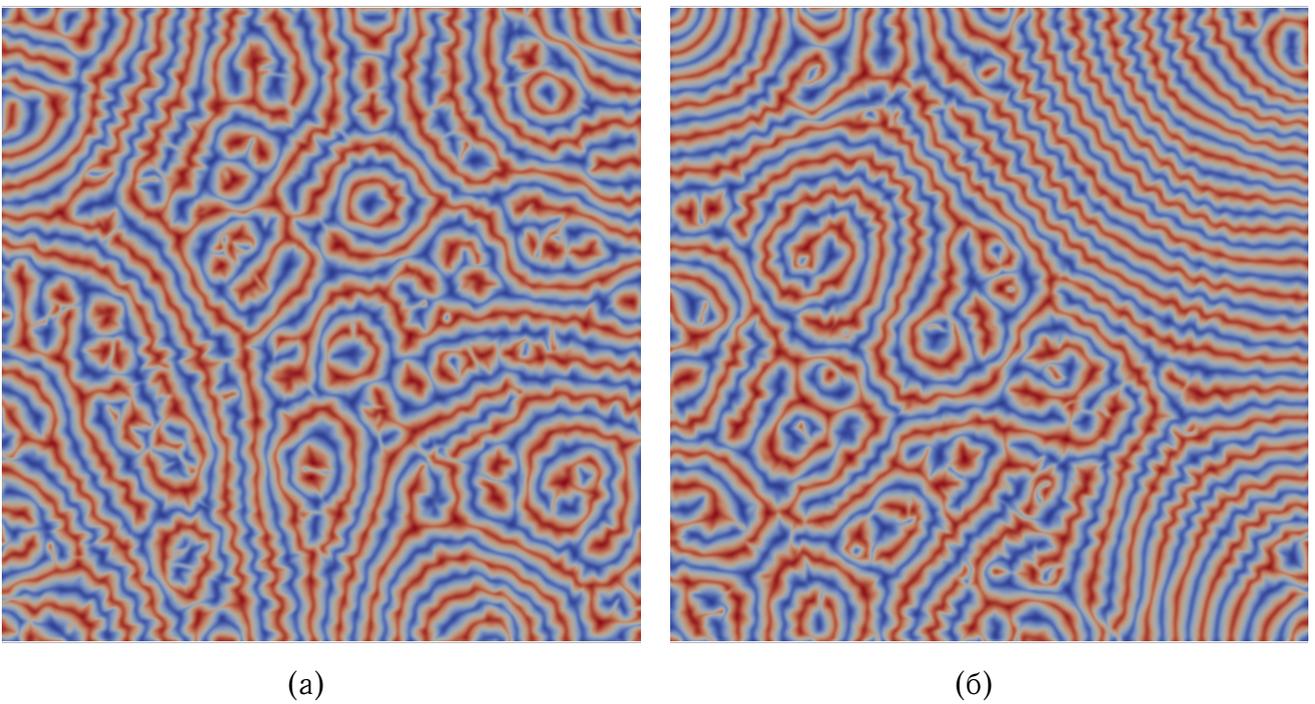


Рис. 8: Распределение температуры. $x_3 = 0.5$, $Ra = 5Ra_{cr}$, $Pr = 0.71$.
 (a) $t = 50t_\nu$, (б) $t = 200t_\nu$

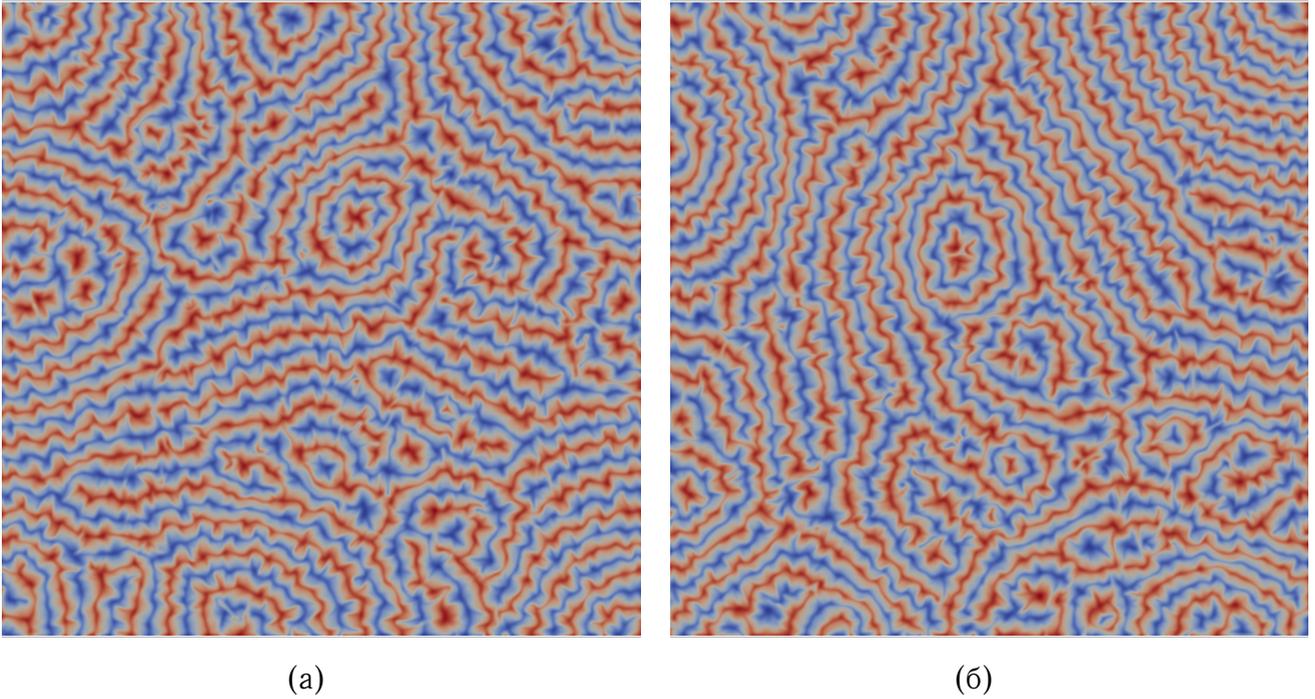


Рис. 9: Распределение температуры. $x_3 = 0.5$, $Ra = 8Ra_{cr}$, $Pr = 0.71$.

(a) $t = 50t_\nu$, (б) $t = 200t_\nu$

5. Заключение

Проведен анализ эффективности использования явной схемы для решения трехмерных задач гравитационной конвекции. Возникающее при явной аппроксимации уравнений Навье–Стокса уравнение Пуассона для давления решается методом дискретного преобразования Фурье. При больших и умеренных значениях числа Прандтля для аппроксимации уравнения теплопереноса также используется явная разностная схема. В случае малого числа Прандтля явную аппроксимацию разумно заменить на неявную и для решения системы сеточных уравнений использовать итерационный алгоритм. Показано, что применение технологии OpenACC для решения задачи на графическом ускорителе позволяет заметно сократить время расчетов. Проведено сравнение с полностью неявным подходом к решению уравнений Навье–Стокса. Для демонстрации возможностей явной схемы на различных сетках решена задача, в которой существует стационарное решение. Представлены также результаты моделирования длительных нестационарных течений.

Список литературы

1. Шатров О.А., Щерица О.В., Мажорова О.С. Безусловно устойчивый алгоритм решения трёхмерных нестационарных уравнений Навье–Стокса // Дифференциальные уравнения. 2018. Т. 54, № 7. С. 996–1008.
2. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. Москва: Наука, 1972. 392 с.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. Москва: Наука, 1989. 616 с.
4. Гончаров А.Л., Девдариани М.Т., Простомолотов А.И., Фрязинов И.В. Аппроксимация и численный метод решения трехмерных уравнений Навье–Стокса на ортогональных сетках // Математическое моделирование. 1991. Т. 3, № 5. С. 89–109.
5. Arakawa A. Computational design for long-term numerical integration of the equation of fluid motion: Two dimensional incompressible flow. // Journal of Computational Physics. 1966. Vol. 1. Pp. 119 – 143.
6. Белоцерковский О.М., Гушин В.А., Щенников В.В. Метод расщепления в применении к решению задач динамики вязкой несжимаемой жидкости // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1975. Т. 15, № 1. С. 197–207.
7. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. Москва: Наука, 1978. 592 с.
8. Курганов Д.В., Мажорова О.С., Попов Ю.П. О методах решения уравнений Навье–Стокса в естественных переменных // Препринт института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва. 2001. № 39. 31 с.
9. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. Москва: Наука, 1971. 552 с.
10. van der Vorst H.A. Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems // SIAM Journal on scientific and statistical computing. 1992. Vol. 13, no. 2. Pp. 631–644.

11. Saad Y., Schultz M.H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // SIAM Journal on scientific and statistical computing. 1986. Vol. 7, no. 3. Pp. 856–869.
12. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems. SIAM, 2003. 528 pp. ISBN: 9780898715347.

Содержание

1. Введение	3
2. Постановка задачи	4
3. Разностная схема	5
3.1. Сетка и сеточные функции	5
3.2. Аппроксимация по пространству	6
3.3. Аппроксимация по времени	8
3.3.1. Уравнения Навье–Стокса	8
3.3.2. Способ решения уравнения Пуассона для давления . . .	9
3.3.3. Уравнение конвективной теплопроводности	10
4. Результаты расчетов	11
4.1. Расчет течений с малой надкритичностью	11
4.2. Скорость расчета одного конвективного времени	14
4.3. Расчет течений с высокой надкритичностью	15
5. Заключение	19
Список литературы	20