

Матричные методы в задачах механики жидкости

М.К. Ермаков

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Матричный подход используется для моделирования и исследования устойчивости осесимметричных течений несжимаемой жидкости. Для решения системы нелинейных дискретизованных уравнений Навье-Стокса используется метод Ньютона в матричном виде. Для исследования устойчивости течения относительно трехмерных возмущений используется метод обратной итерации и метод Арнольди. Решение систем линейных уравнений реализуется прямым мультифронтальным методом, реализованным в пакете MUMPS. На основе применения матричного метода для численного бенчмарка для модели роста кристаллов по Чохральскому удалось получить решение на сверхподробной сетке с 125М неизвестных при использовании 65 процессоров с памятью 24 ГБ на СК «Ломоносов».

1. Введение

Современную науку и технику невозможно представить без искусственно выращиваемых кристаллов. Кремний и германий используются в радиоэлектронике, в производстве микросхем, создании солнечных батарей. Рубины используются в лазерах и всевозможных датчиках напряжения, давления, температуры, электромагнитного излучения в различных диапазонах.

Качество выращиваемого из расплава кристалла во многом определяется данным начальным этапом: отсутствием пространственных макронеоднородностей, связанных с неустойчивостью течения в расплаве, и микронеоднородностью распределения примеси, связанной с колебаниями фронта кристаллизации [1].

Основой для процессоров является подложка, качество которой обеспечивается устойчивым процессом роста кристалла из расплава. Подавляющее число кристаллов выращивается методом Чохральского (рис. 1), в котором кристалл вытягивается из расплава, находящимся в тигле, причем распределение температуры в установке подобрано таким образом, что кристаллизация происходит у верхней поверхности расплава. Качество кристалла зависит от кривизны фронта, однородности распределения легирующей примеси и отсутствия структурных микродефектов. В связи с тем, что легирующая примесь отторгается фронтом, достаточный уровень конвекции в расплаве необходим для поддержания её равномерной концентрации. Однако, слишком сильная конвекция приводит к колебаниям и неоднородности.

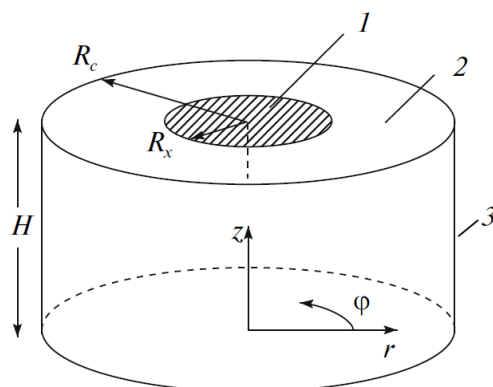


Рис. 1. Схема гидродинамической модели метода Чохральского роста кристаллов из расплава: 1- вращающийся диск (кристалл), 2-расплав, 3-тигель.

Целью данной работы является определение границ устойчивости течения расплавов в представленных конфигурациях роста кристаллов [2-4] на сверхподробных сетках, недоступ-

ных для расчетов на персональных компьютерах. Моделирование ведется на основе уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска. Для решения задачи используются матричные методы, позволяющие определять основное течение с помощью метода Ньютона и его устойчивость относительно малых возмущений. Задача об устойчивости течения сводится к решению обобщенной задачи на собственные значения. Решение возникающих на обоих шагах разреженных линейных систем уравнений осуществляется на основе LU декомпозиции с помощью открытого пакета MUMPS, поддерживающего многопроцессорный режим на основе MPI.

На основе проведенных расчетов для бенчмарка по росту кристаллов по методу Чохральского для больших чисел Прандтля [3, 4] получены решения на сетках до 5000×5000 точек.

2. Постановка задачи

Гидродинамическая модель роста кристаллов по Чохральскому представляет собой цилиндрический объем жидкости (расплава) высоты H и радиуса R_c (рис. 1). Боковая и нижняя стороны ограничены тиглем, с верхней стороны при $r < R_x$ находится диск (кристалл), вне диска для $R_x < r < R_c$ поверхность является свободной.

Поведение жидкости определяется уравнениями Навье-Стокса в приближении Буссинеска для ньютоновской жидкости, поверхностное натяжение σ которой предполагается линейной функцией температуры T :

$$\sigma = \sigma_0 - \gamma(T - T_0).$$

Безразмерные уравнения неразрывности, движения и притока тепла в цилиндрических координатах (r, φ, z) с компонентами скорости $\vec{U} = \{U, V, W\}$ и давлением P имеют вид:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(rU)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial \varphi} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \nabla)U - \frac{V^2}{r} = -\frac{\partial P}{\partial r} + \Delta U - \frac{U}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial V}{\partial \varphi},$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \nabla)V + \frac{UV}{r} = -\frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \varphi} + \Delta V - \frac{V}{r^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial U}{\partial \varphi},$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \nabla)W = -\frac{\partial P}{\partial z} + \Delta W + Gr T,$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \nabla)T = \frac{1}{Pr} \Delta T,$$

где

$$\nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \frac{\partial}{\partial z} \right\}, (\vec{U} \cdot \nabla) = \left\{ U \frac{\partial}{\partial r}, \frac{V}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}, W \frac{\partial}{\partial z} \right\}, \Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Граничные на твердых поверхностях имеют вид:

$$\vec{U} = 0, T = 1 - \text{боковая поверхность}, T = 0.8571 + 0.1429(r/R_c)^2 - \text{дно}.$$

Граничные на свободной поверхности имеют вид:

$$\frac{\partial U}{\partial z} + Re \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \frac{\partial V}{\partial z} + Re \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \varphi} = 0, W = 0, \frac{\partial T}{\partial z} + Bi T = 0.$$

Безразмерные параметры включают два безразмерных геометрических параметра:

$$A = H/R_c, Ar = R_x/R_c.$$

а также термокапиллярное число Рейнольдса Re , число Грасгофа Gr , число Прандтля Pr и число Био Bi .

На первом этапе ищутся стационарные осесимметричные решения выписанных уравнений. На втором этапе найденное решение $(U_0, V_0, W_0, P_0, T_0)$ рассматривается как базовое и для него рассматривается устойчивость относительно малых возмущений, которые представляются в виде:

$$\begin{pmatrix} U \\ V \\ W \\ P \\ T \end{pmatrix}(r, \varphi, z, t) = \begin{pmatrix} U_0 \\ 0 \\ W_0 \\ P_0 \\ T_0 \end{pmatrix}(r, z) + \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \\ p \\ \vartheta \end{pmatrix}(r, z) \times e^{\lambda t + im\varphi}.$$

Относительно амплитудных функций (u, v, w, p, ϑ) получается обобщенная задача на собственные значения:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{imv}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0,$$

$$\lambda u + (\vec{U}_0 \cdot \nabla)u + (\vec{u} \cdot \nabla)U_0 + \frac{U_0 v}{r} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \Delta_2 u - \frac{u}{r^2} - \frac{2imv}{r^2},$$

$$\lambda v + (\vec{U}_0 \cdot \nabla)v = -\frac{imp}{r} + \Delta_2 v - \frac{v}{r^2} + \frac{2imu}{r^2} + Gr \vartheta,$$

$$\lambda w + (\vec{U}_0 \cdot \nabla)w + (\vec{u} \cdot \nabla)W_0 = -\frac{\partial p}{\partial z} + \Delta_2 w,$$

$$\lambda \vartheta + (\vec{U}_0 \cdot \nabla)\vartheta + (\vec{u} \cdot \nabla)T_0 = \frac{1}{Pr} \Delta_2 \vartheta,$$

где

$$\vec{U}_0 = \{U_0, 0, W_0\}, \vec{u} = \{u, v, w\}, \Delta_2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{m^2}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Аналогично преобразовываются граничные условия. Описание методики и тесты представлены в [5].

3. Метод решения и тесты

Для численного решения уравнений используется метод контрольного объема с использованием разнесенных сеток. При пространственной дискретизации радиальная и осевая компоненты скорости определяются на гранях сеточных объемов, а скалярные величины, давление и температура, а также азимутальная компонента скорости определяются в центрах этих объемов. Конвективные производные аппроксимируются центральными разностями, обеспечивающими второй порядок аппроксимации. Введение, при необходимости, существенно неравномерной сетки позволяет воспроизвести тонкую структуру пограничных слоев вблизи точек соприкосновения твердых и свободных поверхностей без введения регуляризации.

Для решения стационарных осесимметричных разностных (дискретизованных) уравнений на первом шаге используется итерационный метод Ньютона в матричной форме для $f(\vec{x}) = 0$:

$$x^{[k+1]} = x^{[k]} - \frac{f(x^{[k]})}{f'(x^{[k]})}, \quad k = 0, 1, \dots$$

для некоторого начального значения $x^{[0]}$. Под вектором x подразумевается все множество неизвестных задачи, а под функцией f все множество уравнений и граничных условий. Так как якобиан $f'(x^{[k]})$ является матрицей, то для нахождения решения на следующей итерации требуется решать систему линейных алгебраических уравнений.

Использование матричных методов решения уравнений имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционными явными и полунявными методами:

1. возможность построения эффективных полностью неявных схем без расщепления иременительных ограничений, связанных с шагом интегрирования по времени.
2. отсутствие необходимости разработки метода решения разностных уравнений; разностные уравнения решаются матричными методами.
3. возможность получения решений, неустойчивых для нестационарных уравнений; это необходимо при исследовании линейной устойчивости решений.

4. Высокая скорость сходимости при использовании метода Ньютона для решения нелинейных уравнений; решение уравнений находится за несколько итераций.

Недостатки матричных методов связаны с необходимостью решения систем линейных уравнений высокого порядка. Матрица якобиана при использовании разностной аппроксимации имеет блочно-диагональный характер и является сильно разреженной. Число элементов матрицы примерно в 10 раз больше размерности вектора неизвестных. В данной работе для решения систем линейных уравнений используется прямой метод решения уравнений, основанный на реализации мультифронтального метода [6] в пакете MUMPS [7]. Пакет MUMPS осуществляет LU разложение для разреженных матриц, которое в нашем случае требует примерно в 100 раз больше оперативной памяти, чем исходная матрица. Персонального компьютера с памятью 12 ГБ достаточно для решения задачи на исходной сетке ($n_r \times n_z$) до 500×500 точек. Такого разрешения часто вполне достаточно для описания течений вблизи порога их устойчивости, однако для некоторых случаев этого недостаточно. В частности, для решения бенчмарков – специально выделенных тестов для исследования методов и поведения решений. Решение систем на сетках до 5000×5000 точек в этом случае возможно при использовании кластерной вычислительной системы. При указанном размере сетки количество неизвестных составит 125М, размер матрицы составит 10 ГБ, а размер LU разложения – 1000 ГБ. Соответственно, задача относится к классу требующей большой оперативной памяти.

Количество даже открытых пакетов для решения задач линейной алгебры весьма велико [8]. Выбор конкретного пакета следует предпринимать из опубликованного опыта предшественников, что не слишком просто из-за практического отсутствия опыта перекрестного тестирования. Вопросы, связанные с выбором программных средств для моделирования задач сеточными методами на суперкомпьютерах, являются очень важными, и они подробно обсуждаются в [9]. Пакет MUMPS является современным структурированным пакетом решения разреженных линейных систем, с открытым кодом, поддерживает распределенное хранение матрицы и LU разложения, основан на шаблонах BLAS и использует MPI [9]. Он также включает стадию предварительного анализа матрицы для её переупорядочивания с целью уменьшения объема LU разложения. Помимо встроенных приближенных подходов для переупорядочивания возможно использование специализированных внешних пакетов работы с графами METIS и SCOTCH. Сочетание данных свойств пакета приводит к увеличению быстродействия до 100 раз по сравнению с простыми пакетами учебного уровня [10] и уменьшению требований к используемой памяти.

Значительной экономии памяти теоретически можно было бы достичь используя итерационный метод решения градиентного типа для системы линейных уравнений, однако, построение эффективного предобуславливателя для полной системы уравнений конвекции является достаточно сложной задачей.

Для решения обобщенной задачи на собственные значения $Ax = \lambda Bx$ используется метод обратной итерации и метод Арнольди. Последний используется в режиме shift-and-invert пакета ARPACK. Для определения устойчивости течения достаточно найти собственное значение с наибольшей действительной частью. Если действительная часть такого собственного значения положительно, то течение является неустойчивым, в противном случае оно устойчиво. Использование стандартных методов решения спектральной задачи затруднено вырожденным характером матрицы B . Для обоих подходов необходимо снова решение системы линейных уравнений, на этот раз над полем комплексных чисел.

Данный подход был разработан и тщательно протестирован для различных задач вынужденной, термогравитационной и термокапиллярной конвекции [5]. Результаты подтверждены данными других исследований [11]. Для кластерного варианта кода различие состоит в обращении к параллельной версии пакета MUMPS (с параллельными пакетами, при необходимости, ParMETIS и PtSCOTCH для переупорядочивания матриц). Основная программа использует MPI, синхронно вызывая функции пакета MUMPS и настраивая его на соответствующий режим работы с помощью входных параметров. Упомянутые пакеты поставляются в исходных текстах и компиляция библиотек для их использования в среде UNIX не вызывает сложностей. Для компиляции и выполнения использовались компиляторы фирмы Intel и библиотека MKL.

4. Результаты

Расчеты проводились на сетках до 5000×5000 точек (125 млн. неизвестных) для нахождения стационарного решения и до 3000×3000 точек (45 млн. неизвестных) для решения задачи устойчивости. Для задач использовалось до 65 процессоров с памятью 24 ГБ и до 17 процессоров с памятью 48 ГБ. Результатом решения задачи являются стационарные осесимметричные течения и нейтральные кривые, определяющие границы устойчивости, критические частоты и собственные вектора, определяющие наиболее опасные возмущения. (Будут приведены данные по временным затратам; в данный момент они отсутствуют так расчеты проводились для несколько другой постановки задачи).

В таблице 1 представлено сравнение результатов по бенчмарку для высоких чисел Прандтля [3] для параметров $A=0.92$, $Ar=0.5$, $Pr=9.2$, $Re=586$, $Gr=1.9 \cdot 10^5$, $Bi=0.1$. Видна (будет) сходимость результатов при увеличении сеточного разрешения. Результаты, полученные на подробных сетках могут рассматриваться как практически точные и могут быть использованы для оценки точности результатов, полученных ранее на менее подробных сетках.

Таблица 1. Сравнение данных по бенчмарку [3]

Сетка	Настоящая работа			[3,4]	[3]	[4]
	5000x5000	3000x3000	1000x1000	1000x1000	200x200	120x120
Ψ_{\min}	Будет досчитано и представлено в окончательном варианте статьи или ранее по требованию рецензента		-1.5149	-1.5295	-1.510	-1.5175
(r)			(0.7959)	(0.7969)	(0.8100)	(0.813)
(z)			(0.5468)	(0.5557)	(0.3263)	(0.333)
Ψ_{\max}			0.0	0.0	0.0	0.0
$V_{r \min}$ (r=0.5)			-41.2904	-52.2848	-36.55	-56.1
(z)			(0.9188)	(0.9194)	(0.9183)	(0.9193)
$V_{r \max}$ (r=0.5)			14.6486	14.7508	14.63	14.635
(z)			(0.08771)	(0.08875)	(0.08763)	(0.08886)
$V_{z \min}$ (z=0.5H)			-231.33	-232.50	-231.8	-231.5
(r)			(0.0)	(0.0)	(0.0)	(0.0)
$V_{z \max}$ (z=0.5H)			15.8016	15.9669	15.76	15.805
(z)			(0.9481)	(0.9478)	(0.9477)	(0.9478)
E_{kin}			81.49	82.66	80.92	81.49
Nu (дно)			1.5860	1.6084	1.575	1.593
Nu (стенка)			1.2559	1.2768	1.246	1.258
Nu (кристалл)			-2.8056	-2.8489	-2.784	-2.814
Nu (поверхность)			-0.0363	-0.0363	-0.036	-0.0364

На рис.2 представлены примеры изоповерхностей собственных векторов для бенчмарка [] в широком диапазоне чисел Прандтля от 0.005 до 30. Отчетливо видно изменение азимутального волнового числа и формы собственных векторов (возмущений азимутальной компоненты скорости и температуры), определяющей направление распространения возмущений.

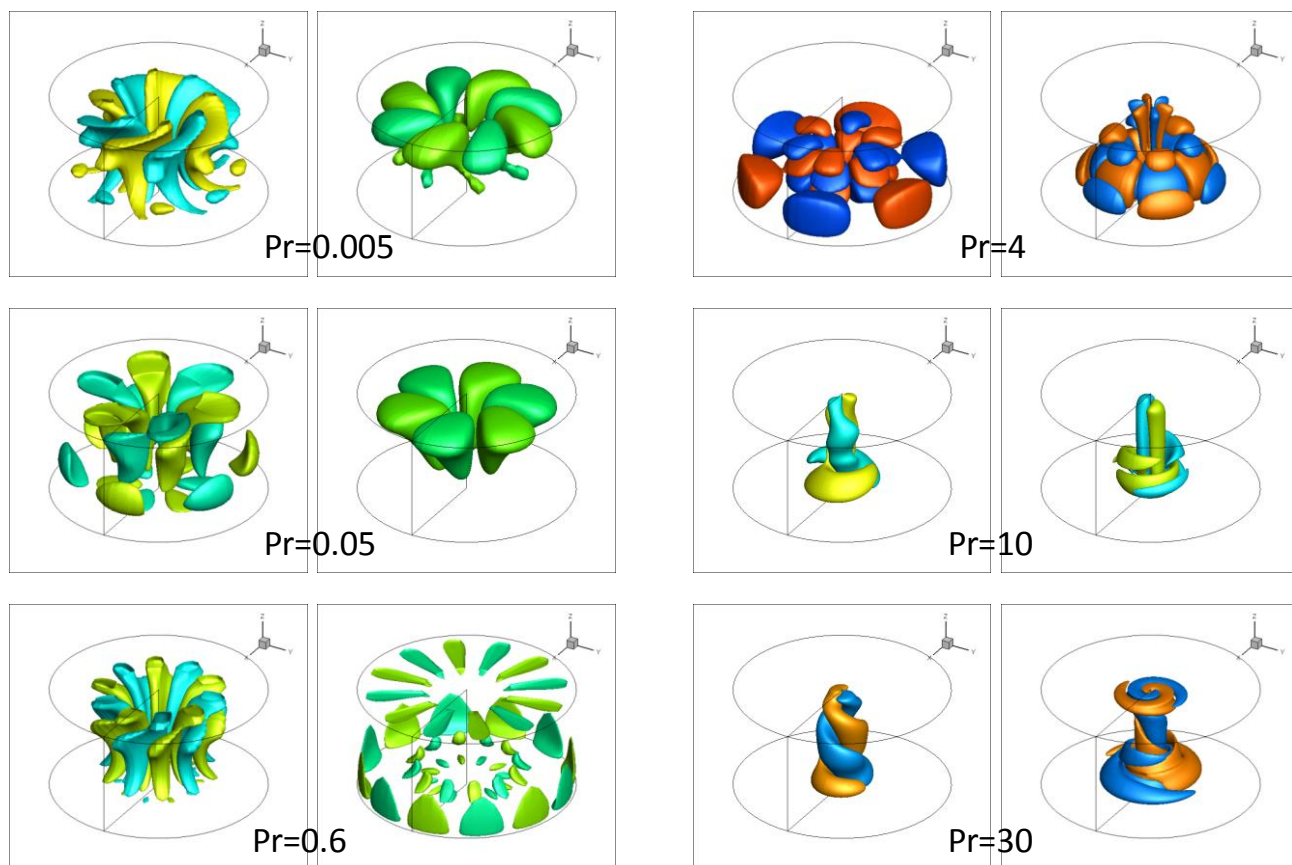


Рис. 2. Примеры собственных функций задачи (температура – слева, азимутальная компонента скорости – справа) для чисел Прандтля от 0.005 до 30.

5. Выводы

Для осесимметричных конвективных течений роста кристаллов из расплава по методу Чохральского разработана методика решения стационарных задач и исследования устойчивости течений по отношению к трехмерным возмущениям для кластерных систем. Для решения задач используется матричный подход, основанный на применении методов Ньютона, обратных итераций, Арнольди и линейного решателя (солвера) MUMPS для прямого решения разреженных систем.

Использование данного подхода позволило получить численное решение на сетках до 5000×5000 точек (125 млн. неизвестных) на 65 процессорах с памятью 24 ГБ или на 17 процессорах с памятью 48 ГБ. Результаты получены для международного бенчмарка по росту кристаллов из расплава по Чохральскому для высоких чисел Прандтля [3].

Разработанные методы и коды могут быть также использованы для исследования устойчивости течений в задачах внешнего обтекания, крупномасштабной конвекции в мантии и атмосфере Земли и динамики плазмы в осесимметричных конфигурациях.

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова [12, 13].

Литература

1. Lappa M. Rotating Thermal Flows in Natural and Industrial Processes. Wiley, Chichester, 2012, 522 p.
2. Wheeler A.A. Four test problems for the numerical simulation of flow in Czochralski crystal growth // J. Cryst. Growth. 1991. V. 102. № 4. P. 691-695.

3. Crnogorac N., Wilke H., Cliffe K.A., Gelfgat A.Yu., Kit E. Numerical modelling of instability and supercritical oscillatory states in a Czochralski model system of oxide melts // *Cryst. Res. Technol.* 2008. V. 43. № 6. P. 606–615.
4. Бессонов О.А., Полежаев В.И. Нестационарные неосесимметричные течения в гидродинамической модели метода Чохральского при больших числах Прандтля // *Изв. РАН. МЖГ.* 201. № 5. С. 16–32.
5. Ermakov M.K., Ermakova M.S. Linear-stability analysis of thermocapillary convection in liquid bridges with highly deformed free surface // *J. Cryst. Growth*, 2004. Vol. 266. P.160-166.
6. Amestoy P.R., Duff I.S., L'Excellent J.-Y. Multifrontal parallel distributed symmetric and unsymmetric solvers. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 184:501–520, 2000.
7. MUMPS. URL: <http://mumps-solver.org>.
8. Freely Available Software for Linear Algebra.
URL: <http://www.netlib.org/utk/people/JackDongarra/la-sw.html>.
9. Василевский Ю.В., Коньшин И.Н. Копытов Г.В., Терехов К.М. INMOST – программная платформа и графическая среда для разработки параллельных численных методов на сетках общего вида. М.: Изд-во Московского университета, 2013. – 144 с.
10. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems. SIAM. 2003. 528 p.
11. Gelfgat A. Yu. Numerical study of three-dimensional instabilities of Czochralski melt flow driven by buoyancy convection, thermocapillarity and rotation // *Studies on Flow Instabilities in Bulk Crystal Growth. Transworld Res. Network*, 2007. 37/661 (2). P. 1–26.
12. Ермаков М.К. Исследование устойчивости в гидродинамических моделях роста кристаллов // *Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности: Альманах / – М.: Изд-во Московского университета, 2014. С. 140-145.*
13. Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. Практика суперкомпьютера "Ломоносов" // *Открытые системы. – М.: Издательский дом "Открытые системы", N 7, 2012. С. 36-39.*