

УДК 519.6

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РРМ В РАСЧЕТАХ ПО МЕТОДИКАМ ЭГАК И ТРЭК

Ю. В. Янилкин, В. Ю. Колобянин, И. Н. Чистякова, М. Ю. Егузова
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Приводятся результаты расчетов по методикам ЭГАК и ТРЭК с применением различных методов аппроксимации конвективных членов уравнений (донорный метод, метод РРМ и метод концентраций). Все расчеты проводились в эйлеровой постановке. Дается сравнение и анализ результатов, полученных в расчетах, которые показали, что по точности метод РРМ имеет несомненные преимущества перед донорным методом, а в некоторых случаях и перед методом концентраций. Предлагается алгоритм объединения метода РРМ и метода концентраций, сохраняющий их лучшие свойства.

Введение

Использование эйлеровых и произвольно-лагранжево-эйлеровых методов для ударно-волновых течений многокомпонентной сплошной среды приобретает все больший вес из-за присущих им по сравнению с лагранжевыми методами преимуществ, среди которых наиболее важными являются их безавостность, более простая подготовка начальных данных, меньшая трудоемкость проведения расчетов и меньшая зависимость результатов от квалификации исполнителя расчетов.

Однако эйлеровы методы при всей их привлекательности требуют решения ряда сложных проблем, одной из которых является относительно меньшая (по сравнению с лагранжевыми методами) точность, обусловленная необходимостью решения уравнения адвекции и появляющейся в связи с этим схемной вязкостью.

От решения указанной проблемы зависит эффективность и точность эйлеровых методов. Ниже описываются алгоритмы, применяемые авторами для повышения точности методик ЭГАК (2D) и ТРЭК (3D).

Особенности реализации метода РРМ совместно с донорным методом и методом концентраций

При численном решении системы газодинамических уравнений в методиках ЭГАК [1] и

ТРЭК [2] используется метод расщепления на два этапа.

На первом (лагранжевом) этапе решаются уравнения газодинамики в лагранжевых переменных, т. е. без конвективных членов уравнений. Аппроксимация этих уравнений производится с первым порядком по времени и со вторым — по пространственным переменным.

На втором (эйлеровом) этапе решаются уравнения, содержащие только конвективные члены. Аппроксимация уравнений производится с первым порядком как по времени, так и по пространственным переменным.

Общая точность программы, решающей уравнения газодинамики, зависит от точности решения уравнений на каждом этапе вычислений. В большинстве случаев точность и эффективность методики вполне достаточны, однако при моделировании некоторых задач для достижения необходимой точности решения требуется неприемлемо большое количество счетных ячеек. Поэтому проблема повышения точности расчетов довольно актуальна, и решена она может быть прежде всего повышением точности аппроксимации системы на втором этапе вычислений, поскольку она меньше, чем на первом этапе.

Метод концентраций. Одним из наиболее успешно применяемых методов, позволяющих повысить точность решения уравнения адвекции для многокомпонентного случая, является метод концентраций (СМ), предложенный в

работе [3]. Этот метод лежит в основе методик ЭГАК и ТРЭК, и именно в методике ЭГАК был разработан его первый вариант.

В методе концентраций для выделения разных компонентов используются их индивидуальные параметры термодинамического состояния, количество которых увеличивалось по мере развития метода [4]. В случае газодинамики их полный набор включает плотности (или массовые концентрации — доли, отсюда и название метода), энергии и объемные концентрации. При этом уравнения неразрывности и энергии записываются для каждого компонента в отдельности. Суть метода концентраций заключается в том, что в нем для расчета потоков из смешанных ячеек используется специальный алгоритм, основанный на локальном восстановлении положения контактных границ по полю концентраций. Метод позволяет локализовать положение границ с точностью до одной счетной ячейки.

Не будем касаться всех алгоритмов этого метода (они подробно изложены, например, в обзорной работе [5]), а остановимся лишь на некоторых проблемах, которые возникают при его использовании совместно с донорным методом (DM) и методом RPM [6]. Отметим также, что конкретные алгоритмы метода CM могут отличаться друг от друга в разных методиках, ниже речь идет лишь об алгоритме, реализованном в методиках ЭГАК и ТРЭК.

Формулу для определения потоков объемов компонентов через сторону (грань) ячейки можно записать в следующем общем виде:

$$\Delta V_i = \Delta V \beta_{\Delta V}^i.$$

Здесь ΔV — суммарный поток объема через текущую сторону; $\beta_{\Delta V}^i$ — некоторое определяемое значение объемной концентрации для i -го компонента. Для вычисления $\beta_{\Delta V}^i$ могут использоваться два метода — CM и RPM, в зависимости от ситуации. В случае, когда в донорной ячейке по полю концентраций удастся восстановить положение контактной границы, используется метод CM, в противном случае используется метод RPM. Фактически метод RPM используется для вычисления потоков из смешанной ячейки в смешанную или из смешанной в чистую при наличии в данной ячейке тонкого слоя другого вещества.

После определения потоков объемов компонентов потоки массы определяются по аналогичной формуле:

$$\Delta M_i = \Delta V_i \rho_i^*, \quad (1)$$

где ρ_i^* — значение плотности в потоке, определяемое либо методом DM, либо методом RPM.

Для вычисления потоков энергии и других величин, определенных на единицу массы компонента, используется аналогичный подход, только в формуле (1) вместо ΔV_i присутствует ΔM_i , а вместо ρ_i^* — соответствующая величина.

Донорный метод. Используется предположение о том, что распределение величины в ячейке — кусочно-постоянное. Таким образом, при расчете потоков через стороны ячейки используется среднее значение величины в ячейке. Метод прост в реализации, является монотонным и не требует больших ресурсов вычислительной машины. Однако он имеет первый порядок точности, что приводит к неизбежному сглаживанию профилей газодинамических величин.

Метод RPM. Используется предположение о том, что величина в ячейке распределена по некоторому параболическому закону. Таким образом, при расчете потоков через стороны (грани) ячейки используются значения величин вблизи границ ячеек, а не средние величины, как в донорном методе.

Детали реализации метода RPM в методике ЭГАК приводятся в работе [7]. Здесь же рассмотрим некоторые особенности использования метода RPM, в первую очередь возникающие в связи с распараллеливанием и касающиеся методики ТРЭК.

Дело в том, что реализация метода при вычислении потока через любую сторону требует информации о состоянии в пяти ячейках. Существует несколько ситуаций, когда информация о необходимых ячейках недоступна. Связаны они прежде всего с нахождением потоков вблизи границы счетной области или через сторону ячейки, лежащую на границе между областями, рассчитываемыми разными процессорами. Ситуации эти следующие:

1. *Часть необходимых ячеек лежит за границей области (ЭГАК и ТРЭК).* На рис. 1 за границей счетной области находится ячейка $k+2$, и информация о ней отсутствует. В таком случае состояние ячейки $k+2$ копируется из $(k+1)$ -й ячейки.

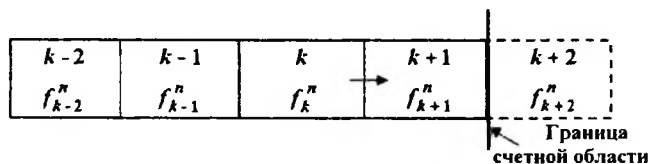


Рис. 1. Фрагмент счетной сетки для вычисления потоков в случае 1

2. Часть необходимых ячеек лежит за границей области, рассчитываемой текущим процессором (ТРЭК). В случае, представленном на рис. 2, ячейки $k-1$ и $k-2$ находятся за границей области текущего процессора 1 и рассчитываются процессором 2. Распараллеливание кода ТРЭК построено таким образом, что текущему процессору известно состояние всех ячеек области этого процессора, а также состояние одного слоя ячеек, рассчитываемых соседним процессором. Поэтому в данном случае состояние ячейки $k-1$ известно, а состояние ячейки $k-2$, о котором информации нет, копируется из $k-1$.

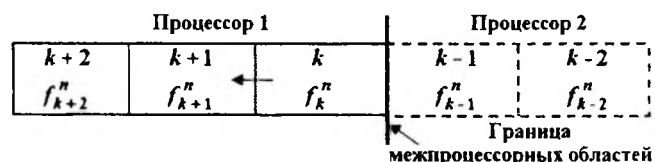


Рис. 2. Фрагмент счетной сетки для вычисления потоков в случае 2

3. Рассчитывается поток через сторону ячейки, лежащую на границе межпроцессорных областей (ТРЭК). Эта ситуация представлена на рис. 3. В данном случае для вычисления потока используется метод DM.

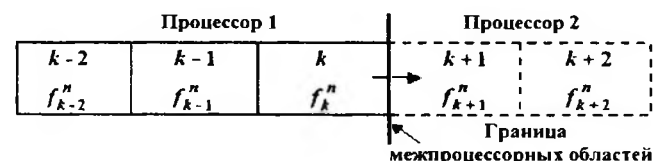


Рис. 3. Фрагмент счетной сетки для вычисления потоков в случае 3

Некоторые расчеты

Одномерные расчеты задачи "Blast Waves" [6]. В начальный момент времени в области $0 \leq x \leq 1$ имеются три подобласти, в которых заданы вещества с параметрами, указанными на рис. 4.

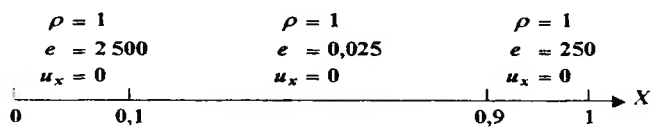


Рис. 4. Начальная геометрия задачи

УРС веществ — для идеального газа, $p = (\gamma - 1)\rho e$, $\gamma = 1,4$. На границах области задаются условия жесткой стенки.

Расчеты проводились в эйлеровой постановке на равномерной сетке, изменялось только число ячеек счетной сетки ($M = 100, 200, 400, 1000$).

При аппроксимации конвективных членов уравнений неразрывности и энергии использовался донорный метод или метод РРМ. Также варьировалось количество веществ в области: одно или три (в последнем случае при расчете потоков объемов использовался метод концентраций). Для оценки точности результатов использовались профили плотности на контрольный момент времени $t = 0,038$. В качестве эталонного взят расчет из работы [8], выполненный на предельно большом количестве точек $M = 20000$ в лагранжевой постановке.

На рис. 5 представлены профили плотности на момент времени $t = 0,038$ с количеством ячеек счетной сетки $M = 400$. На рис. 6 приведены кривые зависимости интегральной погрешности плотности в сеточной норме L_1 [8] от размера ячейки счетной сетки, построенные в логарифмическом масштабе, на контрольный момент времени $t = 0,038$. В таблице сведены результаты расчетов порядка сходимости для различных схем методики ЭГАК. Кроме того, в таблице представлен средний порядок сходимости $\alpha_{\text{сред}}$, полученный как среднее арифметическое по всем интервалам.

Из анализа результатов следует, что в эйлеровых расчетах по методике ЭГАК наилучшие результаты показывает метод РРМ в совокупности с методом концентраций. Средний порядок сходимости по такой схеме $\alpha_{\text{сред}} = 0,81$. Применение донорного метода как с методом концентраций, так и без него дает порядок сходимости, более чем в 2 раза меньший, чем метод РРМ с любыми предположениями. Кроме того, отметим, что сама погрешность метода DM уже на грубых сетках значительно выше и ситуация при увеличении количества ячеек только ухудшается по сравнению с методом РРМ.

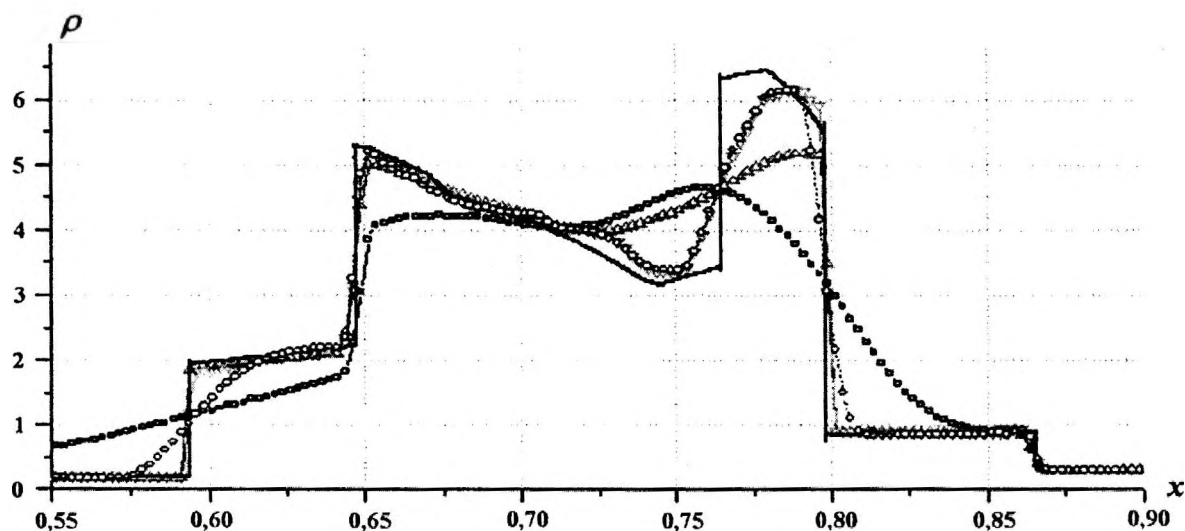


Рис. 5. Профили плотности, $t = 0,038$, $M = 400$: $\triangle$ — DM, 3 вещества; ∇ — PPM, 3 вещества; — — эталон; $\square$ — DM, 1 вещество; $\circ$ — PPM, 1 вещество

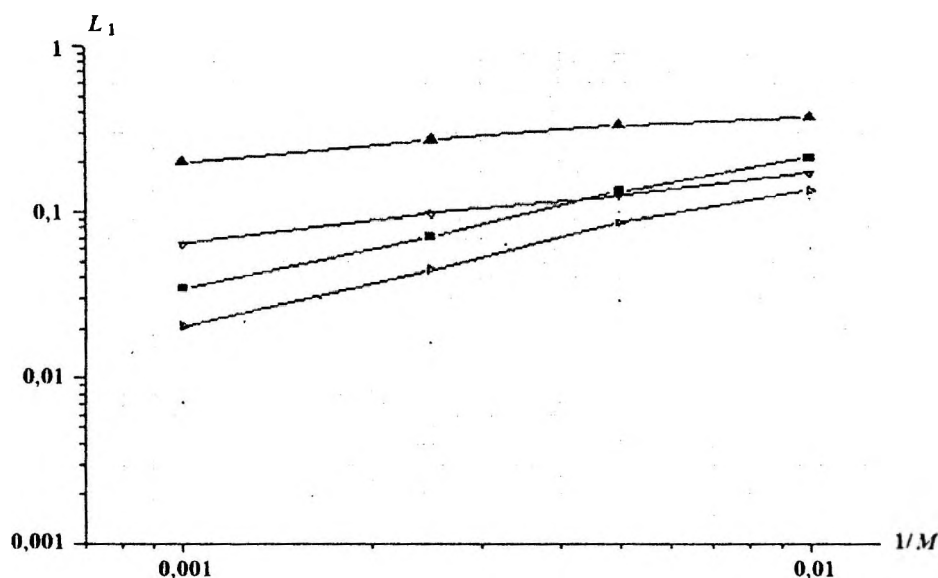


Рис. 6. Зависимость интегральной нормы погрешности плотности от размера ячейки в логарифмическом масштабе, $t = 0,038$: ∇ — DM, 3 вещества; $\triangle$ — PPM, 3 вещества; $\blacktriangle$ — DM, 1 вещество; $\blacksquare$ — PPM, 1 вещество

Порядок сходимости на момент времени $t = 0,038$

Метод счета	Порядок сходимости α			$\alpha_{\text{сред}}$
	Интервалы			
	100—200	200—400	400—1 000	
DM, 1 вещество	0,161	0,268	0,346	0,26
DM, 3 вещества	0,439	0,369	0,456	0,421
PPM, 1 вещество	0,684	0,917	0,774	0,791
PPM, 3 вещества	0,629	0,953	0,849	0,81

Двумерная задача о движении тонкой оболочки. При проведении расчетов на неподвижной сетке часто возникает проблема расчета движения тонких оболочек, занимающих одну ячейку или даже меньше одной. По алгоритмам метода концентраций, реализованным в методиках ЭГАК и ТРЭК, такие оболочки корректно сосчитать практически не удастся, так как указанная ситуация является недопустимой. Данный тест представлен как раз для сравнения методов на задаче подобного типа.

Имеется прямоугольная область размером 100×100 ячеек, содержащая два вещества, первое из которых заполняет всю область, а второе занимает тонкую оболочку шириной $S = 1$ (в одну ячейку), расположенную по диагонали (рис. 7, а). Расчет проводился на равномерной сетке с размером ячейки $h_x = h_y = 1$. Параметры обоих веществ: $\rho = 1$; $e = 0$; $p = 0$. Движение происходит из верхнего левого угла в правый нижний с постоянной скоростью: $u_x = 1$; $u_y = -1$.

Результаты расчетов представлены на момент времени $t = 40$.

На рис. 7, б–г показаны растровые картины объемных концентраций, полученные по разным

методам. Приведены только объемные концентрации вещества 1, концентрация вещества 0 вычисляется по формуле $\beta_0 = 1 - \beta_1$.

На рис. 8 приведены профили объемных концентраций вещества 1, а также представлен начальный профиль. Профили изображены перпендикулярно к оболочке от координаты X .

Из представленных рисунков видно, что по сравнению как с методом ДМ, так и с методом СМ результаты расчетов по методу РРМ лучше согласуются с аналитическим решением (профиль аналитического решения не приводится, его легко получить сдвигом начального профиля вдоль направления движения). Недостатки метода СМ, по крайней мере его реализации в

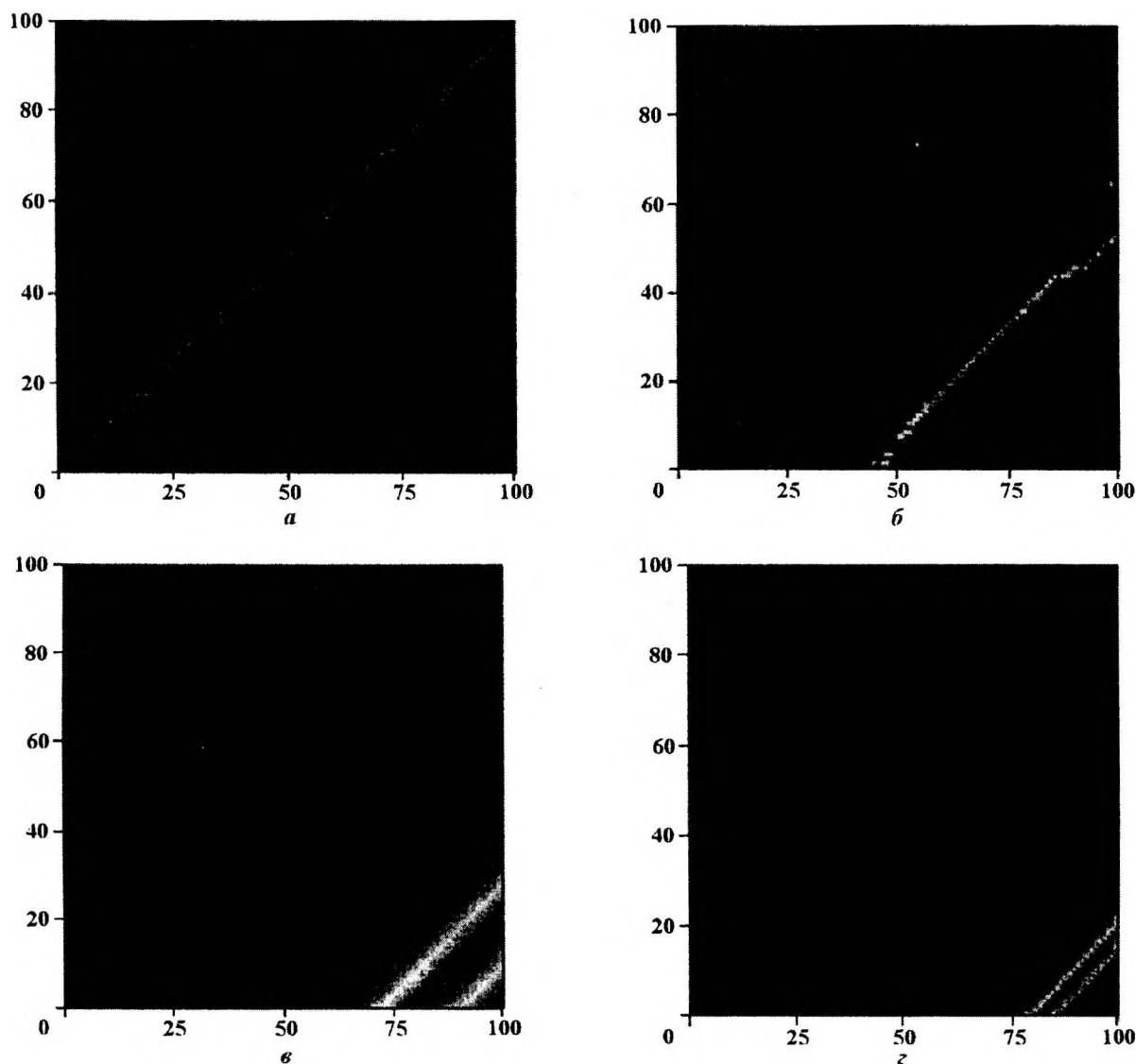


Рис. 7. Растровая картина объемных концентраций вещества 1: а — $t = 0$; б — $t = 40$, расчет по методу СМ; в — $t = 40$, расчет по методу ДМ; г — $t = 40$, расчет по методу РРМ

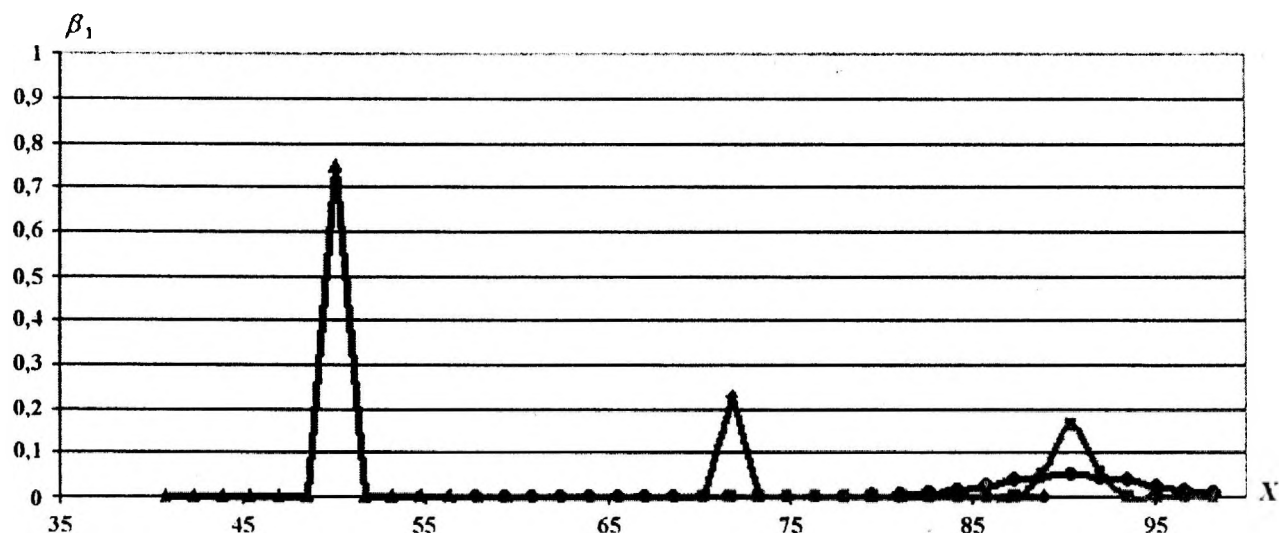


Рис. 8. Профили объемных концентраций вещества 1: $\blacktriangle$ — $t = 0$; $\blacklozenge$ — $t = 40$, расчет по методу DM; $\blacklozenge$ — $t = 40$, расчет по методу CM; $\blacksquare$ — $t = 40$, расчет по методу PPM

рассматриваемых методиках, связаны с очень малой толщиной оболочки — этому методу для корректного счета необходимо, чтобы на оболочку приходилось 2–3 ячейки.

Модельная задача о сильном взрыве в атмосфере с экспоненциальным распределением плотности. Рассматривается сферический взрыв в среде с экспоненциальным распределением плотности. Геометрия задачи представлена на рис. 9.

Область 1 — продукты взрыва (ПВ) с радиусом $R_0 = 0,75$, плотностью $\rho = 1$, удельной внутренней энергией $e = \frac{E}{4/3\pi R_0^3}$, полным энергосодержанием $E = 1$. Область 2 — холодная

атмосфера с экспоненциальным распределением плотности вдоль оси Y , $\rho = \rho_0 \exp(-y)$, $\rho_0 = 1$. Граничные условия — жесткие стенки.

В трехмерном расчете на область 1 приходится пять точек по радиусу в каждом направлении, затем точки распределены по геометрической прогрессии. В области 2 по оси Y в направлении возрастания плотности — 50 точек, в направлении убывания плотности — 220 точек, по осям X и Z — 60 точек. Таким образом, общее число точек — 1,5 млн. Тип сетки — неподвижная прямоугольная. При расчете потоков массы и энергии использовались методы PPM и DM.

Основными эффектами в возникающих течениях являются всплытие облака ПВ в направ-

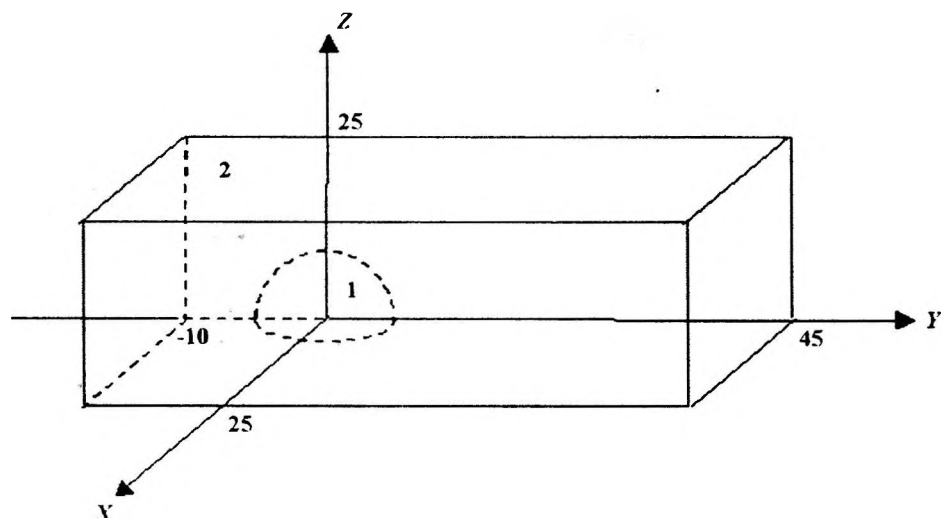


Рис. 9. Геометрия модельной задачи

лении уменьшения плотности и ускорение ударной волны (УВ) до наступления так называемого прорыва, когда ускорение УВ стремится к бесконечности. Эффект прорыва характеризуется критическим параметром $t_{\text{пр}}$ — моментом времени прорыва УВ. По различным численным исследованиям $t_{\text{пр}} \sim 30-40$ [9].

На рис. 10, 11 приведены растровые картины внутренней энергии атмосферы на моменты времени $t = 45$ и $t = 50$.

Решение, полученное по методу DM, в обоих расчетах не удовлетворяет физическим представлениям о характере течения. Как видно из рисунков, максимум энергии в УВ находится не

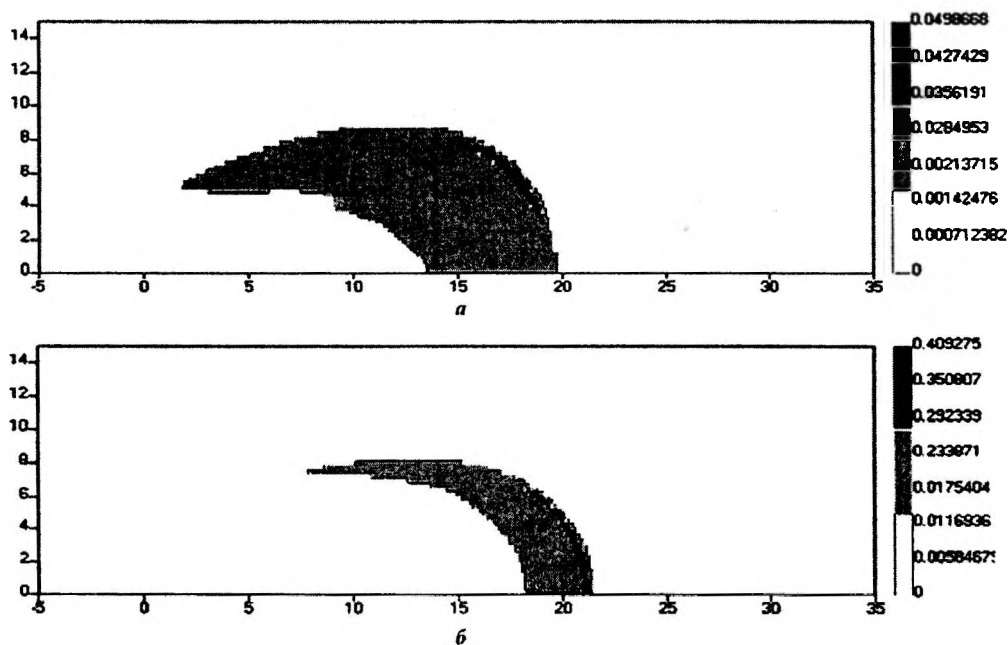


Рис. 10. Внутренняя энергия атмосферы на момент времени $t = 45$, сечение плоскостью YZ : a — по методу DM; b — по методу PPM

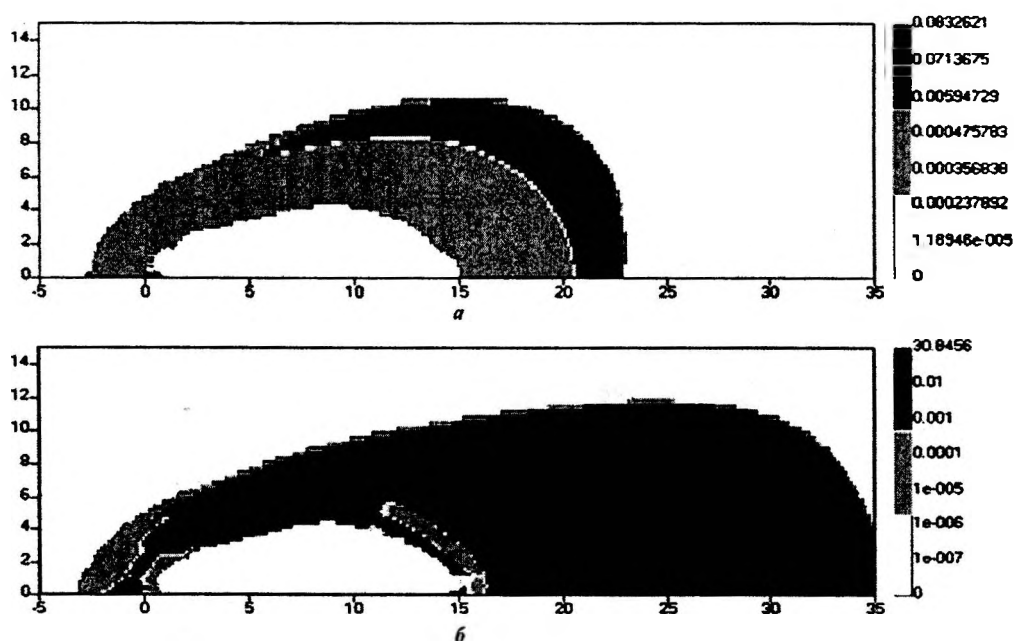


Рис. 11. Внутренняя энергия атмосферы на момент времени $t = 50$, сечение плоскостью YZ : a — по методу DM; b — по методу PPM

на оси симметрии Y . Неверно описывается эффект прорыва UB , по методу DM получить прорыв не удалось. Что касается результатов по методу PPM , численное решение вполне удовлетворительно отражает характер течения как по факту прорыва, так и по симметрии поля течения.

На рис. 12 представлены зависимости радиуса UB от времени.

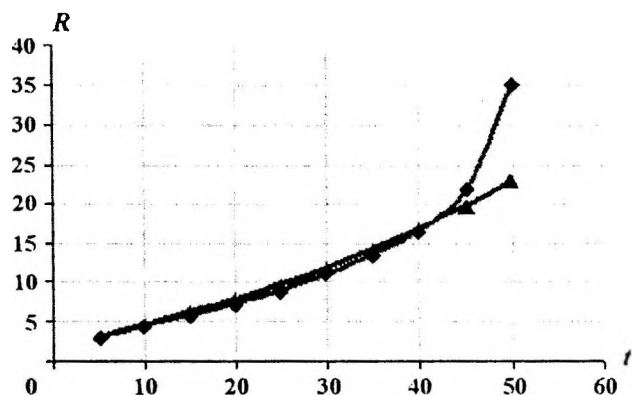


Рис. 12. Зависимость радиуса UB от времени: $\blacktriangle$ — трехмерный расчет по методу DM ; $\blacklozenge$ — трехмерный расчет по методу PPM

Расчеты задачи Бенджамина. Ниже приводятся результаты расчетов опытов Бенджамина [10]. В область, заполненную воздухом, через круглое отверстие вдувается газ SF_6 , в результа-

те чего образуется смесь, занимающая область цилиндрической формы (рис. 13). После установления стационарного состояния по воздуху параллельно плоскости YZ пускается плоская UB , на начальный момент времени она занимает 0,5 см по оси X .

Чтобы учесть эффект перемешивания при вдуве, в каждую ячейку смеси заносится 5 %-ное возмущение концентрации одного вещества. Задача по основному течению двумерна, и трехмерность существенна лишь с точки зрения турбулентности.

Двумерная постановка получается сечением трехмерной геометрии плоскостью, параллельной ZX (возмущение концентрации не задавалось).

Расчеты проводились на неподвижной равномерной сетке с размером ячейки 0,0125 см по каждому направлению. Варьировались способы счета потоков объема: методом DM или PPM .

На рис. 14 представлены растровые картины средней плотности из двумерного расчета на различные моменты времени.

Как показывают результаты двумерных расчетов, по методу PPM на одной и той же сетке удается описать более мелкие особенности течения по сравнению с донорным методом.

На рис. 15 представлены растровые картины средней плотности (в логарифмическом масшта-

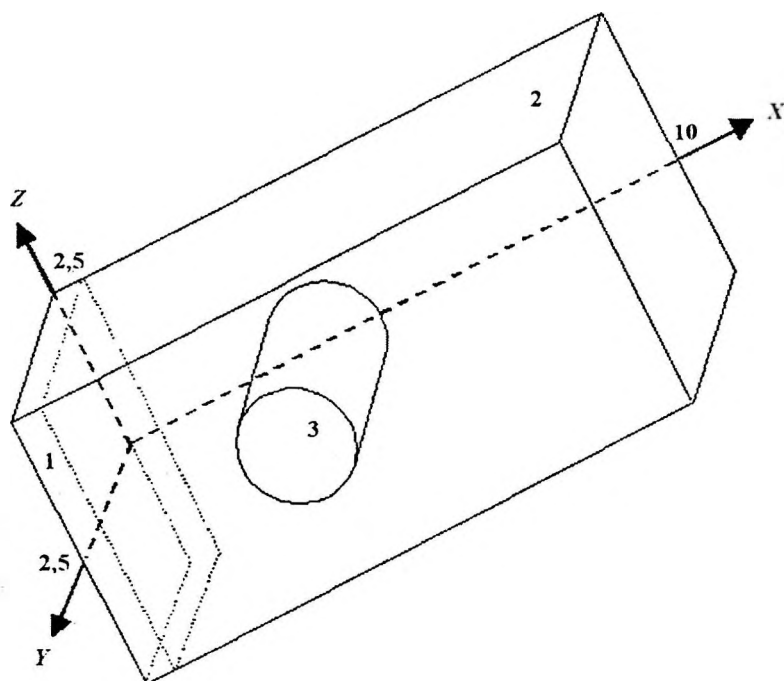


Рис. 13. Постановка трехмерного расчета задачи Бенджамина

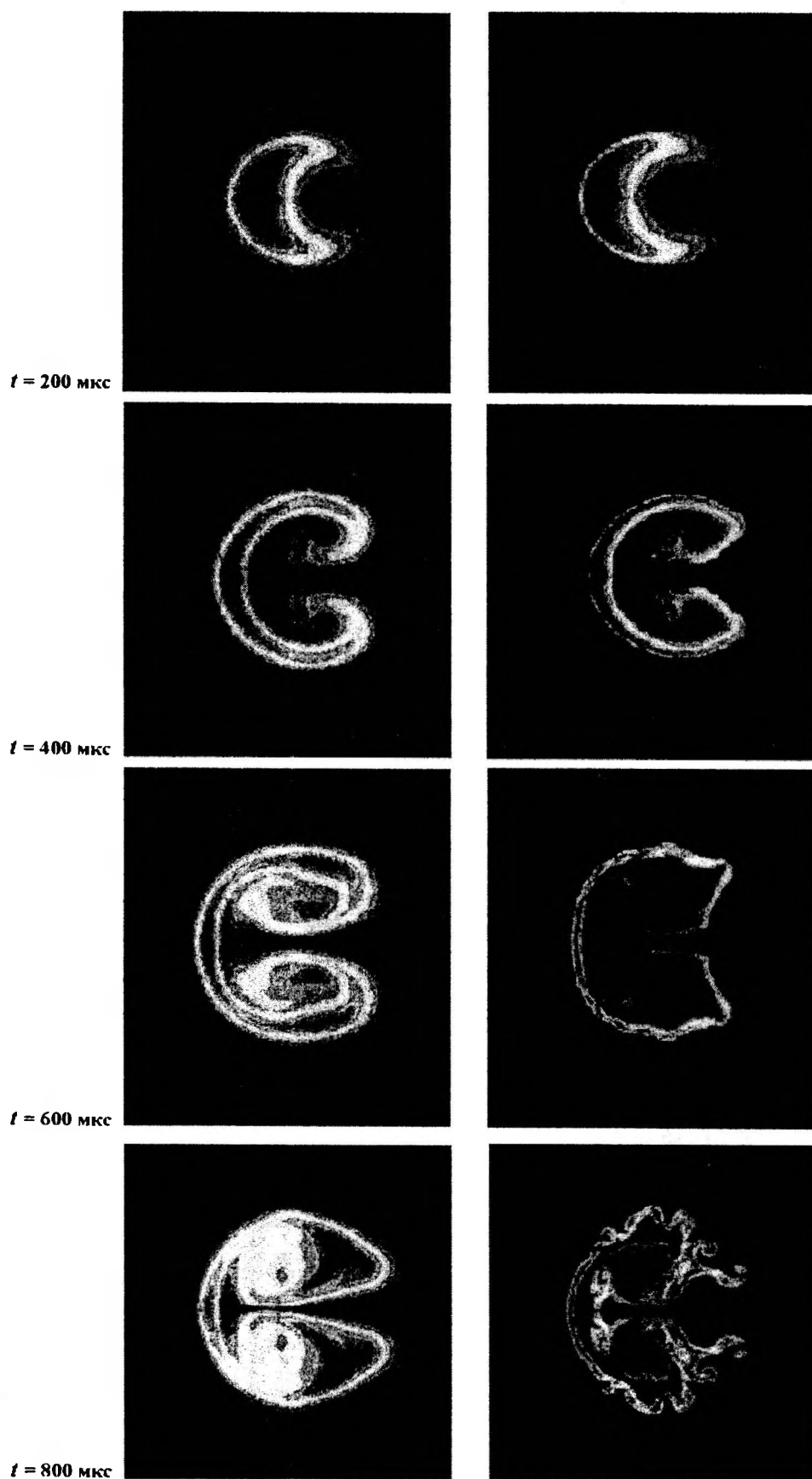


Рис. 14. Растровые картины средней плотности на различные моменты времени из двумерного расчета: слева — по методу DM; справа — по методу PPM

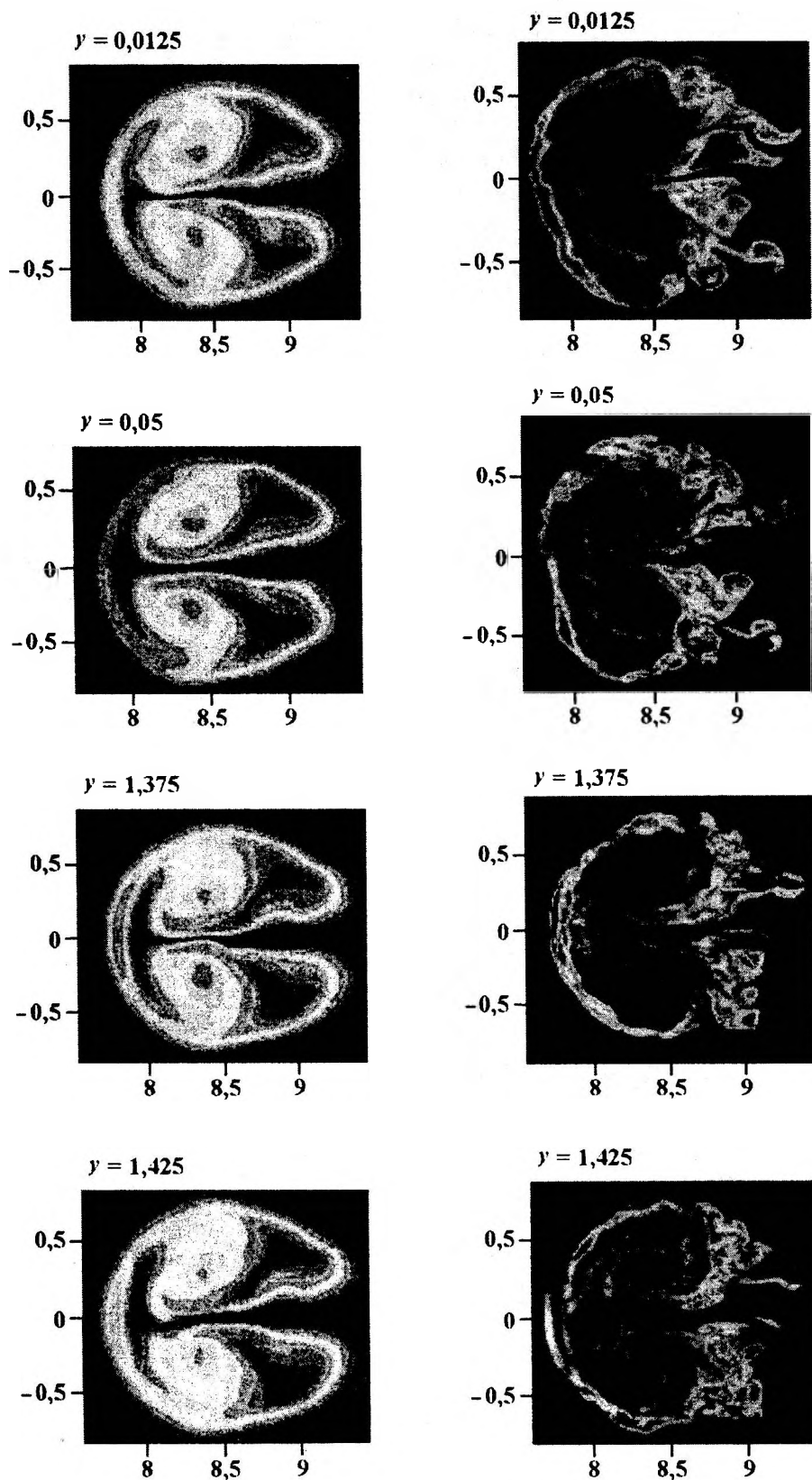


Рис. 15. Растровые картины средней плотности в трехмерном расчете в плоскостях, перпендикулярных оси Y , $t = 800$ мкс: слева — по методу DM; справа — по методу PPM

бе) по нескольким плоскостям, перпендикулярным оси Y , в трехмерном расчете на момент времени $t = 800$ мкс. Как видно из рисунка, при расчете донорным методом картины средней плотности практически не отличаются, т. е. теряет трехмерность задачи. При расчете по методу PPM все картины отличны друг от друга и трехмерность сохраняется.

Заключение

По результатам расчетов можно сделать вывод, что алгоритм, объединяющий методы концентраций и PPM, на различных классах задач показывает свое преимущество по сравнению с каждым из трех рассмотренных методов в отдельности и позволяет получать более точные результаты на одной и той же сетке или уменьшить количество ячеек без потери точности.

Работа была выполнена при частичной финансовой поддержке Лос-Аламосской национальной лаборатории в рамках контракта 37713-000-02-35, номер 012.

Список литературы

1. Дарова Н. С., Дибиров О. А., Жарова Г. В., Шанин А. А., Янилкин Ю. В. Комплекс программ ЭГАК. Лагранжево-эйлерова методика расчета двумерных газодинамических течений многокомпонентной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1994. Вып. 2. С. 51–58.
2. Yanilkin Yu. V., Tarasov V. I., Stadnik A. L. et al. Program system TREK for numerical simulation of 3D multi-component medium flows // Proc. of Workshop "New Models and Numerical Codes for Shock Wave Processes in Condensed Media". Oxford, 1997. P. 413–422.
3. Бахрах С. М., Глаголева Ю. П., Самигулин М. С., Фролов В. Д., Яненко Н. Н., Янилкин Ю. В. Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 3. С. 566–569.
4. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Шанин А. А. Метод расчета двумерных осесимметричных газодинамических течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых переменных // Там же. 1984. Т. 278, № 4. С. 829–833.
5. Янилкин Ю. В. Численное моделирование двумерных течений многокомпонентной среды с учетом некоторых мелкомасштабных процессов // Физическая мезомеханика. 1999. Т. 2, № 5. С. 27–48.
6. Woodward P. R., Colella Ph. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks // J. Comp. Phys. 1984. Vol. 54. P. 115–174.
7. Кучерова П. А., Янилкин Ю. В., Гончаров Е. А. Применение кусочно-параболического метода для решения уравнения адвекции в комплексе ЭГАК // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 1. С. 29–35.
8. Бондаренко Ю. А. Порядок аппроксимации, порядок численной сходимости и экономичность счета многомерной газовой динамики в переменных Эйлера на примере расчетов на сходимость задачи "Blast-Waves" // Там же. 2004. Вып. 4. С. 51–61.
9. Андрианкин Э. И., Коган А. М., Компанец А. С., Крайнов В. П. // ПМТФ. 1962. № 6.
10. Zoldi C. A., Prestridge K., Rightley P. M. and Benjamin R. F. Simulations of a shock-accelerated gas cylinder and comparison with experimental images and velocity fields // 8th Int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing. Pasadena, USA, 2001.

Статья поступила в редакцию 24.08.05.
Исправленный вариант — 21.10.05.