Пределы детализации и формулировка уравнений, описывающих поведение сплошной среды.

Четверушкин Б.Н.
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Grand Challenge – Экзафлопсные вычисления

Рост производительности вычислительной техники – 1EXAFLOPS – 2018 г.

Системы производительностью в 1PFLOPS будут достаточно распространены к 2015 г.

Существует реальная потребность в высокопроизводительных вычислениях: нефтедобыча, экологически чистое горение, атомная и термоядерная энергетика, турбулентность, астрофизика

В настоящее время расчетов использующих более 100 TFLOPS на задачу мало.

Фактически существует 100 TFLOPS барьер.

Причина: необходимость использования для высокопроизводительных вычислений принципиально новых моделей, алгоритмов программного обеспечения.

Логически простые, но эффективные алгоритмы.

Решение средствами фундаментальной науки

«Физически» бесконечно малый объем содержит несколько десятков молекул.

В воздухе нормальной плотности, характерный размер этого объема $l^* \sim 10^{-6}$см

$$l_0 \ll l^* \ll l$$

l_0 – размер молекулы 10^{-8} см,

l – длина свободного пробега $l^* \sim 10^{-4}$см

Уравнение теплопроводности –

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} K \frac{\partial T}{\partial x} + I$$

парадокс мгновенного распространения тепла

Неявная схема – парадокс существует

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta t} = K\frac{T_{i+1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1}}{\Delta x^2} + I$$

Явная схема –конечная скорость распространения

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta t} = K\frac{T_{i+1}^{j} - 2T_i^{j} + T_{i-1}^{j}}{\Delta x^2} + I$$

Гиперболическая теплопроводность

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x}K\frac{\partial T}{\partial x} + I$$

$$\Delta t \gtrsim \tau \qquad\qquad \tau \sim 10^{-8}\text{см}$$

$$\Delta t \le \frac{\Delta x^2}{2K}, \quad \Delta t \sim \tau = \frac{l}{c}, \quad K \sim l \cdot c \qquad\qquad \Delta x \gtrsim l$$

Кинетические схемы – квазигазодинамическая система 1983 г.

$$f(x,\zeta,t^{j+1})$$

$$f_0(x-\zeta\tau,\zeta,t^j)$$

$$t^{j+1}=t^j+\tau$$

$$f\left(\bar{x},\bar{\zeta},t^{j+1}\right)=f_0(\bar{x}-\bar{\zeta}\tau,\bar{\zeta},t^{j+1})$$

$$\frac{l}{L}\ll 1$$

$$f^{j+1}-f^j=-\tau\zeta_i\frac{\partial f_0}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\tau^2}{2}\zeta_i\zeta_k\frac{\partial f_0}{\partial x_k}$$

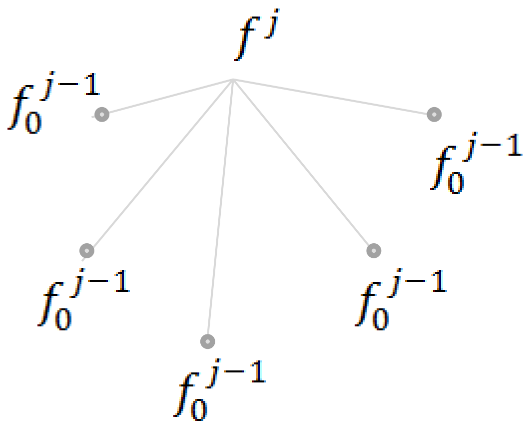
$$\frac{|\zeta|\tau}{L}\ll 1$$

Умножим на сумматорные инварианты $1,\bar{\zeta},{\zeta^2}/{2}$

и проинтегрируем по скоростям молекул

Lattice Boltzmann схемы

БГК модель



$$\frac{df}{dt} = \nu(f_0 - f)$$

$$\rho = \sum f^{j} \Delta\zeta$$

$$\rho U = \sum f^{j} \zeta \Delta\zeta$$

Явные схемы.

В роли длины свободного пробега выступает *h*

$$Re = \frac{\rho U L}{\mu}$$

$$\mu \sim lc \cdot \rho$$

Гиперболическая система - КГУ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho U}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\rho U^2 + P)$$

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 \rho U}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U^2 + P) = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\rho U^3 + 3PU)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x} \big(U(E + P)\big) = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} (U^2 (E + 2P) + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{P}{\rho} (E + P)\right]$$

КГУ =N - S + O(Kn^2)

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\tau^*}{2}\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} K \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + I$$

$$\left[\tau^* \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right] \ll \left[\frac{\partial T}{\partial t}\right]$$

$$\tau^* \sim {}^{h}\!/_{c}$$

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^{j-1}}{2\Delta t} + \frac{\tau^*}{2}\frac{T_i^{j+1} - 2T_i^{j} + T_i^{j+1}}{\Delta t^2} = K\frac{T_{i-1}^{j} - 2T_i^{j} + T_{i+1}^{j}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\tau}{2\Delta t^2} = \frac{K}{\Delta x^2}$$ - Дюффорт Франкел $\Delta t \sim h^{3/2}$

$$\Delta t \sim h$$

Combustion Flows

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial^2 \rho_i}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho_i U}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho_i U^2 + P_i\right) \quad - \text{ self diffusion}$$

$i = 1 \ldots N-1$, i – number of species

$\rho = \rho_i$, $P = P_i$

$$\frac{\partial}{\rho \partial t} + \frac{\partial^2}{\rho \partial t^2} + \frac{\partial \rho U}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho\, U^2 + P\right) \quad \rightarrow \quad O(\mathrm{Kn}^2)$$

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \frac{\partial^2 \rho U}{\partial t^2} + \frac{\partial U^2 + P}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho\, U^3 + 3PU\right)$$

Метод стабилизационных поправок

$$-U\frac{d\Phi}{dx}+K\frac{d^2\Phi}{dx^2}+Q=0$$

Проинтегрируем это уравнение на отрезке $x_b - x_a = h$
и воспользуемся разложением в ряду Тейлора

$$-U\frac{d\Phi}{dx}+K\frac{d^2\Phi}{dx^2}+Q+\frac{h}{2}\frac{d}{dx}U\frac{d\Phi}{dx}=0$$

$\tau^* = {}^{h}/_{U}$ - внутреннее время

$$-U\frac{d\Phi}{dx}+K\frac{d^2\Phi}{dx^2}+Q+\frac{d}{dx}\frac{\tau^*}{2}\frac{d\Phi\mathrm{U}^2}{dx}=0$$

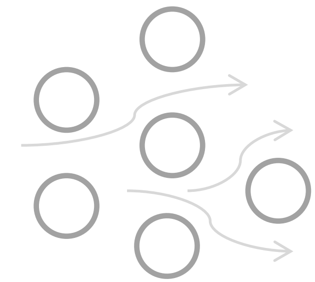
При наличии достаточных вычислительных ресурсов степень детализации (величина *h*) определяется из реальных потребностей.

Задачи фильтрации

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\rho\overline{U} = 0 \quad (1)$$

$$KU = -grad\ P \quad (2)$$

$$\rho = \rho_0[1 + \beta(P - \rho_0)] \quad (3)$$



$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \tau^*\frac{\partial^2\rho}{\partial t^2} + div\rho U = div\frac{\tilde{l}c}{2}grad\ \rho$$

$$KU = -grad\ P$$

$$\rho = \rho_0[1 + \beta(P - \rho_0)]$$

$\hat{l}$ - несколько десятков зерен породы

Уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \zeta \frac{\partial f}{\partial x} = J(f,f')$$

$$\frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} + \zeta \frac{f_{i+1}^j - f_{i-1}^j}{2\Delta x} = \frac{|\zeta|\Delta x}{2} \frac{f_{i+1}^j - 2f_i^j + f_{i-1}^j}{(\Delta x)^2} + J(f,f')$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \tau^* \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \zeta \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{|\zeta| l^*}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + J(f,f')$$

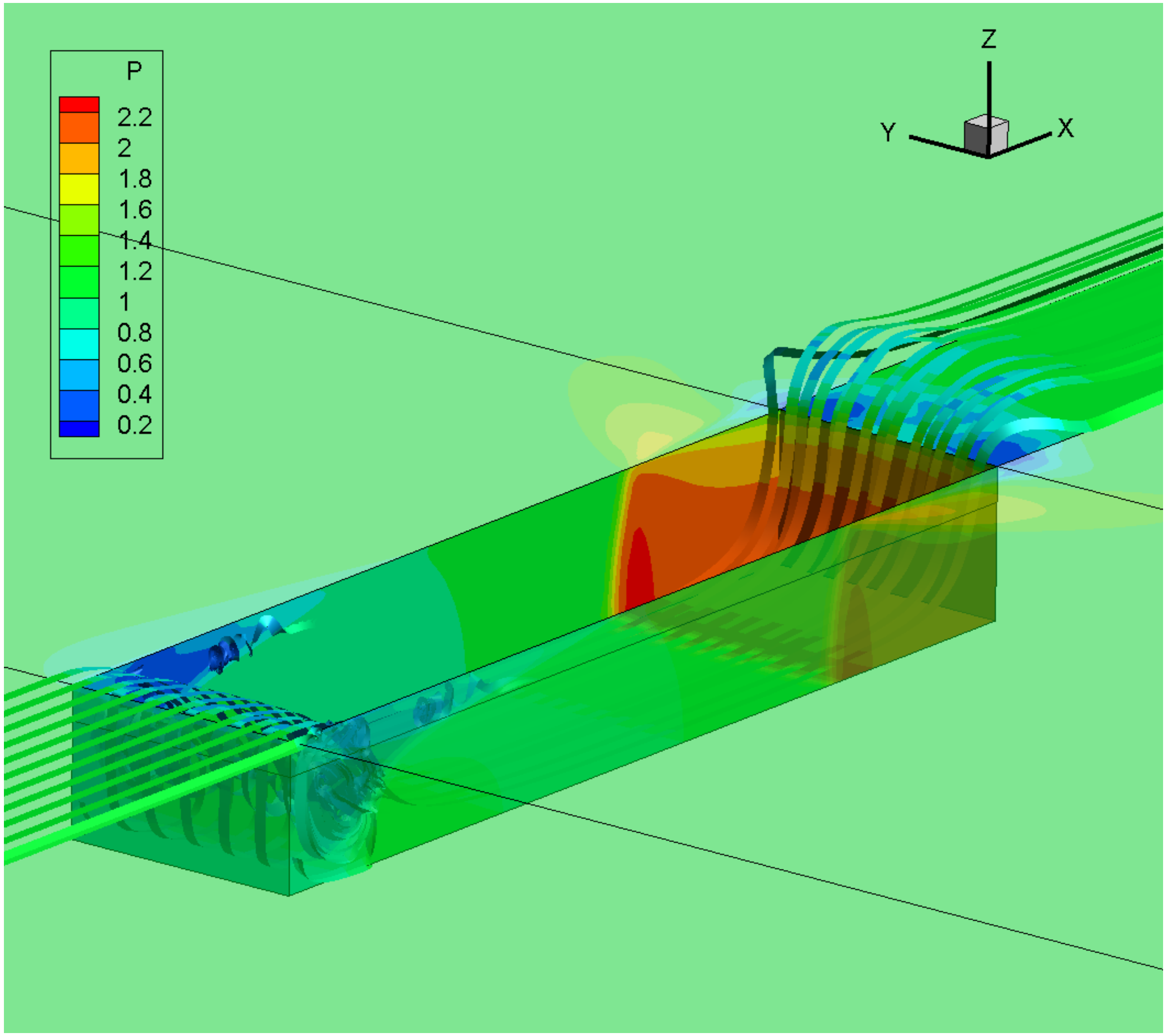
$$\tau^* - l_0/c \quad - 10^{-14}\ \text{сек} \qquad l_0 \sim 10^{-8}\ \text{см}$$

f - вероятностный характер и объем диаметра l^* должен содержать несколько десятков молекул

$$l_0 \ll l^* \ll l$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \zeta \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} |\zeta| l^* \frac{\partial f}{\partial x} + J(f,f')$$

Flow in cavity simulation



$4.5 \cdot 10^9$ mesh nodes
GPGPU “Lomonosov”
Efficiency 68.1%
1200 Fermi cards

Streamlines and pressure level sets

Hyperbolic Model of Multiphase Fluid Flow in Porous Medium

$$m\frac{\partial(\rho_\alpha S_\alpha)}{\partial t} + \tau\frac{\partial^2(\rho_\alpha S_\alpha)}{\partial t^2} + \operatorname{div}(\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) =$$

$$= q_\alpha + \operatorname{div}\frac{l_\alpha c_\alpha}{2}\operatorname{grad}(\rho_\alpha S_\alpha)$$

$$\mathbf{u}_\alpha = -K\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha}(\operatorname{grad} p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g})$$

$$\rho_\alpha = \rho_{0\alpha}\left[1+\beta_\alpha(p_\alpha - p_{0\alpha})\right]$$

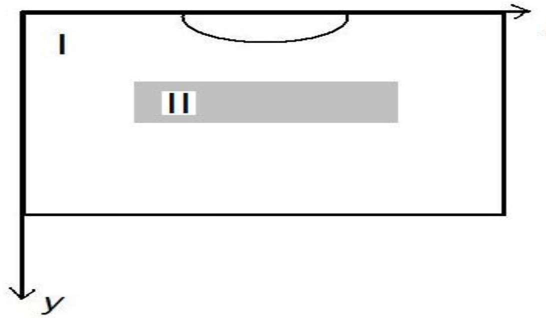
$$\sum_\alpha S_\alpha = 1$$

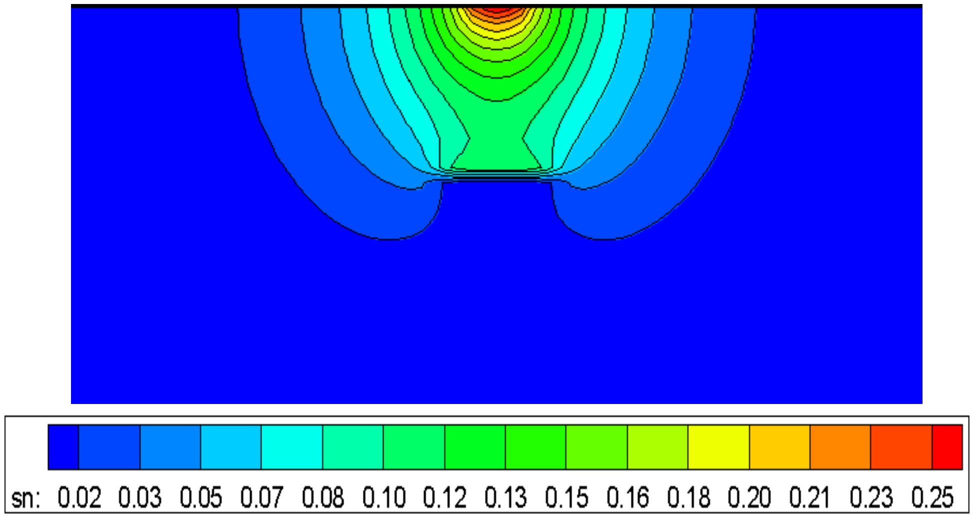
$$p_\alpha - p_\beta = p_{c\,\alpha\beta}(S_\alpha, S_\beta), \quad \alpha \neq \beta$$

α (β) indicates the phase

$$\Delta t \sim h^{3/2}$$

3D problem of tetrachloroethylene infiltration into the water-saturated soil (vertical central section)



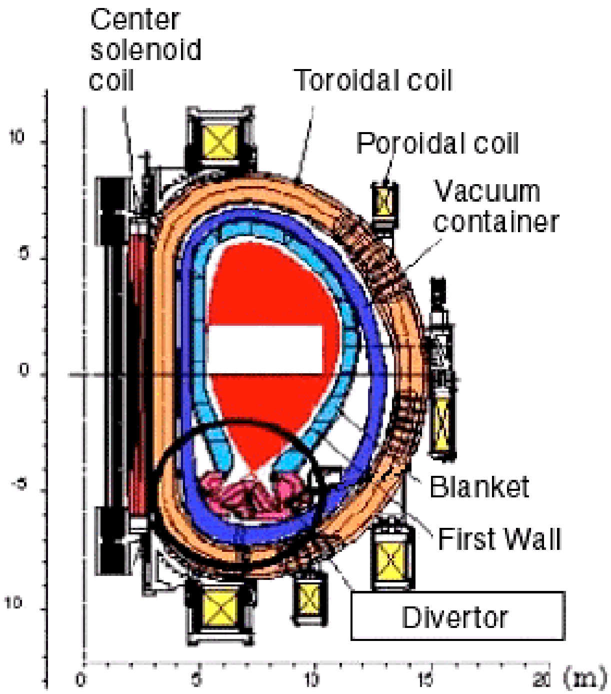


$1.5\cdot10^9$ mesh nodes
K-100 - 100TFLOPs

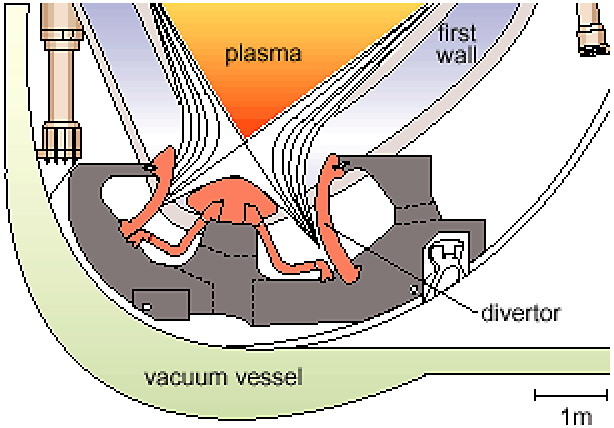
Contaminant saturation field

The immediate task is the development of the model for turbulent heat and mass transfer in ITER divertor (MHD + turbulence + radiative transfer).

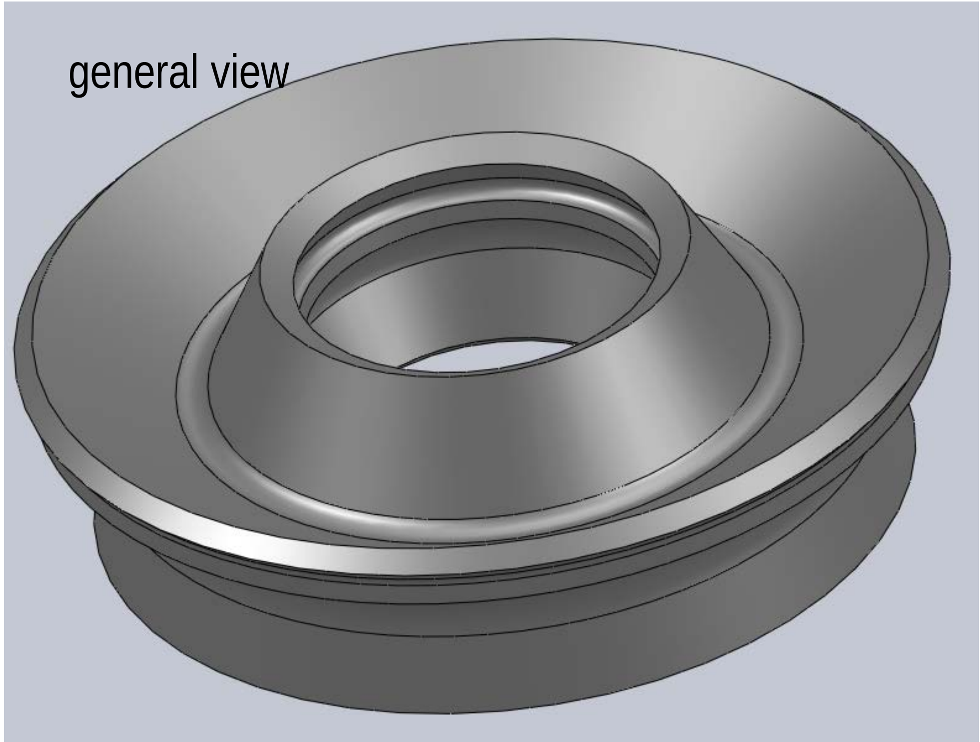
Cross-section of ITER

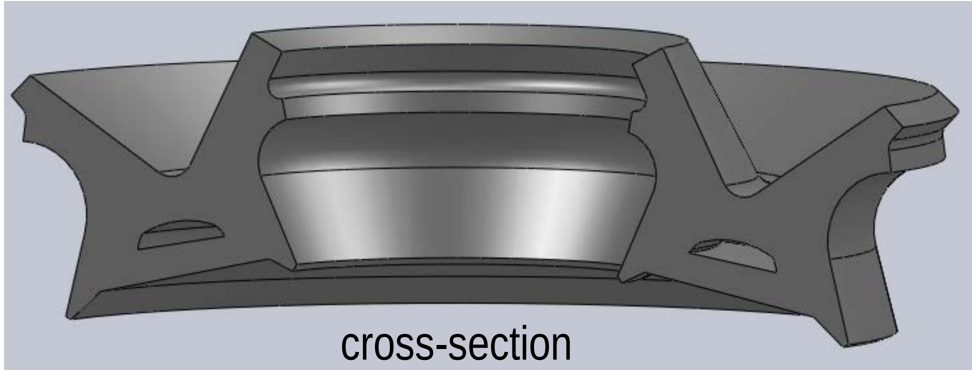


Magnified view of divertor area



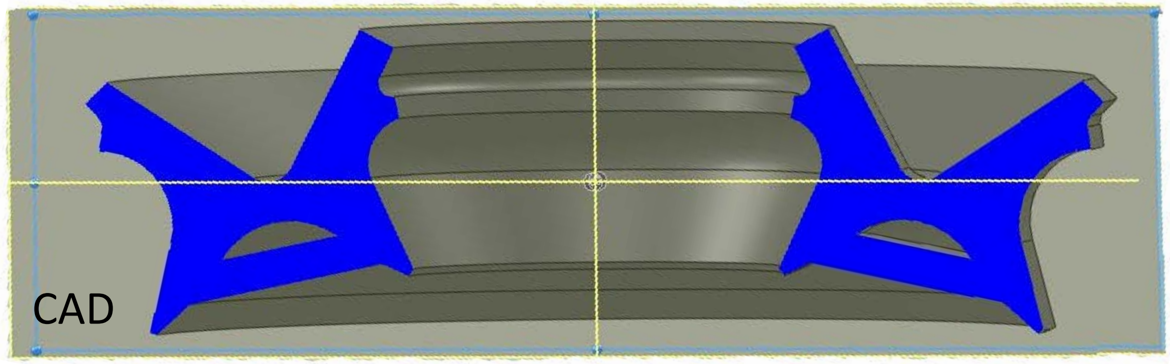
CAD images

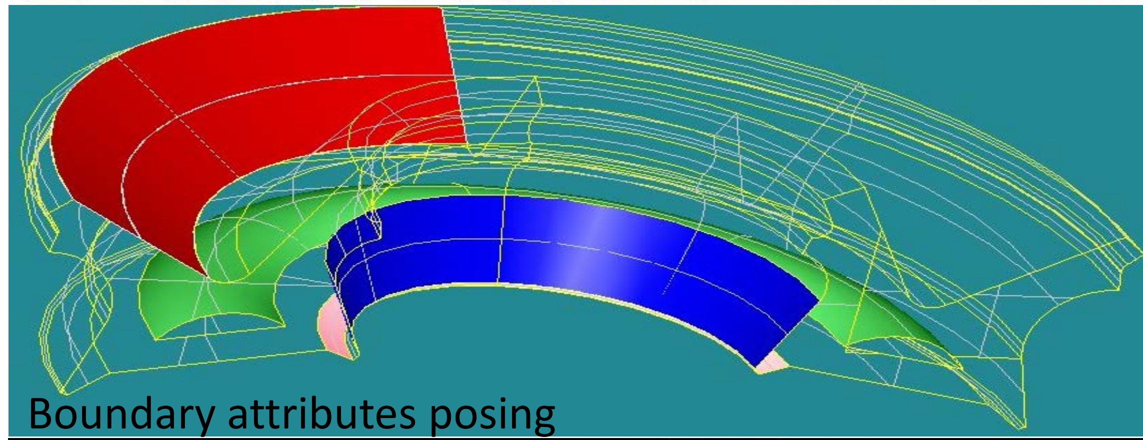


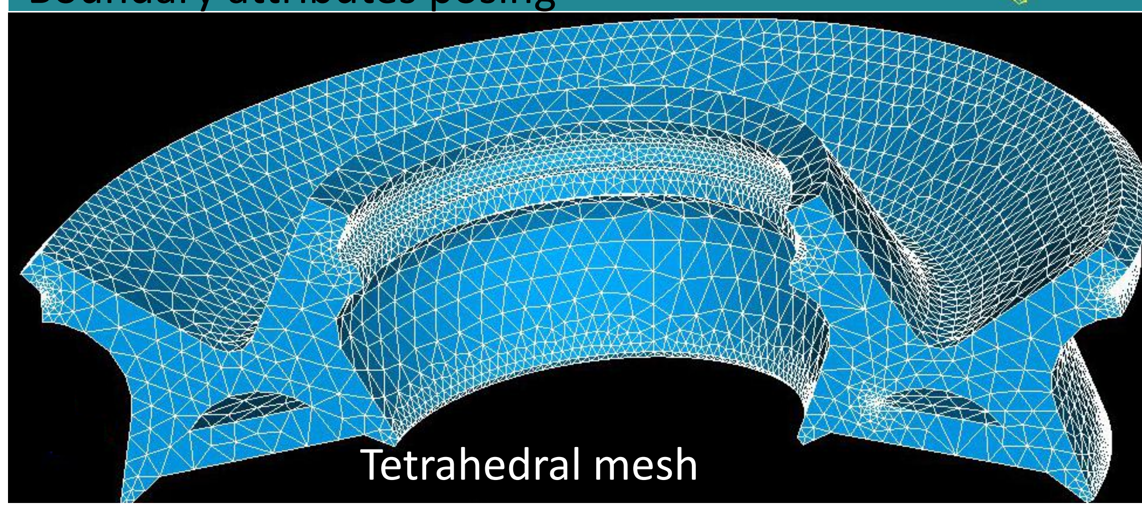


Turbulent heat and mass transfer in ITER divertor:

From CAD model
to computational mesh







Initial tetrahedral mesh before refinement is shown.
The resulting mesh includes 10^8 cells and more.

Kinetic schemes and QGS for MHD

$$f_0 = \frac{\rho}{(2\pi KT)^{3/2}} \exp\left\{-\left(\bar{\xi} - \bar{U}(x,t) - i\bar{w}\right)\right\}^2$$

$$w = \frac{\bar{B}}{\sqrt{\rho}} \qquad \varphi = \left(1, \xi, \frac{\xi^2}{2}, \xi^2\right)$$

$$\rho = \int f_0 d\xi, \quad \bar{U} = \frac{1}{\rho}\int \xi f d\xi, \quad E = \int \frac{\xi^2}{2} f_0 d\xi$$

$$B = -\frac{1}{\sqrt{\rho}} \int m\xi^* f_0 d\xi$$

$\int f d\xi$ x $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_K}{\partial x_K}$=0

$\int f \xi d\xi$ x $\frac{\partial \rho U_K}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_K}\left[\left(P + \frac{B^2}{2}\right)\delta_{PK} + \rho U_{KP} - B_K B_P\right]$=0

$\int f \frac{\xi^2}{2} d\xi$ x $\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_K}\left[U_K\left(E + P + \frac{B^2}{2}\right) - B_K \sum_P U_i B_P\right]$=0

$\int f \xi^* d\xi$ x $\frac{\partial B_K}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_K}[U_P B_K - U_K B_P]$=0

$$\frac{\partial B_K}{\partial x_K} = 0 \qquad , \tau, \qquad \tau_m$$

Заключение

- Современные суперкомпьютеры в ряде случаев уже не ставят ограничений на степень детализации решения.
- Существуют масштабы, меньше которых детализация не имеет смысла.
- Дополнительные члены, как правило, выступают в роли физически обоснованных регуляризаторов, сглаживая нефизические эффекты, получающиеся при численном решении.
- Конкретное значение коэффициентов, входящих в решение, важно лишь по порядку величины.
- Учет минимальных размеров тесным образом связан с характером вывода уравнений сплошной среды, использующим представление конечного объема и дискретного описания среды.