

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 62 за 2020 г.</u>



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

## Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.

Опыт применения библиотек Intel MKL и PETSc для решения задач тепломассопереноса с фазовым переходом

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Опыт применения библиотек Intel MKL и PETSc для решения задач тепломассопереноса с фазовым переходом // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 62. 34 с. http://doi.org/10.20948/prepr-2020-62

URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-62

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

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

# Опыт применения библиотек Intel MKL и PETSc для решения задач тепломассопереноса

с фазовым переходом

Mockba - 2020

### Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.

Опыт применения библиотек Intel MKL и PETSc для решения задач тепломассопереноса с фазовым переходом

Работа посвящена анализу методов решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при численном моделировании процесса кристаллизации многокомпонентного раствора. Математическая модель учитывает движение фронта кристаллизации, тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах. Проведено сравнение эффективности применения прямых и итерационных методов решения систем линейных алгебраических уравнений, описывающих движение жидкости и тепломассоперенос в растворе и кристалле. Для решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений использовался параллельный программный модуль, разработанный на основе библиотек Intel MKL и PETSc.

*Ключевые слова:* фазовый переход; рост кристалла из жидкой фазы; методы крыловского типа; Intel MKL; PETSc

#### Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.

Numerical simulation of a phase transition problems using Intel MKL and PETSc libraries

We consider the linear systems of equations arising from a finite volume discretization of multicomponent alloy crystallisation problem. The underlying mathematical model of phase transition process accounts for the crystallisation interface movement, convective heat and mass transfer in the solution, diffusion heat and mass transfer in the solid. The performance comparison of direct and iterative methods for sparse linear systems governing the convective motion and heat and mass transfer is carried out. The parallel package for the solution of the corresponding sparse linear systems based on the Intel MKL and PETSc libraries is developed.

**Key words:** phase transition; solution crystal growth; Krylov methods; Intel MKL; PETSc;

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-31-20020.

### 1 Введение

Работа посвящена анализу методов решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), возникающих при численном моделировании процессов тепломассопереноса в присутствии фазового перехода. Математическая модель процесса кристаллизации учитывает движение границы раздела фаз, тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах. Для численного моделирования процесса кристаллизации используется энергетически нейтральная разностная схема, в которой на дискретном уровне выполняются законы сохранения массы и теплоты. Метод решения полученной системы нелинейных алгебраических уравнений основан на расщеплении по физическим процессам: расчет организован таким образом, что на каждом шаге по времени сначала решается задача движения жидкости, то есть определяется поле скоростей, затем находятся распределения температуры и концентраций, положение фронта кристаллизации. Система нелинейных сеточных уравнений, аппроксимирующих задачу тепломассоперноса, решается с помощью метода Ньютона. Таким образом, на каждом шаге по времени нужно решить одну СЛАУ для разностных уравнений движения и несколько СЛАУ с одинаковым портретом матрицы для уравнений теплопроводности и массопереноса. (Подробное описание вычислительного алгоритма приведено в работе [1].) Матрицы рассматриваемых систем линейных уравнений имеют большие числа обусловленности, не являются симметричными и положительно определенными, для них не выполняется свойство диагонального преобладания. Данные обстоятельства значительно осложняют процесс выбора эффективного прямого или итерационного решателя СЛАУ.

Основным преимуществом прямых методов является их высокая надежность и отсутствие настроечных параметров. При этом для разреженных матриц, в зависимости от реализации, время расчета с увеличением размерности матрицы n растет достаточно умеренно, как  $O(n^{3/2}) - O(n^2)$ . Недостатками прямых методов являются большие затраты оперативной памяти и достаточно плохая масштабируемость на многопроцессорных системах [2].

Итерационные методы крыловского типа хорошо масштабируются, их применение требует умеренных затрат оперативной памяти. Однако в случае решения задач с плохо обусловленной несимметричной матрицей скорость сходимости таких методов, как правило, является очень низкой [3]. При этом построение эффективного с вычислительной точки зрения предобуславливателя для конкретной системы уравнений является самостоятельной сложной задачей. Например, известно, что использование распространенного ILU(0) предобуславливателя не позволяет значительно ускорить расчет, если матрица не обладает свойством диагонального преобладания [4].

Создание эффективного решателя, учитывающего архитектуру современных вычислительных систем, является очень трудоемкой задачей и для своего решения требует больших временных затрат. Однако в настоящее время доступно большое количество библиотек и пакетов, в которых реализованы различные прямые и итерационные методы решения СЛАУ. Как правило, для пользователя сторонние решатели являются черным ящиком с минимальным набором настраиваемых параметров, поэтому при работе с нестандартными задачами достичь оптимальной производительности с помощью таких подпрограмм затруднительно. С другой стороны, библиотеки позволяют в достаточно короткий срок изучить особенности работы большого количества различных подходов и выбрать решатель, наиболее подходящий для рассматриваемого класса задач.

В данной работе проведено сравнение эффективности применения прямых и итерационных методов решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений в случае численного моделирования процесса кристаллизации двухкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле. В качестве прямых методов используются решатель PARDISO, входящий в состав открытой библиотеки Intel MKL 2018, решатель PARDISO 6 из пакета PARDISO 6.2 solver project и решатель SuperLU\_dist. В качестве итерационных решателей используются метод GMRES с ILU(0) предобуславливателем из библиотеки Intel MKL 2018 и предобусловленные методы GMRES и BiCGStab, реализованные в открытой библиотеке PETSc.

### 2 Математическая модель

Рассмотрим процесс получения монокристалла из двухкомпонентного раствора. Рост кристалла осуществляется в вертикальной цилиндрической ампуле (рис. 1а), находящейся в печи (рис. 1b). Раствор компонента A в веществе B располагается над твердой фазой  $A_{\rm x}B_{1-{\rm x}}$ , где  ${\rm x}$  — мольная доля компонента A в кристалле. Ампулу перемещают вниз вдоль вертикальной оси печи с постоянной скоростью  $V_{\rm g}$ , в результате в окрестности твердой фазы раствор становится пересыщенным, и происходит рост кристалла.

Математическое моделирование процесса кристаллизации проводится в рамках следующих предположений. Поля температуры, концентрации и скоростей жидкости предполагаются осесимметричными. Поэтому расчет ведется в области  $\Omega$ , расположенной в плоскости ( $\mathbf{r}, \mathbf{z}$ ) и состоящей из трех подобластей: жидкой фазы  $\Omega^{l}$ , затравки и кристалла  $\Omega^{cr}$ , ампулы  $\Omega^{amp}$  (см. рис. 1а). Положение подвижной границы раздела кристалл-раствор описывается функцией  $\mathbf{z}_{ph} = \xi(\mathbf{t}, \mathbf{r}), 0 \leq \mathbf{r} \leq R_{in}$ . Раствор является вязкой несжимаемой жидкостью. При этом зависимость плотности жидкой фазы от температуры и содержания компонента A учитывается в рамках приближения Обербека-Буссинеска.



Рис. 1: (a) Цилиндрическая ампула; (b) Распределение температуры на боковой поверхности ампулы.

Обозначения для физических параметров модели приведены в таблице 1.

Уравнения, описывающие эволюцию системы, записываются в безразмерном виде. В качестве пространственного масштаба используется внутренний радиус ампулы  $R_{\rm in}$ , временной масштаб  $t_{\nu} = R_{\rm in}^2/\nu$ . Безразмерная температура определяется соотношением  $T = (T^{\rm d} - T_0^{\rm d})/\Delta T^{\rm d}$ , где  $T^{\rm d}$  — размерная температура,  $T_0^{\rm d}$  — температура плавления чистого вещества B,  $\Delta T^{\rm d} = T_{\rm top}^{\rm d} - T_{\rm bot}^{\rm d}$  — характерный перепад температуры в ампуле. Безразмерная концентрация  $C = C^{\rm d}/C_{\rm init}^{\rm d}$ , где  $C^{\rm d}$  — концентрация компонента A [моль/см<sup>3</sup>],  $C_{\rm init}^{\rm d}$  — начальная концентрация A в растворе. Теплофизические параметры системы нормируются на соответствующие значения параметров жидкой фазы (см. таблицу 2). Безразмерные параметры приведены в таблице 3.

Таблица	1:	Обозначения
---------	----	-------------

Величина	$\Omega^{\rm cr}$	$\Omega^{lq}$	$\Omega^{\mathrm{amp}}$
Коэффициент сегрегации	-	$k_{\text{seg}}$	-
Угол наклона линии ликвидуса	-	$\alpha^{d}$	-
Кинематическая вязкость	-	ν	-
Коэффициент температурного расширения	-	$\beta_{\mathrm{T}}$	-
Коэффициент концентрационного расширения	-	$\beta_{ m C}$	-
Скрытая теплота плавления	$\lambda$	-	-
Плотность	$ ho^{\mathrm cr}$	$ ho^{ m lq}$	$ ho^{ m amp}$
Удельная теплоемкость	$c_{\rm p}^{\rm cr}$	$c_{\rm p}^{\rm lq}$	$c_{\rm p}^{\rm cr}$
Коэффициент теплопроводности	$k^{\rm cr}$	$k^{\mathrm{lq}}$	$k^{\mathrm{cr}}$
Коэффициент диффузии	$D^{\mathrm{cr}}$	$D^{\mathrm{lq}}$	-

Таблица 2: Безразмерные теплофизические характеристики

Величина	Обозначение	$\Omega^{\rm cr}$	$\Omega^{\mathrm{lq}}$	$\Omega^{\mathrm{amp}}$
Отношение плотностей	ρ	$ ho^{ m cr}/ ho^{ m lq}$	1	$ ho^{ m amp}/ ho^{ m lq}$
Отношение удельных теплоемкостей	$c_p$	$c_{\mathrm{p}}^{\mathrm{cr}}/c_{\mathrm{p}}^{\mathrm{lq}}$	1	$c_{\mathrm{p}}^{\mathrm{amp}}/c_{\mathrm{p}}^{\mathrm{lq}}$
Отношение коэф. теплопроводности	k	$k^{ m cr}/k^{ m lq}$	1	$k^{ m amp}/k^{ m lq}$
Отношение коэф. диффузии	D	$D^{\mathrm{cr}}/D^{\mathrm{lq}}$	1	-

Движение раствора-расплава описывается уравнениями Навье-Стокса, записанными в переменных «функция тока – завихренность». Компоненты векто-

#### Таблица 3: Безразмерные параметры

Величина	Определение
Число Прандтля	$\Pr = \nu c_{\rm p}^{\rm lq} \rho^{\rm lq} / k^{\rm lq}$
Число Шмидта	$Sc = \nu / D^{lq}$
Число Стефана	$\mathrm{St} = \lambda \rho^{\mathrm{cr}} / (\rho^{\mathrm{lq}} c_{\mathrm{p}}^{\mathrm{lq}} \Delta T^{\mathrm{d}})$
Тепловое число Грасгофа	$\mathrm{Gr}_{\mathrm{T}} = g\beta_{\mathrm{T}}R_{\mathrm{in}}^{3}\dot{\Delta}T^{\mathrm{d}}/\nu^{2}$
Концентрационное число Грасгофа	$\mathrm{Gr}_{\mathrm{C}} = g \beta_{\mathrm{C}} R_{\mathrm{in}}^3 C_{\mathrm{init}}^{\mathrm{d}} / \nu^2$

ра скорости  $\mathbf{V} = (V_{\mathbf{r}}, 0, V_{\mathbf{z}})$  представлены в виде

$$V_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{z}}, \quad V_{\mathbf{z}} = -\frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{r}},$$

где  $\psi - \phi$ ункция тока.

Завихренность определяется следующим образом  $\boldsymbol{\omega} = \operatorname{rot} \mathbf{V} = (0, \omega_{\boldsymbol{\varphi}}, 0).$ Здесь

$$\omega_{\mathbf{\varphi}} = \frac{\partial V_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{z}} - \frac{\partial V_{\mathbf{z}}}{\partial \mathbf{r}}.$$

Для удобства в качестве неизвестной в уравнениях движения будем использовать  $\omega = -\omega_{\varphi}/\mathbf{r}$ .

Тепломассоперенос в растворе описывается следующей системой уравнений.

• Уравнение переноса завихренности:

$$\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{t}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{z}} \omega \right) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left( \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{r}} \omega \right) \right] =$$
$$= \frac{1}{\mathbf{r}} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \mathbf{r}^{2} \omega \right) \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left( \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left( \mathbf{r}^{2} \omega \right) \right) \right] + \mathrm{Gr}_{\mathrm{T}} \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} + \mathrm{Gr}_{\mathrm{C}} \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial C}{\partial \mathbf{r}}. \quad (1)$$

• Уравнение, связывающее завихренность и функцию тока:

$$-\omega = \frac{1}{\mathbf{r}} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left( \frac{1}{\mathbf{r}} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{z}} \right) \right].$$
(2)

• Уравнение конвективного теплопереноса:

$$\frac{\partial T}{\partial \mathbf{t}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \mathbf{r} V_{\mathbf{r}} T \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left( \mathbf{r} V_{\mathbf{z}} T \right) \right] = \frac{1}{\Pr} \frac{1}{\mathbf{r}} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \mathbf{r} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left( \mathbf{r} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{z}} \right) \right]. \quad (3)$$

• Уравнение конвективного массопереноса:

$$\frac{\partial C}{\partial \mathbf{t}} + \frac{1}{\mathbf{r}} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \mathbf{r} V_{\mathbf{r}} C \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left( \mathbf{r} V_{\mathbf{z}} C \right) \right] = \frac{1}{\mathrm{Sc}} \frac{1}{\mathbf{r}} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \mathbf{r} \frac{\partial C}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left( \mathbf{r} \frac{\partial C}{\partial \mathbf{z}} \right) \right]. \quad (4)$$

Перенос теплоты в ампуле и кристалле описывается уравнением

$$c_{p}\boldsymbol{\rho}\frac{\partial T}{\partial \mathbf{t}} = \frac{1}{\Pr}\frac{1}{\mathbf{r}}\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\left(k\mathbf{r}\frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}}\right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}}\left(k\mathbf{r}\frac{\partial T}{\partial \mathbf{z}}\right)\right].$$
(5)

Диффузионный массоперенос компонента А в кристалле:

$$\frac{\partial C}{\partial \mathbf{t}} = \frac{1}{\mathrm{Sc}} \frac{1}{\mathbf{r}} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \mathrm{D} \mathbf{r} \frac{\partial C}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left( \mathrm{D} \mathbf{r} \frac{\partial C}{\partial \mathbf{z}} \right) \right].$$
(6)

Граничные условия для функции тока, температуры и концентрации на оси ампулы вытекают из условий симметрии и имеют вид

$$\psi = \omega_{\mathbf{\varphi}} = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial C}{\partial \mathbf{r}} = 0.$$
(7)

Граничные условия для функции тока на стенках ампулы и фронте

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0.$$
 (8)

Здесь  $\frac{\partial}{\partial n}$  — производная по направлению нормали к соответствующей границе. Внутренние стенки ампулы непроницаемы для вещества.

$$D\frac{\partial C}{\partial n} = 0. \tag{9}$$

Твердая фаза и ампула, а также жидкая фаза и ампула находятся в идеаль-

ном тепловом контакте

$$k\frac{\partial T}{\partial n}\Big|_{lq} = k\frac{\partial T}{\partial n}\Big|_{amp}, \quad k\frac{\partial T}{\partial n}\Big|_{cr} = k\frac{\partial T}{\partial n}\Big|_{amp}, \quad (10)$$

Температура на границе ампулы зависит от времени

$$T|_{\mathbf{z}=Z_0} = T_{\text{bot}}(\mathbf{t}, \mathbf{r}), \quad T|_{\mathbf{z}=Z_4} = T_{\text{top}}(\mathbf{t}, \mathbf{r}), \quad T|_{\mathbf{r}=R_{\text{out}}} = T_{\text{wall}}(\mathbf{t}, \mathbf{z}).$$
(11)

Условия фазового равновесия на фронте кристаллизации имеют вид

$$T^{\mathrm{d}}\big|_{\mathbf{z}=\xi(\mathbf{t},\mathbf{r})} = T_0^{\mathrm{d}} + \alpha \mathbf{x}_{\mathrm{eq}}^{\mathrm{lq}}, \quad \mathbf{x}_{\mathrm{eq}}^{\mathrm{cr}} = k_{\mathrm{seg}} \mathbf{x}_{\mathrm{eq}}^{\mathrm{lq}}.$$
 (12)

Здесь  $\mathbf{x}_{eq}^{lq}$ ,  $\mathbf{x}_{eq}^{cr}$  — мольная доля компонента A в растворе и кристалле на границе раздела.

Балансные соотношения для внутренней энергии и массы на фронте кристаллизации имеют следующий вид.

• Закон сохранения энергии (условие Стефана):

$$\frac{1}{\Pr} \left[\!\!\left[ (\mathbf{k} \nabla T \cdot \mathbf{N}) \right]\!\!\right] = \operatorname{St} v_{\mathrm{ph}}(\mathbf{e}_{\mathbf{z}} \cdot \mathbf{N}).$$
(13)

Здесь  $[\![f]\!] = f^{\rm cr} - f^{\rm lq}, v_{\rm ph}$  — скорость движения границы раздела фаз, **N** — единичная нормаль к фронту кристаллизации, направленная в жидкую фазу, **e**<sub>z</sub> — единичный вектор в направлении оси **z**.

• Закон сохранения массы для компонента А:

$$\frac{1}{\mathrm{Sc}} \left[\!\!\left[ (\mathrm{D}\nabla C \cdot \mathbf{N}) \right]\!\!\right] = -(C_{\mathrm{ph}}^{\mathrm{cr}} - C_{\mathrm{ph}}^{\mathrm{lq}}) v_{\mathrm{ph}}(\mathbf{e}_{\mathbf{z}} \cdot \mathbf{N}).$$
(14)

Здесь  $C_{\rm ph}^{\rm lq}$  и  $C_{\rm ph}^{\rm cr}$  — концентрации компонента A на фронте кристаллизации в твердой и жидкой фазах, [моль/см<sup>3</sup>].

### 3 Метод решения

#### 3.1 Преобразование системы координат

Для решения задачи с внутренней подвижной границей, положение которой необходимо определять в ходе решения задачи, применяется метод выпрямления фронта [5, 6]. Для этого выполняется замена независимых переменных ( $\mathbf{t}, \mathbf{r}, \mathbf{z}$ ), такая что в новой системе координат (t, r, z) положение границы раздела фаз на протяжении всего процесса остается неизменным и совпадает с некоторой координатной линией.

Преобразование системы координат осуществляется следующим образом. Фронт кристаллизации доопределяется внутри стенки ампулы [1], физическая область, изображенная на рисунке 2a, разбивается на четыре подобласти. Используется замена переменных, такая что области  $S_{\gamma}$ ,  $\gamma = 0, 1, 2, 3$  в новой системе становятся прямоугольниками (рис. 2b), а границы областей — кривые  $\mathbf{z} = Z_0$ ,  $\mathbf{z} = Z_1$ ,  $\mathbf{z} = Z_2$ ,  $\mathbf{z} = Z_3$ ,  $\mathbf{z} = Z_4$  — переходят в прямые z = 0, z = 1, z = 2, z = 3, и z = 4 соответственно.



Рис. 2: Замена переменных: (a) физическая область; (b) расчетная область.

Связь между системами координат имеет вид

$$t = \mathbf{t}, \quad r = \mathbf{r}, \quad z = (\mathbf{z} - \mathbf{Z}_{\gamma})/l^{\gamma} + \gamma, \quad \gamma = 0, 1, 2, 3,$$
 (15)

где  $l^{\gamma} = \mathbf{Z}_{\gamma+1} - \mathbf{Z}_{\gamma}$  толщина зоны  $\mathbf{S}_{\gamma}$ .

С помощью замены независимых переменных (15) уравнения (1)–(14) записываются в неподвижной системе координат. При этом в новой системе координат в уравнениях, описывающих эволюцию системы, появляются коэффициенты, зависящие от неизвестной скорости границы раздела, в диссипативных членах возникают смешанные производные. Дивергентная форма записи уравнений (1)–(14) в преобразованной системе координат приведена в работе [1].

### 3.2 Вычислительная схема

Использование метода выпрямления фронта позволяет стандартным образом ввести в расчетной области прямоугольную сетку и с помощью интегро-интерполяционного метода построить энергетически нейтральную разностную схему, в которой на дискретном уровне выполняются законы сохранения массы и теплоты. Подробное описание построения вычислительного алгоритма приведено в работе [1].

#### Метод решения системы нелинейных алгебраических уравнений

Метод решения полученной системы нелинейных алгебраических уравнений основан на расщеплении по физическим процессам [7].

- Сначала из уравнений, аппроксимирующих уравнения Навье–Стокса, определяется поле скоростей жидкости. Конвективные члены в уравнении переноса завихренности (1) вычисляются по значениям функции тока с предыдущего временного слоя. В результате соответствующие сеточные уравнения становятся линейными. Для повышения устойчивости вычислительной схемы в дискретных аналогах уравнения (2) и граничных условиях Тома [1] все неизвестные берутся с верхнего временного слоя. Поэтому соответствующая система линейных алгебраических уравнений решается совместно относительно неизвестных функции тока и завихренности.
- Распределение температуры и концентрации в системе, а также новое положение фронта кристаллизации определяются совместно. Соответствующая

система нелинейных алгебраических уравнений решается с помощью метода Ньютона относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются концентрация A в твердой и жидкой фазах, температура во всей расчетной области и скорость движения фронта. Для простоты метрические коэффициенты, возникающие в результате замены переменных, вычисляются по значениям скорости фронта с предыдущего временного слоя. Скорость движения фронта берется с верхнего временного слоя только в условиях (13), (14), выражающих балансы теплоты и массы на границе раздела фаз. В работах [8,9] показано, что алгоритм, основанный на совместном решении уравнений, описывающих тепломассоперенос в системе, обладает значительным запасом устойчивости и позволяет моделировать процессы роста и растворения для широкого круга веществ.

#### Методы решения систем линейных алгебраических уравнений

Дискретный аналог уравнений Навье-Стокса запишем в виде

$$A^{\rm NS}x^{\rm NS} = f^{\rm NS}.$$
 (16)

Для сеточных уравнений, описывающих тепло- и массоперенос в ростовой камере, на каждой итерации метода Ньютона имеем

$$A^{\rm TC}x^{\rm TC} = f^{\rm TC}.$$
(17)

Здесь  $A^{\alpha} \in \mathbb{R}^{N_{\alpha}} \times \mathbb{R}^{N_{\alpha}}$ ;  $x^{\alpha}$ ,  $f^{\alpha} \in \mathbb{R}^{N_{\alpha}}$ ,  $N_{\alpha}$  — размерность соответствующей задачи,  $\alpha = \text{NS}$ , TC. Матрицы  $A^{\text{NS}}$ ,  $A^{\text{TC}}$  являются разреженными, т.е. число ненулевых элементов Nz<sub> $\alpha$ </sub> в них много меньше  $N^2_{\alpha}$ . Портреты матриц  $A^{\text{NS}}$ ,  $A^{\text{TC}}$  приведены на рисунках 3a и 3b соответственно.

Значения ненулевых элементов матриц  $A^{\rm NS}$ ,  $A^{\rm TC}$  изменяются с течением времени **t**. Матрицы  $A^{\rm NS}$ ,  $A^{\rm TC}$  не являются симметричными и положительно определенными, для них не выполняется свойство диагонального преобладания. Эти обстоятельства значительно сужают круг методов решения задач (16), (17).

В данной работе для решения разреженных систем линейных алгебраиче-



Рис. 3: Портрет матрицы: (a) Уравнения Навье–Стокса, сетка 7 × 7; (b)Уравнения тепло- и массопереноса, сетка 7 × 13.

ских уравнений (16), (17) применяются прямой метод (LU разложение) и итерационные методы крыловского типа (см. таблицу 4). Разработан соответствующий параллельный программный модуль. В качестве прямого метода используется решатель PARDISO, входящий в состав открытой библиотеки Intel MKL 2018 [10], а также решатель PARDISO 6 из программы PARDISO 6.2 solver project [11–13] (в настоящий момент для несимметричных матриц эти решатели реализованы только для вычислительных систем с общей памятью). В качестве итерационных решателей используются предобусловленные методы GMRES (обобщенный метод минимальных невязок) с рестартами [2,3] и BiCGStab (стабилизированный метод бисопряженных градиентов) [2,3], реализованные в открытой библиотеке PETSc [14–16]. Параллелизм в PETSc основан на технологии MPI. Данная библиотека позволяет подключать сторонние прямые решатели, например SuperLU dist [17].

Для систем с общей памятью итерационный метод GMRES с ILU(0) предобуславливателем реализован в библиотеке Intel MKL. Однако наш опыт его применения, а также опыт других авторов [18, с. 602] свидетельствует о том, что данный решатель очень плохо масштабируется и по существу является последовательным. Для задач кристаллизации MKL GMRES показывает низкую производительность (в 3–5 раз ниже, чем у MKL PARDISO), поэтому далее этот решатель не рассматривается.

Таблица 4: Используемые методы решения СЛАУ

Библиотека		Итерационные методы		
	прямые методы	Решатели	Предобуславливатели	
Intel MKL	MKL PARDISO	MKL GMRES	ILU(0)	
PARDISO 6.2 solver project	PARDISO 6	-	-	
PETSc	$SuperLU_dist$	GMRES, BiCGStab	Блочный метод Якоби + ILU(0) Аддитивный метод Шварца + LU	

### 4 Результаты расчетов

Сравним эффективность работы прямых и итерационных методов решения СЛАУ на примере задачи о кристаллизации двухкомопонентного раствора, рассмотренной в работе [1, раздел 4.2]. Выбран процесс, в котором происходит смена направления движения границы раздела фаз — росту кристалла предшествует растворение затравки. Рассматривается режим выращивания, в котором в ходе процесса кристаллизации течение в растворе перестраивается: на ранних этапах интенсивность конвективного переноса велика, однако на развитых стадиях рост происходит в режиме, близком к диффузионному, и граница раздела фаз движется с постоянной скоростью.

Параметры кристалла, раствора, ампулы и печи, используемые в расчетах, приведены в **Приложении**. Задача рассматривается на трех сгущающихся сетках (Basic, 2×Basic и 4×Basic), параметры которых приведены в таблице 5.

Матрицы  $A^{\rm NS}$  и  $A^{\rm TC}$  в данной задаче являются плохо обусловленными: в начальный момент времени на базовой сетке  $\kappa(A^{\rm NS}) \approx 1 \cdot 10^9$ ,  $\kappa(A^{\rm TC}) \approx 2 \cdot 10^6$ . При

Обозн.	$\tau [t_{\nu}]$	Число узлов	$N_{\rm NS}$	$N_{\rm TC}$	$Nz_{NS}/N_{NS}^2$	$Nz_{TC}/N_{TC}^2$
Basic	0.005	$27000 = 50 \times 540$	12500	39500	0.00076	0.00023
$2 \times Basic$	0.0025	$108000 = 100 \times 1080$	50000	158000	0.00019	0.000058
$4 \times \text{Basic}$	0.001	$432000 = 200 \times 2160$	200000	632000	0.0000475	0.0000145

этом из–за движения границы раздела фаз и изменения структуры течения в растворе числа обусловленности  $\kappa(A^{\rm NS})$ ,  $\kappa(A^{\rm TC})$  увеличиваются в ходе процесса кристаллизации. Данные обстоятельства крайне негативно сказываются на скорости сходимости итерационных методов решения систем (16), (17). Поэтому выбор подходящего предобуславливателя является ключевым моментом, обеспечивающим эффективную работу итерационных решателей.

### 4.1 Прямые методы

Рассмотрим результаты расчетов, полученные с помощью прямых методов типа PARDISO (LU разложение). Решение систем линейных алгебраических уравнений (16), (17) организовано следующим образом. Наиболее затратное с вычислительной точки зрения переупорядичивание и символьное разложение матриц  $A^{\rm NS}$ ,  $A^{\rm TC}$  выполняется один раз на первом шаге по времени. Однако из–за наличия конвективных членов и метрических коэффициентов элементы в разложении матрицы  $A^{\rm NS}$  нужно вычислять на каждом шаге по времени, а из–за нелинейных условий на фронте кристаллизации численное разложение матрицы  $A^{\rm TC}$  необходимо проводить на каждой итерации метода Ньютона. Данное обстоятельство значительно увеличивает вычислительную стоимость алгоритма.

Расчеты проводились на одном узле вычислительного кластера К-60, расположенного в ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. На узле установлено 256 Гб оперативной памяти и два процессора Intel Xeon E5-2690v4, что позволяет вести расчет на 28 ядрах с общей памятью.

С помощью решателя MKL PARDISO на базовой сетке (расчет Basic) получены следующие результаты. На начальном этапе процесса тепловое поле в установке перестраивается (рис. 4), так как ампула, раствор и кристалл имеют различные коэффициенты температуропроводнодности. Вблизи фронта кристаллизации в центре ампулы раствор становится недосыщенным, а у боковой стенки — пересыщенным. В результате на ранней стадии процесса в центре ростовой камеры затравка растворяется, а у стенки начинается процесс кристаллизации. Перемещение ампулы в печи приводит к тому, что температура на фронте понижается, и при  $t \approx 12t_{\nu}$  растворение в центре сменяется ростом кристалла.



Рис. 4: Распределение температуры в области при  $t = 1t_{\nu}$ .

В установке образуется радиальный температурный градиент, который способствует возникновению конвективного движения в растворе. На начальном этапе процесса течение состоит из двух тороидальных валов (рис. 5а). Нижний вал вращается таким образом, что раствор поднимается в центре ампулы и опускается вдоль ее боковой стенки, верхний вал вращается в противоположном направлении. Возникновение нижнего вала обусловлено не только неустойчивым



Рис. 5: Распределение функции тока  $[cm^3/cek]$  (слева) и содержание компонента в A растворе [мольная доля] (справа) в различные моменты времени: (a)  $t = 2.5t_{\nu}$  ( $\psi_{\min} = -2 \cdot 10^{-4}$ ,  $\psi_{\max} = 5.4 \cdot 10^{-4}$ ); (b)  $t = 25t_{\nu}$  ( $\psi_{\min} = -10^{-5}$ ,  $\psi_{\max} = 5.9 \cdot 10^{-4}$ ); (c)  $t = 75t_{\nu}$  ( $\psi_{\min} = -5.7 \cdot 10^{-6}$ ,  $\psi_{\max} = 5.8 \cdot 10^{-6}$ ).

радиальным температурным градиентом, но и поступлением более легкого компонента А в жидкую фазу при растворении затравки. На этапе роста кристалла, в окрестности границы раздела фаз образуется стабилизирующий концентрационный градиент, и нижний конвективный вал затухает ( $t \approx 15 t_{\nu}$ ). Постоянное уменьшение концентрации компонента А в растворе приводит к тому, что интенсивность конвективного переноса уменьшается (рис. 5b). При  $t \approx 65 t_{\nu}$  течение в растворе перестраивается, верхний конвективный вал также затухает. Структура течения на развитом этапе процесса приведена на рисунке 5с. На рисунке 6 изображена зависимость кинетической энергии жидкости (безразмерной) от времени. Видно, что на поздней стадии процесса кинетическая энергия раствора близка к нулю, рост кристалла происходит в режиме, близком к диффузионному. Описанные особенности конвективного движения (перестройки течения, наличие мелкомасштабных структур, низкая интенсивность конвекции на поздних этапах процесса) в расчетах проявляются в изменении свойств матрицы системы (16). Поэтому при решении уравнений Навье–Стокса с помощью итерационных методов, если на одном этапе процесса алгоритм сходится быстро, то на следующем он может не сойтись вовсе или скорость сходимости ощутимо упадет (см. результаты расчетов в разделе 4.2).



Рис. 6: Зависимость кинетической энергии раствора от времени.

Использование более подробных сеток (расчеты  $2 \times \text{Basic u } 4 \times \text{Basic}$ ) практически не влияет на качество получаемого решения: положение фронта, баланс массы компонента A, теплоты и кинетической энергии отличаются от результатов, полученных на базовой сетке (расчет Basic), менее чем на 0.1%. Более подробное описание результатов рассмотреного численного эксперимента приведено в работе [1].

Задачи также были решены с помощью прямого метода PARDISO 6. Результаты, полученные в ходе этих расчетов, идентичны результатам, полученным с помощью MKL PARDISO. Среднее время расчета одного шага по времени с помощью рассмотренных прямых методов приведено в таблице 6 (Здесь и далее, первое число в ячейке — среднее время расчета одного шага по времени для уравнений Навье-Стокса; второе — среднее время расчета одного шага по времени для и для уравнений тепло- и массопереноса. На начальных этапах процесса метод Ньютона сходится за 5 – 6 итераций, на развитых за 2 – 3). Во всех расчетах РАRDISO 6 работает приблизительно в 2 раза быстрее, чем MKL PARDISO.

Таблица 6: Среднее время расчета одного шага на узле вычислительного кластера K-60

Сетка	MKL PARDISO	PARDISO 6.0
Basic	11  mc + 52  mc	8 мс + 29 мс
$2 \times \text{Basic}$	$62 \ { m mc} + \ 274 \ { m mc}$	26  Mc + 135  Mc
$4 \times \text{Basic}$	$358 \mathrm{mc}+1221 \mathrm{mc}$	110 мс + 564 мс

На рисунке 7 приведены зависимости среднего времени расчета одного шага на 4×Basic сетке от числа ядер. Из рисунка видно, что использование технологии MPI и дальнейшее увеличение числа ядер, скорее всего, приведет к увеличению длительности расчета.

Задачи также были решены с помощью прямого метода SuperLU\_dist, который можно подключить в библиотеки PETSc. Однако общее время расчета при использовании этого решателя выросло более чем на порядок, по сравнению с PARDISO 6.



Рис. 7: 4×Вазіс сетка. Зависимость времени расчета одного шага от числа ядер.

### 4.2 Итерационные методы

Применим для решения рассмотренных задач предобусловленный метод GMRES с рестартами (подпространство Крылова будем перестраивать через каждые 30 итераций) и предобусловленный метод BiCGstab, реализованные в библиотеки PETSc. Основное различие между данными методами заключается в способе построения базиса в подпространстве Крылова: в методе GMRES для этого используется ортогонализация Арнольди, а в BiCGStab – биортогонализация Ланцоша [2,3]. Предобуславливатель для системы (16) строится на каждом шаге по времени, итерации идут до тех пор, пока не будет выполнено условие  $\varepsilon_{\rm NS} = ||P^{-1}(A^{\rm NS}x_*^{\rm NS} - f^{\rm NS})||_2 / ||P^{-1}f^{\rm NS}||_2 \le 10^{-6}$ , где P — левый предобуславливатель. При этом для уменьшения числа MPI-пересылок уравнения Навье-Стокса решаются только на процессорных ядрах, содержащих узлы сетки из жидкой фазы. Предобуславливатель для системы (17) строится на каждом шаге по времени на первой итерациии метода Ньютона, соответствующая линейная система решается с точностью  $\varepsilon_{\rm TC} = 10^{-5}$ . Внешние итерации при решении задачи тепломассопереноса идут до тех пор, пока не будет выполнено условие  $||\delta x^{\text{TC}}|| < \varepsilon_{\text{TC}}^1 \cdot ||x_0^{\text{TC}}|| + \varepsilon_{\text{TC}}^2$ , где  $\delta x^{\text{TC}}$  – приращение решения,  $x_0^{\text{TC}}$  – решение с предыдущего временного слоя.

#### Предобуславливание с помощью блочного метода Якоби

Рассмотрим в качестве предобуславливателя блочный метод Якоби (BJacobiпредобуславливатель) [2,3], для обращения каждого из блоков будем применять метод ILU(0) (неполное LU разложения без заполнения) [2,3].

На базовой сетке (расчет Basic) получены следующие результаты. Зависимость числа итераций при решении уравнений Навье–Стокса и уравнений теплои массопереноса от времени для различных значений параметра  $\varepsilon_{\rm NS}$  изображена на рисунках 8–10. В случае решения уравнений тепло- и массопереноса на протяжении всего процесса на первой итерации метода Ньютона GMRES сходится приблизительно за 30 итераций, а BiCGStab за 20. При этом метод Ньютона сходится за 2-3 итерации, таким образом, общее число итераций на каждом шаге по времени для GMRES составляет 60–90, а для BiCGStab — 40–60. При  $\varepsilon_{\rm NS} = 10^{-6}$  число итераций необходимых для решения уравнений Навье-Стокса значительно колеблется от шага к шагу. Увеличение точности сходимости приводит к увеличению среднего числа итераций, однако колебания исчезают (рис. 9, 10), максимальное число итераций наблюдается при  $t \approx 65t_{\nu}$ . В этот момент происходит перестройка течения, и рост продолжается в режиме, близком к диффузионному.



Рис. 8: Basic сетка. Зависимость числа итераций от времени при  $\varepsilon_{\rm NS} = 10^{-6}$ : (a) GMRES; (b) BiCGStab.



Рис. 9: Вазіс сетка. Зависимость числа итераций от времени при  $\varepsilon_{\rm NS} = 10^{-7}$ : (a) GMRES; (b) BiCGStab.



Рис. 10: Basic сетка. Зависимость числа итераций от времени при  $\varepsilon_{\rm NS} = 10^{-8}$ : (a) GMRES; (b) BiCGStab.

Важно отметить, что при всех рассмотренных значениях параметра  $\varepsilon_{\rm NS}$  результаты расчетов незначительно отличаются от результатов, полученных с помощью прямого метода (максимум отклонения кинетической энергии составляет менее 0.05%). Среднее время расчета одного шага по времени на базовой сетке приведено в таблице 7. Из таблицы видно, что наиболее быстрым из рассмотренных методов является GMRES.

Таблица 7: Basic сетка. Среднее время расчета одного шага на узле вычислительного кластера К-60

$\varepsilon_{\rm NS}$	GMRES	BiCGStab	PARDISO 6.0	MKL PARDISO
$10^{-6}$	6  mc + 13  mc	6  mc + 15  mc		
$10^{-7}$	5  mc + 13  mc	10  mc + 15  mc	8  mc + 29  mc	11  mc + 52  mc
$10^{-8}$	8  mc + 13  mc	17  mc + 15  mc		

В случае расчета на 2×Вазіс сетке задачу удается решить только с помощью метода GMRES при  $\varepsilon_{\rm NS} = 10^{-8}$ . Во всех остальных случаях итерационный процесс для системы (16) либо расходится, либо число итераций превышает 10000, и расчет принудительно завершается. Зависимость числа итераций от времени приведена на рисунке 11. На позднем этапе процесса, когда интенсивность конвективного движения мала, число итераций колеблется. Среднее время расчета одного шага по времени приведено в таблице 8 (прочерк в ячейке означает, что итерационный процесс не сошелся). Из таблицы видно, что использование метода GMRES позволяет значительно сократить время решения уравнений, описывающих тепло- и массоперенос в ростовой камере.



Рис. 11: 2×Basic сетка. Зависимость числа итераций от времени при  $\varepsilon_{\rm NS} = 10^{-8}$ 

На самой подробной сетке (расчет 4×Basic) задачу не удается решить ни одним из рассмотренных методов, так как итерационный процесс для уравнений Навье–Стокса не сходится.

Таблица 8: 2×Basic сетка. Среднее время расчета одного шага на узле вычислительного кластера К-60

$\varepsilon_{\rm NS}$	GMRES	BiCGStab	PARDISO 6.0	MKL PARDISO
$10^{-6}$	-	-		
$10^{-7}$	-	-	26 мс + 135 мс	62  mc + 274  mc
$10^{-8}$	33  mc + 65  mc	-		

Итерации Арнольди позволяют оценить максимальное и минимальное собственные значения матриц  $\widetilde{A}^{NS}$  и  $\widetilde{A}^{TC}$ , где  $\widetilde{A}^{\alpha} = (P^{\alpha})^{-1}A^{\alpha}$ ,  $\alpha = NS$ , TC. Оценки числа обусловленности матриц  $\widetilde{A}^{NS}$ ,  $\widetilde{A}^{TC}$  в случае использования блочного метода Якоби приведены в таблице 9. Видно, что на всех сетках число обусловленности матрицы  $\widetilde{A}^{NS}$  велико, а число обусловленности матрицы  $\widetilde{A}^{TC}$  принимает умеренные значения. Этот результат хорошо согласуется с характером сходимости итерационных методов в рассмотренных примерах.

Таблица 9: Оценка максимума числа обусловленности

Сетка	Без предобуславливателя	${ m Block} \; { m Jacobi} + { m ILU}(0)$	${\rm Additive \; Schwarz + LU}$
Basic	$\kappa(A^{\rm NS}) \sim 10^9; \ \kappa(A^{\rm TC}) \sim 10^6$	$\kappa(\widetilde{A}^{\rm NS}) \sim 10^4; \ \kappa(\widetilde{A}^{\rm TC}) \sim 10^1$	
$2 \times Basic$	$\kappa(A^{\rm NS}) \sim 10^{10}; \ \kappa(A^{\rm TC}) \sim 10^7$	$\kappa(\widetilde{A}^{\rm NS}) \sim 10^5; \ \kappa(\widetilde{A}^{\rm TC}) \sim 10^2$	$\kappa(A^{\rm NS}) \sim 10^2; \kappa(A^{\rm TC}) \sim 10^2$
$4 \times Basic$	$\kappa(A^{\rm NS}) \sim 10^{11}; \ \kappa(A^{\rm TC}) \sim 10^8$	$\kappa(\widetilde{A}^{\rm NS}) \sim 10^6; \ \kappa(\widetilde{A}^{\rm TC}) \sim 10^3$	

#### Предобуславливание с помощью аддитивного метода Шварца

Рассмотрим в качестве предобуславливателя аддитивный метод Шварца/блочный метод Якоби с перекрытием (ASM-предобуславливатель) [2, 3], для обращения каждого из блоков будем применять LU разложение. Построение такого предобуславливателя является очень затратным с вычислительной точки зрения. Однако применение данного подхода значительно улучшает обусловленность систем (16), (17) (см. таблицу 9). При этом с ростом размерности системы ее число обусловленности практически не увеличивается.

Зависимость числа итераций от времени при  $\varepsilon_{\rm NS} = 10^{-6}$  на базовой сетке приведена на рисунке 12. Использование ASM-предобуславливателя приводит к значительному, по сравнению с BJacobi-предобуславливателем, уменьшению



Рис. 12: Зависимость числа итераций от времени при  $\varepsilon_{\rm NS} = 10^{-6}$ : (a) GMRES; (b) BiCGStab.

числа итераций, необходимых для решения систем (16), (17) с заданной точностью. На развитом этапе процесса кристаллизации наблюдаются небольшие колебания в числе итераций. При расчете с  $\varepsilon_{\rm NS} = 10^{-8}$  колебания исчезают.

Данные о сходимости рассматриваемых итерационных методов (минимальное, максимальное и среднее число итераций, а также среднеквадратичное отклонение числа итераций (СКО)) на базовой сетке приведены в таблице 10 (Здесь и далее число в скобках после названия метода — точность сходимости. В случае уравнений тепло- и массопереноса характеристики приведены для первой итерации метода Ньютона).

Среднее время расчета одного шага по времени приведено в таблице 11. Метод GMRES оказывается наиболее производительным из рассмотренных решателей СЛАУ, несмотря на то, что среднее число итераций, необходимых для решения систем (16), (17) с заданной точностью, у него выше, чем у BiCGStab.

Применение ASM-предобуславливателя значительно улучшает обусловленность задачи на 2×Basic сетке. Методы GMRES и BiCGStab сходятся на протяжении всего процесса кристаллизации. Среднее время расчета одного шага на одном узле вычислительного кластера К-60 приведено в таблице 12. Время расчета удается сократить, если проводить вычисления на двух узлах кластера К-60 (таблица 13). Однако дальнейшее увеличение числа узлов приводит к

Метод	Минимальное	Максимальное	Среднее	CKO
	число итераций	число итераций	число итераций	
NS GMRES $(10^{-6})$	2 ит. + 4 ит.	8 ит. + 9 ит.	3 ит. + 8 ит.	1 ит. + 1 ит.
TC GMRES $(10^{-5})$				
NS GMRES $(10^{-8})$	6 ит. + 4 ит.	13 ит. + 9 ит.	8 ит. + 8 ит.	1 ит. + 1 ит.
TC GMRES $(10^{-5})$				
NS BiCGStab $(10^{-6})$	1 ит. + 2 ит.	5 ит. + 5 ит.	2 ит. + 5 ит.	1 ит. + 1 ит.
$TC BiCGStab(10^{-5})$				
NS BiCGStab $(10^{-8})$	4 ит. + 2 ит.	9 ит. + 5 ит.	5 ит. + 5 ит.	1 ит. + 1 ит.
TC BiCGStab $(10^{-5})$				

Таблица 10: Basic сетка. Сходимость итерационного процесса. Один узел

Таблица 11: Basic сетка. Среднее время расчета одного шага на узле вычислительного кластера К-60

$\varepsilon_{\rm NS}$	GMRES	BiCGStab	PARDISO 6.0	MKL PARDISO
$10^{-6}$	3 мс + 9 мс	$4 \mathrm{~mc} + 10 \mathrm{~mc}$	$8 \text{ Mc} \pm 20 \text{ Mc}$	$11 \text{ Me} \pm 52 \text{ Me}$
$10^{-8}$	5 мс + 9 мс	6  mc + 10  mc	0  MC + 23  MC	$11 \text{ mc} \pm 52 \text{ mc}$

падению производительности.

Таблица 12: 2×Вазіс сетка. Среднее время расчета одного шага на узле вычислительного кластера К-60

$\varepsilon_{\rm NS}$	GMRES	BiCGStab	PARDISO 6.0	MKL PARDISO	
$10^{-6}$	$23 \mathrm{~mc} + 71 \mathrm{~mc}$	24 мс $+$ 78 мс	$26 \text{ Mc} \pm 135 \text{ Mc}$	$62 \text{ Mc} \pm 274 \text{ Mc}$	
$10^{-8}$	31  mc + 72  mc	36  mc + 81  mc	20  MC + 150  MC	02  MC + 274  MC	

Таблица 13: 2×Basic сетка. Среднее время расчета одного шага на двух узлах вычислительного кластера К-60

$\varepsilon_{\rm NS}$	GMRES	BiCGStab
$10^{-6}$	19  mc + 56  mc	20  mc + 62  mc
$10^{-8}$	$25 \mathrm{~mc} + 58 \mathrm{~mc}$	29  mc + 65  mc

Данные о сходимости итерационных методов на 2×Basic сетке, полученные

при расчетах на двух узлах K-60, приведены в таблице 14. Из таблицы видно, что увеличение размерности задачи, а также разбиение матрицы на большее число блоков не приводит к значительному увеличению среднего числа итераций.

Таблица 14: 2×Basic сетка. Сходимость итерационного процесса. Два узла

Метод	Минимальное	Максимальное	Среднее	CKO
	число итераций	число итераций	число итераций	
NS GMRES $(10^{-6})$	2 ит. + 5 ит.	11 ит. + 13 ит.	4 ит. + 11 ит.	1 ит. + 1 ит.
TC GMRES $(10^{-5})$				
NS GMRES $(10^{-8})$	8 ит. + 5 ит.	18 ит. + 13 ит.	11 ит. + 11 ит.	2 ит. + 1 ит.
TC GMRES $(10^{-5})$				
NS BiCGStab $(10^{-6})$	1 ит. + 3 ит.	7 ит. + 8 ит.	3 ит. + 7 ит.	1 ит. + 1 ит.
TC BiCGStab $(10^{-5})$				
NS BiCGStab $(10^{-8})$	5 ит. + 3 ит.	12 ит. + 8 ит.	7 ит. + 7 ит.	1 ит. + 1 ит.
TC BiCGStab $(10^{-5})$				

Применение ASM-предобуславливателя позволяет решить задачу на 4×Basic сетке с помощью рассмотренных итерационных методов. Среднее время расчета одного шага на одном и трех узлах вычислительного кластера К-60 приведено в таблицах 15 и 16, соответственно.

Таблица 15: 4×Basic сетка. Среднее время расчета одного шага на узле вычислительного кластера К-60

$\varepsilon_{\rm NS}$	GMRES	BiCGStab	PARDISO 6.0	MKL PARDISO
$10^{-6}$	198 мс + 410 мс	208  mc + 440  mc	$110 \text{ Mc} \pm 564 \text{ Mc}$	$358 \text{ Mc} \pm 1221 \text{ Mc}$
$10^{-8}$	277 мс $+ 412$ мс	315  mc + 442  mc	$110 \text{ MC} \pm 504 \text{ MC}$	$\left  \begin{array}{c} 550 \text{ MC} \\ \end{array} \right  = 1221 \text{ MC}$

Таблица 16: 4×Basic сетка. Среднее время расчета одного шага на трех узлах вычислительного кластера К-60

$\varepsilon_{\rm NS}$	GMRES	BiCGStab
$10^{-6}$	68  mc + 224  mc	70  mc + 260  mc
$10^{-8}$	96  mc + 225  mc	112  мс + 261  мс

Данные о сходимости рассматриваемых итерационных методов на 4×Basic сетке приведены в таблице 17.

Метод	Минимальное	Максимальное	Среднее	СКО
	число итераций	число итераций	число итераций	
NS GMRES $(10^{-6})$	3 ит. + 9 ит.	16 ит. + 25 ит.	6 ит. + 20 ит.	1 ит. + 2 ит.
TC GMRES $(10^{-5})$				
NS GMRES $(10^{-8})$	12 ит. + 9 ит.	29 ит. + 25 ит.	16 ит. + 20 ит.	3 ит. + 2 ит.
TC GMRES $(10^{-5})$				
NS BiCGStab $(10^{-6})$	2 ит. + 7 ит.	11 ит. + 18 ит.	3 ит. + 12 ит.	1 ит. + 1 ит.
$TC BiCGStab(10^{-5})$				
NS BiCGStab $(10^{-8})$	8 ит. + 7 ит.	21 ит. + 18 ит.	11 ит. + 12 ит.	2 ит. + 1 ит.
TC BiCGStab $(10^{-5})$				

Таблица 17: 4×Basic сетка. Сходимость итерационного процесса. Три узла

Из таблицы 9 видно, что система (17) имеет умеренное число обусловленности в случае предобуславливания с помощью блочного метода Якоби. Была проведена серия численных экспериментов, в которых уравнения Навье– Стокса предобуславливались с помощью аддитивного метода Шварца, а уравнения тепло– и массопереноса — с помощью блочного метода Якоби. Среднее время расчета одного шага по времени с помощью предложенного гибридного метода приведено в таблице 18. Из таблицы видно, что во всех рассмотренных случаях гибридный метод работает медленнее, чем решатель основанный на применении ASM–предобуславливателя.

Таблица 18: Среднее время расчета одного шага на вычислительном кластере K-60 методом NS ASM  $\text{GMRES}(10^{-8})$  + TC BJacobi  $\text{GMRES}(10^{-5})$ 

Basic [1 узел]	2×Basic [2 узла]	4×Basic [3 узла]
5 мс + 13 мс	32  mc + 63  mc	96 мс + 436 мс

На всех рассмотренных сетках результаты расчетов практически идентичны результатам, полученным с помощью прямых методов.

### 4.3 Сравнение методов

Предложенный численный эксперимент позволяет оценить целесообразность применения итерационных методов для решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном соединении. Из расчетов видно, что все рассмотренные подходы позволяют получать физически осмысленные результаты практически идентичного качества. Определим наиболее быстрый из решателей.

Сетка	MKL PARDISO	PARDISO 6.0	ASM BiCGStab $(10^{-8})$	ASM GMRES $(10^{-8})$
			ASM BiCGStab $(10^{-5})$	ASM GMRES $(10^{-5})$
Basic	1	1.74	4.20 [1 узел]	4.57 [1 узел]
$2 \times \text{Basic}$	1	2.05	3.57 [2 узла]	4.05 [2 узла]
$4 \times \text{Basic}$	1	2.17	4.25 [3 узла]	4.95 [3 узла]

Таблица 19: Ускорение расчета по сравнению с MKL PARDISO

Сравнение производительности методов приведено в таблице 19. Наиболее медленным из всех рассмотренных подходов является прямой решатель MKL PARDISO. Применение PARDISO 6 позволяет сократить время расчета приблизительно в 2 раза. На подробных сетках итерационные методы сходятся только при применения дорогостоящего с вычислительной точки зрения ASM– предобуславливателя. Однако при наличии достаточного количества вычислительных узлов использование итерационных методов позволяет ускорить расчет в 4–5 раз. При этом для рассмотренного класса задач метод GMRES является более надежным и быстрым методом решения, чем метод BiCGStab.

### 5 Выводы

В работе проведено сравнение эффективности применения прямых и итерационных методов решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений в случае численного моделирования процесса кристаллизации многокомпонентного раствора. Разработан параллельный программный модуль для решения систем сеточных уравнений, описывающих конвективный тепло- и массоперенос в многокомпонентной системе с фазовым переходом. Показано, что на подробных сетках система дискретных уравнений, описывающая движения раствора, является плохо обусловленной, поэтому применение к этой системе широко распространенного блочного диагонального предобуславливателя с неполным разложением каждого из блоков не позволяет получать надежные результаты с помощью итерационных методов GMRES и BiCGStab. Применение в качестве предобуславливателя аддитивного метода Шварца (блоки в разложении обращаются с помощью прямого метода) в сочетании с итерационным методом GMRES позволяет ускорить расчет в 2.5–5 раз по сравнению со случаем, когда системы линейных алгебраических уравнений решаются с помощью прямого метода типа PARDISO.

### Приложение

Распределение температуры на боковой поверхности ампулы имеет вид

$$T_{\text{wall}}^{\text{d}}(\mathbf{t}, \mathbf{z}) = \begin{cases} T_{\text{bot}}^{\text{d}}, & \mathbf{z} \in [Z_0, z_{\text{g}}^{\text{bot}}(\mathbf{t})), \\ T_{\text{bot}}^{\text{d}} + \frac{T_{\text{top}}^{\text{d}} - T_{\text{bot}}^{\text{d}}}{L_g} \mathbf{z}, & \mathbf{z} \in [z_{\text{g}}^{\text{bot}}(\mathbf{t}), z_{\text{g}}^{\text{top}}(\mathbf{t})], \\ T_{\text{top}}^{\text{d}}, & \mathbf{z} \in [z_{\text{g}}^{\text{top}}(\mathbf{t}), Z_4), \end{cases}$$

где  $z_{\rm g}^{\rm top}({\bf t}) = z_{\rm g}^{\rm top}(0) + V_g^{\rm d} \cdot {\bf t}$ ,  $z_{\rm g}^{\rm bot}(t)$  определяется аналогичным образом,  $L_g = z_{\rm g}^{\rm top}(0) - z_{\rm g}^{\rm bot}(0) -$ длина градиентной зоны. Начальное распределение температуры в области  $T(0, {\bf r}, {\bf z}) = T_{\rm wall}(0, {\bf z})$ ,  $T_{\rm top}^{\rm d} = 1138$  K,  $T_{\rm bot}^{\rm d} = 738$  K, скорость протяжки ампулы  $V_{\rm g}^{\rm d} = 9.5$  см/сутки. Температура на фронте кристаллизации в начальный момент времени  $T \approx 1058$  K  $< T_{\rm eq}^{\rm d} = 1073$  K (раствор пересыщен). Содержание компонента A в затравке  ${\bf x}^{\rm cr} = 0.52$ , содержание компонета A в растворе  ${\bf x}^{\rm lq} = 0.2$ .

Геометрические параметры ростовой камеры приведены в таблице 20. Значения параметров задачи указаны в таблицах 21 и 22. Физические параметры ампулы, фаз и печи заимствованы из работ [19, 20].

В каждом расчете используется равномерная в радиальном направлении сетка; сетка в вертикальном направлении равномерна внутри торцов ампулы и сгу-

### Таблица 20: Параметры установки

Ампула				Фазы			Нагреватель	
Внутр.	Внешний	Толщина	Общая	Толщина	Толщина	Положение	$z_{\rm g}^{\rm bot}(0)$	$z_{\rm g}^{ m top}(0)$
радиус	радиус	торцов	высота	затравки	раствора	фронта		-
0.25  cm	$0.5 \mathrm{cm}$	0.2 см	5.4 см	2.5 см	2.5 см	2.7 см	1.9 см	2.9 см

Таблица 21: Значения безразмерных физических параметров

$\rho^{\rm cr}$	$\rho^{\rm amp}$	$c_{p}^{cr}$	$c_{\rm p}^{\rm amp}$	kcr	kamp	D	α	$k_{\text{seg}}$
1	0.29	0.64	4	0.145	1.25	$1 \cdot 10^{-4}$	1.25	2.6

$T_{-}$	n r		6				
таолица 2	1 <b>2:</b> C	значения	оезразме	рных	пар	аметр	DOB

$\mathbf{Pr}$	Sc	St	$Cr_{\pi}$	$Cr_{\alpha}$
	bC	50	OIT	OLC
0.11	20	1.16	$7.6 \cdot 10^{5}$	$-7 \cdot 10^{5}$

щается к границам раздела внутри ампулы.

### Список литературы

- Gusev A. O., Shcheritsa O. V., Mazhorova O. S. Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques // Computers & Fluids. 2020. Vol. 202. P. 104501. https://doi.org/10.1016/j.compfluid. 2020.104501.
- 2. Demmel James W. Applied Numerical Linear Algebra. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.
- 3. Saad Yousef. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Second edition. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- Chapman A., Saad Y., Wigton L. High order ILU preconditioners for CFD problems: Tech. Rep. Technical Report 96/14: University of Minnesota Supercomputer Institute, Minneapolis, 1996.
- Landau H.G. Heat conduction in a melting solid // Journal of applied mathematics. 1950. Vol. 8. Pp. 81 – 94.
- Мажорова О.С., Попов Ю.П., Щерица О.В. Консервативные разностные схемы для термо-диффузионной задачи Стефана // Дифференциальные уравнения. 2013. Т. 49, № 7. С. 897 905.
- Ковеня В.М. Яненко Н.Н. Методы расщепления в задачах газовой динамики. Н.: Наука, 1981.
- Mazhorova O. S., Popov Yu. P., Sakharchuk A. S. Stability of a difference problem for a system of parabolic equations with nonstandard boundary conditions // Differential Equation. 1997. Vol. 33, no. 7. Pp. 950–958.
- Gusev A. O., Shcheritsa O. V., Mazhorova O. S. Stability Analysis of Solution Methods for a Phase Transition Problem // Differential Equation. 2019. Vol. 55, no. 7. Pp. 929-939. https://doi.org/10.1134/s0012266119070061.
- 10. Intel Math Kernel Library. Reference Manual. 2016. ISBN 630813-054US.

- Schenk O., Gärtner K. Solving Unsymmetric Sparse Systems of Linear Equations with PARDISO // Journal of Future Generation Computer Systems. 2004. Vol. 20, no. 3. Pp. 475-487. https://doi.org/10.1016/j.future.2003.07. 011.
- Schenk O., G\u00e4rtner K. On fast factorization pivoting methods for symmetric indefinite systems // Elec. Trans. Numer. Anal. 2006. Vol. 23. Pp. 158 – 179.
- Karypis G., Kumar V. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs // SIAM Journal on Scientific Computing. 1999. Vol. 20, no. 1. Pp. 359-392. https://doi.org/10.1137/s1064827595287997.
- 14. Balay Satish, Abhyankar Shrirang, Adams Mark F. et al. PETSc Web page. https://www.mcs.anl.gov/petsc. 2019.
- Balay Satish, Abhyankar Shrirang, Adams Mark F. et al. PETSc Users Manual: Tech. Rep. ANL-95/11 - Revision 3.13: Argonne National Laboratory, 2020. URL: https://www.mcs.anl.gov/petsc/petsc-current/docs/manual.pdf.
- Balay Satish, Gropp William D., McInnes Lois Curfman, Smith Barry F. Efficient Management of Parallelism in Object Oriented Numerical Software Libraries // Modern Software Tools in Scientific Computing / Ed. by E. Arge, A. M. Bruaset, H. P. Langtangen. Birkhäuser Press, 1997. Pp. 163–202.
- Li Xiaoye S., Demmel James W. SuperLU\_DIST: A scalable distributed-memory sparse direct solver for unsymmetric linear systems // ACM Transactions on Mathematical Software. 2003. Vol. 20, no. 3. Pp. 110-140. https://doi.org/ 10.1145/779359.779361.
- Марчевский И. К., Пузикова В. В. Исследование эффективности распараллеливания вычислений при моделировании течений вязкой несжимаемой среды методом LS-STAG на системах с общей памятью // Выч. мет. программирование. 2015. Т. 16, № 4. С. 595-606. https://doi.org/10.15514/ ispras-2016-28(1)-13.

- Kim D., Brown R. A. Modelling of the dynamics of HgCdTe growth by the vertical Bridgman method // J. Crystal Growth. 1991. Vol. 114, no. 3. Pp. 411-434. https://doi.org/10.1016/0022-0248(91)90058-d.
- 20. Peterson J., Fiederle M., Derby J. Analysis of the traveling heater method for the growth of cadmium telluride // J.Crystal Growth. 2016. Vol. 454. Pp. 45–58. https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.08.055.

### Содержание

1	Вве	дение	3			
<b>2</b>	Математическая модель					
3	Метод решения					
	3.1	Преобразование системы координат	10			
	3.2	Вычислительная схема	11			
4 Результаты расчетов						
	4.1	Прямые методы	15			
	4.2	Итерационные методы	20			
	4.3	Сравнение методов	29			
<b>5</b>	Выі	зоды	29			
Πj	Приложение					
Cı	Список литературы					