

ГЛОБАЛЬНЫЕ ПЕРЕСТРОЙКИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СЕТКИ И ПЕРЕСЧЕТ СЕТОЧНЫХ ВЕЛИЧИН В ДВУМЕРНЫХ РАСЧЕТАХ ПО МЕТОДИКЕ КОРОНА

А. М. Овчинников, А. Г. Козуб

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Введение

В 2008–2009 годах для методики КОРОНА [1] была выполнена программная реализация и проведена отработка единой для математических методик ИТМФ ВНИИЭФ технологии глобальной перестройки расчетной сетки с пересчетом сеточных величин на двумерных многообластных (многофрагментных) расчетах. По результатам этой работы был сделан доклад на конференции «Нижегородская сессия молодых ученых» в мае 2009. В общем виде (например, из нерегулярной методики ТИМ [2] в методику КОРОНА, или из методики КОРОНА в методику КОРОНА) эта технология представляет из себя последовательность действий, изображенную на рис. 1. Для выполнения этапов технологии используются несколько программных приложений, входящих в состав общего программного сервиса ИТМФ, таких как VisualEditor2D, SolidEditor, 2D-RND, InterVal [3].



Рис. 1. Общая схема глобальной перестройки

Выполнение всех этапов, изображенных на схеме в зависимости от задачи может занимать большое количество времени, в особенности, редактирование контуров в VisualEditor2D и задание начальных данных в SolidEditor (до недели кропотливого труда). Такие затраты, возможно, оправданы при передаче данных из одной математической методики в другую, но чрезмерны при проведении глобальной перестройки расчетной сетки в рамках одной методики.

Построение пространственной сетки

При глобальной перестройке пространственной сетки в рамках только методики КОРОНА оказалось возможным заменить три первых звена из четырех (схема рис. 1) на более эффективное средство. А именно, проводить формирование дочерней задачи за один заход программными средствами самой методики КОРОНА с помощью приказов и ключевых слов. А на выходе получать уже готовый для пересчета величин программой InterVal разрез дочерней задачи.

С помощью набора ключевых слов и приказов методики КОРОНА возможно практически любое изменение сетки родительской задачи, а именно:

- изменение количества счетных фрагментов, математических подобластей;
- изменение количества и закона расстановки столбцов;
- изменение количества и закона расстановки строк;
- изменение контуров границ математических подобластей;
- добавление математических подобластей и пр.

Сами ключевые слова занимают малую часть управляющего файла задачи, и принцип их задания логически можно разделить на следующие уровни:

1-й уровень: Ничего не делается с фрагментами – ключевое слово для копирования фрагмента (UNCORR_FR).

2-й уровень: Делается ли что-нибудь с опорной линией (расстановкой столбцов). Если делается, то на следующем уровне только ключевые слова для работы с математическими областями (CORR_REG или CONTOUR_GL). Для задания параметров опорной линии – специальное ключевое слово (PARTET).

3-й уровень: Если с границами области ничего не делается и количество точек не меняется – то область копируется (ключевое слово UNCORR_REG). Если с границами области ничего не делается, а меняется только количество точек, или при изменении опорной линии, то ключевое слово CORR_REG (с сохранением лагранжести или без). Если исправляется граница области (одна или две), то ключевое слово для описания нового контура (CONTOUR_GL).

Пример фрагмента управляющего файла представлен на рис. 2.

```

UNCORR_REG 1 1 1 1
UNCORR_REG 1 2 1 2
UNCORR_REG 1 3 1 3

UNCORR_REG 2 1 2 1
UNCORR_REG 2 2 2 2
UNCORR_REG 2 3 2 3
UNCORR_REG 2 4 2 4
UNCORR_REG 2 5 2 5
UNCORR_REG 2 6 2 6
UNCORR_REG 2 7 2 7
UNCORR_REG 2 8 2 8

CORR_REG 3 1 3 2 0 0 0
CORR_REG 3 2 3 3 0 0 0
CORR_REG 3 3 3 4 0 0 0
CORR_REG 3 4 3 5 0 0 0
CORR_REG 3 5 3 6 0 0 0

CONTOUR_GL 3 1 70 1 1.0 1 1 3 1 2 201

PARTI 3 2 50 1.0 0.0000008 0.5 0.0 0 90
PARTI 3 1 100 1.0 0.5 0.0000008 -44.75 0.0000008 0
PARTI 3 2 50 1.0 0.0000008 -44.75 0.0 90 180

```

Рис. 2. Пример управляющего файла

Заданная информация обрабатывается транслятором методики, заводятся и размечаются сеточные и вспомогательные массивы для дочерней задачи, рассчитываются (при необходимости) параметры новых опорных линий (расстановка столбцов), рассчитываются (или копируются) радиусы точек на лучах. Радиусы точек сетки находятся путем определения точек пересечения дочернего луча с ломаной, определяющей границу математической области.

Задание и построение новой пространственной сетки при глобальной перестройке сетки в рамках только методики КОРОНА было реализовано в рамках методики в виде специального приказа и уже успешно применяется со второй половины 2009 года. Использование описанного и реализованного подхода к построению новой пространственной сетки позволило сократить календарное время выполнения глобальной перестройки расчетной сетки с пересчетом сеточных величин до 1 дня и менее.

Одномерный пересчет величин по угловому направлению

Использование в методике КОРОНА, при расчете процессов газовой динамики, расщепления по пространственным направлениям позволяет сделать следующий шаг в направлении ускорения и повышения точности пересчета сеточных величин при некоторых типах глобальных перестроек сетки. Речь идет о перестройках сетки, при которых двумерный пересчет величин может быть сведен к совокупной последовательности одномерных пересчетов. В первую очередь это перестройки сетки, связанные только с изменением количества и/или закона расстановки столбцов (то есть с изменением параметров опорной линии). Потребность в такого рода перестройках в расчетах различного уровня стоит едва ли не на первом месте. Это перестройки типа прореживания (или увеличения количества) столбцов в некоторых участках счетных фрагментов, сдвиг центра сферического участка опорной линии и т.п. без изменения количества точек радиального направления. Поскольку положение строк сетки при таких перестройках не изменяется, а меняется для каждой стро-

ки только количество разбиений по угловому направлению, то целесообразно организовать пересчет сеточных величин по схеме, аналогичной используемой в методике КОРОНА при расчете углового этапа газовой динамики на этапе пересчета на эйлерову сетку, но только, возможно, с различным количеством угловых интервалов. Тем самым, для подобных перестроек сетки оказалось возможным обойти последнее звено единой схемы (рис. 1), а именно пересчет сеточных величин с помощью программы InterVal. В результате перестройка сетки и пересчет сеточных величин осуществляется внутри методики КОРОНА за один заход на ЭВМ.

При пересчете величин на начальном этапе формируются потоки объемов каналов родительской и дочерней задач.

$$S_i = S_{i-1} + Vol_i, \quad S_1 = 0, \quad (1)$$

где Vol_i – объем i -й ячейки.

Результирующий поток объемов получается путем наложения потока объемов родительской задачи на поток объемов дочерней задачи. Если в ячейку дочерней задачи попадает несколько компонент одного и того же вещества, то происходит объединение этих компонент.

Визуально принцип определения вклада ячеек родительской задачи в дочернюю показан на рис. 3. Здесь ячейки дочерней задачи пронумерованы индексами i , ячейки родительской задачи – индексами J_k , компоненты родительской задачи, попавшие в ячейку дочерней задачи – индексами j_n .

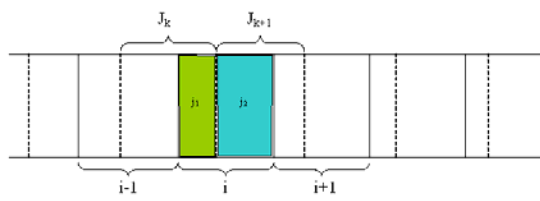


Рис. 3. Определение вклада ячеек родительской задачи в дочернюю

Плотности, удельные внутренние энергии и угловые скорости пересчитываются из условия соблюдения законов сохранения массы, внутренней энергии и импульса по следующим формулам:

$$Ros_i = \frac{\sum_{j=1}^n Ros_j Vol_j}{\sum_{j=1}^n Vol_j}; \quad Es_i = \frac{\sum_{j=1}^n Es_j m_j}{\sum_{j=1}^n m_j};$$

$$V_i = \frac{\sum_{j=1}^n m_j V_j}{\sum_{j=1}^n m_j}. \quad (2)$$

Принцип пересчета радиальных и угловых скоростей при одномерном пересчете по угловому направлению описан далее при описании двумерных пересчетов величин.

Частным случаем одномерного пересчета по угловому направлению является сдвиг центра во фрагменте со сферической угловой сеткой. После программной реализации пересчет величин тестировался на различных модельных задачах. В качестве примера приведем результат применения программ на модельной задаче всплытия легкого «пузыря», постановка которой взята из [4], но несколько модифицирована. Кратко опишем постановку задачи. Сферическая легкая область заключена внутри также сферической, но тяжелой области, причем центры сфер, лежащие на оси симметрии, не совпадают между собой. На внешней границе тяжелого слоя навязано профилированное давление. В задаче [4] профиль навязанного давления был таков, что приводил к «всплыванию» легкой области относительно оси симметрии. Для нашего теста, мы несколько изменили профиль навязанного давления так, чтобы под воздействием градиента давления происходил сдвиг легкой области вдоль оси вращения.

Расчет в такой постановке был проведен до момента времени, когда правая граница центральной области практически наехала на неподвижный центр системы координат. В этот момент времени центр сферической угловой сетки был смещен ближе к левой границе области. На рис. 4 представлена пространственная сетка с закрасом по веществам в расчете до перестройки и после нее. Также показаны контуры математических под областей.

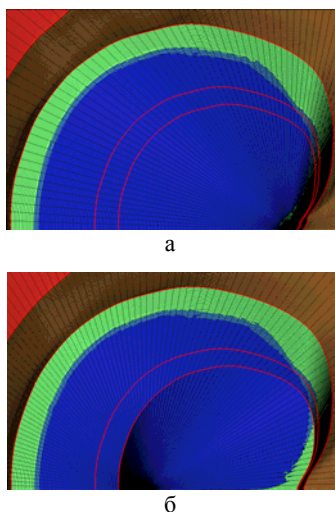


Рис. 4. Расчетная сетка: а – до сдвига; б – после сдвига

На рис. 5 представлены поля внутренних энергий и скоростей в расчете до и после перестройки сетки и пересчета сеточных величин. Каждая пара рисунков представлена в одинаковой палитре. Визуальный контроль показывает практическое совпадение этих величин. Более детальный анализ точности пересчета показывает, что масса по веществам и внутренняя энергия сохранены полностью, изменение в кинетической энергии не превышает 0,5 %.

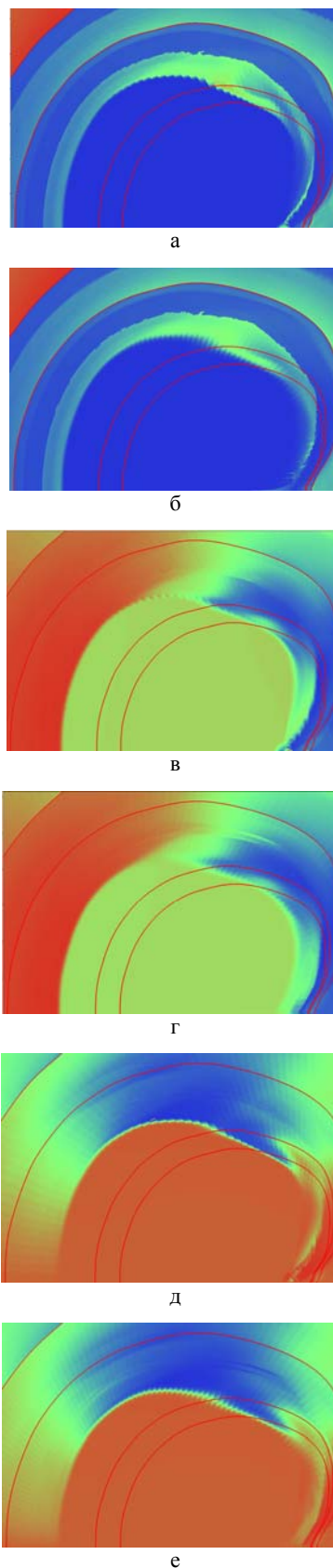


Рис. 5. Поля величин: а – удельные внутренние энергии до сдвига; б – энергии после пересчета; в – радиальные скорости до сдвига; г – радиальные скорости после пересчета; д – угловые скорости до сдвига; е – угловые скорости после пересчета

Одномерный пересчет по радиальному направлению

При перестройках сетки, связанных только с изменением количества и расстановки точек радиального направления, также более точным является не чисто двумерный пересчет, а совокупность последовательности одномерных пересчетов вдоль каждого неизменного столбца (по аналогии с алгоритмами пересчета величин в программах интерполяции расчетной сетки в процессе счета по программам методики КОРОНА при неизменном количестве точек). Перестройки подобного рода (изменение числа точек по радиальному направлению в математических областях фрагментов, коррекция границ областей внутри счетных фрагментов) также весьма актуальны при проведении многообластных расчетов по методике КОРОНА.

Поэтому на следующем шаге в рамках методики КОРОНА был реализован собственный пересчет величин при глобальных перестройках сетки такого рода. Повышение точности такого пересчета связано с более аккуратным (по сравнению с двумерным пересчетом программой InterVal) учетом особенностей аппроксимации величин в методике КОРОНА.

При таком пересчете на начальном этапе формируются участки пересчета в родительской и дочерней задачах. В эти участки включаются диапазоны строк, внутри которых находятся пересчитываемые строки.

При одномерном пересчете по радиальному направлению вклад ячеек родительской задачи в ячейки дочерней задачи определяется по радиусам счетных ячеек сеток. Если в ячейку дочерней задачи попадает несколько компонент родительской задачи, то сортировка этих компонент в ячейке дочерней задачи производится по доле угла, образованного лучом из центра счетного фрагмента к центру компоненты. Визуально принцип определения вклада ячеек родительской задачи в дочернюю показан на рис. 6.

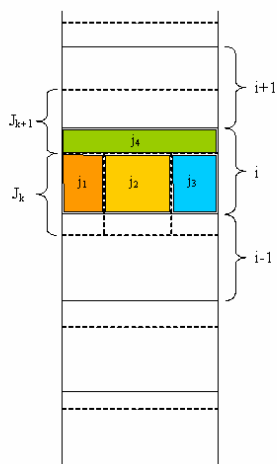


Рис. 6. Определение вклада ячеек родительской задачи в дочернюю

Плотности, энергии и радиальные скорости пересчитываются по тому же принципу что и в случае одномерного пересчета по углу по следующим формулам:

$$Ros_i = \frac{\sum_{j=1}^n Ros_j Vol_j}{\sum_{j=1}^n Vol_j}; \quad Es_i = \frac{\sum_{j=1}^n Es_j m_j}{\sum_{j=1}^n m_j};$$

$$U_i = \frac{\sum_{j=1}^n m_j U_j}{\sum_{j=1}^n m_j}. \quad (3)$$

После программной реализации описанный пересчет величин тестировался на различных модельных задачах. В качестве примера приведем результат применения программ на тесте о сходящейся цилиндрической ударной волне, постановка которого взята из [5]. Расчет начинался на равномерной пространственной сетке, приведенной на рис. 7.

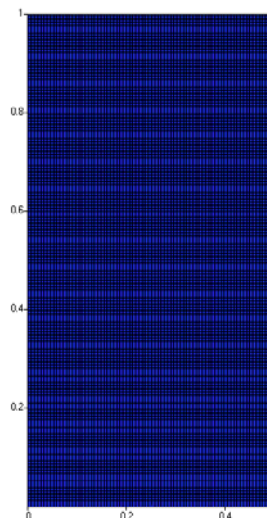


Рис. 7. Начальная пространственная сетка теста о сходящейся цилиндрической ударной волне

На момент времени $t = 0,6$ в расчете было изменено количество точек радиального направления, при этом также была изменена их расстановка: за фронтом ударной волны сетка была прорежена, а перед фронтом – сгущена.

Ниже представлены используемые для этой перестройки ключевые слова:

```
PARTET 1 1 80 1.0 0.0 0.0000002 -0.5 0.0000002 0
CONTOUR_GL 1 1 120 1 1.0 1 1 1 80 2 79
CONTOUR_GL 1 2 30 1 1.0 1 1 1 222 2 79
```

На рис. 8 представлены поля плотностей в исходном расчете на момент перестройки сетки и в расчете с перестроенной сеткой после пересчета величин представляемыми программами.

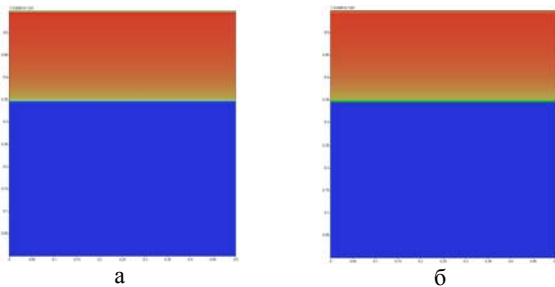


Рис. 8. Поля распределения плотностей: а – на исходной сетке; б – после пересчета

Визуальный контроль показывает практическое совпадение этих величин. Более детальный анализ точности пересчета показывает, что масса и внутренняя энергия полностью сохранены, изменение кинетической энергии менее 0,3%. После перестройки сетки и пересчета величин расчет был продолжен. На рис. 9 приведены поля плотностей и энергий на момент времени $t = 0,8$ полученные в расчете без перестройки сетки и в расчете после перестройки сетки и пересчета сеточных величин.

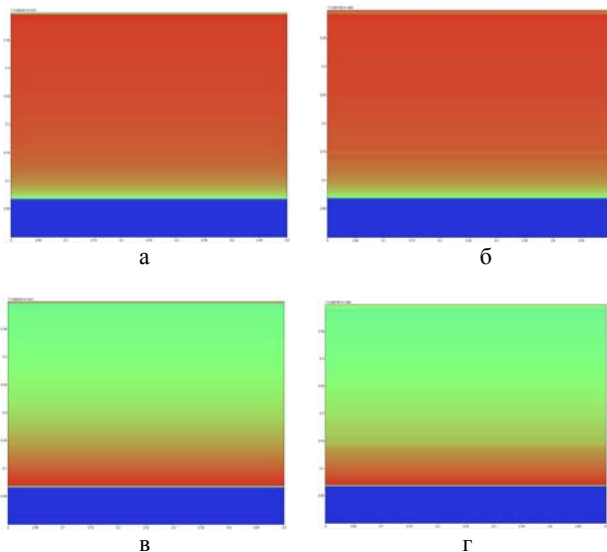


Рис. 9. Поля распределения величин: а – плотности на исходной сетке; б – плотности после пересчета; в – внутренняя энергия на исходной сетке; г – внутренняя энергия после пересчета

Двумерный пересчет

На следующем шаге работы были разработаны алгоритмы и созданы программы в рамках методики КОРОНА для собственного двумерного пересчета при глобальной перестройке расчетной сетки. Причины заключаются в том, что при использовании единого пересчета программой InterVal имеем:

1. Необходимость вызова дополнительного приложения с предварительным формированием файлов ЕФР [6] «родительской» и «дочерней» задач.

2. Повторное задание уже в рамках InterVal соответствия областей при пересчете, копировании.

3. Дополнительный запуск в методике КОРОНА для восстановления давлений и температур по пересчитанным плотностям и энергиям.

А зачастую возникает необходимость всего лишь локально-глобального редактирования только границ счетных фрагментов с пересчетом величин только в прилегающих окрестностях задачи.

Для собственного двумерного пересчета в рамках методики КОРОНА был использован известный метод, основанный на нахождении площади многоугольника, являющегося общей частью при пересечении двух треугольников. Опишем кратко реализованные алгоритмы.

Родительская и дочерняя задачи разбиваются на блоки, для каждого из которых определены минимальные и максимальные координаты. В свою очередь, каждая из ячеек перестраиваемых областей делится на треугольники. Ищется геометрическое пересечение треугольников (рис. 10), находится площадь общей части и определяется вклад объемов, масс, энергий.

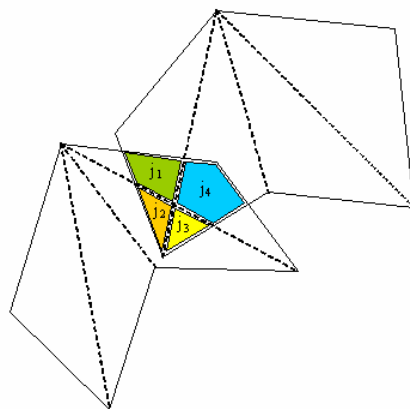


Рис. 10. Определение общей части пересечения двух ячеек

Вклады масс, энергий определяются из соответствующих законов сохранения:

$$Ros_i = \frac{\sum_{j=1}^n Ros_j Vol_j}{\sum_{j=1}^n Vol_j}; \quad Es_i = \frac{\sum_{j=1}^n Es_j m_j}{\sum_{j=1}^n m_j}, \quad (4)$$

где j – номер попавшей компоненты.

Пересчет скоростей выполняется по формулам (5)–(10). На рис. 11 показано центрирование радиальных U и угловых V скоростей в методике КОРОНА.

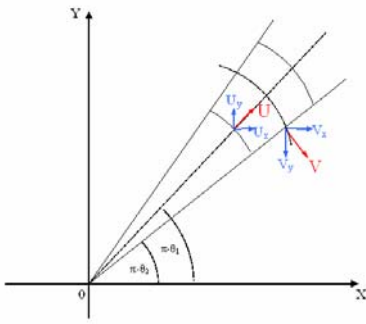


Рис. 11. Центрирование радиальных U и угловых V скоростей в методике КОРОНА

Пересчитывается импульс ячейки по направлениям, совпадающим с декартовыми осями

$$\begin{cases} U_x = U \cos(\pi - \theta_1) = -U \cos \theta_1, \\ U_y = U \sin(\pi - \theta_1) = U \sin \theta_1. \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} V_x = V \cos\left(\theta_2 - \frac{\pi}{2}\right) = V \sin \theta_2, \\ V_y = V \sin\left(\theta_2 - \frac{\pi}{2}\right) = -V \cos \theta_2. \end{cases} \quad (6)$$

На завершающем этапе пересчета выполняется обратное преобразование, используя для него углы разворота θ_{1n} и θ_{2n} дочерней сетки:

$$\begin{cases} U_n = -U_x \cos \theta_{1n} + U_y \sin \theta_{1n}, \\ U' = U_x \sin \theta_{1n} - U_y \cos \theta_{1n}. \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} V' = -V_x \cos \theta_{2n} + V_y \sin \theta_{2n}, \\ V_n = V_x \sin \theta_{2n} - V_y \cos \theta_{2n}. \end{cases} \quad (8)$$

Окончательно формулы будут иметь вид:

$$U(i, j) = U_n + 0,25 \cdot (V'(i-1, j-1) + V'(i, j-1) + V'(i-1, j) + V'(i, j)), \quad (9)$$

$$V(i, j) = V_n + 0,25 \cdot (U'(i-1, j-1) + U'(i, j-1) + U'(i-1, j) + U'(i, j)). \quad (10)$$

Скорости по компонентам составных ячеек дочерней задачи распределяются с использованием линейной интерполяции.

В качестве модельной задачи для демонстрации работоспособности алгоритмов и программ, их реализующих, используем уже представленный тест о сходящейся цилиндрической ударной волне. Была выбрана начальная пространственная сетка, нестандартная для данного теста, но типичная для многих двумерных задач, расчеты которых проводятся в рамках методики КОРОНА. С подобной пространственной сеткой ранее тестировались программы двумерного пересчета сеточных величин при гло-

бальной перестройке расчетной сетки в методике РАЗЕС [4].

Геометрия задачи была разбита на три счетных фрагмента. Для первого фрагмента выбрана цилиндрическая сетка, для второго и третьего – сферическая. Начальная пространственная сетка и поле веществ задачи приведены на рис. 12 (закрас по порядковому номеру вещества).

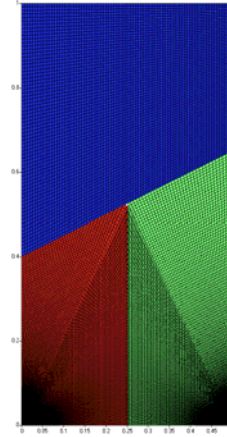


Рис. 12. Расчетная сетка и поле веществ задачи

По физической сути вещества в каждом счетном фрагменте одинаковы (идеальный газ), но имеют различные номера. Для проверки работоспособности программных компонент технологии на момент времени 0,3 была выполнена глобальная перестройка пространственной сетки, заключающаяся в переходе к однофрагментной постановке с приведением сетки к цилиндрическому виду. На рис. 13 приведены расчетные сетки родительской и дочерней задачи на момент перестройки.

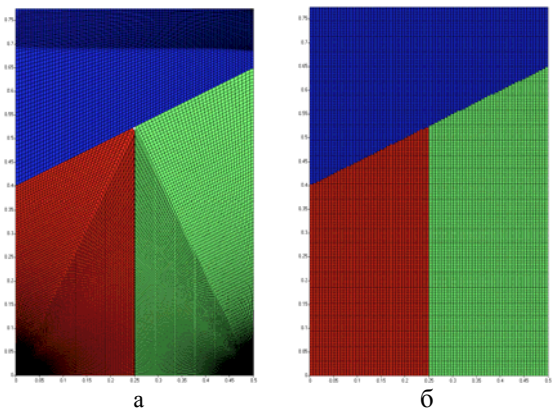


Рис. 13. Пространственная сетка расчета: а – до перестройки; б – после перестройки

На рис. 14 приведены поля плотностей, удельных внутренних энергий и скоростей «родительской» и «дочерней» задачи до и после пересчета сеточных величин (шкала, изображенная справа, одина для каждой пары рисунков).

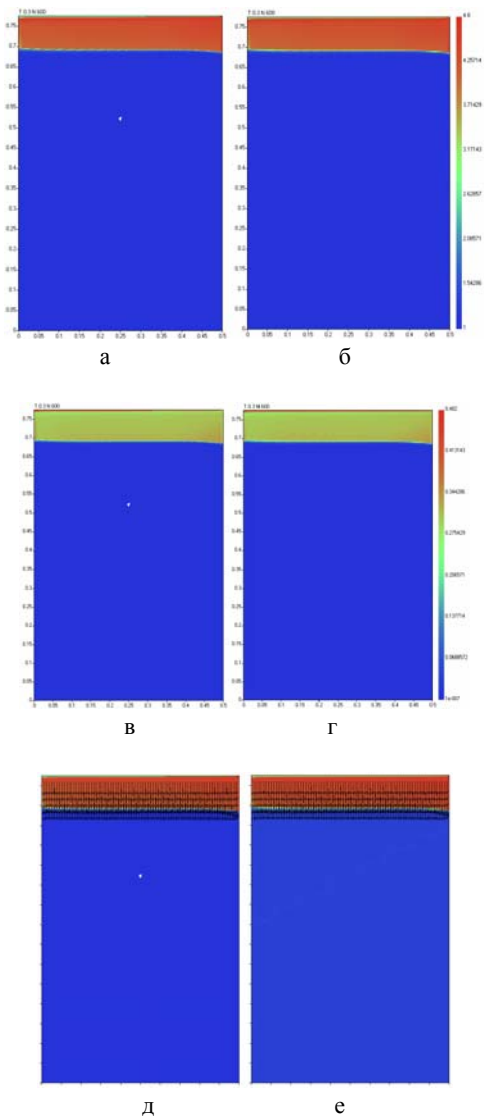


Рис. 14. Поля распределения величин: а – плотности на родительской сетке; б – плотности после пересчета; в – внутренняя энергия на родительской сетке; г – внутренняя энергия после пересчета; д – скорости на родительской сетке; е – скорости после пересчета

Из данных, приведенных на рис. 14, видно приемлемое качество пересчета величин как скалярных (плотности и внутренние энергии), так и векторных (скорости) величин. Анализ балансных величин показал практическое сохранение массы и энергии веществ: различия в массе не превышают 0,01 %, а в полной энергии – 0,1 %.

Отметим, что аналогичный пересчет был выполнен и единой программой InterVal. Отличия по полям

плотностей и энергий, полученные в пересчетах по двум различным программам не превышают 0,02 %. Времена ЦП, затрачиваемые на пересчет, практически совпадают и составляют около 5 мин ЦП Intel PentiumCore2Duo (2400 МГц). Однако, применение собственной программы потребовало значительно меньше временных затрат и действий со стороны исполнителя расчета, а следовательно сократило календарные сроки и повысило надежность (меньше вероятность внесения ошибки исполнителем).

Литература

1. Соколов С. С., Воропинов А. А., Новиков И. Г. и др. Методика ТИМ-2D для расчета задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках с произвольным количеством связей в узлах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 4. С. 29–43.
2. Скрыпник С. И., Рудько Н. М., Королев Р. А., Ляпин В. В., Попов А. В. Численное решение двумерных уравнений газовой динамики с теплопроводностью с использованием переменного по размеру разностного шаблона // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 1. С. 14–26.
3. Черенков П. В., Борисенко О. Н., Черенкова М. В., Тарасов В. И., Олесницкая К. К., Баканова Т. Ю., Кузнецов М. Г., Шутов Д. А., Сергеева А. С. Технология подготовки в унифицированном виде начальных данных двумерных задач по программам SolidEditor и 2D-РНД // Вопросы атомной науки и техники. 2010. Вып. 1. С. 60–67.
4. Козуб А. Г., Пронина О. А. Глобальная перестройка расчетной сетки и пересчет величин в комплексе программ РАМЗЕС // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 1. С. 55–61.
5. Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И., Зубов Е. Н., Ковалев Н. П., Соколов С. С., Шемарулин В. Е. Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Ч. 1. Требования к тестам. Тесты 1-7 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 3–9.
6. Волгин А. В., Красов А. В., Кузнецов М. Ю., Тарасов В. И. Библиотека ЕФР для универсального представления расчетных данных // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2007. Вып. 11. С. 130–135.