# Моделирование задач геофизики на суперкомпьютере "Уран"

А.И. Короткий<sup>1,2</sup>, И.А. Цепелев<sup>1</sup>, А. Исмаил-заде<sup>3,4</sup>, С. Хонда<sup>5</sup>



Институт математики и механики УрО РАН, Екатеринбург, РОССИЯ



Уральский федеральный университет, Екатеринбург, РОССИЯ

Geophysikalisches Institut, Universitat Karlsruhe, GERMANY



Institut de Physique du Globe de Paris, Paris, FRANCE



Earthquake Research Institute, University of Tokyo, Tokyo, JAPAN

### Екатеринбург, ИММ УрО РАН, 2013

・ロト ・日本・ ・ 日本・ ・ 日

РИП-13-И22

1 / 36

Задача реконструкции внутреннего строения Земли состоит в качественной и количественной идентификации строения Земли и ее отдельных регионов на основе интерпретации геолого-геофизических данных (теплового, гравитационного, электромагнитного полей, сейсмичности, палео- и современной геодинамики). Моделирование данной задачи проводится в прямом и обратном временах. Для решения задач необходимо создание математических моделей глобальных процессов, проведение численных экспериментов на детальных расчетных сетках, установление соответствия построенных моделей результатам геодезических и геофизических измерений современного состояния и динамики земных недр. Для эффективной компьютерной реализации требуется использование суперкомпьютеров большой мощности.

Моделирование геофизических процессов на ЭВМ позволит получить фундаментальные знания в области реконструкции физических параметров, обоснования и численного решения задач прогнозирования и оценки параметров геологических систем. Использование ЭВМ в этом направлении приведет к реальному сокращению затрат на эти исследования.

イロト イヨト イヨト イヨト

# Математическая модель

В модельной области  $\Omega = (0, x_1 = l_1) \times (0, x_2 = l_2) \times (0, x_3 = h)$ , на интервале времени  $t \in (0, \vartheta)$  решается уравнение Стокса, уравнение несжимаемости, уравнение теплового баланса в обратном времени в модели расширенного приближения Буссинеска <sup>1</sup>):

$$-\nabla P + \nabla \cdot (\eta(T) [\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^{T}]) + (RaT - La\Phi(T))\mathbf{e}_{3} = \mathbf{0}, \qquad (1)$$
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad x \in \Omega;$$
$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \partial \mathbf{u}_{\tau} / \partial \mathbf{n} = 0, \quad x \in \partial \Omega. \qquad (2)$$

РШП-13-И22

3 / 36

Фазовые переходы на глубинах 410km и 660km

$$\rho(T, \mathbf{x}) = \rho_*(1 - \alpha T + \Phi(T)), \quad \Phi(T) = \sum_{i=1,2} a_i \Phi_i(T),$$

$$\Phi_i(\pi_i) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \tanh \frac{\pi_i(T)}{w_i} \right], \quad \pi_i(T) = z_i - x_3 - \gamma_i(T - T_i), \quad i = 1, 2,$$

 $^{1)}$ Christensen U.R., Yuen D.A. (1985), Layered convection induced by phase transitions, J. Geophys. Res., 90, B12, 10291-10300.

Начально-краевая задача для температуры

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T + A^{-1} B D i^* R a u_3 T = A^{-1} \left( -\nabla^2 T + D i^* \eta \left| \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \right|^2 \right), \tag{3}$$

$$A = \left[1 + \left(a_1 \frac{d\Phi_1}{d\pi_1}\gamma_1^2 + a_2 \frac{d\Phi_2}{d\pi_2}\gamma_2^2\right)Di^*LaT\right] > 0,$$
  

$$B = \left[1 + \frac{La}{Ra}\left(a_1 \frac{d\Phi_1}{d\pi_1}\gamma_1^2 + a_2 \frac{d\Phi_2}{d\pi_2}\gamma_2^2\right)\right],$$
  

$$\sigma_1 T + \sigma_2 \partial T / \partial \mathbf{n} = T_*(t, \mathbf{x}), \qquad \sigma_1^2 + \sigma_2^2 > 0,$$
  

$$T(0, \mathbf{x}) = T_0(\mathbf{x}).$$

イロト イヨト イヨト イヨト

 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  — пространственные координаты,  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$  — вектор скорости, t — время, T — температура, P — давление  $\eta$  — вязкость,  $\vartheta$  — настоящее время,  ${f e}_3=(0,0,1);$   $\nabla$  — градиент;  ${f E}$  — единичный оператор. На глубинах  $z_1 = 410$  km и  $z_2 = 660$  km;  $\pi_1$  и  $\pi_2$  — обобщенные давления;  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$  — фазовые функции, зависящие от температуры и глубины;  $a_1 = 0.05$ ,  $a_2 = 0.09$  — весовые коэффициенты. Число Рэлея, Ra = $(\alpha g \rho^* T^* h^3)(\eta^* \kappa)^{-1}$ , число Лапласа  $Ra = (\alpha g \rho^* h^3)(\eta^* \kappa)^{-1}$ , число Дирихле  $Di^* = (\eta^* \kappa) (\rho^* ch^2 T^*)^{-1}$ . Длины, температура и время нормализованы h,  $\Delta T$ , и  $h^2 \kappa^{-1}$  соотаетственно, Здесь  $\rho^* = 3400 kgm^{-3}$  — характерная плотность;  $T^* = 1576 \mathrm{K}$  — характерная температура,  $\eta^* = 10^{21} \mathrm{Pa}$  s характерная вязкость  $c = 1250Wm^{-1}K^{-1}$  — удельная теплоемкость, k = $10^{-6}m^2s^{-1}$  — теплопроводность,  $\alpha = 3 \cdot 10^{-5}K^{-1}$  — коэффициент теплового расширения, h = 800 km,  $l_1 = l_2 = 5h$ ;  $w_1 = w_2 = 10$  km;  $\gamma_1 = -4MPaK^{-1}$  и  $\gamma_2 = 2MPaK^{-1}$  — углы наклона кривой Клайперона;  $T_1 = 1790$  K,  $T_2 = 1858$  K;  $g = 9.81 m s^{-2}$  — ускорение свободного падения.

Физические параметры в модели (температура, вязкость, скорость, давление и плотность) зависят от времени и точки пространства.

▲□▶ ▲□▶ ▲□▶ ▲□▶ ▲□▶ ● のへの

### Математическая модель

Реология среды (вязкость) расчитывается по формуле

$$\eta(T,x_3) = \exp\left(\frac{E_a + V_a \rho g x_3}{RT}\right).$$



где  $E_a = 3 \cdot 10^5 \ Jmol^{-1}$  — энергия активации,  $V_a = 4 \cdot 10^{-6} m^3 \ mol^{-1}$  — объем активации,  $R = 8.3144 \ Jmol^{-1}K^{-1}$  — универсальная газовая константа. РШП-13-И22 6 / 36

# Граничные условия в модели

На дневной поверхности заданы скорости движения литосферных плит



Движение плит представлено стрелками. Скорости движения определены из геофизических данных <sup>2)</sup> для Филиппинского моря из PB2002 <sup>3)</sup> модели.

<sup>2)</sup>Drewes, H. The Actual Plate Kinematic and Crustal Deformation Model APKIM2005 as basis for a non-rotating ITRF, In: Geodetic Reference Frames, H. Drewes (ed.), IAG Symposia series, 134, 95-99, Springer, Berlin (2009).

 $^{3)}$ Bird, P. An updated digital model of plate boundaries. Geochem. Geophys. Geosyst. 4, 1027 (2003).

7 / 36

РШП-13-И22



Дополнительно полагаем  $\frac{\partial P}{\partial \mathbf{n}}$  на всей границе.

(ロ) (日) (日) (日) (日)

### Начальное распределение температуры



Начальное распределение температуры получено обработкой данных сейсмической томографии (см. Obayashi M., Sugioka H., Yoshimitsu J., Fukao Y. (2006), High temperature anomalies oceanward of subducting slabs at the 410-km discontinuity, Earth Planet. Sci. Lett., 243, 149-158.).

РЦП-13-И22 9 / 36

イロト イヨト イヨト イヨ

Регуляризация (3) состоит в добавлении дополнительных слагаемых более высокого порядка дифференцирования с некоторым малым параметром регуляризации  $\beta > 0$ , и добавлении дополнительного граничного условия.

$$(\mathbf{E} + \beta \nabla^2)^{-2} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T + A^{-1} B D i^* Rau_3 T = A^{-1} \left( -\nabla^2 T + D i^* \eta \left| \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \right|^2 \right), \quad (4)$$

$$\sigma_1 \partial^2 T / \partial \mathbf{n}^2 + \sigma_2 \partial^3 T / \partial \mathbf{n}^3 = 0.$$

Учитывая разрывность правой части в уравнении Стокса производится регуляризация внешних сил с системе (1), (2)

$$-\nabla P + \nabla \cdot (\boldsymbol{\eta}(T)[\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T]) + (\mathbf{E} + \beta_1 \nabla^2)^{-1} (RaT - La\Phi(T))\mathbf{e_3} = \mathbf{0}, \quad (5)$$

 $\beta_1 > 0$ . Конкретный вид регуляризатора определяется возможностями пакета OpenFOAM. А именно тем, что в пакете реализованы аппроксимации дифференциальных операторов не выше второго порядка дифференцирования.

《曰》 《圖》 《문》 《문》

Пространственная область аппроксимируется конечными объемами. Уравнения, составляющие математическую модель, аппроксимируются методом конечный объемов <sup>4)</sup> и численно решаются с привлечением отурытого программного обеспечения OpenFoam.

Для решения уравнения теплового баланса в обратном времени используется идея метода квазиобращения, состоящая в регуляризации уравнения (3) <sup>5)</sup> введение дополнительных слагаемых высокого порядка дифференцирования. Поле скоростей **u** и давление *P* вычисляются из (1) и (2) SIMPLE методом <sup>6)</sup>. Регуляризованное уравнение теплового баланса (4) по времени аппроксимируется методом Эйлера. При этом используется неявная аппроксимация конвективного слагаемого и явная аппроксимация диффузионного члена.

 $<sup>^{\</sup>rm 4)}$ Ismail-Zadeh A., Tackley P. Computational Methods for Geodynamics. Cambridge University Press, Cambridge (2010).

<sup>&</sup>lt;sup>5)</sup>Ismail-Zadeh A., Schubert G., Tsepelev I., Korotkii A. Inverse problem of thermal convection: Numerical approach and application to mantle plume restoration. Phys. Earth Planet. Inter. 145, 99-114 (2004).

<sup>&</sup>lt;sup>6)</sup>Patankar S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. McGraw-Hill, New York (1980).

Методы численного решения

$$(\mathbf{E} + \beta \mathbf{D})^2 \frac{T^{n+1} - T^n}{dt} + \mathbf{C}T^{n+1} - \mathbf{D}T^n + f(\mathbf{u}, T^n) = 0,$$
(6)

где дискретные операторы  $\mathbf{C} = -\mathbf{C}^*$  и  $\mathbf{D} = \mathbf{D}^*$  аппроксимируют конвективный и диффузионный члены соответственно. Для организации расчетов используется метод предиктор-корректор<sup>7)</sup>.

$$(\mathbf{E} + dt\mathbf{C})T^{n+1/2} = (\mathbf{E} + dt\mathbf{D})T^n - dtf(\mathbf{u}, T^n)$$
(7)

$$(\mathbf{E} + dt\mathbf{D})^2 T^{n+1} = T^{n+1/2}.$$
(8)

РШП-13-И22

12 / 36

Система линейных уравнений (4) решается методом Ві-сопряженных градиентов <sup>8)</sup> в котором в качестве предобуславливателя используется неполная LU факторизация исходной системы <sup>9)</sup>. Система уравнений (5) решается методом сопряженных градиентов в котором в качестве предобуславливателя используется неполная факторизация Холецкого исходной системы.

<sup>7</sup>)Samarskii A.A., Vabischevich P.N. Computational Heat Transfer. Vol. 1. Mathematical Modeling. John Wiley and Sons, New York (1995).

<sup>8)</sup>Van der Vorst H. A. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. SIAM J. Sci. Stat. Comput. 13, 631-644 (1992).

<sup>9)</sup>Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems, PWS, Boston (1996)

Код OpenFOAM<sup>10)</sup>, разработан в Великобритании в компании OpenCFD Limited, и используется многими промышленными предприятиями более 12 лет. Свое название и идеологию построения код берет от предшественника FOAM (Field Operation And Manipulation), который является закрытым и продолжает развиваться параллельно с OpenFOAM. Первоначально, программа предназначалась для прочностных расчетов и в результате многолетнего академического и промышленного развития на сегодняшний момент позволяет решать следующие задачи:

<sup>&</sup>lt;sup>10)</sup>http://www.openfoam.com/

- Прочностные расчеты;
- Гидродинамика ньютоновских и неньютоновских вязких жидкостей как в несжимаемом, так и сжимаемом приближении с учетом конвективного теплообмена и действием сил гравитации. Для моделирования турбулентных течений возможно использование RANS-моделей, LES и DNS методов. Возможно решение дозвуковых, околозвуковых и сверхзвуковых задач;
- Задачи теплопроводности в твердом теле;
- Многофазные задачи, в том числе с описанием химических реакций компонент потока;
- Задачи, связанные с деформацией расчетной сетки;
- Сопряженные задачи;
- Некоторые другие задачи, при математической постановке которых требуется решение ДУ в ЧП в условиях сложной геометрии среды;
- Распараллеливание расчета как в кластерных, так и многопроцессорных системах.

・ロト ・回ト ・ヨト ・ヨト

# OpenFOAM:Введение

В основе кода лежит набор библиотек, предоставляющих инструменты для решения систем дифференциальных уравнений в частных производных как в пространстве, так и во времени. Рабочим языком кода является ООП C++. В терминах данного языка большинство математических дифференциальных и тензорных операторов в программном коде (до трансляции в исполняемый файл) уравнений может быть представлено в удобочитаемой форме, а метод дискретизации и решения для каждого оператора может быть выбран уже пользователем в процессе расчёта. Таким образом, в коде полностью инкапсулируются и разделяются понятия расчетной сетки (метод дискретизации), дискретизации основных уравнений и методов решения алгебраических уравнений.

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{U}) = -\nabla p$$

 $\begin{array}{l} \text{ solve (} \\ \text{fvm::dt}(\text{rho},\,\text{U})\,+\,\text{fvm::div}(\text{rho},\,\text{U},\,\text{U})\,\text{-}\,\text{fvm::laplacian}(\text{mu},\,\text{U}) \\ ==\,\text{-fvc::grad}(\text{p}) \ ); \end{array}$ 

イロト イヨト イヨト イヨト

Помимо этого реализованы алгоритмы генерации, импорта и манипуляции сетками в трехмерных областях, процедуры интерполяции скалярных, векторных и тензорных полей на сетках различной топологии. Результаты вычислений могут быть импортированы в другие пакеты инженерных вычислений и пакеты визуальной обработки данных. Вместе с кодом поставляется набор готовых приложений (решателей), в которых уже реализованы различные математические модели механики сплошных сред. Разработчики данного пакета проводят в жизнь идеологию открытого кода, а именно, все программы пакета доступны в исходных текстах, пакет функционирует под управлением операционной системы Linux, которая также является открытой. Для организации параллельных вычмслений состав дистрибутива включается пакет OpenMPI. Для обработки с результаты вычислений импортируется в формат данных VTK (Visual ToolKit) и могут обрабатываться системами визуализации открытого доступа. Пользователь может сам включить в состав сервисов пакета ОрепFOAM любое свободно распространяемое программное обеспечение.

イロト イヨト イヨト イヨト

# OpenFOAM:Введение



Кроме того, в состав пакета включены конверторы форматов для взаимодействия со всеми широко известными коммерческими пакетами проведения инженерных расчетов. Такое взаимодействие осуществляется на уровне файлового обмена и позволяет как импортировать данные (например, генерировать сетку в областях со сложной геометрией в привычной пользователю сервисной оболочке), так и экспортировать данные (например, для визуализации). Таким образом, у пользователя появляется возможность самому разрабатывать и/или совершенствовать математическую модель реального процесса, и/или выбирать различные методы численного решения своих моделей на ЭВМ. Результаты работы могут быть легко визуализированы.

# OpenFOAM: организация вычислений

- О Генерация сетки в области Ω. Определение граничных зон.
- Определение скалярных полей для температуры, давления и вязкости в центре ячеек. Определение векторного поля для скорости в центрах ячеек и векторного поля для потока жидкости через границы каждой из ячеек.
- Задание в каждой из граничных зон определенных граничных условий для температуры, давления и скорости.
- Задание для температуры и вязкости начального состояния.
- Задание разбиения отрезка времени. Задание точности проведения вычислений. Выбор для каждого дифференциального оператора схемы аппроксимации. Выбор алгоритмов решений систем линейных алгебраических уравнений.

Вычислительная работа.

- Определение количества процессов для проведения расчетов.
- 2 Распределение сетки между процессами.
- Выполнение программы на заданном количестве процессоров.

Обработка результатов.

A = A = A = A = A = A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A

РШП-13-И22

18 / 36

- Формирование результатов вычислений для всей сетки.
- Экспорт результатов в формат данных VTK.

Визуализация результатов.

А.И. Короткий (ИММ УрО РАН) Моделирование задач геофизики ...

# OpenFOAM:Структура организации задачи



имя задачи /0 имя задачи /время[1] : имя задачи /время[N]

имя задачи/constant имя задачи/system

имя задачи/processor0 : имя задачи/processorP-1

(D) (A) (A) (A)



#### system

Содержит 3 обязательных файла, которые управляют кодами пользователя во время их выполнения:

controlDict содержит параметры, управляющие временами начала/ окончания счета, шагом по времени, и параметры для вывода данных; fvSchemes содержит названия схем

дискретизации операторов которые использует решатель в процессе счета; fvSolution содержит названия решателей

для СЛАУ, названия методов для предобуславливателей, параметры точности решения СЛАУ.

(D) (A) (A) (A) (A)



#### constant

в поддиректории polyMesh содержится полное описание неструктурированной сетки, которая получается дискретизацией расчетной области;

Также в этой директории помещаются файлы, в которых описываются физические константы например, свойства материалов (плотность, вязкость температура, сила тяжести и т.д.)

(D) (A) (A) (A) (A)

# Генерация сетки

ОрепFoam представляет довольно ограниченные возможности по созданию качественных аппроксимаций пространственных областей со сложной геометрией. Вместо этого в пакете предусмотрена возможность импорта сетки из специализированных пакетов генерирующих сетки (например, Gambit, ANSYS<sup>11</sup>), STAR-CD<sup>12</sup>) и др.).



<sup>11)</sup>http://www.ansys.com/

<sup>12)</sup>http://www.cd-adapco.com/

А.И. Короткий (ИММ УрО РАН) Моделирование задач геофизики ...

РЦП-13-И22 22 / 36

A B A B A
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A

# Импорт сетки

ansysToFoam	Converts an ANSYS input mesh file, exported from I-DEAS,
	to OPENFOAM format
cfx4ToFoam	Converts a CFX 4 mesh to OPENFOAM format
datToFoam	Reads in a datToFoam mesh file and outputs a points file.
	Used in conjunction with blockMesh
fluent3DMeshToFoam	Converts a Fluent mesh to OPENFOAM format
fluentMeshToFoam	Converts a Fluent mesh to OPENFOAM format including
	multiple region and region boundary handling
foamMeshToFluent	Writes out the OPENFOAM mesh in Fluent mesh format
foamToStarMesh	Reads an OPENFOAMR mesh and writes a PROSTAR (v4)
foamToSurface	Reads an OPENFOAM mesh and writes a surface format
gambitToFoam	Converts a GAMBIT mesh to OPENFOAM format
gmshToFoam	Reads .msh file as written by Gmsh
ideasUnvToFoam	I-Deas unv format mesh conversion
kivaToFoam	Converts a KIVA grid to OPENFOAM format
mshToFoam	Converts .msh file generated by the Adventure system
netgenNeutralToFoam	Converts neutral file format as written by Netgen v4.4
plot3dToFoam	Plot3d mesh (ascii/formatted format) converter
sammToFoam	Converts a STAR-CD (v3) SAMM mesh to OPENFOAM format
star3ToFoam	Converts a STAR-CD (v3) PROSTAR mesh into OPENFOAM
star4ToFoam	Converts a STAR-CD (v4) PROSTAR mesh into OPENFOAM
tetgenToFoam	Converts .ele and .node and .face files, written by tetgen
writeMeshObj	Writes mesh as three separate OBJ files for with javaview

・ロト ・四ト ・ヨト ・ヨト

Численные эксперименты проводились на вычислительном кластере "Уран", (Институт математики и механики УрО РАН, г.Екатеринбург). Вычислительный узел состоит из двух CPU Intel Quad-Core Xeon (частота 3.00 ГГц), ОП — 32 GB, высокоскоростная сеть Infiniband 20 Гбит/сек, GPU NVIDIA Tesla.

- Операционная система Linux;
- Компиляторы GCC версии 4.3.1;
- Реализации OpenMPI<sup>13)</sup> версии 1.2.6;
- Пакет OpenFOAM<sup>14)</sup> версии 2.1.0.
- Пакет VTK<sup>15)</sup> для экспорта результатов расчета;
- Пакет ParaView<sup>16)</sup> для для визуализации результатов.

<sup>16</sup> http://www.paraview.org/

イロト イヨト イヨト イヨト

 $<sup>^{13)}</sup>$  http://www.open-mpi.org/

<sup>&</sup>lt;sup>14)</sup>http://www.openfoam.com/

<sup>&</sup>lt;sup>15)</sup>http://www.vtk.org/

Геометрическим параллелизмом обладают многие физические задачи, которые описываются дифференциальными уравнениями в частных произволных. Дискретный аналог данной задачи имеет локальноограниченные взаимодействия между узлами сетки, покрывающей область решения, что позволяет разбить область решения задачи на подобласти и вычисления в каждой из подобластей поручить отдельному процессору. Подзадачи обработки каждой из подобластей взаимосвязаны и требуется обмен данными между этими подзадачами. Данный обмен осуществляется с помощью пакета MPI. Декомпозиция области решения - один из основных способов получения крупнозернистых алгоритмов и программ. При статической декомпозиции области решения границы подобластей, на которые разбивается область решения задачи, в ходе вычислений не меняются. Статическая декомпозиция области решения для данной задачи будет эффективной, т.к. вычислительные сложности подзадачи обработки каждой из подобластей не меняются в ходе вычислений.

イロト イヨト イヨト イヨト

На левом рисунке демонстрируется зависимость времени расчета (t) задачи от количества вычислительных ядер CPU (P) в случае применения пакета MPI для взаимодействия между подзадачами. На правом рисунке показана зависимость суммарного времи расчета  $(t \cdot P)$  одного шага по времени от количества ядер CPU (P). В данном эксперименте размерность дискретной задачи составила 200 × 200 конечных объемов.



РЦП-13-И22 26 / 36

# Тестовая задача



Тепловая аномалия  $\delta T = \frac{T - T_{mid}}{T_{mid}}$ ,  $T_{mid}$  — средняя температура в горизонтальном слое.



На рисунке изображены изоповерхности холодной аномалии 5%, 7%, и 10%.

・ロト ・日ト ・ヨト ・ヨト

æ

27 / 36

РЦП-13-И22

### Результаты численного моделирования



Эволюция температурной аномалии и вязкости при изменении глубины модельной области

РЦП-13-И22

28 / 36

Реконструкция тепловых полей в районе Японского моря. В реконструкции, высокотемпературная аномалии под задуговым японского моря бассейна распадается на две видные аномалии с изображением двух мелких апвеллингами под юго-западной и северной части Японского моря.



Цветом выделена положительная тепловая аномалия 5% в моделируемом Регионе, градации цвета выделяют глубину ее залегания. Маркерами выделены исследуемые районы.

A B A B A B A
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 B
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A
 A

### Результаты численного моделирования



Трехмерная визуализация температурной аномалии и вязкости.

イロト イヨト イヨト イヨ

### Paraview: визуализация результатов

Основной инструмент визуализации данных для OpenFOAM является модуль ParaView Oн базируется на библиотеке Visualization Toolkit (VTK) и может импортировать данные в vtk формате. Для этого реализован фильтр данных foamToVTK.

Кроме того, реализован набор утилит, позволяющих экспортировать данные для всех доступных на сегоднешний день пакетов программ визуализации данных и вычислительных пекетов механики.



РШП-13-И22

31 / 36

Наиболее продвинутыми являются следующие проекты адаптирующие OpenFOAM для использования GPU в расчетах:

- ofgpu v1.0 + Cusp от компании Symscape<sup>17)</sup>
- SpeedIT v2.0 от компании Vratis<sup>18)</sup>
- Culises от компании FluiDyna<sup>19)</sup>
- OpenFOAM-ext v1.6 альтернативный проект<sup>20)</sup>
- В рамках этих проектов реализованы решения задач:
  - Метод сопряжённых градиентов (PCG).
  - Метод бисопряжённых градиентов (PBiCG, PBiCGStab).
  - Многосеточный метод.
  - Вычисление предобуславливателей.

Поддержка GPU реализована в виде дополнительных библиотек, и подключается на этапе запуска задачи в файле fvSolution.

イロン イヨン イヨン イヨン

<sup>&</sup>lt;sup>17)</sup>http://www.symscape.com/

<sup>&</sup>lt;sup>18)</sup>http://www.vratis.com/

<sup>&</sup>lt;sup>19)</sup>http://www.fluidyna.de/

<sup>&</sup>lt;sup>20)</sup>http://www.extend-project.de/

В данном направлении исследования ИММ УрО РАН занимает передовые позиции в мировой науке. Наличие в Институте соответствующего оборудования и программного обеспечения для него позволяет оперативно совершенствовать методологию решения данной задачи с использованием от нескольких сотен до тысячи процессоров большой мощности. Результаты исследований прошли апробацию на международных конференциях в кругу заинтересованных специалистов, опубликованы в 11 работах в журналах, имеющих высокий индекс цитирования.

(D) (A) (A) (A) (A)

- Ismail-Zadeh A., Honda S., Tsepelev I. Linking mantle upwelling with the lithosphere descent and the Japan Sea evolution: a hypothesis. Sci. Report. 3,1137; DOI: 10.1038/srep01137 (2013).
- Ismail-Zadeh A., Korotkii A., Schubert G., Tsepelev I. Quasi-reversibility method for data assimilation in models of mantle dynamics. Geophys. J. Int. 170, 1381-1398 (2007).
- Ismail-Zadeh A., Schubert G., Tsepelev I., Korotkii A. Three-dimensional forward and backward numerical modeling of mantle plume evolution: Effects of thermal diffusion // Journal of Geophysical Research. 2006. Vol. 111. № B6 (B06401, doi:10.1029/2005JB003782).
- Ismail-Zadeh A.T., Schubert G., Tsepelev I.A., Korotkii A.I. Inverse Problem of Thermal Convection: Numerical Approach and Application to Mantle Plume Restoration // Physics of the Earth and Planetary Interiors. 2004. V.145. P.99-114.
- Ismail-Zadeh A.T, Korotkii A.I., Naimark B.M., Tsepelev I.A. Three-dimensional numerical simulation of the inverse problem of thermal convection. Comput. Math. and Mathem. Phys. 43, 587-599 (2003).

(ロ) (日) (日) (日) (日)

# Международные конференции

- Ismail-Zadeh A., Honda S., Tsepelev I. Quantitative reconstruction of lithosphere subduction using assimilation of geophysical data // 28th IUGG Conference on Mathematical Geophysics, Session 8: Data assimilation and model validation. June 7-11, 2010, Pisa, Italy.
- Alik Ismail-Zadeh, Satoru Honda, Igor Tsepelev, Alex Korotkii. Inverse retrospective thermo-mechanical modeling of lithosphere subduction // European Geosciences Union General Assembly 2011 (Austria, Vienna, 3-8 April 2011). Vol.13, EGU2011-7587, 2011.
- Ismail-Zadeh A., Honda S., Tsepelev I. The Pacific Plate Subduction Beneath the Japanese Island Arc: Insight From the Past // XXV IUGG General Assembly Earth on the Edge: Science for a Sustainable Planet. Section IASPEI (Melbourne, Australia 28 June - 7 July 2011). N 4227.
- Ismail-Zadeh A., Tsepelev I., Honda S. Numerical approach to inverse problems in geodynamics: Application to lithosphere subduction // European Geosciences Union General Assembly 2012 (Austria, Vienna, 22 - 27 April 2012). Vol.14, EGU2012-1898, 2012.
- Honda S., Ismail-Zadeh A., Morishige M., Tsepelev I. Hot sub-slab mantle beneath the subducting Pacific plate: Its origin and past evolution // Int. conference "Geophysics of Slab Dynamics" (South Korea, 20-22 August, 2012). 2012.

(ロ) (日) (日) (日) (日)

Исследования математической модели проволось при финансовой поддержке Программы межрегиональных и межведомственных фундаментальных исследований Уральского отделения РАН (проект 12-C-1-1001), параллельные алгоритмы решения задачи и вычислительные эксперименты проводились в рамках программы Президиума РАН № 15 "Информационные, управляющие и интеллектуальные технологии и системы" при поддержке УрО РАН (проект 12-П-1-1023) и региональной целевой программой РЦП-13-П24. Данный документ подготовлен в рамках проекта РЦП-13-И22.

(日) (周) (王) (王)