

УДК 532.517:537.584

## ПСЕВДОСПЕКТРАЛЬНЫЙ МЕТОД В МОДЕЛЯХ ТЕПЛОВОЙ КОНВЕКЦИИ ВО ВРАЩАЮЩЕЙСЯ СФЕРИЧЕСКОЙ ОБОЛОЧКЕ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРОВ

М. Ю. Решетняк<sup>1</sup>

Рассмотрены вопросы численной реализации и параллелизации классических моделей тепловой конвекции в сферической оболочке, используемых в современных моделях планетарного динамо с учетом вращения твердого ядра под действием вязких сил. Приведены тесты скорости сходимости вычислений для псевдоспектральной модели при распараллеливании в радиальном направлении для кластерных систем, демонстрирующие эффективность параллелизации для типичных трехмерных сеток порядка  $64^3$  узлов.

**Ключевые слова:** сферические функции, полиномы Чебышева, геострофическое состояние, кластерные системы.

**1. Введение.** Задача тепловой конвекции в сферической оболочке актуальна для многих астрофизических приложений: описания движения жидкой среды в мантиях и ядрах планет, конвективных оболочках звезд, физике океана и атмосферы. Данная задача может быть составной частью и более сложной задачи динамо, в которую входит расчет конвекции. Многие составные блоки задачи конвекции могут быть использованы в задачах динамо и непосредственно. Несмотря на тот факт, что далее мы будем рассматривать задачу для несжимаемой жидкости, после несложной трансформации переменных (необходимо заменить скорость на произведение скорости и плотности, которое при малых числах Маха остается бездивергентным) используемые алгоритмы могут быть применены и для задач, в которых плотность жидкости меняется по известному закону с глубиной, что характерно для самогравитирующих объектов. Замена уравнения теплопроводности на уравнение энтропии для сжимаемой жидкости мало меняет структуру задачи [1]. Далее мы ограничимся анализом тепловой конвекции в приближении Буссинеска.

Остановимся подробнее на специфике задач тепловой конвекции в сферической оболочке [2]. Ниже под системой уравнений конвекции мы будем понимать пару уравнений Навье–Стокса и теплопроводности с учетом сил плавучести (Архимеда) и вращения (Кориолиса). Предполагается, что нижняя граница имеет большую температуру, что является причиной появления конвекции. Возникающие вязкие силы со стороны движущейся жидкости могут приводить во вращение твердое ядро, являющееся нижней границей оболочки.

В силу сферичности исходной геометрии задачи целесообразно использовать сферическую геометрию, упрощающую постановку граничных условий [3]. Использование декартовых сеток, привычных для задач со сложными границами, оказывается не эффективным, существенно ухудшая сходимость, хотя и делает запись уравнений в дискретном виде более простой.

К настоящему времени развиты два метода решения уравнений в сферической оболочке: псевдоспектральный и конечно-разностный. В рамках псевдоспектрального метода поля (или их потенциалы) раскладываются в ряды по сферическим функциям и (не обязательно) по полиномам Чебышева в радиальном направлении [4]. Комбинация представления векторных полей через их потенциалы и их разложения в ряд по спектральным функциям оказывается наиболее точной известной аппроксимацией, позволяющей автоматически удовлетворить условию бездивергентности полей и корректно описать пограничные слои на твердых границах оболочки, где полиномы Чебышева дают сгущение сетки.

Второй метод наиболее интересен в терминах контрольных объемов, позволяющих обойти сложности, связанные со сгущением сетки у оси, а для задач динамо с проводящим ядром — и в центре сферы, характерные для обыкновенных конечных разностей [5]. Чтобы понять серьезность проблемы, достаточно сказать, что известный критерий устойчивости для конечно-разностных явных схем дискретизации по времени  $\delta t < \delta x^2$  вблизи центра и оси вращения имеет вид  $\delta t < \delta x^6$ , что исключает применимость явных схем практически полностью. Абсолютно неявные схемы, хотя и устойчивы, имеют более медленную сходимость в центре.

<sup>1</sup> Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН, ул. Б. Грузинская, 10, 123995, Москва; гл. науч. сотр., e-mail: m.reshetnyak@gmail.com

С появлением параллельных компьютеров требования к численным алгоритмам ужесточились. Наиболее эффективно распараллеливаются конечно-разностные алгоритмы, в которых вычисления производятся в одном, физическом пространстве, так что каждому процессору отводятся вычисления в отдельной пространственной области. В зависимости от реализации в некоторый момент времени процессоры обмениваются информацией с прилегающими к ним другими процессорами. Последнее эффективно с той точки зрения, что для трехмерной задачи происходит обмен слоями (двумерными данными) без обмена трехмерными данными. Оценки показывают, что удастся сводить долю затрачиваемого времени на обмен к 10–15% от общего времени счета. Более того, за счет более эффективного использования кэш-памяти удастся достичь эффекта сверхускорения [6], когда скорость вычислений растет быстрее, чем число процессоров.

Формально использование псевдоспектральных методов, обладающих более высокой точностью, для параллельных вычислений связано с микропроцессорной передачей трехмерных данных при переходе из физического пространства в волновое и обратно, что существенно снижает эффективность алгоритма. С другой стороны, общая сходимость конечно-разностных методов (для одного процессора) оказывается в несколько раз хуже сходимости псевдоспектральных методов. Более того, измельчение сетки, приводящее к увеличению общего времени интегрирования уравнений конвекции, существенно ограничивает пределы применимости уже обоих методов, что хорошо наблюдается при обзоре современных моделей геодинamo, демонстрирующих насыщение в увеличении разрешения. Оба эти обстоятельства побудили нас для сравнительно небольших сеток порядка  $64^3$ – $128^3$  узлов найти оптимальное сочетание точности вычислений, используя псевдоспектральный метод и одномерное распараллеливание в радиальном направлении, позволяющее использовать по одной точке (или полиному Чебышева) на процессор. Ниже мы рассматриваем детали численной реализации псевдоспектральной модели в быстро вращающейся оболочке и приводим распределения течений, типичные для современных моделей геодинamo.

**2. Уравнения конвекции.** Рассмотрим уравнения конвекции для несжимаемой жидкости ( $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$ ) во вращающемся вокруг оси  $z$  с угловой скоростью  $\Omega$  сферическом слое ( $r_i \leq r \leq r_0$ ), где  $(r, \theta, \varphi)$  — сферическая система координат. Введем следующие единицы измерения для скорости  $\mathbf{V}$ , времени  $t$  и давления  $P$ :  $\kappa L^{-1}$ ,  $L^2 \kappa^{-1}$  и  $\rho \kappa^2 L^{-2}$ , где  $L$  — единица длины,  $\kappa$  — коэффициент молекулярной теплопроводности и  $\rho$  — плотность вещества. Тогда уравнения тепловой конвекции принимают вид

$$\begin{aligned} \text{Pr}^{-1} \mathbf{E} \left( \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} - \mathbf{V} \times \nabla \times \mathbf{V} \right) &= -\nabla P - \mathbf{1}_z \times \mathbf{V} + \text{Ra} T r \mathbf{1}_r + \mathbf{E} \nabla^2 \mathbf{V}, \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)(T + T_0) &= \nabla^2 T. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь безразмерные числа Прандтля, Экмана и Рэлея заданы в виде  $\text{Pr} = \nu \kappa^{-1}$ ,  $\mathbf{E} = \nu (2\Omega L^2)^{-1}$  и  $\text{Ra} = \alpha g_0 \delta T L (2\Omega \kappa)^{-1}$ , где  $\nu$  — коэффициент кинематической вязкости,  $\alpha$  — коэффициент объемного расширения,  $g_0$  — ускорение свободного падения и  $\delta T$  — единица возмущения температуры  $T$  относительно равновесного профиля  $T_0 = \frac{r_i r^{-1} - r_0}{r_0 - r_i}$ .

Задача (1) замыкается граничными условиями на  $r = r_i, r_0$ , полагаемыми далее равными 0.35 и 1, как для случая земного ядра. Для возмущений температуры  $T$  используются нулевые граничные условия, что в совокупности с заданным выше профилем  $T_0$  соответствует фиксированным значениям полной температуры  $T_0 + T$ : (1, 0).

Для поля скорости принимается условие непроникновения  $V_r = 0$ . Для тангенциальных компонент скорости  $V_\theta, V_\varphi$  относительно границ  $r = r_i, r_0$  (твердое ядро может вращаться вокруг оси  $z$ ) используются два вида граничных условий: условие непроскальзывания  $V_\theta = V_\varphi = 0$ , характерное для твердых границ, либо условие отсутствия касательных напряжений. Такой вид граничных условий заимствован из моделей конвекции звезд, имеющих свободную границу. Для условия непроскальзывания значение угловой скорости вращения  $\omega$  твердого ядра с моментом инерции  $I = 8\pi r_i^5/15$  относительно оси  $z$  получается из решения уравнения момента импульса с учетом вязких сил, приложенных к твердому ядру:  $I \text{Ro} \frac{\partial \omega}{\partial t} = \mathbf{E} \oint \frac{\partial}{\partial r} \frac{V_\varphi}{r} r^4 \Big|_{r=r_i} \sin \theta dS$ , где  $dS$  — элемент сферической поверхности на границе твердого ядра.

**3. Разложение на полоидальные и тороидальные поля.** Используя бездивергентность поля скорости  $\mathbf{V}$ , разложим его на полоидальную и тороидальную компоненты:

$$\mathbf{V} = \nabla \times \nabla \times (V \mathbf{r}) + \nabla \times (W \mathbf{r}), \quad (2)$$

где  $V$  и  $W$  — скалярные потенциалы. Разложение (2) автоматически удовлетворяет условию бездивергентности  $\mathbf{V}$ , а компоненты скорости имеют вид

$$\mathbf{V} = \left( \frac{\mathcal{L}_2 V}{r}, \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} W + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial r} (rV), -\frac{\partial}{\partial \theta} W + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial r} (rV) \right), \quad \mathcal{L}_2 = (\mathbf{r} \times \nabla)^2.$$

Граничные условия для потенциалов имеют следующий вид:  $W = V = \frac{\partial}{\partial r} V = 0$  для непроскальзывания и  $\frac{\partial}{\partial r} \frac{W}{r} = V = \frac{\partial^2}{\partial r^2} V = 0$  — для невязких граничных условий.

Подстановка (2) в (1) после действия операторов  $\mathbf{r} \cdot \nabla \times$  и  $\mathbf{r} \cdot \nabla \times \nabla \times$  (исключающих давление) дает следующую систему уравнений тепловой конвекции [7]:

$$\begin{aligned} \text{Pr}^{-1} \text{E} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{L}_2 W &= \mathbf{r} \cdot \nabla \times \mathbf{G} + \text{E} \nabla^2 \mathcal{L}_2 W, \\ \text{Pr}^{-1} \text{E} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{L}_2 \nabla^2 V &= -\mathbf{r} \cdot \nabla \times \nabla \times \mathbf{G} + \text{E} \nabla^2 \mathcal{L}_2 \nabla^2 V, \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)(T + T_0) &= \nabla^2 T, \\ \mathbf{G} &= \text{Pr}^{-1} \text{E} \mathbf{V} \times \nabla \times \mathbf{V} - \mathbf{1}_z \times \mathbf{V} + \text{Ra} T r \mathbf{1}_r. \end{aligned}$$

Мы свели исходную систему уравнений в частных производных второго порядка к системе со смешанными производными шестого порядка, исключив давление и имея лишь две переменные для поля скорости. Несмотря на более высокий порядок уравнений, использование псевдоспектрального метода дает возможность эффективного решения такой системы. Идея метода состоит в том, чтобы осуществлять операции дифференцирования и интегрирования в спектральном пространстве, а вычисление произведения физических полей (вычисление нелинейных конвективных членов, силы Лоренца в задаче динамо) — в физическом. Ключевым моментом является использование быстрых преобразований из одного пространства в другое. Далее мы рассмотрим основные свойства используемых преобразований.

**4. Разложение по спектральным функциям.** Разложим скалярные поля  $V$ ,  $W$  и  $T$ , взятые в точках коллокации  $(r_\alpha, \theta_\beta, \varphi_\gamma)$ , по сферическим функциям  $Y_l^m$  и полиномам Чебышева первого рода  $T_n$ :

$$\begin{aligned} V(r, \theta, \varphi, t) &= \sum_{n=0}^N \sum_{l=0}^{L/2} \sum_{m=0}^l V_{ln}^m(t) T_n(r) Y_l^m(\cos \theta), \\ W(r, \theta, \varphi, t) &= \sum_{n=0}^N \sum_{l=0}^{L/2} \sum_{m=0}^l W_{ln}^m(t) T_n(r) Y_l^m(\cos \theta), \\ T(r, \theta, \varphi, t) &= \sum_{n=0}^N \sum_{l=0}^{L/2} \sum_{m=0}^l T_{ln}^m(t) T_n(r) Y_l^m(\cos \theta), \end{aligned}$$

где  $V_{ln}^m$ ,  $W_{ln}^m$  и  $T_{ln}^m$  — коэффициенты разложения. Сетка по  $r$  выбрана таким образом, чтобы можно было использовать быстрое преобразование Фурье для перехода из физического пространства в волновое:  $r_\alpha = r_i + \frac{1}{2} \left( 1 + \cos \pi \frac{\alpha - 1}{N - 1} \right)$ ,  $\alpha = 1, \dots, N$ . Переход в пространство Чебышева позволяет получить рекуррентные формулы для производных и интегралов полей по  $r$  [7].

Поскольку сферическая система координат криволинейна и переход в волновое пространство не избавляет нас от зависящих от координат коэффициентов, в дальнейшем удобно использовать запись полей в пространстве  $(l, m)$ , оставляя зависимость по  $r$ :

$$\begin{aligned} \text{E Pr}^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 V_l^m &= \text{E} \nabla^4 V_l^m - \mathcal{L}_2^{-1} [\mathbf{r} \cdot \nabla \times \nabla \times \mathbf{G}]_l^m, \\ \text{E Pr}^{-1} \frac{\partial}{\partial t} W_l^m &= \text{E} \nabla^2 W_l^m + \mathcal{L}_2^{-1} [\mathbf{r} \cdot \nabla \times \mathbf{G}]_l^m, \\ \frac{\partial T_l^m}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)(T + T_0) &= (L_r + L_\tau) T_l^m, \end{aligned}$$

где введены операторы

$$\begin{aligned}\nabla^2 &= \mathcal{L}_r - \frac{\mathcal{L}_2}{r^2}, \quad \nabla^4 = \frac{\partial^4}{\partial r^4} + \frac{4}{r} \frac{\partial^3}{\partial r^3} - \frac{2(l^2 + l)}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l^2 - 1)(l + 2)}{r^4}, \\ L_r &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}, \quad L_\tau = -\frac{\mathcal{L}_2}{r^2}, \quad \mathcal{L}_2 = l(l + 1).\end{aligned}$$

**5. Интегрирование по времени.** Использование криволинейных координат накладывает некоторую специфику на часто используемый в декартовой системе координат псевдоспектральный метод [8]. Рассмотрим некоторые детали этого метода.

**5.1. Уравнение теплопроводности.** Остановимся подробнее на схеме дискретизации уравнения теплопроводности. Запишем уравнение в виде  $\frac{\partial T}{\partial t} = R + \nabla^2 T$ , где  $R = -V\nabla(T + T_0)$ . Тогда, используя метод Кранка–Николсон для диффузионного оператора и метод Адамса–Башфорта для конвективной части  $R$ , получим  $\frac{T^{k+1} - T^k}{\tau} = \frac{1}{2}[\Delta T^{k+1} + \Delta T^k] + S$ , где  $S = \frac{\tau}{2}(3R^k - R^{k-1})$ ,  $\tau$  – шаг по времени и индекс  $k$  соответствует шагу по времени. В более удобном виде имеем

$$\left[1 - \frac{\tau}{2} \Delta\right] T^{k+1} = \left[1 + \frac{\tau}{2} \Delta\right] T^k + S. \quad (3)$$

Запишем (3) в пространстве  $(l, m, r)$ :

$$\left[1 + \frac{\tau}{2} \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)\right] T_l^{m, k+1}(r) = \left[1 - \frac{\tau}{2} \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)\right] T_l^{m, k}(r) + S_{\alpha l}^m. \quad (4)$$

Операторы в квадратных скобках в (4) не зависят от  $m$  (поскольку оператор диффузии не зависит от  $m$ ).

Пусть в точках коллокации  $r_\alpha$  справедливо разложение  $T_l^{m, k+1}(r_\alpha) = \sum_{n=0}^N T_{nl}^{m, k+1} T_n(r_\alpha)$ , тогда получим систему линейных уравнений относительно  $T_{nl}^{m, k+1}$  в виде

$$M_{n\alpha l} T_{nl}^{m, k+1} = C_{\alpha l}^m, \quad (5)$$

где матрица  $M_{n\alpha l} = \left[1 + \frac{\tau}{2} \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)\right] T_n(r_\alpha)$  может быть вычислена один раз предварительно. Значения  $C_{\alpha l}^m = \left[1 - \frac{\tau}{2} \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)\right] T_l^{m, k}(r_\alpha) + S_{\alpha l}^m$  в правой части (5) берутся с двух предыдущих шагов по времени.

Таким образом, значения поля  $T^{k+1}$  на новом шаге по времени в пространстве  $(l, m, n)$  можно записать в виде  $T_{nl}^{m, k+1} = M_{n\alpha l}^{-1} C_{\alpha l}^m$ . Для обращения матрицы  $M_{n\alpha l}$  удобно использовать  $LU$ -разложение.

**5.2. Уравнение для поля скорости.** Форма уравнения для  $W$  близка к форме уравнения теплопроводности, и мы ограничимся лишь записью матриц  $C$  и  $M$ :

$$\begin{aligned}M_{n\alpha l} &= \mathbb{E} \left[ \text{Pr}^{-1} + \frac{\tau}{2} \left( \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] T_n(r_\alpha), \\ C_{\alpha l}^m &= \mathbb{E} \left[ \text{Pr}^{-1} - \frac{\tau}{2} \left( \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] W_l^{m, k}(r_\alpha) + S_{\alpha l}^m\end{aligned}$$

и нелинейного члена  $R_l^m = \frac{1}{l(l+1)} \mathbf{r} \cdot \nabla \times \mathbf{G}_l^m$ .

Для полоидального потенциала  $V$  имеем

$$\begin{aligned}M_{n\alpha l} &= \mathbb{E} \left[ \text{Pr}^{-1} \nabla^2 - \frac{\tau}{2} \nabla^4 \right] T_n(r_\alpha), \\ C_{\alpha l}^m &= \mathbb{E} \left[ \text{Pr}^{-1} \nabla^2 + \frac{\tau}{2} \nabla^4 \right] W_l^{m, k}(r_\alpha) + S_{\alpha l}^m, \\ R_l^m &= -\frac{1}{l(l+1)} \mathbf{r} \cdot \nabla \times \nabla \times \mathbf{G}_l^m.\end{aligned}$$

**5.3. Граничные условия по  $r$ .** Представим поле  $T$  в пространстве  $(l, m, r)$  в виде ряда по  $T_n$ :

$$T_l^m(r_\alpha) = \sum_{n=0}^N T_{n\alpha l}^m T_n(r_\alpha).$$

Тогда для  $T_l^m(r_0) = 0$  и  $T_l^m(r_i) = 0$  имеем  $\sum_{n=0}^N T_{n\alpha l}^m = 0$  и  $\sum_{n=0}^N (-1)^{n+1} T_{n\alpha l}^m = 0$  соответственно.

Для  $\frac{\partial T_l^m}{\partial r} \Big|_{r=r_0} = 0$  и  $\frac{\partial T_l^m}{\partial r} \Big|_{r=r_i} = 0$  имеем  $\sum_{n=0}^N n^2 T_{n\alpha l}^m = 0$  и соответственно  $\sum_{n=0}^N (-1)^n n^2 T_{n\alpha l}^m = 0$  [7, 9, 10].

**5.4. Гипервязкость.** Для подавления возникающих численных высокочастотных неустойчивостей для больших чисел Рэлея существует два пути: увеличение числа точек сетки или введение искусственно повышенной вязкости для больших волновых чисел. Именно второй путь сделал возможным реализацию режимов динамо для больших чисел Рейнольдса в [4]. Ниже для больших чисел Рэлея мы примем, что значения теплопроводности и гидродинамической вязкости, стоящие при операторе Лапласа, зависят от  $l$  как  $\kappa = \kappa_0 0.075 l^3$  и  $\nu = \nu_0 0.075 l^3$ . О роли гипервязкости см. в [11].

**6. Численная реализация и результаты моделирования.** Код написан на языке Фортран-90 с использованием модульной архитектуры. Для разложения по сферическим функциям был использован пакет SPHEREPACK, дающий помимо спектрального разложения еще и возможность быстрого дифференцирования полей по переменной  $\theta$ , основанного на рекуррентных формулах для присоединенных полиномов Лежандра  $P_l^m$ . Для взятия интегралов по сферической поверхности использованы квадратуры Гаусса–Лежандра, см. подробнее о выборе сеток в описании пакета [12]. Переход в пространство Чебышева осуществляется с помощью быстрого преобразования Фурье для четных гармоник.

Остановимся на вопросах параллелизации кода.

Если исключить возможность распараллеливания по уравнениям (а для задачи тепловой конвекции в приближении Буссинеска их всего три) и применения машин с общей памятью с последующим использованием OpenMP, возможности которого ограничены максимальным количеством процессоров на машинах с общей памятью (а их количество так же невелико), то единственной приемлемой возможностью для распараллеливания является использование MPI на основе многопроцессорной техники с распределенной памятью, в частности на кластерных системах. Поскольку для нас немаловажна возможность легкого переноса кода с одной вычислительной платформы на другую, мы также исключаем для себя использование вычислений на графических картах в силу их пока еще малой распространенности.

Как уже упоминалось во введении, идея выбора численного метода состоит в том, чтобы для режимов с реалистичным шагом по времени получить разумное ускорение при параллелизации. Для сеток порядка  $64^3$ – $128^3$  узлов мы придерживаемся мнения, что достаточно использования одномерного распараллеливания, см. подробнее о двумерном распараллеливании в [13]. Чтобы не нарушать структуру алгоритмов пакета SPHEREPACK, не имеющего версии для параллельных компьютеров, мы рассмотрели параллелизацию в радиальном направлении как в физическом пространстве, так и в пространстве Чебышева. Для реализации быстрого преобразования Фурье матрицы полей предварительно распределялись между процессорами с использованием операций вида MPIALLTOALL так, чтобы каждый процессор мог выполнить преобразование для всего ряда по  $r$  или  $n$ . Для устранения паразитных частот при вычислении нелинейных членов использовалось правило 3/2, сводящееся к обрезанию высокочастотной части спектра полей, входящих в произведение [13].

Сравнение полученных результатов вычислений с сетками порядка  $64^3$  узлов дает результат ничуть не хуже, чем для для сеток порядка  $256^3$  в методе контрольных объемов. Другими словами, за счет повышения точности, получаемой в спектральном методе по сравнению с конечно-разностными методами, нам

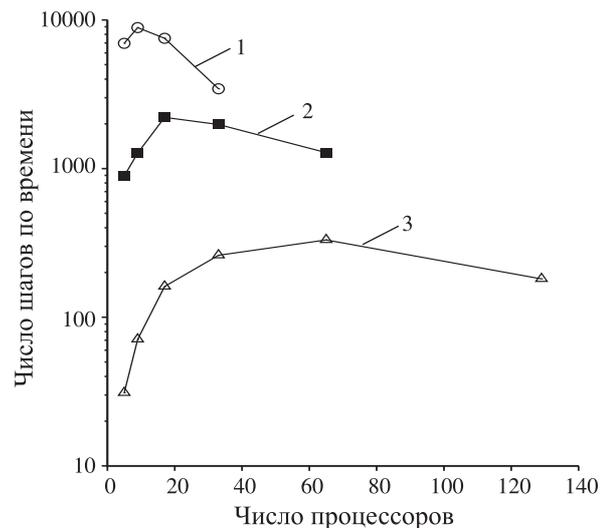


Рис. 1. Зависимость количества шагов по времени от числа процессоров для трех сеток: 1)  $32^3$ , 2)  $64^3$  и 3)  $128^3$

удаётся компенсировать издержки, связанные с использованием пересылки трехмерных данных между всеми процессорами для данного диапазона сеток. Справедливости ради надо сказать, что при увеличении количества узлов сеток и гармоник количество операций в псевдоспектральном методе растет быстрее, чем в конечно-разностном методе. Однако и прямое использование тех же численных методов в конечно-разностных методах для решения систем уравнений используемыми итеративными методами также приводит к насыщению: начиная с некоторого момента становится актуальным использование мультигридов и других ухищрений для повышения скорости сходимости. Другим моментом, побудившим разработку данного подхода, является дальнейшее его использование для задач динамо. Как показали многочисленные эксперименты, адаптация конечно-разностных алгоритмов, активно использующих несимметричные схемы аппроксимации конвективных членов, с трудом экстраполируется на задачи с магнитным полем, в которых нарушение обмена энергией между уравнением Навье–Стокса и уравнением индукции может приводить к нарушению баланса полной энергии системы.

На рис. 1 приведены результаты расчетов на суперкомпьютере СКИФ МГУ “Чебышев”. Сетки выбраны так, что  $L = N$ . Для каждой из рассмотренных сеток наблюдается оптимальное число процессоров (приблизительно в 2–4 раза меньше числа точек в радиальном направлении). Данный результат является хорошим аргументом в пользу того, что для рассмотренных сеток использование двумерной параллелизации не является оптимальным: использование минимального количества операций на процессор, когда количество процессоров равно количеству точек  $N$  в радиальном направлении, снижает общую скорость вычислений. Вычисление одного диффузионного времени на сетках  $64^3$  для оптимального режима выбора числа процессоров занимает порядка 15 часов.

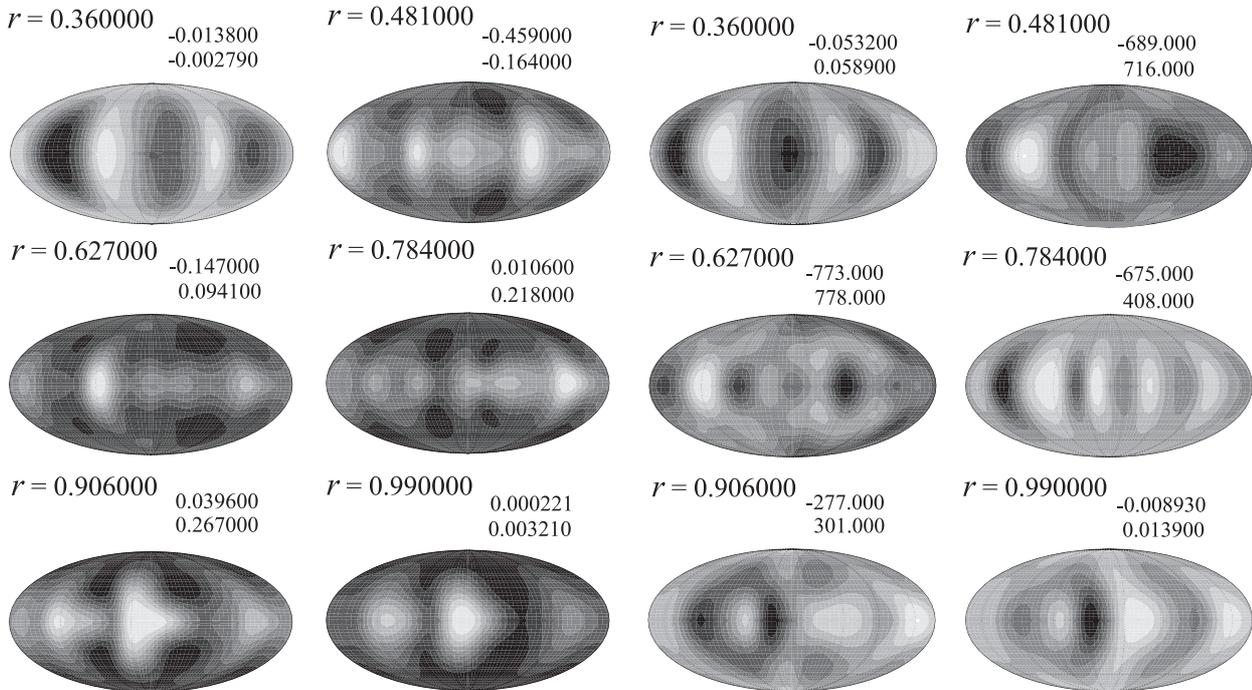


Рис. 2. Радиальное сечение флуктуаций температуры  $T$  для различных  $r$ . Числа соответствуют диапазону значений поля. Темные области — меньшим значениям, светлые — большим

Рис. 3. Радиальное сечение  $V_r$ -компоненты скорости для различных  $r$

Количество шагов по времени для оптимального (для данной сетки) режима убывает как  $N^{-2}$ , что весьма неплохо для псевдоспектрального метода, для которого общее число операций при  $N \rightarrow \infty$  определяется самым узким местом, связанным с “медленным” преобразованием Лежандра, требующим  $N^2$  операций для каждой точки по  $r$  и  $\varphi$ . Тогда полное число операций в объеме равно  $N^2 \times N^2 = N^4$ ; следовательно, получаемое ускорение зависит от  $N$  как  $\sim N^{-3}$ . Наблюдаемое расхождение в лучшую для нас сторону связано с конечностью  $N$ , эффективным использованием кэш-памяти, а также вкладом двух других уже “быстрых” преобразований для  $r$ - и  $\varphi$ -направлений, для которых  $N^2$  заменяется на  $N \log N$ . Другими словами, нам удалось получить алгоритм, для которого хотя бы в узком диапазоне параметров удастся получить ускорение существенно более высокое, чем ожидалось из приведенных выше простых

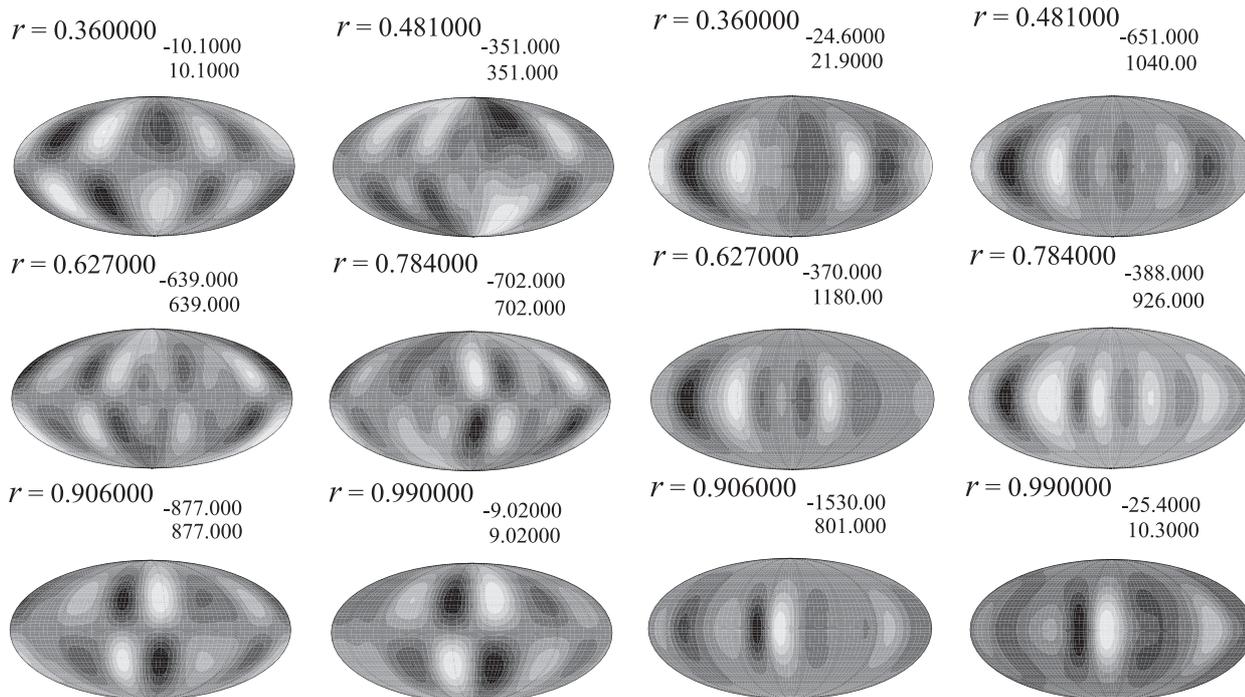


Рис. 4. Радиальное сечение  $V_\theta$ -компоненты скорости для различных  $r$

Рис. 5. Радиальное сечение  $V_\varphi$ -компоненты скорости для различных  $r$

асимптотических оценок.

В заключение для режима без проскальзывания мы приводим распределения характерных физических полей: поля флуктуации температуры  $T$  относительно доконвективного распределения  $T_0$  и компонент поля скорости  $V$  (см. рис. 2–5 для  $Ra = 8 \times 10^3$ ,  $E = 10^{-4}$ ,  $Pr = 1$ ) и нескольких радиальных сечений в проекции Мольвейде. Выбранный режим соответствует геострофическому состоянию, когда поля вытянуты вдоль оси вращения  $z$ , а производные полей в  $z$ -направлении малы. Данный режим соответствует балансу сил Кориолиса и градиента давления. При малых числах Рэлея роль сил Архимеда сводится к совершению работы и подаче энергии в систему, слабо отклоняя течения от геострофической формы. Наблюдаемые вертикальные структуры представляют собой систему циклонов и антициклонов, вращающихся относительно своей оси в направлении, определяемом знаком вертикальной составляющей скорости, что соответствует существованию крупномасштабной спиральности, см. подробнее о зависимости спиральности от амплитуды тепловых источников в [14].

**7. Заключение.** Выше мы рассмотрели адаптацию численных методов решения уравнений тепловой конвекции в сферической оболочке на базе разложения по сферическим функциям и полиномам Чебышева для параллельных компьютеров. Нашей целью было создание кода, позволяющего с высокой точностью достаточно быстро проводить интегрирование по времени уравнений конвекции, а в будущем — и уравнений динамо. Обратим внимание, что целью создания такого рода программы является не только проведение вычислений с повышенным разрешением, но и длинновременное интегрирование на грубой пространственной сетке, удовлетворяющей точности наблюдений магнитного поля в прошлом.

Несмотря на очевидные сложности, возникающие при параллелизации псевдоспектральных алгоритмов, нам удалось найти весьма приемлемый диапазон параметров, для которых параллельные алгоритмы дают возможность практического использования программы для решения задач конвекции в планетарных ядрах. Обратим внимание, что высокая точность спектральных методов значительно упрощает их использование для задач, в которых нарушение энергетического баланса может иметь катастрофические последствия, в частности в моделях динамо, для которых сумма кинетической и магнитной энергий должна быть строго равна диссипации и работе сил плавучести. Последнего весьма сложно добиться, например в рамках метода контрольных объемов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Braginsky S.I., Roberts P.H.* Equations governing convection in Earth's core and the geodynamo // *Geophys.*

- Astrophys. Fluid Dynamics. 1995. **79**. 1–95.
2. *Jones C.A.* Convection-driven geodynamo models // Phil. Trans. R. Soc. London. 2000. **A 358**. 873–897.
  3. *Christensen U.R., Wicht J.* Numerical dynamo simulations // Treatise on Geophysics. Vol. 8: Core Dynamics. Amsterdam: Elsevier, 2007. 245–282.
  4. *Glatzmaier G.A., Roberts P.H.* A three-dimension convective dynamo solution with rotating and finitely conducting inner core and mantle // Phys. Earth Planet. Inter. 1995. **91**. 63–75.
  5. *Hejda P., Reshetnyak M.* Control volume method for the dynamo problem in the sphere with the free rotating inner core // Studia Geoph. et Geod. 2003. **47**. 147–159.
  6. *Wadleigh K.R., Crawford I.L.* Software optimization for high-performance computing. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2000.
  7. *Simitev R.* Convection and magnetic field generation in rotating spherical fluid shells. Ph.D. Thesis. University of Bayreuth. Bayreuth, 2004 (<http://www.phy.uni-bayreuth.de/theo/tp4/members/simitev.html>).
  8. *Canuto C., Hussaini M.Y., Quarteroni A., Zang T.A.* Spectral methods in Fluids Dynamics. New York: Springer-Verlag, 1988.
  9. *Glatzmaier G.* Numerical simulations of stellar convective dynamos. I. The model and method // J. Comp. Physics. 1984. **55**. 461–484.
  10. *Tilgner A.* Spectral methods for the simulation of incompressible flows in spherical shells // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 1999. **30**. 713–724.
  11. *Zhang K., Jones C.A.* The effect of hyperviscosity on geodynamo models // Geophys. Res. Lett. 1997. **24**. 2869–2872.
  12. *Adams J.C., Swartztrauber P.N.* SPHEREPACK 3.2: A Model Development Facility (<http://www.cisl.ucar.edu/css/-software/spherepack/>).
  13. *Chune T.C., Elliott J.R., Miesch M.S., Toomre J., Glatzmaier G.A.* Computational aspects of a code to study rotating turbulent convection in spherical shells // Parallel Computing. 1999. **25**. 361–380.
  14. *Решетняк М.Ю.* Тейлоровский цилиндр и конвекция в сферической оболочке // Геомагнетизм и аэрономия. 2010. **50**, № 2. 273–283.

Поступила в редакцию  
07.02.2011

---