

Описание входных файлов программного средства
«Прецизионный масштабируемый вихреразрешающий CFD
модуль на базе DNS приближения, ориентированный на
петафлопсные (10^{15}) вычислительные ЭВМ.
Версия 3.0» (CONV-3D/V2.3)

Оглавление

Входные файлы и особенности ввода данных	2
Блок декомпозиции расчетной области.....	4
Операция вывода и выходные файлы	6
Приложение 1. Форматы входных файлов	8
Таблица 1.1 - Входные параметры CONV3D – файл _geo.inp	8
Таблица 1.2 - Входные параметры CONV3D – файл _key.inp	15
Таблица 1.3 - Входные параметры CONV3D – файл _prop.inp.....	21
Таблица 1.4 - Входные параметры CONV3D – файл _out.inp.....	24
Таблица 1.5 - Входные параметры CONV3D – файл _pumps.inp	26
Таблица 1.6 - Входные параметры CONV3D – файл decomp_mg.inp.....	28
Таблица 1.7 - Входные параметры CONV3D – файл _dstat.inp.....	30
Приложение 2. Постановка тестовой задачи	31
Приложение 3. Описание программы “CONVerter”	34

Входные файлы и особенности ввода данных

Полный комплект входных файлов CONV3D/V2.3 состоит из **_geo.inp**, **_key.inp**, **_prop.inp**, **_out.inp**, **_pumps.inp**, **decomp_mg.inp**, **_dstat.inp**, **mapf3d.inb**, **bci.inp**, **stlinp.stl**. Причем последние три файла являются необходимыми только в случае построения расчетной геометрии через специализированную программу построения расчетных областей и сеток (геометрический редактор) с применением маркировщика расчетной области. В этом случае ключ *key_fictgeom* в файле *_key.inp* задается равным 2.

Форматы входных файлов детально описаны в разделе [Приложение 1. Форматы входных файлов](#) в конце этого документа.

Ввод данных при исполнении программы осуществляется в следующем порядке.

Сначала зачитывается размерность задачи из файла **_geo.inp**. Это необходимо, чтобы определить размер массивов и в дальнейшем выделить под них требуемое количество памяти.

Затем из файла **decomp_mg.inp** загружаются параметры для процессорной решетки, необходимые для декомпозиции области, а также ряд параметров для организации вывода (параметры прореживания пишущих процессов *n1mg, n2mg, n3mg* и ключ резервного копирования данных *key_backup*, подробнее см. разделе [Операции вывода и выходные файлы](#) и таблица 1.6 в разделе [Приложение 1. Форматы входных файлов](#)).

Первым зачитывается файл **_geo.inp**. Он содержит входные данные о начальной геометрии: размеры вычислительной области, описание расчетной сетки, описание геометрических примитивов для «раскраски» расчетной области различными материалами. Геометрические примитивы используются для инициализации карты материалов расчетной области только в случае задания ключа *key_fictgeom* равным 1 (определяется в файле *_key.inp*).

Также в файле **_geo.inp** задаются параметры для выдачи: координаты точек мониторинга, карта вычисляемых потоков и информация о том, интегральные характеристики каких материалов будут записаны в файл-history.

Второй зачитываемый файл - **_key.inp**. Он содержит параметр-ключ управляющий рестартом (в этом случае для задачи необходим файл рестарта **uvpt.cnv** с предыдущего расчета), временные параметры вычислительного процесса: шаг по времени с которым

будет идти расчет, время начало расчета в секундах, количество шагов по времени, шаг записи результатов в файл, шаг вычисления history, шаг выдачи информации о состоянии задачи на экран, а также схемные параметры-ключи для вычислительных алгоритмов и некоторые необходимые константы.

Третьим зачитывается файл **_prop.inp**. Он содержит данные по свойствам материалов, начальные условия задачи и параметры обезразмеривания. Параметры обезразмеривания настоятельно рекомендуется брать единичными (а для температуры равным 0). В параллельной версии вычислительного модуля чтением занимается нулевой процесс с дальнейшей рассылкой параметров на остальные процессы.

Далее зачитываются данные для сбора статистики из файла **_out.inp**. В начале файла находятся два параметра, отвечающие за инициализацию граничного условия на входе для третьей компоненты скорости (вдоль оси Z). Первый - параметр-ключ, отвечающий за способ инициализации граничного условия (0- обычным способом, константой на всей входной плоскости, 1- использовать градиент от нуля до заданного значения вблизи фиктивных областей и границ прилипания). Второй – расстояние, на котором и задан градиент. Этот механизм сейчас не используется.

Затем задается количество блоков (индексных нарезок), количество шагов сохраняемых в памяти программы для одномоментной записи в файл (общее число для всех блоков) и для каждого блока определяются ключ рестарта (вновь создаваемый файл или продолжение записи), интервал времени записи, скважность записи, индексный диапазон по I,J,K.

Пятым зачитывается файл **_pumps.inp**. Файл содержит параметры, позволяющие задавать параметры внутреннего изменения объема, так называемые насосы.

Шестым зачитывается файл **_dstat.inp**. Файл содержит переменные для так называемой «динамической статистики»: ключ рестарта, время начала и конца сбора, дискретность выдачи. В процессе счета вычисляются средние по времени значения и среднеквадратичные отклонения (RMS) температуры, давления, компонент скорости. Вычисления осуществляются во всех узлах расчетной области, результаты представляют собой трехмерные массивы размерности (n1,n2,n3), выдаваемые в файлы **3a.cnv**(средние значения) и **3r.cnv** (RMS). Также в файле **_dstat.inp** задается информация по сбору информации по сечениям с задаваемыми материалами. Кроме трех материалов, задаваемых пользователем, для каждого сечения всегда вычисляются данные для

совокупности меток 1 и 2 («жидкость»). Полученные данные записываются в выходной файл **h_sect.dat** (максимальные, минимальные, средние температуры по сечению, средние значения RMS температуры по сечениям и интеграл сечения).

Вышеперечисленные файлы данных зачитываются всегда, при отсутствии их будет возникать ошибка. После чтения данных нулевым процессом, осуществляется их рассылка на остальные процессы.

Дальнейший ход ввода данных зависит от выбранного значения ключа *key_fictgeom* в файле **_key.inp**. Если значение равно 2, дополнительно зачитываются файлы **mapf3d.inb**, **bci.inp**, **stlinp.stl**.

Файл **stlinp.stl** не является обязательным, в его отсутствии теплопередача на границе материалов будет вычисляться более грубо, как если бы граница проходила по середине ребра расчетной сетки. Файл **mapf3d.inb** содержит карту материалов расчетной области. В случае использования файла материалов, геометрические примитивы в файле **_geo.inp** игнорируются. Файл **bci.inp** содержит граничные условия на шести гранях расчетной области. Граничные условия определены для каждого значения карты на рассматриваемой грани. При этом граничные условия из файла **_geo.inp** игнорируются. Из зачитанной карты материалов вычленяется карта насосов, а сама карта материалов в узлах насосов редактируется – заменяется на материал «жидкой» фазы (на значение 2).

Если значение ключа *key_fictgeom* равно 1, то вышеперечисленные данные модулю не требуются, геометрия и граничные условия уже зачитаны из **_geo.inp** файла. Подробнее об этом в следующем разделе.

Зачитанные из файлов данные проходят через блок нормировки CONV3D/V2.3. На данный момент следует проводить расчеты в размерном виде (СИ или СГС).

Запись файлов статистики (ou0XX.cnv) отличается от вывода остальных файлов. Для данных файлов поддерживается накопление информации с нескольких моментов времени и вывод их в файл за один раз. Кол-во моментов для одного вывода задается в файле **_out.inp**.

Блок декомпозиции расчетной области

Вычислительный модуль CONV3D/V2.3 позволяет проводить декомпозицию расчетной области в любом из трех направлений. Параметры (NPX, NPY, NPZ),

определяющие разбиение расчетной области, находятся в файле `decomp_mg.inp`, и соответствуют количеству частей, на которые будет делиться расчетная область в каждом из трех направлений. В зависимости от выбора ключа для вычисления давления на данные параметры налагаются различные условия.

а) При вычислении давления с помощью солвера MG (ключи для давления 1 или 2) NPX, NPY и NPZ должны быть степенью числа 2.

б) При вычислении давления с помощью солвера MG на грубой сетке с последующей интерполяцией на узлы исходной (ключ давления 3) NPX должен быть равен NPY и быть степенью 2, NPZ=1 (В данный момент данный солвер не доступен для использования).

в) При вычислении давления с помощью солвера SMITH2D (ключи для давления 4 или 5) NPX и NPY должны быть степенями 2 и NPZ=1.

г) При вычислении давления с помощью солвера SMITH3D (ключи для давления 6 или 7) NPX, NPY и NPZ должны быть степенью числа 2.

При любом выборе ключа для давления **общее число процессов, на которых запускается задача, должно равняться произведению $NPX \cdot NPY \cdot NPZ$.**

Дополнительно рассмотрим механизм определения процессов осуществляющих вывод. Выводящие процессы определяются при помощи параметрами `n1mg`, `n2mg`, `n3mg` расположенными в файле `decomp_mg.inp`. Каждый из данных параметров указывает во сколько раз уменьшится число выводящих процессов по сравнению с расчетными в каждом из направлений. Области вывода на каждом выводящем процессе определяются также как и для расчетных заменой в декомпозиции NPX, NPY, NPZ на $NPX/n1mg$, $NPY/n2mg$, $NPZ/n3mg$. При $n1mg=n2mg=n3mg=1$ в выводе участвуют все расчетные процессы, при $n1mg=NPX$, $n2mg=NPY$, $n3mg=NPZ$ вывод производит процесс с рангом 0. На данные параметры наложены следующие ограничения: они должны быть степенями числа 2, и не могут быть больше соответственно чисел NPX, NPY, NPZ определяющих процессорное разбиение. В программе осуществляется проверка данных параметров. Если числа не являются степенями 2, то им присваивается значение 1, если они больше NPX, NPY, NPZ и являются степенью 2, то им присваиваются значения NPX, NPY, NPZ. К примеру, NPX=2, NPY=4, NPZ=8; $n1mg=1$, $n2mg=3$, $n3mg=16$, тогда, после проверки

$n1mg=1$, $n2mg=1$, $n3mg=8$. Также числа $n1mg$, $n2mg$, $n3mg$ не могут быть больше 64, а их произведение ограничено 128.

Чтение входных файлов осуществляется аналогично выводу: исходя из заданного количества процессов для чтения\записи по каждому направлению в файле `decomp_mg.inp`)

Операция вывода и выходные файлы

Информация о ходе работы программы выводится в консоли, где производился запуск задачи (для Windows x32 ОС), либо в логе запуска `log.txt`.

К выходным файлам истории относятся:

- **h.dat** – файл основных параметров задачи (максимальная и средняя температуры, шаг по времени, тепловые потоки на границах расчетной области)

- **h_fl.dat** – файл с временной зависимостью тепловых потоков между различными материалами (определяются во входном файле `_geo.inp`)

- **h_mp.dat** – файл с температурными зависимостями в точках мониторинга (определяются во входном файле `_geo.inp`)

- **h_av.dat** - файл с зависимостями средних температур в тех же самых точках мониторинга

- **h_rms.dat** - файл с зависимостями RMS температур в тех же самых точках мониторинга.

В ходе расчета еще создается файл сечений **h_sect.dat**, в который пишутся максимальные, минимальные, средние температуры по сечению, средние значения RMS температуры по сечениям и интеграл сечения.

Также в результате расчета создаются бинарные файлы, содержащие информацию о расчетной области задачи и трехмерных массива данных:

- **3d.cnv** — значения температуры (Temperature), компонент скорости (U-Velocity – по координате X, V-Velocity – по координате Y, W-Velocity – по координате Z), давления (Pressure), индексов маркирования области (Map) в последний момент времени расчета;

- **3a.cnv** – средние по времени значения указанных величин;

- **3r.cnv** – RMS (среднеквадратичные отклонения) указанных величин;
- **3p.cnv** – значения физических свойств материалов в последний момент времени расчета.

Также в результате расчета создается файл **convert.inp**, который содержит настройки для программы-конвертера. Часть этих настроек можно менять. Детальное описание представлено в приложении 3

Далее необходимо запустить конвертер CONVerter. Его можно запустить в однопроцессорном режиме путем прямого запуска соответствующего системе исполняемого файла, либо в параллельном (для более детальной информации см. документацию к CONVerter). В результате работы конвертера (в соответствии с настройками в файле **convert.inp**) указанные выше бинарные файлы в формате *.cnv преобразуются в форматы *.plt (для открытия в Tecplot) или *.vtr (для открытия в ParaView). При настройках **convert.inp** по умолчанию файлы *.cnv преобразуются в формат Tecplot типа *.plt.

Приложение 1. Форматы входных файлов

Таблица 1.1 - Входные параметры CONV3D – файл `_geo.inp`

ИМЯ ФАЙЛА	ИМЯ ПЕРЕМЕННОЙ	СИНОНИМ В ПРОГРАММЕ	ПОЯСНЕНИЕ
<code>_geo.inp</code>			
\$DEF SIZE OF REGION: X1L X1R X2L X2R X3L X3R			
	X1L	X1l	координата начала вычислительной области по направлению X1
	X1R	X1r	координата конца вычислительной области по направлению X1
	X2L	X2l	координата начала вычислительной области по направлению X2
	X2R	X2r	координата конца вычислительной области по направлению X2
	X3L	X3l	координата начала вычислительной области по направлению X3
\$DEF DIMENSIONS OF GRID:N1 N2 N3			
	N1	N1	Число узлов сетки по направлению X1
	N2	N2	Число узлов сетки по направлению X2
	N3	N3	Число узлов сетки по направлению X3
\$ DEF NUMBER OF GRIDS X1:			
	NG1	ng1	Количество сеточных подинтервалов по первому направлению
\$ DEF #1 X1: Кол-во блоков в области. Если блоков больше, чем один, то стек по первому направлению повторяется столько раз, сколько блоков			

\$ DEF X1L x1R			
	X1LM	x1lm	Левая координата первой подсетки вдоль X1
	X1RM	x1rm	Правая координата первой подсетки вдоль X1
	N1M	n1m	Размерность первой подсетки вдоль X1
\$DEF TYPE OF GRID X1: TYPE (0-uniform,1-compleft,...)			
	TYPE	Justx1m	Тип первой подсетки вдоль X1: 0- равномерная; 1- неравномерная, с максимальным сеточным сгущением около начала региона; 2- неравномерная, с максимальным сеточным сгущением около начала и конца региона; 3- неравномерная, с максимальным сеточным сгущением около конца региона; 4 –сетка задаваемая пользователем
\$DEF HMIN OF GRID X1 (IF TYPE= 1-3):			
	HMIN	x1minm	Минимальный шаг по сетке вдоль направления X1 (только Justx1=1,2,3) Во всех остальных случаях комментируется символом #
\$DEF GRID X1 (IF TYPE= 4):			
		x1fm	Сеточные узлы подсетки, задаваемые пользователем вдоль X1 (только Justx1=4) Во всех остальных случаях комментируется символом #

\$ DEF NUMBER OF GRIDS X2:

	NG2	ng2	Количество сеточных подинтервалов по второму направлению
\$ DEF #1 X2: Кол-во блоков в области. Если блоков больше, чем один, то стек по второму направлению повторяется столько раз, сколько блоков			
\$ DEF X2L x2R			
	X2LM	x2lm	Левая координата первой подсетки вдоль X2
	X2RM	x2rm	Правая координата первой подсетки вдоль X2
	N2M	n2m	Размерность первой подсетки вдоль X2
\$DEF TYPE OF GRID X2: TYPE (0-uniform,1-compleft,...)			
	TYPE	Justx2m	Тип первой подсетки вдоль X2: 0- равномерная; 1- неравномерная, с максимальным сеточным сгущением около начала региона; 2- неравномерная, с максимальным сеточным сгущением около начала и конца региона; 3- неравномерная, с максимальным сеточным сгущением около конца региона; 4 –сетка, задаваемая пользователем.
\$DEF HMIN OF GRID X2 (IF TYPE= 1-3):			
	HMIN	x2minm	Минимальный шаг по сетке вдоль направления X2 (только Justx2=1,2,3) Во всех остальных случаях комментируется символом #
\$DEF GRID X2 (IF TYPE= 4):			
		x2fm	Сеточные узлы подсетки, задаваемые пользователем вдоль X2 (только Justx1=4)

			Во всех остальных случаях комментируется символом #
\$ DEF NUMBER OF GRIDS X3:			
	NG3	ng3	Количество сеточных подинтервалов по третьему направлению
\$ DEF #1 X3: Кол-во блоков в области. Если блоков больше, чем один, то стек по третьему направлению повторяется столько раз, сколько блоков			
\$ DEF X3L x3R			
	X3LM	x3lm	Левая координата первой подсетки вдоль X3
	X3RM	x3rm	Правая координата первой подсетки вдоль X3
	N3M	n3m	Размерность первой подсетки вдоль X3
\$DEF TYPE OF GRID X3: TYPE (0-uniform,1-compleft,...)			
	TYPE	Justx3m	Тип первой подсетки вдоль X3: 0- равномерная; 1- неравномерная, с максимальным сеточным сгущением около начала региона; 2- неравномерная, с максимальным сеточным сгущением около начала и конца региона; 3- неравномерная, с максимальным сеточным сгущением около конца региона; 4 –сетка задаваемая пользователем.
\$DEF HMIN OF GRID X3 (IF TYPE= 1-3):			
	HMIN	x3minm	Минимальный шаг по сетке вдоль направления X3 (только Justx3=1,2,3) Во всех остальных случаях комментируется символом #
\$DEF GRID X3 (IF TYPE= 4):			

		x3fm	Сеточные узлы подсетки, задаваемые пользователем вдоль X3 (только Justx3=4) Во всех остальных случаях комментируется символом #
\$DEF NUMBER OF OBJECTS FOR MAP:			
	N_grob		Число геометрических объектов для «раскраски» карты материалов (не более 35)
\$DEF OBJECTS FOR MAP:			
\$TYPE 1 MAP X1L X1R X2L X2R FI1 FI2 X3L X3R			
Размеры геометрических объектов, если тип карты =1, т.е. прямоугольник			
	X1L		координата начала примитива на декартовой оси X1
	X1R		координата конца примитива на декартовой оси X1
	X2L		координата начала примитива на декартовой оси X2
	X2L		координата начала примитива на декартовой оси X2
	X3R		координата конца примитива на декартовой оси X3
	X3R		координата конца примитива на декартовой оси X3
\$TYPE 2 MAP X1C X2C RX1 RX2 FI1 FI2 X3L X3R			
Размеры геометрических объектов, если тип карты =2, т.е. эллипс			
	X1C		координата центра эллипса на декартовой оси X1
	X2C		координата центра эллипса на декартовой оси X2
	RX1		радиус эллипса вдоль декартовой оси X1
	RX2		радиус эллипса вдоль декартовой оси X2

	FI1		Начальный угол дуги эллипса
	FI2		Конечный угол дуги эллипса
	X3R		координата конца примитива на декартовой оси X3
	X3R		координата конца примитива на декартовой оси X3
\$DEF PARAMETERS FOR OUTPUT			
\$DEF NUMBER MONITORING POINTS: NUM_MP			
	NUM_MP		Количество мониторинговых точек (не более 50)
\$DEF (X,Y,Z) COORDINATE FOR MONITORING POINTS: POINTS			
	POINTS		Координаты мониторинговых точек 1-я строка X 2-я строка Y 3-я строка Z
\$DEF NUMBER MAP_FLUXES: N1_MFLUX			
	N1_MFLUX		Количество вычисляемых потоков между материалами (не более 10)
\$DEF (MAP1,MAP2,DIR) FOR MAP_FLUXES: MFLUX			
	MFLUX		Карта потоков (MAP1,MAP2,DIR)
\$DEF NUMBER MAP_HIST: N_MHIST			
	N_MHIST		Число материалов, чьи интегральные характеристики будут записаны в файл - history (не более 4)
\$DEF MAP_HISTS :			
	MAP_HIST		Строка с указанием номеров материалов, чьи интегральные характеристики будут записаны в файл - history

\$DEF BOUNDARY CONDITION: $k d(T)/dn = ALF*(T-T_0) + G$

\$ ROW 1 - ALF; ROW 2 - T_0; ROW 3 - G

\$ <T> LEFT RIGHT BOTTOM TOP

Задание граничных условий в виде матрицы 3x4,

где строки - коэффициенты выражения

$$kd(Y)/dn = \alpha(Y - Y_0) + G,$$

т.е.

1-я строка - α , 2-я строка - Y_0 и 3-я строка - G ,

столбцы – границы по каждому из 2-х направлений

	LEFT		На левой границе $i=1$
	RIGHT		На правой границе $i=n1$
	BOTTOM		На нижней границе $j=1$
	TOP		На верхней границе $j=n2$
	NEAR		На ближней границе $k=1$
	FAR		На дальней границе $k=n3$

\$ <U> LEFT RIGHT BOTTOM TOP

\$ <V> LEFT RIGHT BOTTOM TOP

\$ <W> LEFT RIGHT BOTTOM TOP

\$ <P> LEFT RIGHT BOTTOM TOP

Таблица 1.2 - Входные параметры CONV3D – файл _key.inp

ИМЯ ФАЙЛА	ИМЯ ПЕРЕМЕННОЙ	СИНОНИМ В ПРОГРАММЕ	ПОЯСНЕНИЕ
_key.inp			
\$ DEF TIME STEP: TAU (TAU<0 => auto by CUR_BASE_TAU)			
	TAU	Tau	Шаг по времени в секундах
\$ DEF INIT TIME: TIMEINIT			
	TIMEINIT	timeinit	Время начала расчета в секундах
\$ DEF RESTART: ICONT			
	ICONT	icont	Ключ рестарта 0- запускается с начала 1- рестарт с предыдущего состояния
\$ DEF: ITMAX NWRECL NHRECL NWRINFO Ln1 Ln2 Ln3			
	ITMAX	itmax	Количество шагов по времени
	NWRECL	nwrecl	Шаг записи вычисления результатов в файл
	NHRECL	nhrecl	Шаг вычисления history
	NWRINFO	iwrinfo	Шаг выдачи информации о состоянии задачи на экран
	LN1	ln1	Дискретность записи по первому направлению(I). 1- записывать каждый узел, 2- каждый второй, 3- каждый третий и т.д.
	LN2	ln2	Дискретность записи по второму направлению(J). 1- записывать каждый узел, 2- каждый второй, 3- каждый третий и т.д.
	LN3	ln3	Дискретность записи по третьему направлению(K). 1- записывать каждый узел, 2- каждый второй, 3- каждый третий и т.д.

\$ DEF TIME MOMENTS FOR OUTPUT:			
		time_outp	Строка временных моментов в которые будет осуществляться запись вычисленных результатов в файл. Число моментов сброса с отрицательным знаком в этом случае указывается в параметре NHRECL.
\$ DEF: GRAVITY BETA			
	GRAVITY	grav_c	Ускорение силы тяжести в м/с ²
	BETA	beta_c	Коэффициент термического расширения в 1/К
\$ DEF: TEMHRD			
	TEMHRD	temhrd	Температура на границе твердой и жидкой фаз в К
\$ DEF NUMBER TEMPERATURE INTERVALS FOR CEPS: NTE			
	NTE	n1_ceps_vs_te	Число характерных значений температуры для ε - параметра МФО с продолжением по младшим коэффициентам (не более 20)
\$ DEF TEMPERATURE AND CEPS: TECEPS			
	TECESP	ceps_vs_te	1-я строка - значение температуры 2-я строка - значение ε
\$ DEF ALFA: ALFVIS ALFCUP			
	ALFVIS	alfvis	Параметр для коррекции вязкости по ротору скорости.
	ALFCUP	alfcup	Параметр для коррекции теплопроводности по ротору скорости.
\$ DEF SCHEME PARAMETERS:			
\$ KEY_DRLOS (0- D-R, 1- LOS)			
	KEY_DRLOS	Key_los	Ключ для расщепления в блоке гидродинамики:

			0- Дуглас-Рекфорд 1- Локально-одномерное
\$ KEY_CONV for Te (1-upwind, 2-skew, 3-nir, 4-upwindm)			
		key_convt	Ключ выбора схемы переноса для энтальпии: 1 – направленные разности 2 – кососимметричные разности 3 – нировская схема 4 – направленные разности для недивергентного поля скоростей
\$ KEY_DIFF for Te (0-implicit, 1-explicit)			
		key_dift	Ключ выбора солвера для диффузии температуры. 0 – MG-солвер, 1- явная схема, 2 - LIM солвер.
\$ KEY_CONV for Vel (1-upwind, 2-skew, 3-nir, 4-Qnir)			
		key_convu qnir	Ключ выбора схемы переноса для компонент скорости: 1 – направленные разности 2 – кососимметричная 3 – нировская 4 – схема с весами skew+nir 4 – схема с весами upwind+nir Значение весового параметра при выборе схемы 4(указываетс вес схемы nir)
\$ KEY_DIFF for Vel (0-implicit, 1-explicit)			
		key_difu	Ключ выбора солвера для компонент скорости: 1- явная схема, 2 - LIM солвер.
\$ KEY_FILTR(diskretnost) (0- no filtr)			
	KEY_FILTR	key_filtr	Ключ для фильтрации компонент скорости – не используется
\$ KEY_Curant (0- by volume, 1 - as h1,h2)			

	KEY_CURANT	key_curant	Ключ для задания способа вычисления числа Куранта: 0- объемный 1- линейный
\$ KEY_FICTGEOM (1- default, 2 - vs MAPF.INP)			
	KEY_FICTGEOM	key_fictgeom	Ключ для задания способа определения фиктивной области: 1-по умолчанию, т.е. фиктивные области и граничные условия задаются через _geo.inp файл; 2-задаются в зависимости от mapf3d.inp и файла с граничными условиями bc.inp;
\$ DEF KEY FOR POIS: (1-MG,2-MGiter,3-MGexp,4-SMITH, 5-SMITHiter) ITER			
	KEY_FFT_F	key_fft_f	Ключ выбора солвера для урвнения давления: 1- MG солвер 2- итерационный вариант MG солвера 3- MG солвер с прореживанием (разрабатывается) 4- SMITH2 солвер 5- итерационный вариант SMITH2 солвера 6- SMITH3 солвер 7- итерационный вариант SMITH3 солвера Обычный алгоритм используется для расчета задач без использования фиктивных областей, итерационный – применяется для задач с фиктивными областями
\$ DEF CURANT NUMBER FOR AUTO TAU: CUR_BASE_TAU CUR_CONV_TAU			
	CUR_BASE_TAU	cur_base_tau	число Куранта для вычисления автоматического шага по времени. Работает, когда TAU<0
	CUR_CONV_TAU	cur_conv_tau	Ограничивающее число Куранта для конвективного переноса

\$ DEF EPS FOR BANDS: epso_te epsa_te epso_v epsa_v ... epsa_p			
	epso_te	epso_te	Относительная точность вычислений для температуры (в случае MG солвера)
	epsa_te	epsa_te	Абсолютная точность вычислений ... для температуры (в случае MG солвера)
	epso_v	epso_v	Относительная точность вычислений для скорости (не используется)
	epsa_v	epsa_v	Абсолютная точность вычислений для скорости (не используется)
	epso_p	epso_p	Относительная точность вычислений для давления (в случае MG солвера)
	epsa_p	epsa_p	Абсолютная точность вычислений для давления (в случае MG солвера)
\$ DEF VECTOR (Ax Ay Az) for Ra/Pr*dT direction			
	(Ax Ay Az)	gvector(3)	Задание координат вектора всплытия . Следует учитывать при задании силы тяжести. При необходимости, в случае не совпадения действия вектора силы тяжести с ориентацией оси – следует задать знак минус
\$ DEF FILTR (U,V)			
\$ 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15			
	FILTR (U,V)	filtr	Фильтр по скоростям – не используется
\$ DEF NUMBER Radius INTERVALS FOR SOURCE			
			В данной версии не используется
\$ DEF NUMBER Zadius INTERVALS FOR SOURCE			
			Задание количества точек зависимости распределения температуры вдоль оси Z
\$ DEF Zadius&Tem: TE_Z			

			Задание распределения температуры вдоль оси Z
\$ DEF parameters of turbulent model: Key(0:1) C1, C2, H1, H2, D			
	Key(0:1)		Ключ для проведения расчетов с моделью турбулентности: 0-не используется; 1-используется
	C1		Параметры модели турбулентности
	C2		
	H1		
	H2		
	D		

Таблица 1.3 - Входные параметры CONV3D – файл _prop.inp

ИМЯ ФАЙЛА	ИМЯ ПЕРЕМЕННОЙ	СИНОНИМ В ПРОГРАММЕ	ПОЯСНЕНИЕ
_prop.inp			
\$ DEF NUMBER OF MAIN MATERIALS : NMAT			
	NMAT	n_mat	Число материалов (не более 20)
\$ DEF INITIAL TEMPERATURE FOR MATERIALS: STM			
	STM	teminitm	Строка начальных значений температуры для каждого материала
\$ KEY INNER BOUNDARY CONDITION FOR MATERIALS:			
	keyteminitm	keyteminitm	Ключевой параметр, определяющий является ли материал внутренним граничным условием. Если данный параметр равен 1, то для материала ставится внутреннее граничное условие первого рода с температурой, равной начальной. При 0 значении параметра внутренне граничное условие не активируется и температура является просто начальной.
\$ DEF NUMBER TIME INTERVALS FOR SOURCE: NSHMINTR			
	NSHMINTR	n_timesor	Количество характерных моментов времени для источника, max=20
\$ DEF TIME INTERVALS: TSHMINTR			
	TSHMINTR	timesorm	Характерные моменты времени (не более 20)
\$ DEF SOURCE OF HEAT FOR <NMAT> MATERIALS: SHM			

	SHM	sorm	Интегральное тепловыделение в материалах в характерные моменты времени – матрица размера n_matx n_timesor
\$ DEF NUMBER PROPERTIES: NPROP			
	NPROP	n_prop	Число свойств материалов const=4
\$ DEF FOR 1... MATERIAL PROPERTIES VS TEMPERATURE			
\$ DEF NUMBER TEMPERATURE INTERVALS: NTEINTR			
	NTEINTR	n_temprop	Количество характерных значений температуры, для которых известны свойства данного материала (не более 23)
\$ DEF TEMPERATURE INTERVALS: TEINTR			
	TEINTR	temprop	Характерные значения температуры
\$ DEF : KAPPA CV RHO VIS ---<NAME MATERIAL>---			
	KAPPA	prop	Теплопроводность, Вт/(мК)
	CV		Теплоемкость, Дж/(кгК)
	RHO		Плотность, кг/м ³
	VIS		Кинематическая вязкость, м ² /с
\$ DEF NUMBER NORMIR COEFFICIENTS: NNORM			
	NNORM	n_norm	Число коэффициентов обезразмеривания const=7
\$DEF NORM COEF C_NORM: KAPPA0 CV0 RHO0 VIS0 SOURCE0 R0 TEM0			
	KAPPA0	c_norm	Для теплопроводности, Вт/(мК)
	CV0		Для теплоемкости, Дж/(кгК)
	RHO0		Для плотности, кг/м ³
	VIS0		Для вязкости, м ² /с
	SOURCE0		Для источника тепловыделения, Вт/м ³
	R0		Для координаты, м

	ТЕМО		Для температуры, К
--	------	--	--------------------

Таблица 1.4 - Входные параметры CONV3D – файл _out.inp

ИМЯ ФАЙЛА	ИМЯ ПЕРЕМЕННОЙ	СИНОНИМ В ПРОГРАММЕ	ПОЯСНЕНИЕ
_out.inp			
\$ DEF KEY for W boundary condition(0-standart, 1- external) D0			
	KEY_BCW	key_bcw	В данной версии не используется
	D0BCW	d0bcw	В данной версии не используется
\$ DEF NUMBER of Blocks			
	N_OUT	n_out	Количество блоков(индексных нарезок). (не более 51)
\$ DEF NUMBER of iterations for 1 output			
	N_STAT	N_stat	Размер буфера (количество моментов сброса данных на диск, накапливаемых в памяти)
\$ DEF FOR 1 Block			
\$ Restart key for write to file(0-new file, 1-restart writing)			
	KEYFILEOUT	keyfileout	Ключ рестарта- вновь создаваемый файл или продолжение записи
\$ Tn Tk			
	TIMEOUT	timeout	Интервал времени записи
\$ iter			
	IDISKROUT	idiskrout	Скважность записи
\$ In Ik			
	INDOUT	indout	индексное пространство по I
\$ Jn Jk			

	JNDOUT	jndout	индексное пространство по J
\$ Kn Kk			
	KNDOUT	kndout	индексное пространство по K
<i>Далее так же, как для первого блока</i>			

Таблица 1.5 - Входные параметры CONV3D – файл _pumps.inp

ИМЯ ФАЙЛА	ИМЯ ПЕРЕМЕННОЙ	СИНОНИМ В ПРОГРАММЕ	ПОЯСНЕНИЕ
_pumps.inp			
\$ DEF: Количество насосов			
	N_nasos	N_nasos	Количество насосов (не более 999).
\$ DEF: Постоянные параметры насосов (построчно- Номер, Ключ, Искусственная вязкость)			
	Num	param_nasos (1)	Номер(метка) насоса. Номера насосов начинаются с 1001 и идут строго подряд: 1001, 1002,...,1999.
	key	param_nasos (2)	Ключевой параметр, описывающий способ задания температуры насоса. 0 – Температура насоса задается внутренним граничным условием согласно табличной зависимости от времени. 1 – Температура насоса не инициализируется.
	Vis	param_nasos (3)	Искусственная добавочная вязкость в насосе. Входит аддитивно в молекулярную вязкость.
\$ DEF: Количество моментов времени для расхода насосов			
	n_rashod_nasos_time	n_rashod_nasos_time	Количество моментов времени, для которых будет задан расход насосов. Максимальное количество

			моментов времени равно 30.
\$ DEF: Расход насосов (м³/сек) в зависимости от времени (сек)			
\$ DEF: Время 1001 1002 1003 1004 1005 1006			
	rashod_nasos_time , rashod_nasos	rashod_nasos_time, rashod_nasos	Первый столбец – время, второй и последующие – расход для каждого насоса. В случае, если задача построена в единицах измерения Си, расход задается в m ³ /s
DEF: Количество моментов времени для температуры насосов			
	n_temp_nasos_time	n_temp_nasos_time	Количество моментов времени, для которых будет задана температура насосов. Максимальное количество моментов времени равно 30.
\$ DEF: Температура насосов (К) в зависимости от времени (сек)			
\$ DEF: Время 1001 1002 1003 1004 1005			
	temp_nasos_time, temp_nasos	temp_nasos_time, temp_nasos	Первый столбец – время, второй и последующие – температура для каждого насоса

Таблица 1.6 - Входные параметры CONV3D – файл decomp_mg.inp

ИМЯ ФАЙЛА	ИМЯ ПЕРЕМЕННОЙ	СИНОНИМ В ПРОГРАММЕ	ПОЯСНЕНИЕ
decomp_mg.inp			
\$ DEF NUMBER Decomposition Blocks (NPX,NPY,NPZ)			
	NPX,NPY,NPZ	NPX,NPY,NPZ	параметры процессорной решетки по трем направлениям (необходимы для декомпозиции области)
\$ Coarse solver parameters m1 m2 m3			
	M1 M2 M3	m1b, m2b, m3b	коэффициенты прореживания для солвера с прореживанием
\$ Coarse solver Iterations			
	ITERB	iterb	Не используется (параметр количества итераций для солвера с прореживанием)
\$ Domain decomposition for output (NPXo,NPYo,NPZo)			
	NPXo,NPYo,NPZo	NPXo,NPYo,NPZo	количество пишущих процессов по каждому направлению. Для случая записи всеми процессами предусмотрено значение по умолчанию, равное -1. Т.е. если все параметры равны -1, то пишут все расчетные процессы, а если равны 1, то пишет только один.
\$ Key for backup datafiles (only for Lomonosov, 0/1 - no/yes backup)			

	key_backup	key_backup	<p>Ключ резервного копирования записанных данных. 0 – резервное копирование выключено, 1 – резервное копирование включено. Резервное копирование включает в себя все входные и выходные файлы задачи и осуществляется в подпапку backup. Необходимо это бывает на кластерных системах с нестабильной системой записи на большом количестве процессов (в частности, суперкомпьютер «Ломоносов»)</p>
--	------------	------------	--

Таблица 1.7 - Входные параметры CONV3D – файл _dstat.inp

ИМЯ ФАЙЛА	ИМЯ ПЕРЕМЕННОЙ	СИНОНИМ В ПРОГРАММЕ	ПОЯСНЕНИЕ
_dstat.inp			
\$ DEF PARAMETERS FOR DYNAMIC STATISTIC DATA (av:3a.cnv, rms:3r.cnv)			
	KEY_DSTAT	key_dstat	Параметр начала\продолжения накопления «динамической» статистики (0 – начатать заново, 1- продолжить)
	TIME_DSTAT	time_dstat(1)	Начальное время накопления «динамической» статистики
	TIME_DSTAT	time_dstat(2)	Конечное время накопления «динамической» статистики
	IDISKR_DSTAT	idiskr_dstat	Скважность (дискретность) накопления «динамической» статистики
\$ Number sections (k-index)			
	num_sect	num_sect	Количество сечений по третьему направлению (индексу К). Максимальное значение равно 3.
\$ Section1 Section2 Section3			
	ksect	ksect	Номера сечений по третьему направлению (индексу К). Максимальное количество равно 3.
\$ Number Map values			

	num_mapsect	num_mapsect	Количество меток материалов для сечений. Максимальное значение равно 3.
\$ Map1 Map2 Map3			
	mapsect	mapsect	Список меток материалов для сечений. Максимальное количество равно 3.

Приложение 2. Постановка тестовой задачи

1. Введение

Эксперимент по термоконвекции в вытянутой по вертикали замкнутой области проведен P.L. Betts и I.H. Vokhari [1] и является одним из немногих представленных в литературе экспериментов, который можно взять за основу как надежный и качественный бенчмарк, признанный вычислителями во всем мире (например, результаты данного эксперимента приняты за основу при верификации новейших вычислительных методик в европейском сообществе инженеров и вычислителей ERCOFTAC [2], занимающихся моделированием турбулентных течений и процессов горения). С помощью этого теста могут быть протестированы вычислительные программные средства, претендующие на то, чтобы стать универсальным инструментом инженера-теплофизика при расчете термоконвективных задач.

2. Описание эксперимента

Эксперимент проведен на установке, схематично показанной на рисунке 1 и подробно описанной в [1, 3]. Внутренние размеры полости, имеющей форму параллелепипеда, составляют 2,18 м по высоте (H), 0,076 м по ширине (расстояние между горячей и холодной стенками, W) и 0,52 м в глубину (D).

Горячая и холодная стенки изнутри покрыты тонким слоем алюминия, каждый слой омывается восходящим потоком воды, температура которой поддерживается постоянной с точностью $\pm 0,05^\circ\text{C}$. Таким образом поддерживается изотермичность

активных стенок. Адиабатически изолированные стенки представляют собой два толстых слоя натурального каучука толщиной 2,5 см, между которыми проложен контрольный слой из 35 термопар. Снаружи все стенки коробки покрыты 5-сантиметровым слоем полистирола (синтетический теплоизоляционный материал). Горячая стенка дополнительно теплоизолирована 5-сантиметровой деревянной вставкой. Полость коробки заполнена воздухом при нормальном давлении.

Температура холодной стенки поддерживалась на уровне $15,1^{\circ}\text{C}$, для горячей стенки было выбрано значение: $34,7^{\circ}\text{C}$.

Таким образом, имеем свободную конвекцию воздуха в замкнутой области в форме параллелепипеда, в котором разность температур между левой и правой вертикальными стенками поддерживается постоянной, остальные стенки — адиабатически изолированы. Стенки параллелепипеда непроницаемы, скорость воздуха на границах области равна нулю (условие прилипания). В расчетах для воздуха могут быть приняты следующие параметры (см. таблицу 1).

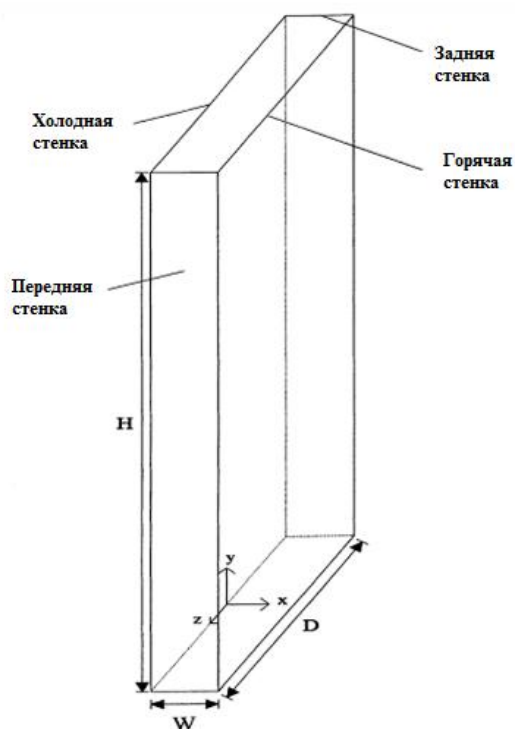


Рисунок 1 – Экспериментальная установка, схематическая диаграмма

Таблица 1 – Физические характеристики воздуха при разных температурах

Температура, °С	15,1	34,7
Теплопроводность, Вт/(м·К)	0,0253	0,0268
Коэффициент теплового расширения β , К ⁻¹	0,00347	0,00325
Кинематическая вязкость ν , м ² /с	$1,46 \cdot 10^{-5}$	$1,65 \cdot 10^{-5}$
Число Pr	0,704	0,700
C_p , кДж/(кг·К)	1,005	1,005

Эксперимент проведен при перепаде температур на стенках: 19,6°С. Это соответствует числу Рэля: $0,86 \cdot 10^6$, рассчитанному по расстоянию между активными стенками. Измерения температуры внутри области проводились хромель-алюмелевыми (для справки: хромель — 90% Cr, 10% Ni; алюмель — 95% Ni, остальное Al, Si, Mn) термопарами диаметром порядка 75 мкм со временем отклика от 0,065 до 0,07 секунд. Измерения скорости выполнены с помощью однокомпонентного лазерного доплеровского измерителя.

Литература

1. Bokhari, I.H., 1996. Turbulent natural convection in a tall cavity. Ph.D. Thesis, UMIST.
2. ERCOFTAC, European Research Community On Flow, Turbulence And Combustion. <http://www.ercofac.org/>.
3. Betts, P.L. and I.H. Bokhari, Experiments on turbulent natural convection in an enclosed tall cavity. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2000. 21: p. 675-683.

Приложение 3. Описание программы «CONVerter»

Программа «CONVerter» служит для преобразования выходных файлов, получаемых после работы программы CONV3D/V2.3, для их последующей визуализации в графическом редакторе. Поддерживается работа в параллельном режиме.

Описание выходных файлов программы CONV3D/V2.3

В результате работы программы «CONV3D/V2» создаются следующие файлы:

1. convert.inp – управляющий файл для работы конвертера. В нем задаются входные данные для его работы.
2. 3a.cnv, 3d.cnv, 3r.cnv, 3g.cnv – бинарные файлы содержащие информацию о расчетной области задачи и 5 трехмерных массивов данных.
3. fd.cnv – файл с потоками на границах расчетной области
4. серия файлов ou0XX.cnv –

Возможности программы «CONVerter»

«CONVerter» позволяет:

- Конвертировать файлы fd.cnv и ou00.cnv в текстовый формат .dat для (название редактора).
- Конвертировать файлы 3a.cnv, 3d.cnv, 3r.cnv, 3g.cnv в бинарные форматы plt (для редактора Tecplot360) или vtr (для редактора ParaView)
 - Создавать выходные файлы 3a, 3d, 3r и 3g, как для всей расчетной области, так и для ее части.
 - «Прореживать» область вывода для файлов 3a, 3d, 3r и 3g в любом направлении, т.е. писать каждую 2-ую, 4-ую... точки
 - Разделять выходной файл на несколько частей в каждом из направлений.

Описание управляющего файла convert.inp

Задание количества процессов как произведение трех чисел NPX, NPY, NPZ

\$ Decomposition blocks for processes (NPX,NPY,NPZ)

*\$ NPX*NPY*NPZ should be equal to number of processes*

1 1 1

Указание, какие файлы необходимо преобразовывать

\$ CONVERSION KEYS FOR OUTPUT FILES

\$ Key for fd.dat conversion (0-no, 1-yes)

1

\$ Key for uo.dat conversion (0-no, 1-yes)

1

\$ Key for 3d&3p conversion (0-no, 1-plt, 2-vtr)

1

\$

Блок данных для преобразования файлов 3a, 3d, 3p и 3r

\$ OUTPUT INFORMATION FOR FILES 3D&3P

Начальный и конечный индекс в направлении X, а также коэффициент прореживания

\$ Borders and recording period in the i direction (il, ir, ln1)

1 65 1

Начальный и конечный индекс в направлении Y, а также коэффициент прореживания

\$ Borders and recording period in the j direction (jl, jr, ln2)

1 65 1

Начальный и конечный индекс в направлении Z, а также коэффициент прореживания

\$ Borders and recording period in the k direction (kl, kr, ln3)

1 129 1

Коэффициенты разбиения на подфайлы в каждом направлении

\$ Division of the file in each direction (numf1, numf2, numf3)

1 1 1

\$

Далее идут данные, в которые НЕЛЬЗЯ вносить изменения!

*\$ ******

```

$   OTHER DATA, CAN'T BE CHANGED MANUALLY!!!

$ *****

$ Dimensions of grid: N1 N2 N3

           65  65 129

$ Number of Blocks for Output

           1

$ Block number  1

Размеры областей в файлах ou00.cnv

$ Key for file recording (0-new file,1-restart)

           0

$ In Ik

           1  65

$ Jn Jk

           1  65

$ Kn Kk

           1 129

```

Условия на запуск программы «CONVerter»

Обозначим через «X» условие: число равно 2 в степени n, n больше или равно 0, тогда:

1. Кол-во процессов для работы программы должно удовлетворять условию «X».
- 2 Произведение параметров процессорного разбиения задаваемых пользователем (NPX*NPY*NPZ) должно равняться количеству процессов.
3. Область для вывода для файлов 3a, 3d, 3p и 3r ($[il,ir] \times [jl,jr] \times [kl,kr]$) должна лежать внутри расчетной области задачи $[1,n1] \times [1,n2] \times [1,n3]$.
4. Параметры прореживания ln1, ln2, ln3 для файлов 3a, 3d, 3p и 3r должны удовлетворять условию «X».

5. В случае использования прореживания сетки в некотором направлении, разность правого и левого индексов области вывода в этом направлении («ir-il» в случае 1-го направления) должна удовлетворять условию «X».

6. Коэффициенты разбиения на подфайлы (numf1, numf2, numf3) должны удовлетворять условию «X».

7. Минимальный размер области для файлов 3a, 3d, 3p и 3r в направлении 1 должен удовлетворять условию $((ir-il)/ln1+1)/NPX*numf1 > 1$. Аналогично для остальных направлений.

8. Приблизительный минимальный объем памяти необходимый для работы программы на одном процессе:

8.1 для файлов 3a, 3d, 3p и 3r:

$8*(1+1/ln1*ln2*ln3) * (ir-il+1) * (jr-jl+1) * (kr-kl+1) / (numf1*numf2*numf3)$ байт.

8.2 для файла fd:

$8*max(n1*n2, max(n1*n3, n2*n3))$ байт.

8.3 для файла ou00:

$5*8*(lk-ln+1)*(jk-jn+1)*(kk-kn+1)$ байт.

9. Максимальное число точек в одном файле (подфайле) 3d.vtr не должно быть больше 89478485 (ограничение формата, для 3p – можно в 3 раза больше точек).