

Численное моделирование задач
турбулентного перемешивания на
основе квазимонотонной схемы
повышенного порядка точности

Чеванин В. С.

Под руководством Тишкина В. Ф.

Основные цели работы

- Построение схемы повышенного порядка точности;
- Тестирование построенной схемы;
- Создание параллельного программного комплекса для моделирования трехмерных задач;
- Повышение эффективности параллельных расчетов («гибридная» схема);
- Исследование неустойчивостей Рэлея - Тейлора и Рихтмайера – Мешкова на основе созданного программного комплекса

Одномерный закон сохранения

Одномерное уравнение:

$$u_t(x, t) + f_x(u(x, t)) = 0$$

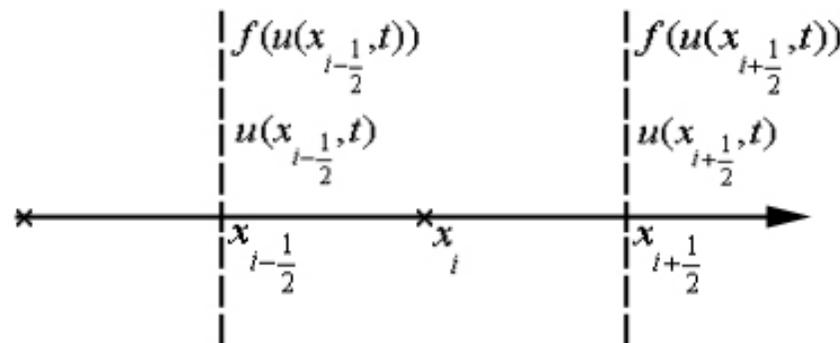
Разрывные начальные условия
и периодические граничные.

Разностная схема:

$$\frac{d\bar{u}(x_i, t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta x} [f(u(x_{i+\frac{1}{2}}, t)) - f(u(x_{i-\frac{1}{2}}, t))] \quad \bar{u}_i(x_i, t) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(\xi, t) d\xi$$

На точность влияют:

$$f(u(x_{i-\frac{1}{2}}, t)) \text{ и } f(u(x_{i+\frac{1}{2}}, t)), u(x_{i-\frac{1}{2}}, t) \text{ и } u(x_{i+\frac{1}{2}}, t)$$



Способы выбора потоков

- Поток Годунова:

$$h(a,b) = \begin{cases} \min_{a \leq u \leq b} f(u), & a \leq b, \\ \max_{a \geq u \geq b} f(u), & a > b; \end{cases} \quad \begin{aligned} f(u(x_{i+\frac{1}{2}}, t)) &\approx f_{i+\frac{1}{2}} \\ f_{i+\frac{1}{2}} &= h(\bar{u}_{i+\frac{1}{2}}^+, \bar{u}_{i+\frac{1}{2}}^-) \end{aligned}$$

- Поток Энkvиста-Ошера:

$$h(a,b) = \int_0^b \min(f'(s), 0) ds + \int_0^a \max(f'(s), 0) ds + f(0);$$

- Поток Лакса-Фридрихса:

$$h^{LF}(a,b) = \frac{1}{2} \{f(a) + f(b) - \alpha(b-a)\},$$

$$\alpha = \max_{\inf u_0(x) \leq s \leq \sup u_0(x)} |f'(s)|; \quad \alpha = \max_{\min(a,b) \leq s \leq \max(a,b)} |f'(s)|;$$

- Поток Роу:

$$h^R(a,b) = \begin{cases} f(a), & f'(u) \geq 0, u \in [\min(a,b), \max(a,b)], \\ f(b), & f'(u) \leq 0, u \in [\min(a,b), \max(a,b)], \\ h^{LLF}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Способы интерполяции значений переменных на границах ячеек

- 1-ый порядок:

$$u(x_{i+1/2}, t) = u(x_i)$$

- N-ый порядок:

$$u(x_{i+1/2}, t) = P_n(x_{i+1/2}) = Au(x_i) + Bu(x_{i-1}) + Cu(x_{i+1}) + Du(x_{i-2}) + Eu(x_{i+2}) + \dots$$

$$P_n(x_i) = u(x_i),$$

$$P_n(x_{i+1}) = u(x_{i+1}),$$

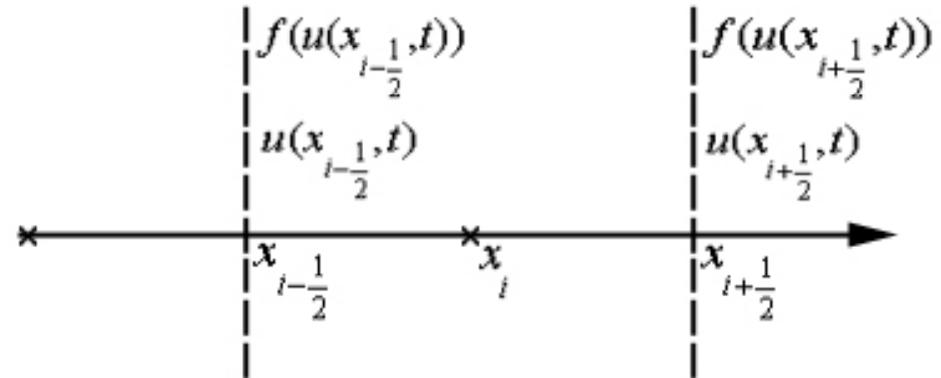
$$P_n(x_{i-1}) = u(x_{i-1}),$$

...

- Схемы с «лимитером» (TVD):

$$u(x_{i+1/2}) = u(x_{i+1}) - \frac{\Delta x}{2} \alpha(R_{i+1/2}^+) \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{\Delta x} \quad TV = \sum_j |u_{j+1} - u_j| \quad TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n)$$

- ENO и WENO



ENO

- Essentially Non-Oscillatory Scheme
- Интерполяционный полином (Ньютоновский):

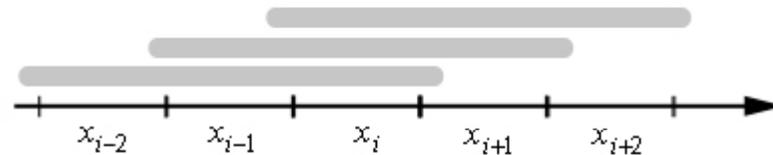
$$P(x) = \sum_{j=0}^k V[x_{i-r-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i-r+j-\frac{1}{2}}] \prod_{m=0}^{j-1} (x - x_{i-r+m-\frac{1}{2}})$$

- Ньютоновские разделенные разности

$$V[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{1}{2}}] = \frac{V[x_{i+\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{1}{2}}] - V[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{3}{2}}]}{x_{i+j-\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \quad V[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] = \bar{u}_i$$

- Выбор шаблона осуществляется на основе гладкости производных

$$V[x_{i-\frac{3}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{3}{2}}] < V[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{1}{2}}], \rightarrow r = r - 1$$



WENO

- Weighted Essentially Non-Oscillatory Scheme
- Учитываются все возможные шаблоны с весами:

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} \quad \omega_r \geq 0 \quad \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r = 1$$

- Для гладких решений:

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} d_r u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} \quad d_r \geq 0 \quad \sum_{r=0}^{k-1} d_r = 1$$

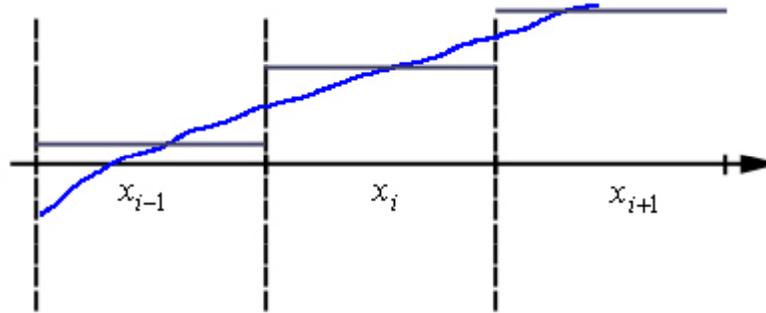
- Комбинирование «гладкой» и «негладкой» интерполяций:

$$\alpha_r = \frac{d_r}{(\varepsilon + \beta_r)^2} \quad \omega_r = \frac{\alpha_r}{\sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s}$$

- Индикатор гладкости:

$$\beta_r = \sum_{l=1}^{k-1} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Delta x^{2l-1} \left(\frac{\partial^l p_r(x)}{\partial x^l} \right)^2 dx$$

Новый метод



- Интерполяционный полином:

$$p(x) = \alpha_1 p_1(x) + \alpha_2 p_2(x) + \dots + (1 - \alpha_1 - \alpha_2 - \dots - \alpha_{k-1}) p_k(x) \quad \sum_{i=1, k-1} \alpha_i \leq 1$$

- Условие минимума нормы в L2:

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

Новый метод (3-ий порядок)

- Интерполяционный полином:

$$p_i(x) \equiv p(x) = \alpha p_1(x) + \beta p_2(x) + (1 - \alpha - \beta) p_3(x)$$

$$0 \leq \alpha, \beta \leq 1, 0 \leq \alpha + \beta \leq 1$$

- Базисные полиномы:

$$p_1(y_i) = A_1 y_i^2 + B_1 y_i + C_1$$

$$p_2(y_i) = A_2 y_i^2 + B_2 y_i + C_2 \quad y_i = x - x_i$$

$$p_3(y_i) = A_3 y_i^2 + B_3 y_i + C_3$$

- Итоговый полином:

$$A = \alpha A_1 + \beta A_2 + (1 - \alpha - \beta) A_3$$

$$p_i(x) = Ay_i^2 + By_i + C \quad B = \alpha B_1 + \beta B_2 + (1 - \alpha - \beta) B_3$$

$$C = \alpha C_1 + \beta C_2 + (1 - \alpha - \beta) C_3$$

$$A_1 = \frac{\bar{u}_{i-2} - 2\bar{u}_{i-1} + \bar{u}_i}{2\Delta x^2}$$

$$B_1 = \frac{\bar{u}_{i-2} - 4\bar{u}_{i-1} + 3\bar{u}_i}{2\Delta x}$$

$$C_1 = \bar{u}_i - \frac{\Delta x^2}{12} A_1$$

$$A_2 = \frac{\bar{u}_{i-1} - 2\bar{u}_i + \bar{u}_{i+1}}{2\Delta x^2}$$

$$B_2 = \frac{\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_{i-1}}{2\Delta x}$$

$$C_2 = \bar{u}_i - \frac{\Delta x^2}{12} A_2$$

$$A_3 = \frac{\bar{u}_i - 2\bar{u}_{i+1} + \bar{u}_{i+2}}{2\Delta x^2}$$

$$B_3 = \frac{4\bar{u}_{i+1} - 3\bar{u}_i - \bar{u}_{i+2}}{2\Delta x}$$

$$C_3 = \bar{u}_i - \frac{\Delta x^2}{12} A_3$$

Условие на функционал

- Условие минимума функционала $\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \{p_i(x) - \bar{u}_i\}^2 dx$:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \{p_i(x) - \bar{u}_i\}^2 dx \right) = \frac{\Delta x^3}{2} \left\{ \alpha \left[\frac{1}{3} (B_1 - B_3)^2 + \frac{\Delta x^2}{45} (A_1 - A_3)^2 \right] + \right.$$

$$\left. + \beta \left[\frac{1}{3} (B_1 - B_3)(B_2 - B_3) + \frac{\Delta x^2}{45} (A_1 - A_3)(A_2 - A_3) \right] + \right.$$

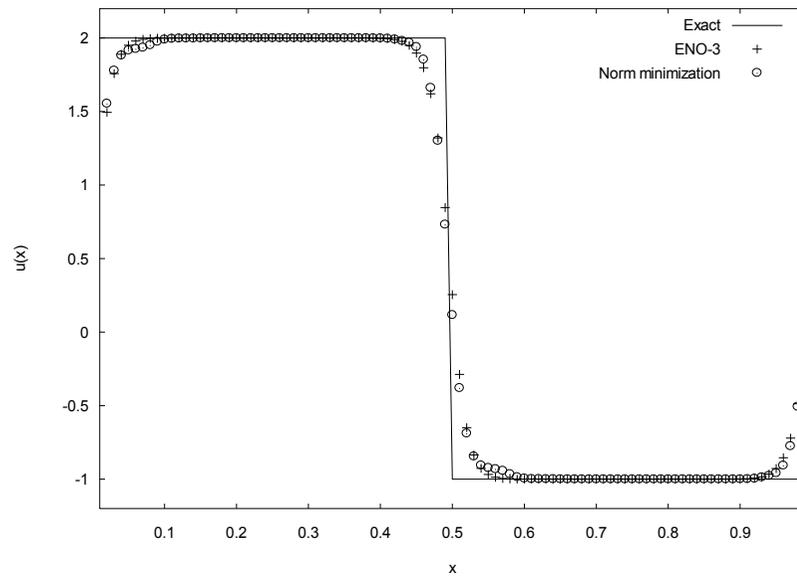
$$\left. \frac{1}{3} B_3 (B_1 - B_3) + \frac{\Delta x^2}{45} A_3 (A_1 - A_3) \right\} = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \{p_i(x) - \bar{u}_i\}^2 dx \right) = \frac{\Delta x^3}{2} \left\{ \beta \left[\frac{1}{3} (B_2 - B_3)^2 + \frac{\Delta x^2}{45} (A_2 - A_3)^2 \right] + \right.$$

$$\left. + \alpha \left[\frac{1}{3} (B_1 - B_3)(B_2 - B_3) + \frac{\Delta x^2}{45} (A_1 - A_3)(A_2 - A_3) \right] + \right.$$

$$\left. \frac{1}{3} B_3 (B_2 - B_3) + \frac{\Delta x^2}{45} A_3 (A_2 - A_3) \right\} = 0.$$

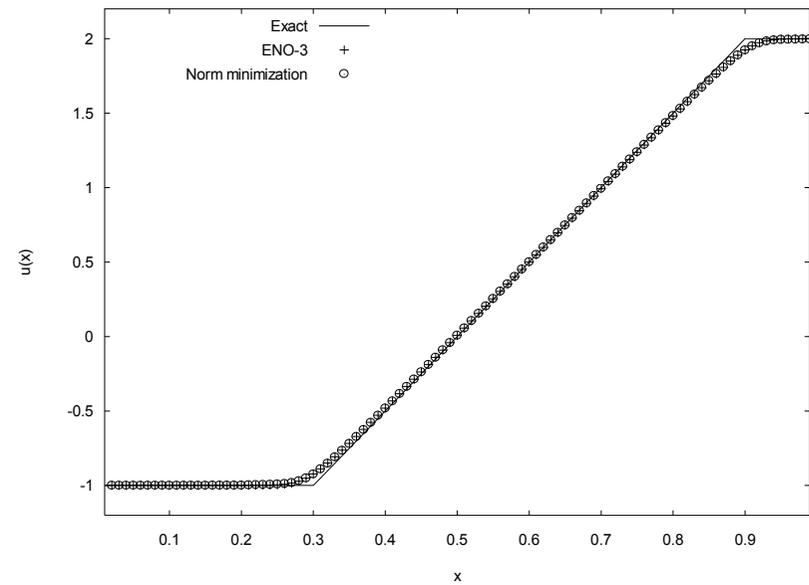
Уравнение переноса и уравнение Бюргерса



$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = 0$$

$$u(t=0, x) = \begin{cases} -1, & x < 0.5 \\ 2, & x \geq 0.5 \end{cases},$$

$$0 \leq x \leq 1$$



$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial u^2(x,t)}{\partial x} = 0$$

$$u(t=0, x) = \begin{cases} -1, & x < 0.5 \\ 2, & x \geq 0.5 \end{cases},$$

$$0 \leq x \leq 1$$

Одномерная газовая динамика

- Система уравнений:

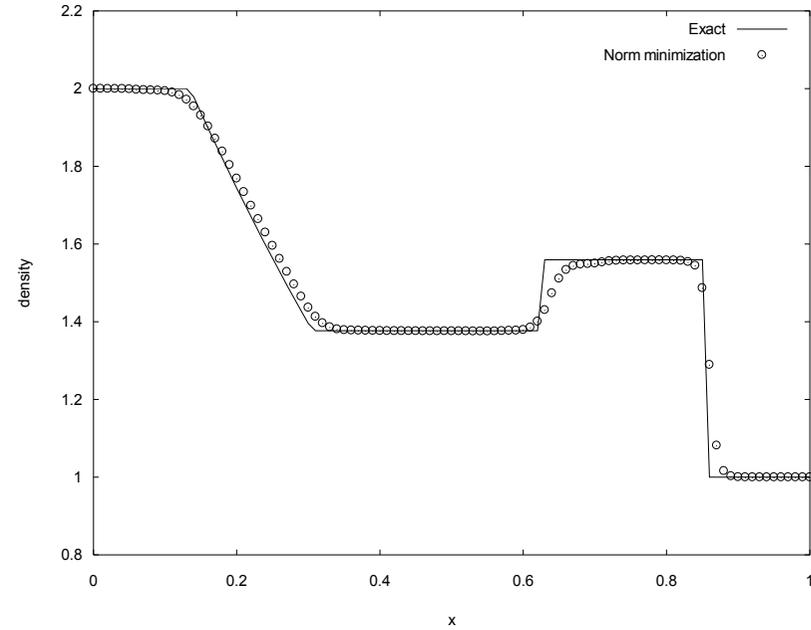
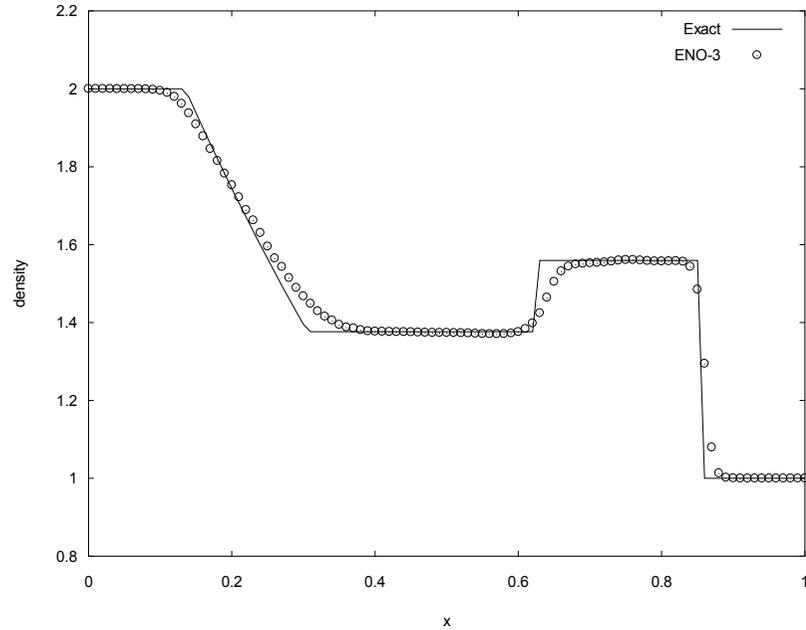
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho u \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) + p u \right] = 0.$$

$$p = (\gamma - 1) \rho \varepsilon$$

Задача Римана



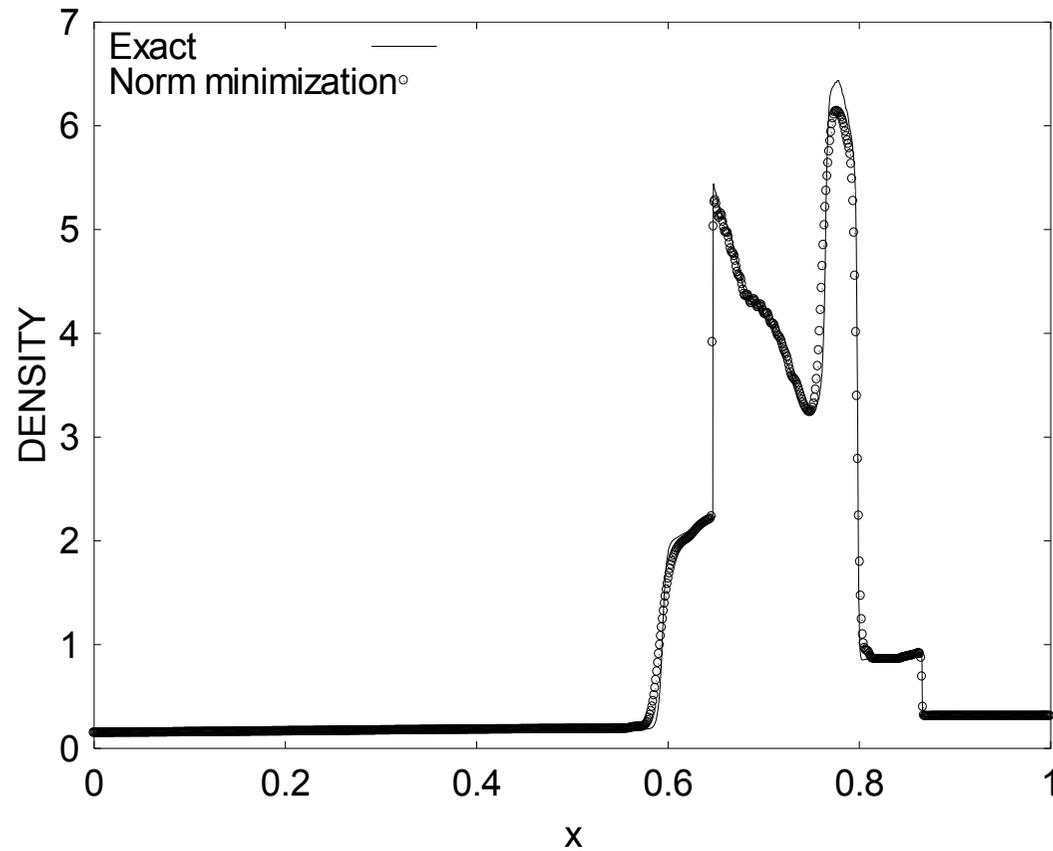
$$\rho(t=0) = \begin{cases} 2 & \text{при } 0 \leq x \leq 0.5 \\ 1 & \text{при } 0.5 < x \leq 1 \end{cases}$$

$$u(t=0) = 0$$

$$\varepsilon(t=0) = \begin{cases} 3 & \text{при } 0 \leq x \leq 0.5 \\ 1.5 & \text{при } 0.5 < x \leq 1 \end{cases}$$

$$0 \leq x \leq 1$$

Woodward-Colella blast waves

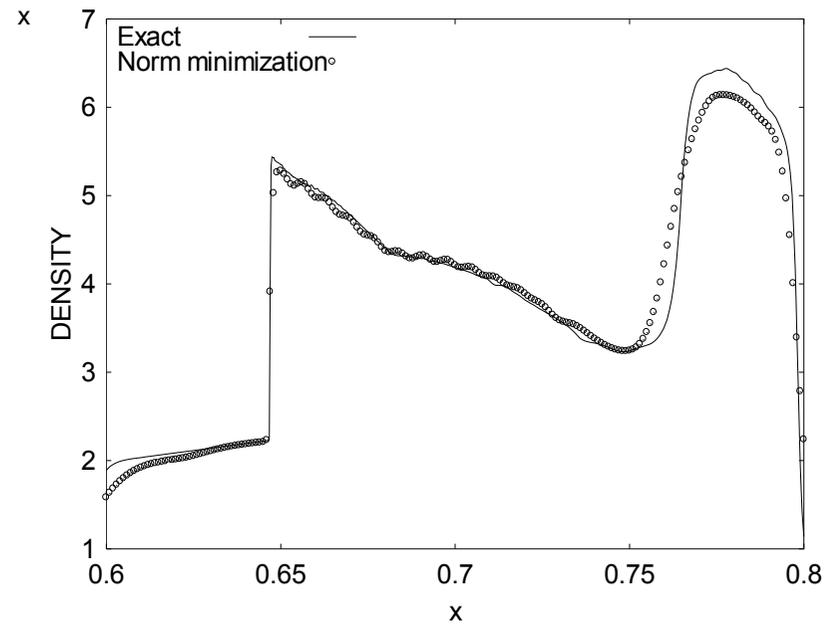
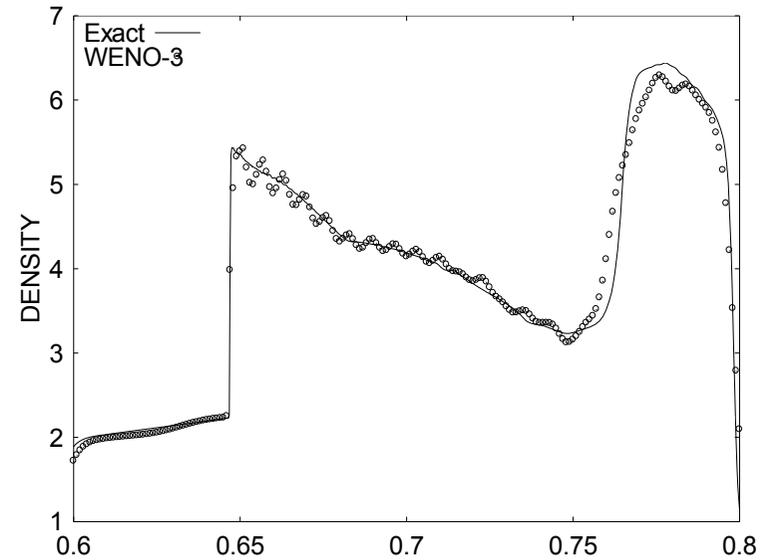
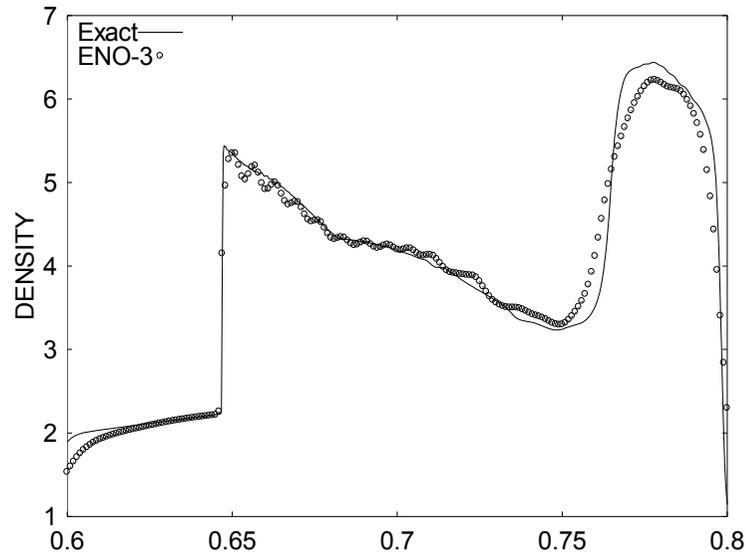


$$\rho(t=0) = 1$$

$$u(t=0) = 0$$

$$\varepsilon(t=0) = \begin{cases} 1500 & \text{при } 0 \leq x \leq 0.1 \\ 0.015 & \text{при } 0.1 < x \leq 0.9 \\ 150 & \text{при } 0.9 < x \leq 1 \end{cases} \quad 0 \leq x \leq 1$$

Blast waves



Трёхмерная газовая динамика

- Система уравнений:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{\Pi} = \vec{F},$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{v}e) = -\operatorname{div}(\rho \vec{v}) + Q + (\vec{F} \vec{v}) - \operatorname{div} \vec{W},$$

$$p = p(\rho, T),$$

$$\varepsilon = \varepsilon(\rho, T),$$

$$e = \rho \left(\varepsilon + \frac{|\vec{v}|^2}{2} \right) \quad p = (\gamma - 1) \varepsilon \rho,$$

- Итоговый вид системы:

- Разностная схема:

$$\begin{aligned} & \frac{U_{ijk}^{n+1} - U_{ijk}^n}{\Delta t} + \frac{H_{i+1/2,j,k}^{(1)} - H_{i-1/2,j,k}^{(1)}}{\Delta x} + \\ & + \frac{H_{i,j+1/2,k}^{(2)} - H_{i,j-1/2,k}^{(2)}}{\Delta y} + \frac{H_{i,j,k+1/2}^{(3)} - H_{i,j,k-1/2}^{(3)}}{\Delta z} = 0, \end{aligned}$$

$$\vec{U} = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \end{Bmatrix} \quad \vec{F}_1 = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ u(e+p) \end{Bmatrix} \quad \vec{F}_2 = \begin{Bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ v(e+p) \end{Bmatrix} \quad \vec{F}_3 = \begin{Bmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ w(e+p) \end{Bmatrix}$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}_1(\vec{U})}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}_2(\vec{U})}{\partial y} + \frac{\partial \vec{F}_3(\vec{U})}{\partial z} = 0,$$

MPI и OpenMP

MPI

Плюсы:

- 1) Более низкоуровневое распараллеливание;
- 2) Быстрый обмен между процессорами через сокеты.

Минусы:

- 1) Сложность кода;
- 2) Необходимость контроля «целостности»;
- 3) Недостаточно эффективен при работе с общей памятью.

OpenMP

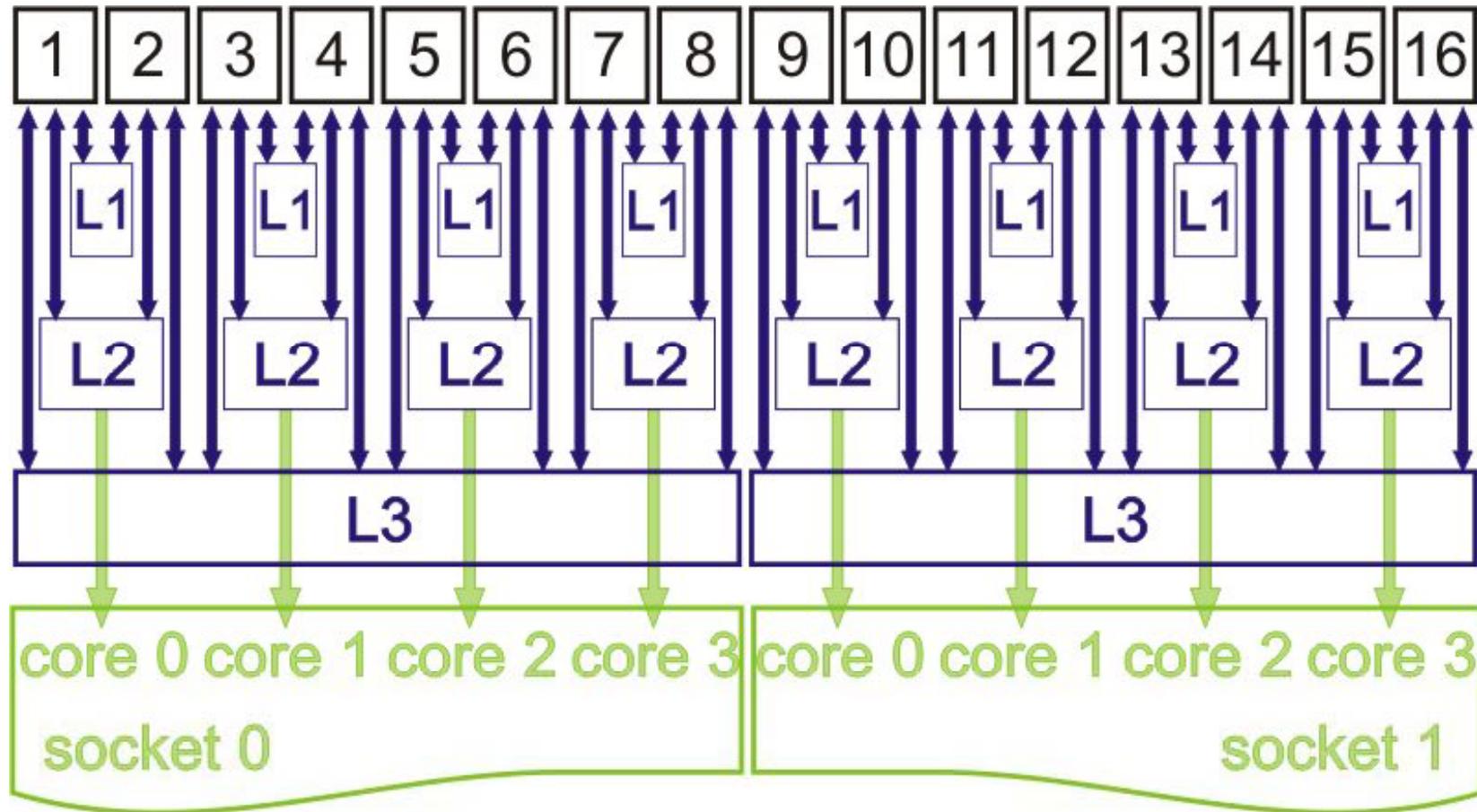
Плюсы:

- 1) Эффективен при работе с общей памятью;
- 2) Простота кода и внутренняя оптимизация;

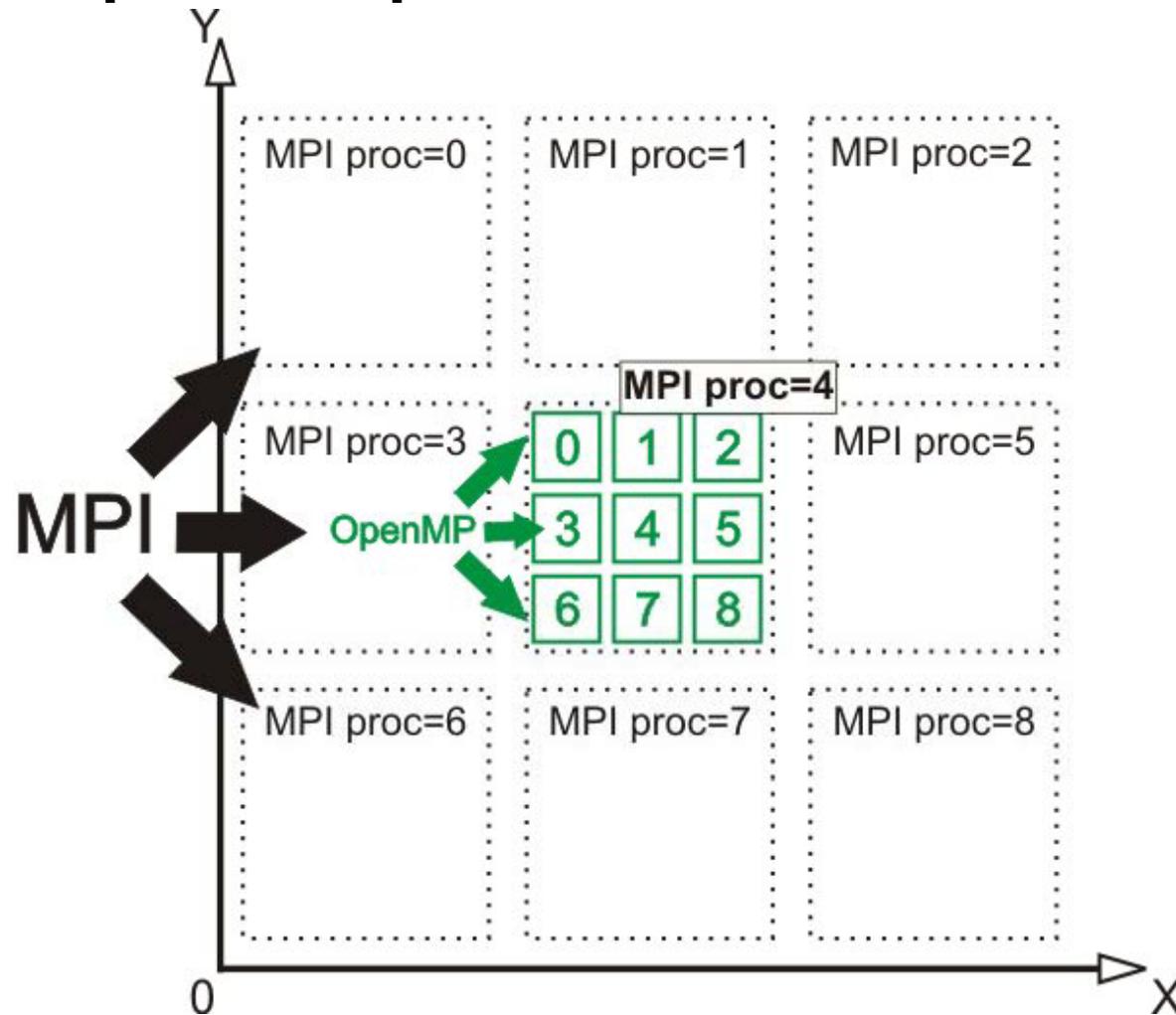
Минусы:

- 1) Медленные обмены вне общей памяти;
- 2) Требуется больше оперативной памяти;
- 3) Недостаточно эффективен при распараллеливании вложенных циклов.

Современный 16-ядерный процессор



Гибридный способ распараллеливания



Исследование эффективности гибридной схемы

- Ускорение:

$$S = \frac{T_1}{T_{Np}}$$

- Эффективность:

$$E_{Np} = \frac{S}{Np}$$

- Закон Амдаля:

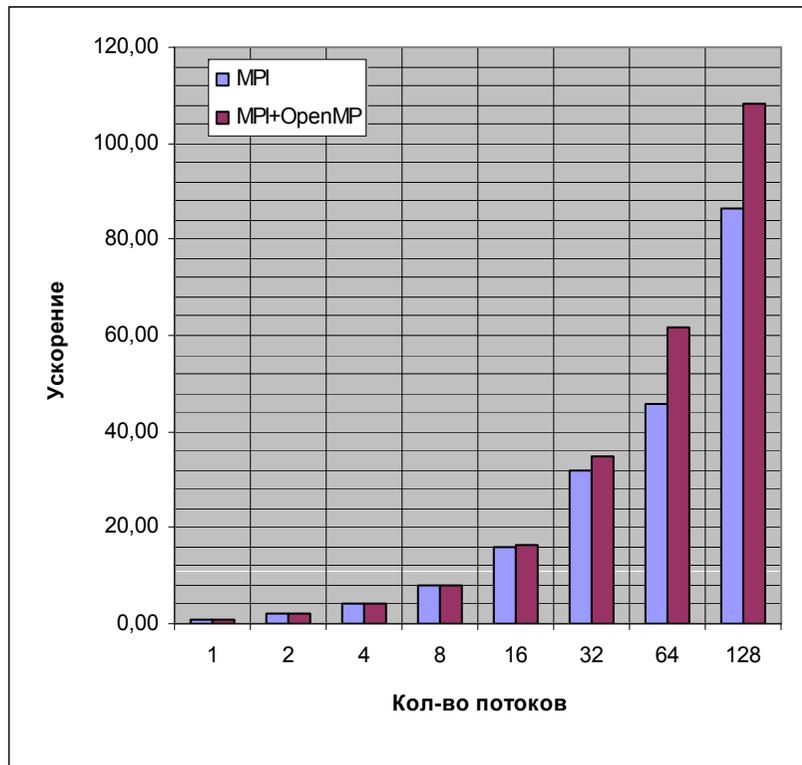
$$S_A = \frac{Np}{\beta_A Np + (1 - \beta_A)}$$

- Оценка в трехмерном случае:

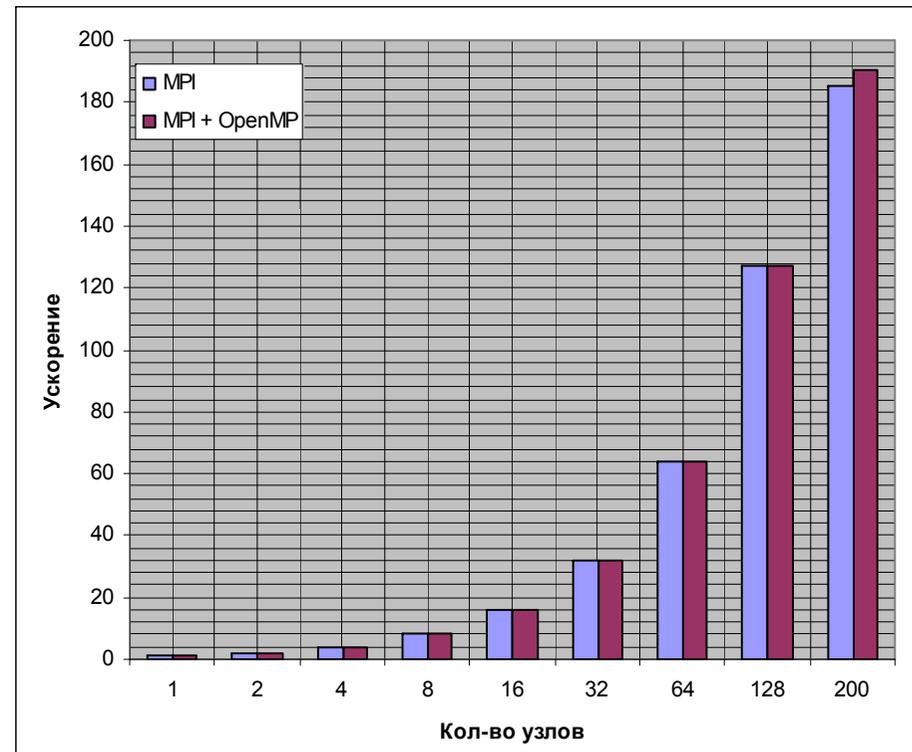
$$S_{Np} = \frac{Np}{1 + 2kk_t \frac{Np}{\sqrt[3]{N_x N_y N_z}}} \quad E_{Np} = \frac{1}{1 + 2kk_t \frac{Np}{\sqrt[3]{N_x N_y N_z}}}$$

Ускорение (MPI и гибрид)

Немасштабированные
расчеты:

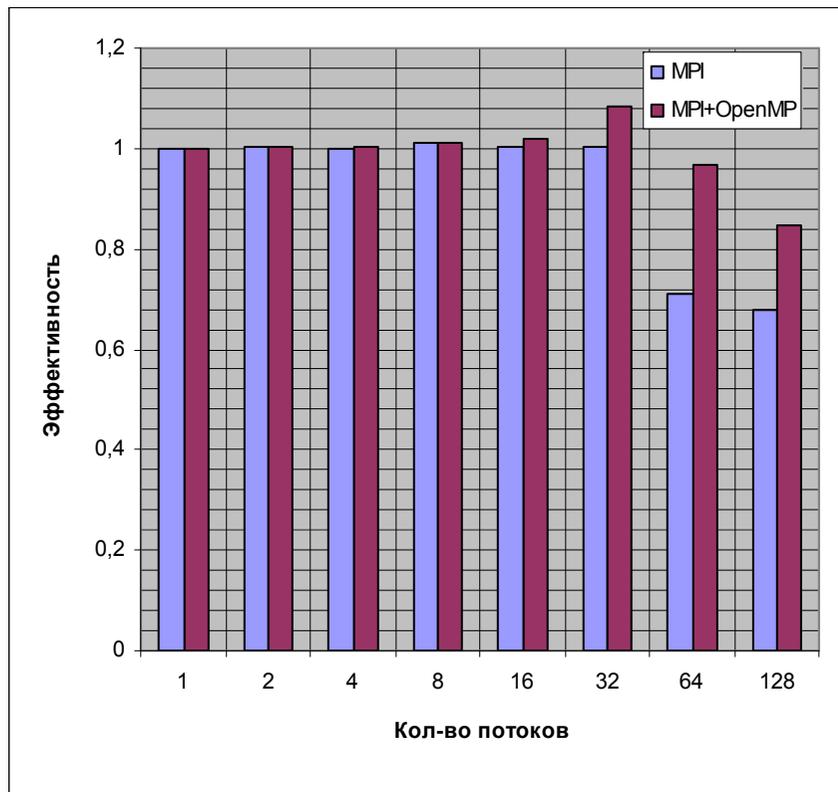


Масштабированные
расчеты:

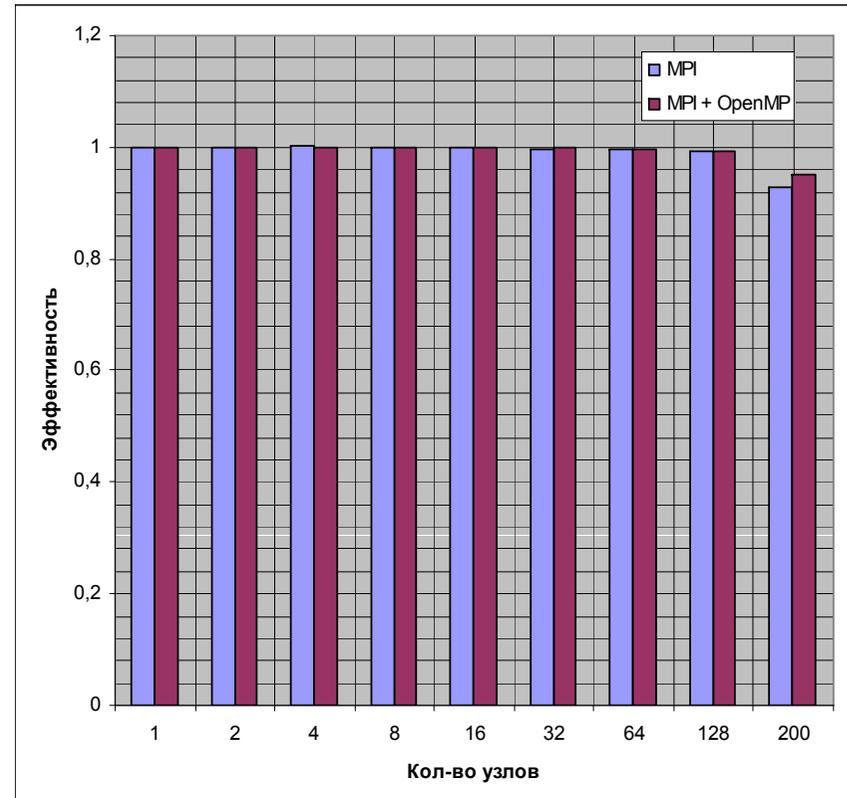


Эффективность (MPI и гибрид)

Немасштабированные расчеты:



Масштабированные расчеты:



Развитие неустойчивости Рихтмайера – Мешкова

- Задача Погги:

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}_1(\vec{U})}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}_2(\vec{U})}{\partial y} + \frac{\partial \vec{F}_3(\vec{U})}{\partial z} = 0,$$

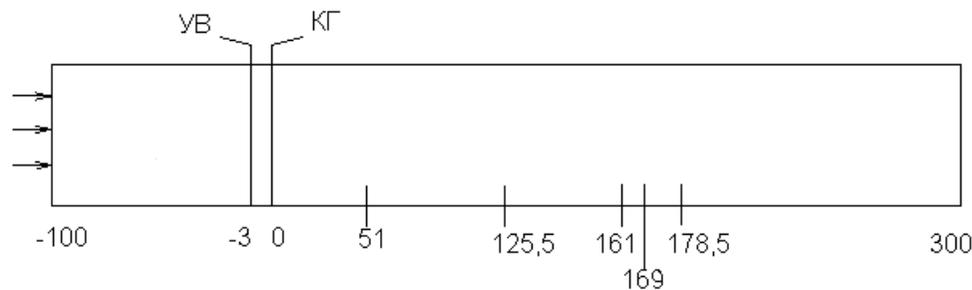
$$\vec{U} = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \end{Bmatrix} \quad \vec{F}_1 = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ u(e+p) \end{Bmatrix} \quad \vec{F}_2 = \begin{Bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ v(e+p) \end{Bmatrix} \quad \vec{F}_3 = \begin{Bmatrix} \rho w \\ \rho w^2 + p \\ \rho vw \\ w(e+p) \end{Bmatrix}$$

- На контактной границе: $R(i, j, k) = R_n + \text{sign}(\xi - 0.5)\Delta R_n,$

$$R_1 + \Delta R_1 = \rho_2,$$

$$R_N + \Delta R_N = \rho_1$$

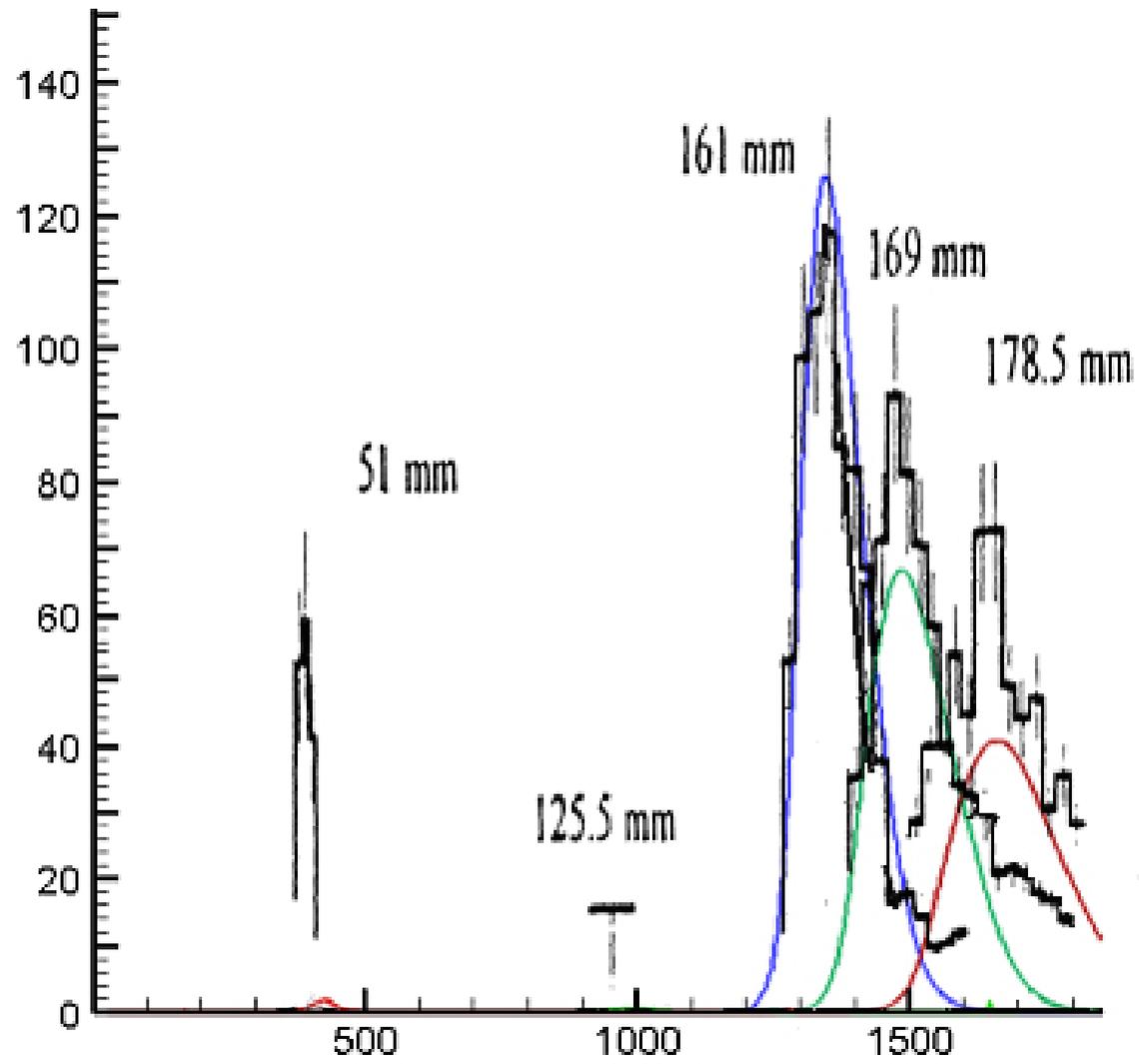
- В определенных слоях измеряется $\langle w^2 \rangle - \langle w \rangle^2$



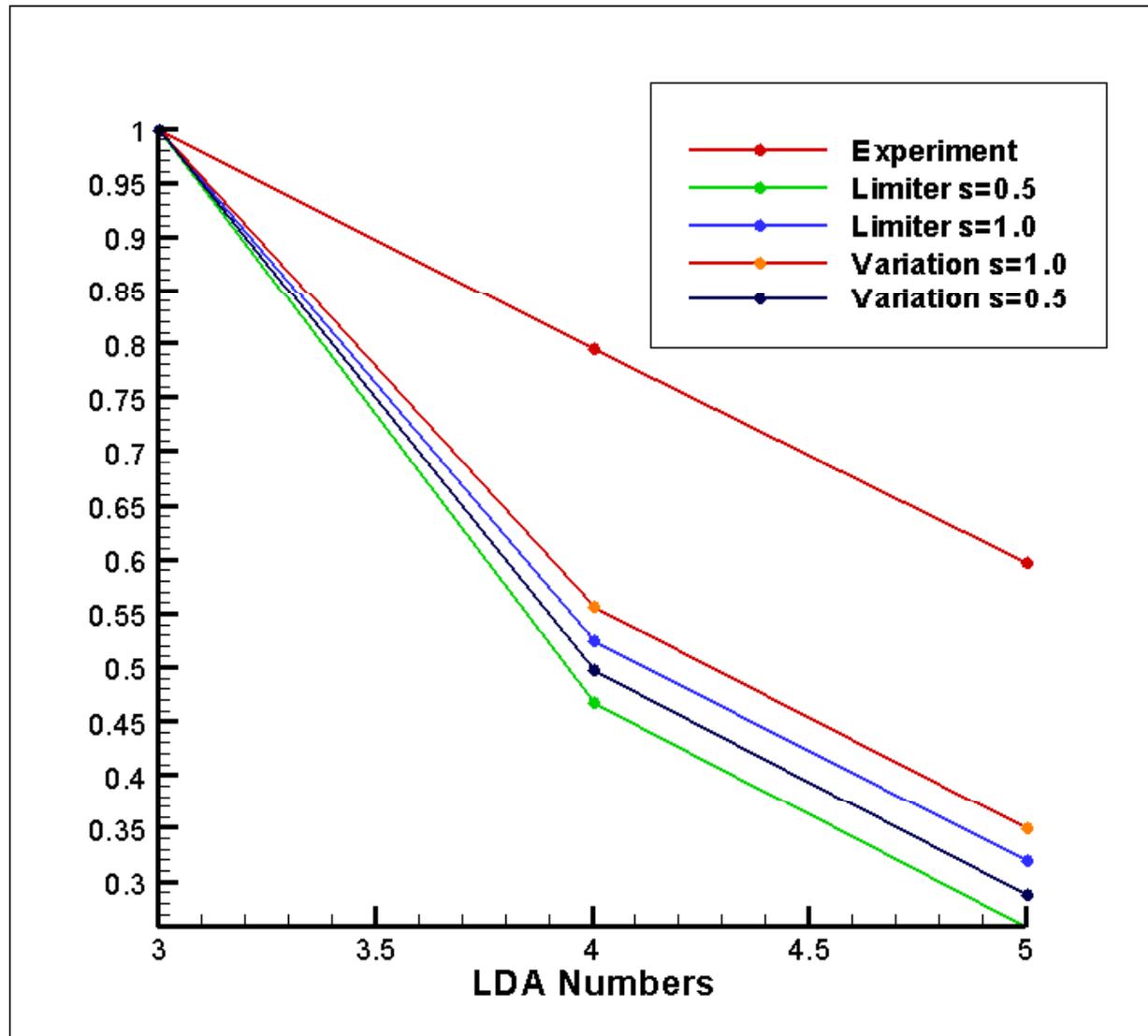
$SF6 : \gamma = 1,094$

Воздух : $\gamma = 1.4$

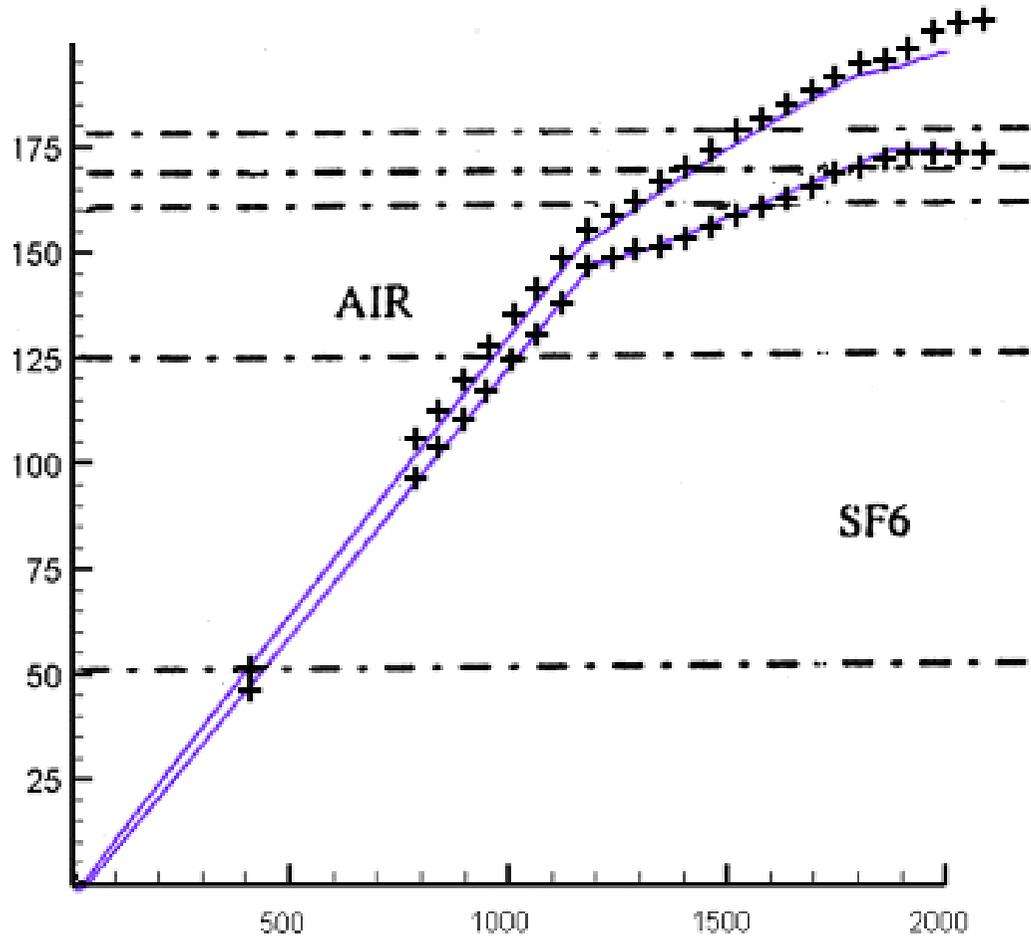
Пульсации



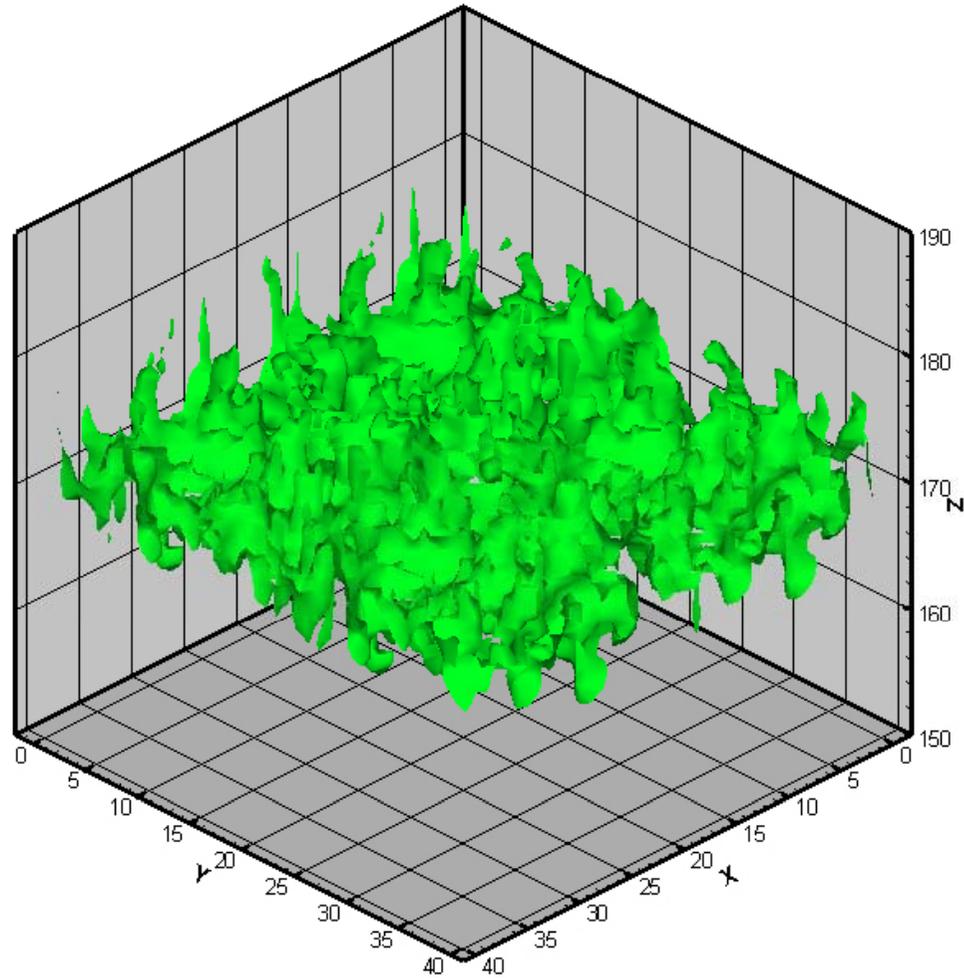
Амплитуды пульсаций



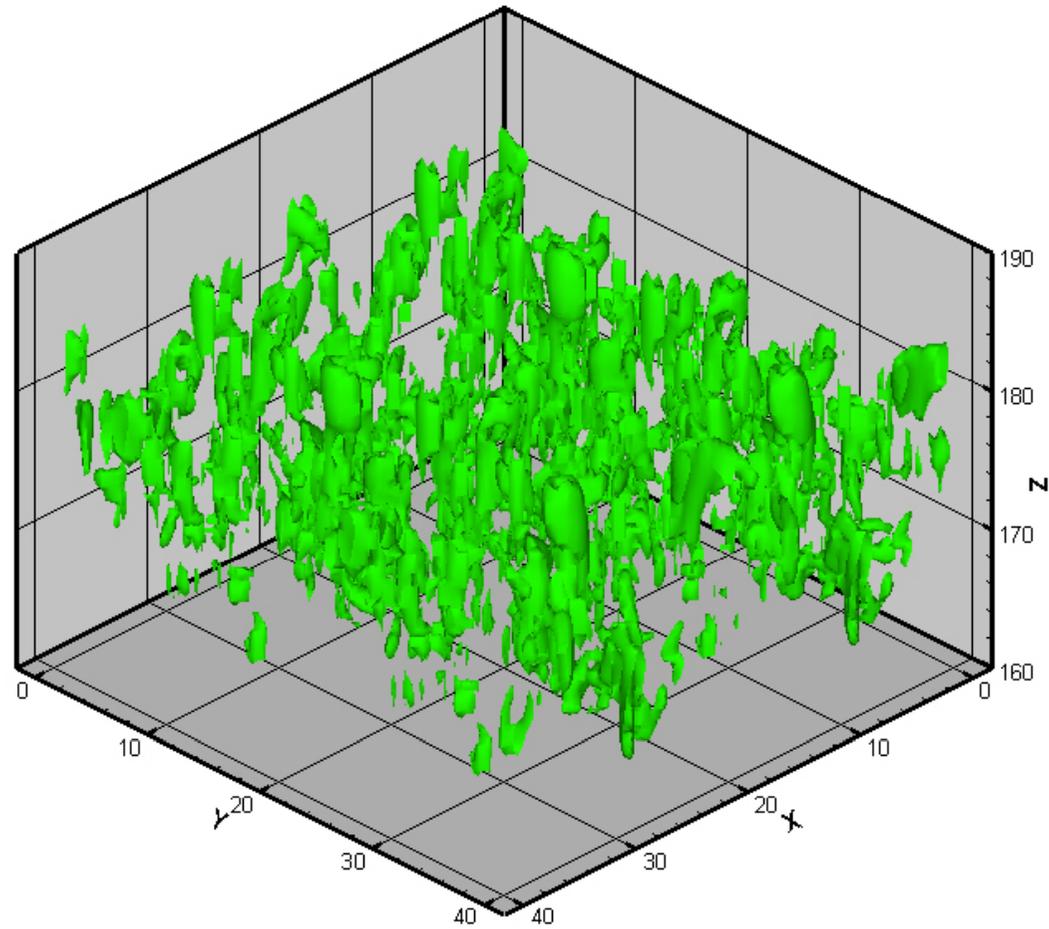
Ширина ЗТП



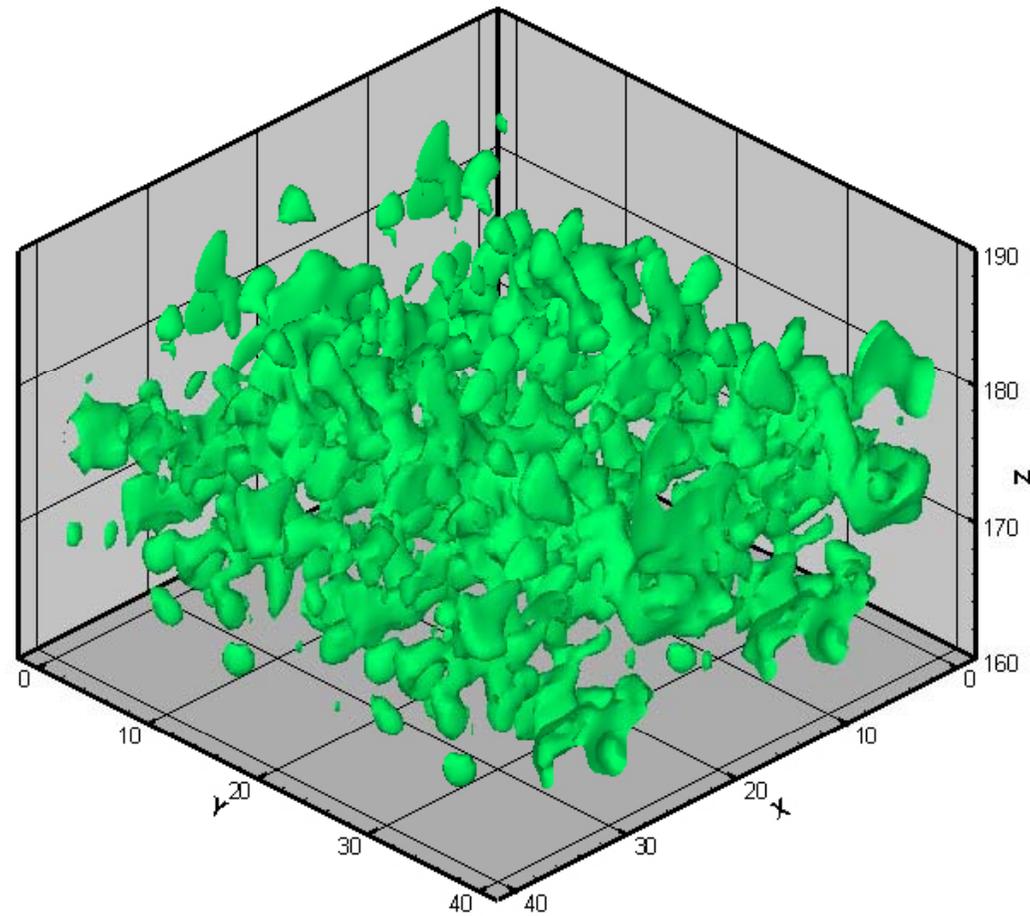
Изоповерхность плотности



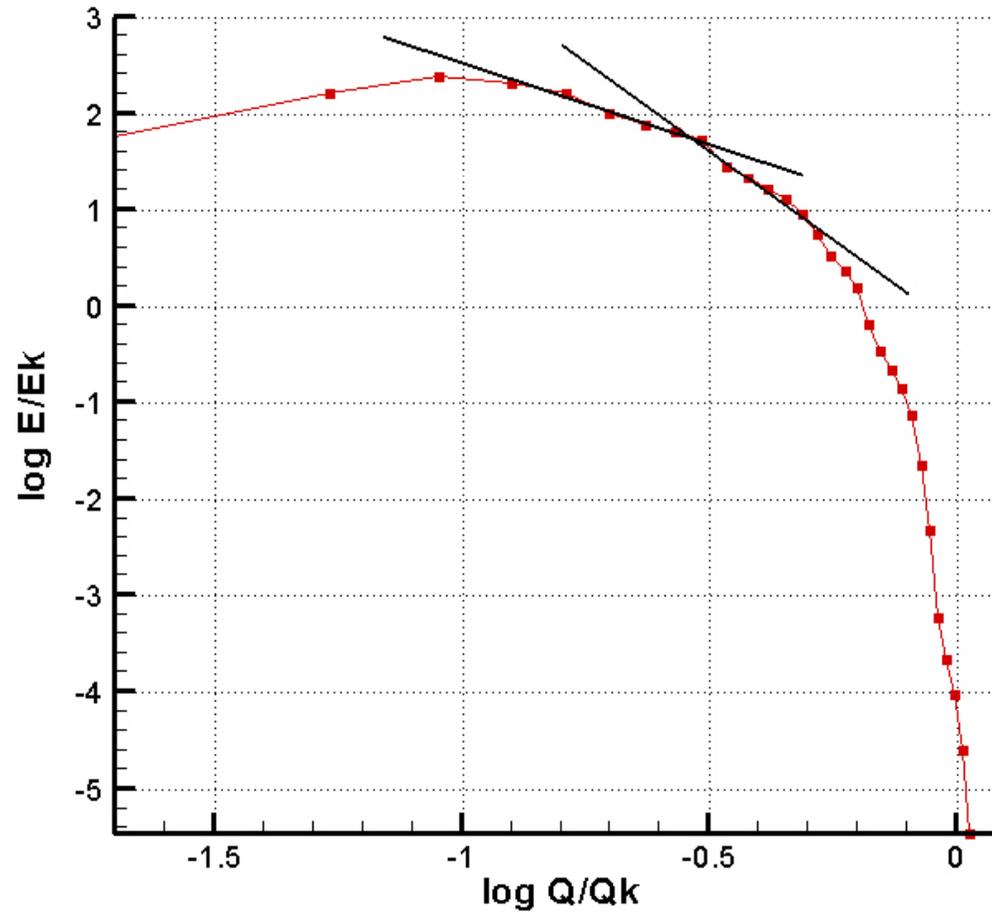
Тонкая структура



Отфильтрованная кинетическая энергия



Спектральная плотность кинетической энергии



Развитие неустойчивости Рэля-Тейлора

- Задача:

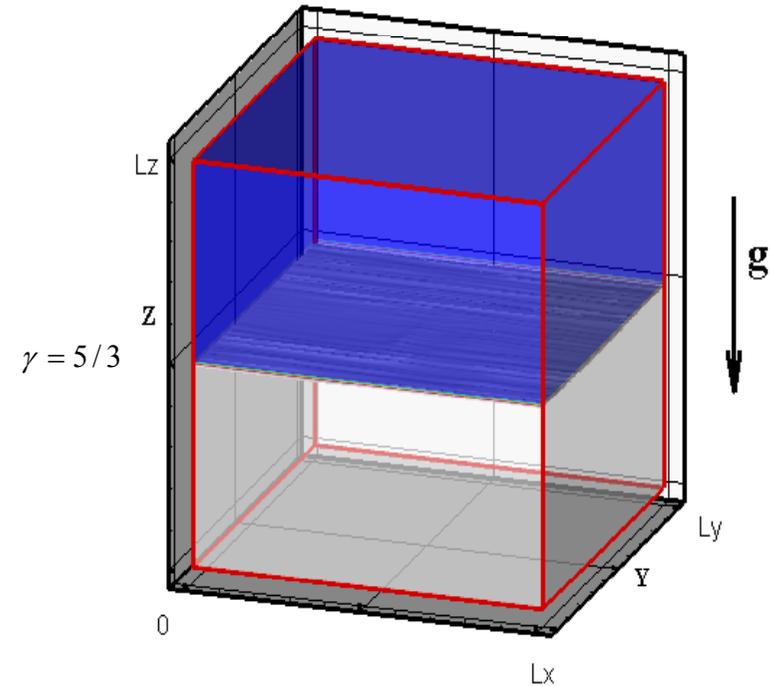
$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}_1(\vec{U})}{\partial x} + \frac{\partial \vec{F}_2(\vec{U})}{\partial y} + \frac{\partial \vec{F}_3(\vec{U})}{\partial z} = 0,$$

$$\vec{U} = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \end{Bmatrix} \quad \vec{F}_1 = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ u(e+p) \end{Bmatrix} \quad \vec{F}_2 = \begin{Bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ v(e+p) \end{Bmatrix} \quad \vec{F}_3 = \begin{Bmatrix} \rho w \\ \rho w^2 + p \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ w(e+p) \end{Bmatrix}$$

- На границе:

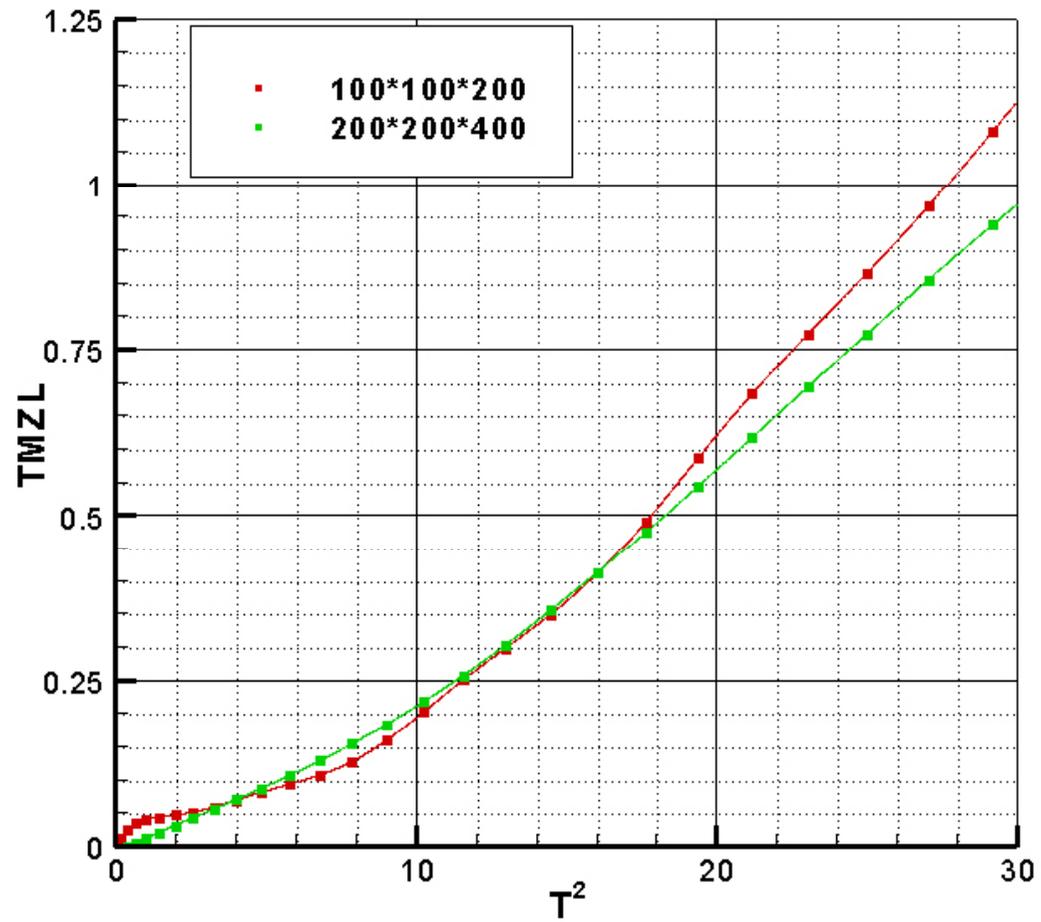
$$\rho_1 = \rho_{01} (1 + 0.1 \text{sign}(\xi - 1)) \exp\left(\gamma \frac{gh}{2c_{01}^2}\right)$$

$$p = p_0 \exp\left(-\gamma \frac{gz}{c_{02}^2}\right), \rho = \rho_{02} \exp\left(-\gamma \frac{gz}{c_{02}^2}\right)$$

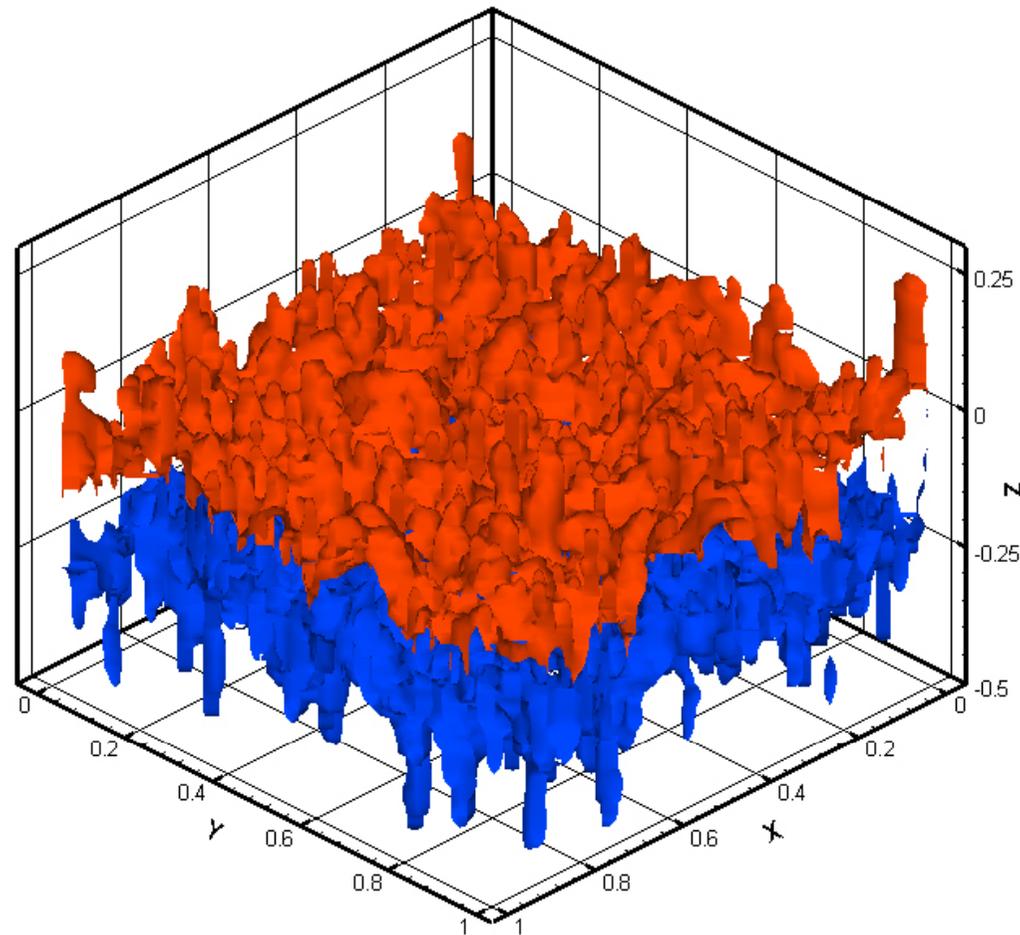


$$p = p_0 \exp\left(-\gamma \frac{gz}{c_{01}^2}\right), \rho = \rho_{01} \exp\left(-\gamma \frac{gz}{c_{01}^2}\right)$$

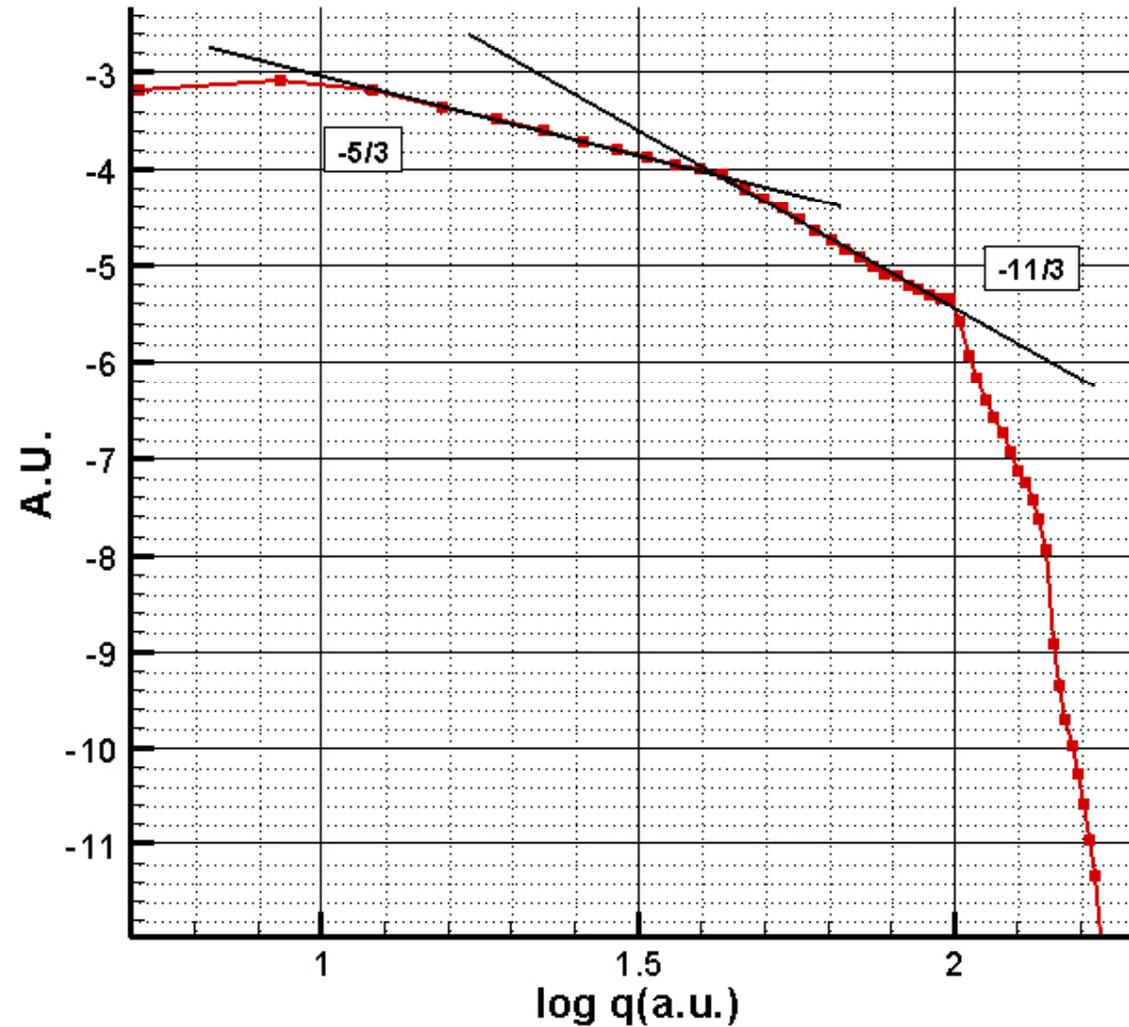
Ширина ЗТП



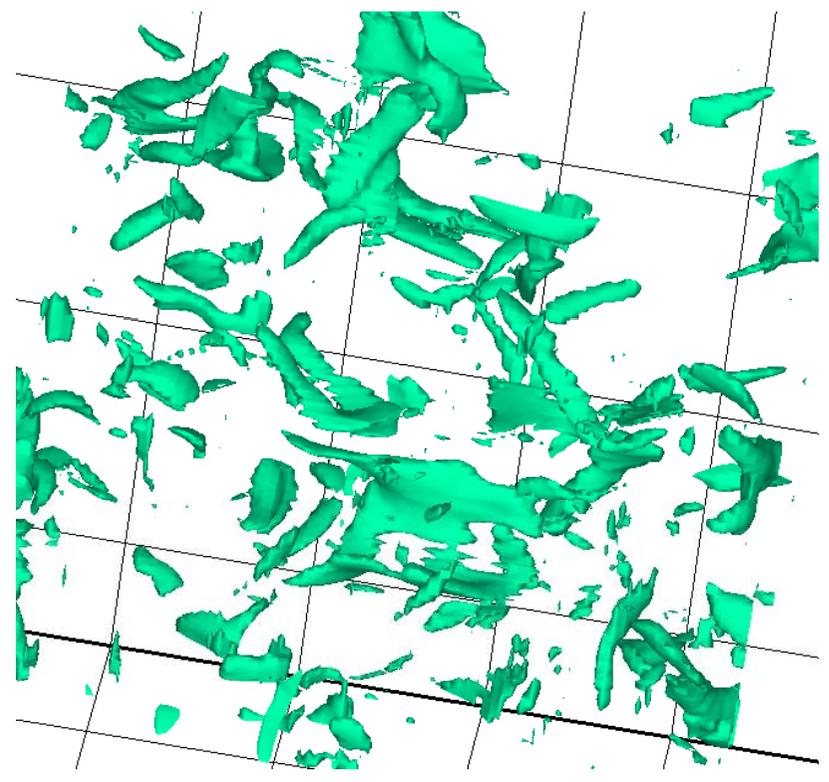
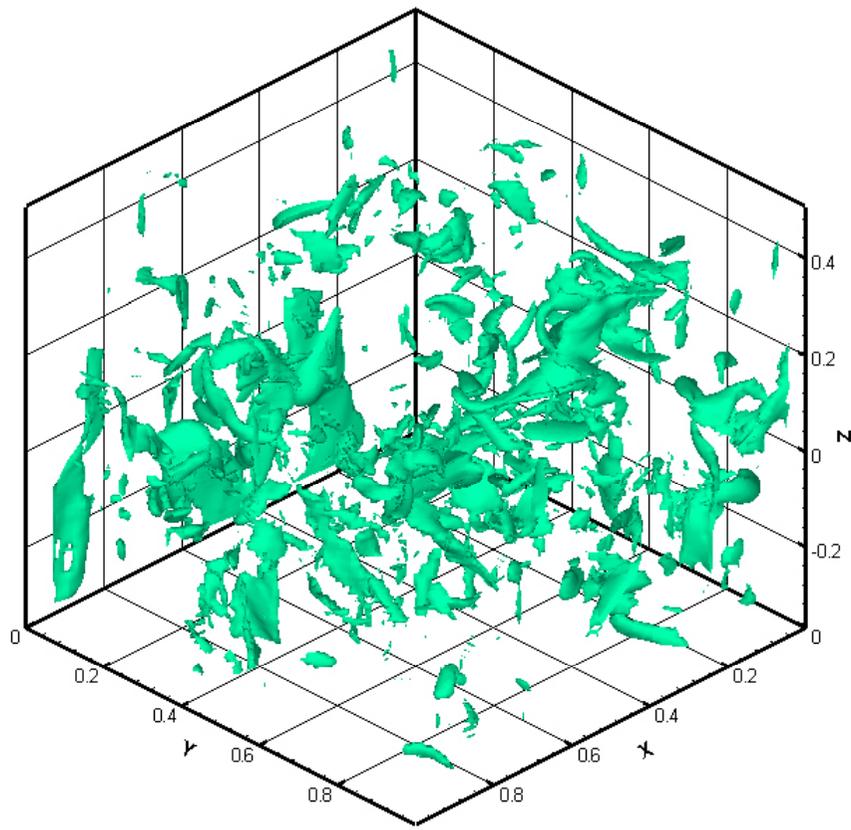
Изоповерхности массовой концентрации



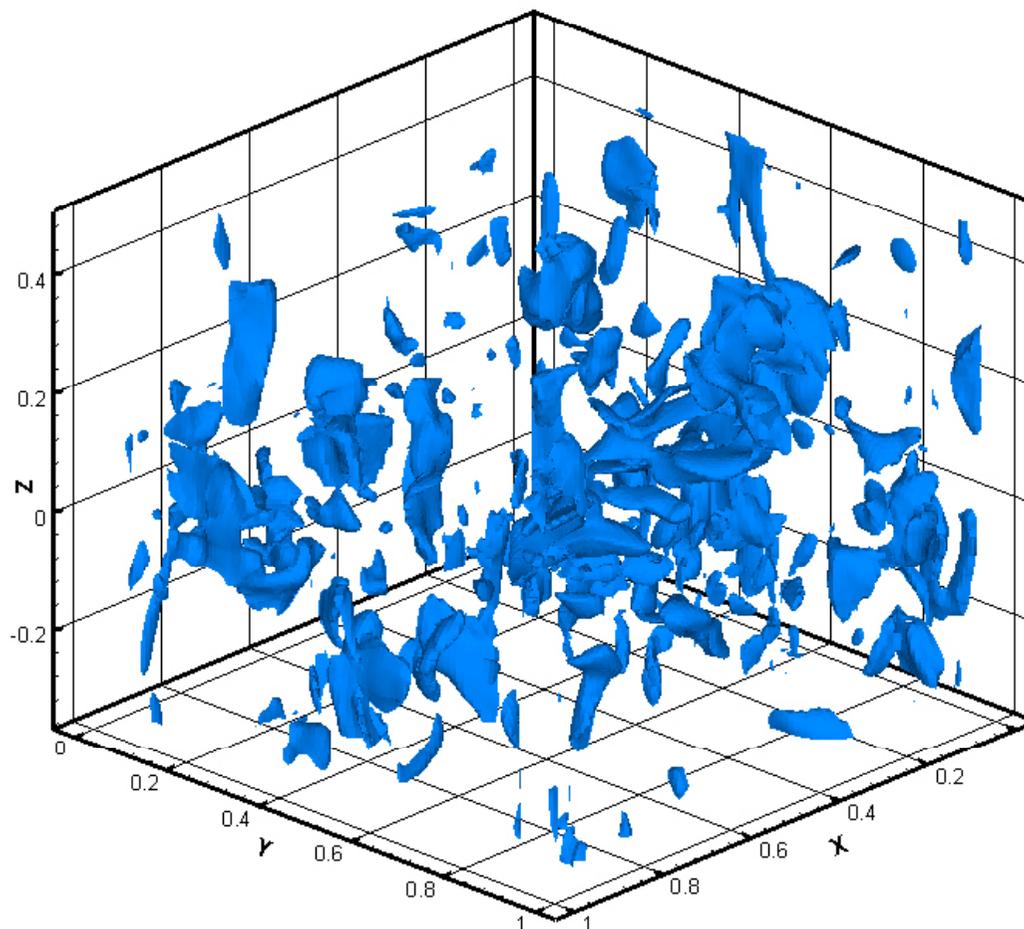
Спектральная плотность кинетической энергии



Тонкая структура



Отфильтрованная энергия



Результаты работы

- Была создана квазимонотонная схема повышенного порядка точности;
- Полученная схема была испытана на ряде одномерных тестов и показала большую монотонность в некоторых задачах по сравнению с ENO и WENO;
- Был предложен и реализован параллельный алгоритм с гибридной схемой распараллеливания (MPI+OpenMP), доказана большая эффективность гибридного распараллеливания по сравнению с MPI;
- С использованием реализованного алгоритма было произведено моделирование развития неустойчивостей Рэля - Тейлора и Рихтмайера – Мешкова, получен колмогоровский спектр;