

АЛГОРИТМЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ РАДИУСА СГЛАЖИВАНИЯ В МЕТОДЕ SPH

И. Д. Блажнов, С. Н. Полищук

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

Введение

Метод сглаженных частиц (от англ. Smoothed Particles Hydrodynamics method) [1] является лагранжевым бессточным методом, в основе которого лежит интерполяционный принцип. Значения величин в любой точке пространства вычисляются по известным значениям в заданных точках с использованием процедуры сглаживания. Одним из основных параметров, влияющих на точность счета, является радиус сглаживания (длина сглаживания). Выбор способа вычисления его значения зависит от решаемой задачи.

В работе рассматриваются общеизвестные алгоритмы вычисления длины сглаживания. На примере ряда тестовых задач газовой динамики, имеющих аналитические решения, проводится сравнение точности получаемых численных решений, а также времени, затраченного на поиск соседства при вычислении радиуса сглаживания по разным алгоритмам.

Метод сглаженных частиц

Дифференциальные уравнения, описывающие течение невязкого газа, в переменных Лагранжа имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= -\rho \nabla \bar{u}, \\ \frac{d\bar{u}}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p, \\ \frac{d\varepsilon}{dt} &= -\frac{p}{\rho} \nabla \bar{u}, \\ \frac{d\bar{r}}{dt} &= \bar{u}, \end{aligned} \quad (1)$$

где \bar{r} – вектор перемещения, t – время, ρ – плотность, \bar{u} – вектор скорости, ε – внутренняя энергия, p – давление.

Система уравнений (1) замыкается уравнением состояния:

$$p = p(\rho, \varepsilon). \quad (2)$$

Система уравнений (1)–(2) решается с помощью метода сглаженных частиц. основополагающие формулы для вычисления расчетных величин $f(\bar{r})$ в любой точке пространства по значениям в известных точках \bar{r}_j , имеют следующий вид:

$$\langle f(\bar{r}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho(\bar{r}_j)} f(\bar{r}_j) W(\bar{r} - \bar{r}_j, h), \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla f(\bar{r}) \rangle &= \sum_j \frac{m_j}{\rho(\bar{r}_j)} f(\bar{r}_j) \nabla W(\bar{r} - \bar{r}_j, h), \\ \nabla W(\bar{r} - \bar{r}_j, h) &= W'(\bar{r} - \bar{r}_j, h) \frac{\bar{r} - \bar{r}_j}{|\bar{r} - \bar{r}_j|} \end{aligned} \quad (4)$$

где W – ядро сглаживания, h – радиус сглаживания. В качестве ядра сглаживания используется сплайн третьей степени [1]:

$$W(\bar{r}_i - \bar{r}_j, h) = N \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{R^3}{2}, & 0 \leq R \leq 1 \\ \frac{(2-R)^3}{6}, & 1 \leq R \leq 2 \\ 0, & R > 2 \end{cases}$$

где $N = \frac{1}{h}$ и $\frac{15}{7\pi h^2}$, соответственно, для одномерного и двумерного случаев.

Используя формулы (3) и (4), для частицы с номером i можно записать дискретную систему уравнений газовой динамики в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} &= \sum_j m_j (\bar{u}_i - \bar{u}_j) \nabla W_{ij}, \\ \frac{d\bar{u}_i}{dt} &= -\sum_j m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla W_{ij}, \\ \frac{d\varepsilon_i}{dt} &= \sum_j m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} + \Pi_{ij} \right) (\bar{u}_i - \bar{u}_j) \nabla W_{ij}, \\ \frac{d\bar{r}_i}{dt} &= \bar{u}_i. \end{aligned} \quad (5)$$

Искусственная вязкость Π_{ij} вычисляется по формуле:

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{(-\alpha c_{ij} + \beta \mu_{ij}) \mu_{ij}}{\rho_{ij}}, & (\bar{u}_i - \bar{u}_j)(\bar{r}_i - \bar{r}_j) < 0 \\ 0, & (\bar{u}_i - \bar{u}_j)(\bar{r}_i - \bar{r}_j) \geq 0 \end{cases}$$

$$\mu_{ij} = \frac{h_{ij} (\bar{u}_i - \bar{u}_j)(\bar{r}_i - \bar{r}_j)}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|^2 + \varepsilon^2 h_{ij}^2}, \quad c_{ij} = \frac{1}{2}(c_i + c_j),$$

$$\rho_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j),$$

где h_{ij} – длина сглаживания i и j частиц, c_i – скорость звука, α , β и ε – заданные константы (равные, соответственно, 1; 2 и 0,1).

При интегрировании дифференциальных уравнений (5) по времени используется схема «предиктор-корректор» с консервативным расщеплением уравнения энергии [2], которая обеспечивает приближенное выполнение закона сохранения полной энергии.

Шаг «предиктор»:

$$\rho_i^* = \rho_i^n + \frac{1}{2} \tau \sum_j m_j (\bar{u}_i^n - \bar{u}_j^n) \nabla W_{ij},$$

$$\varepsilon_i^* = \varepsilon_i^n + \frac{1}{2} \tau \sum_j m_j \left(\frac{p_i^n}{(\rho_i^n)^2} + \frac{p_j^n}{(\rho_j^n)^2} + \Pi_{ij} \right) (\bar{u}_i^n - \bar{u}_j^n) \nabla W_{ij}.$$

Первый проход шага «корректор»:

$$\bar{u}_i^{n+1} = \bar{u}_i^n - \tau \sum_j m_j \left(\frac{p_i^*}{(\rho_i^*)^2} + \frac{p_j^*}{(\rho_j^*)^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla W_{ij},$$

$$\bar{u}_i^* = \frac{1}{2} (\bar{u}_i^n + \bar{u}_i^{n+1}).$$

Второй проход шага «корректор»:

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n + \tau \sum_j m_j (\bar{u}_i^* - \bar{u}_j^*) \nabla W_{ij},$$

$$\varepsilon_i^{n+1} = \varepsilon_i^n + \tau \sum_j m_j \left(\frac{p_i^*}{(\rho_i^*)^2} + \frac{p_j^*}{(\rho_j^*)^2} + \Pi_{ij} \right) (\bar{u}_i^* - \bar{u}_j^*) \nabla W_{ij}.$$

Основным фактором, влияющим на устойчивость, безавзностность и точность счета, является способ выбора радиуса сглаживания. Радиус сглаживания для двух взаимодействующих частиц в настоящей работе вычисляется как:

$$h_{ij} = \frac{1}{2} \gamma (h_i + h_j),$$

где γ – заданная константа (равна 1).

Значение длины сглаживания частиц может быть переменным или фиксированным на всем протяжении счета. Рассмотрим основные общеизвестные алгоритмы вычисления радиуса сглаживания:

1. *Постоянный радиус сглаживания:*

$$h_i = \theta_1 d_0, \quad (6)$$

где θ_1 – заданная константа, d_0 – начальная расстановка между частицами.

2. Радиус сглаживания, вычисляемый по расстоянию до ближайшей частицы:

$$h_i = \theta_2 \min_j |\vec{r}_i - \vec{r}_j|, \quad (7)$$

где θ_2 – заданная константа (равна 2).

3. Радиус сглаживания, вычисляемый с учетом объема, занимаемого частицей [3, 4]:

$$h_i = \theta_3 \left(\frac{m_i}{\rho_i} \right)^{1/d}, \quad (8)$$

где θ_3 – заданная константа (равна 1,2), d – число пространственных измерений.

Паршиков [5], в качестве длины сглаживания полагает диаметр окружности, площадь которой равна объему занимаемой частицей (в одномерном случае – расстояние между частицами)

$$h_i = \tilde{\theta}_3 \left(\frac{m_i}{\rho_i} \right)^{1/d}, \quad (9)$$

где $\tilde{\theta}_3$ равна 1 для одномерного случая и $2/\sqrt{\pi}$ для двумерного случая.

4. Радиус сглаживания выбирается таким образом, чтобы обеспечивалось заданное число соседей. В работе [6] используется следующая итерационная процедура:

$$h_i^{\gamma+1} = \frac{1}{2} h_i^\gamma \left[1 + \left(\frac{N_s}{N_i^\gamma} \right)^{\frac{1}{d}} \right], \quad h_i^\gamma \Big|_{\gamma=0} = h_i^n, \quad (10)$$

где γ – номер итерации, N_i – текущее число соседних частиц, N_s – заданное желаемое число соседних частиц.

Итерационный процесс завершается при выполнении по всем i следующего условия:

$$\frac{N_i^\gamma - N_s}{N_s} 100 \% \leq \delta_{\max},$$

где δ_{\max} – заданное значение дисбаланса (~5–10 %).

Для корректирования радиуса сглаживания на каждом временном шаге можно применить подход, рассмотренный в частности в работе [3]. Соотношение, при котором число соседних частиц для фиксированной плотности ρ_0 и радиуса h_0 будет таким же, как и для плотности ρ с длиной сглаживания h в момент времени t :

$$h(t) = h_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho(t)} \right)^{1/d}.$$

Тогда производная по длине сглаживания запишется в виде:

$$\frac{dh_i}{dt} = \frac{1}{d} \frac{h_i}{\rho_i} \frac{d\rho_i}{dt}.$$

Аппроксимируя данное уравнение по явной схеме, получим итоговую формулу расчета на шаге радиуса сглаживания:

$$h_i^{n+1} = h_i^n + \frac{\tau}{d} \frac{h_i^n}{\rho_i^n} \frac{d\rho_i^n}{dt}. \quad (11)$$

Значение производной плотности по времени вычисляется из уравнения сохранения массы (5).

Использование постоянного радиуса сглаживания на всем протяжении расчета существенно упро-

щает алгоритм поиск соседства частиц. Так, например, можно ввести несколько вспомогательных сеток поиска и каждому ансамблю частиц с одинаковой длиной сглаживания отнести свою сетку, на которой реализовать поиск (или просто напрямую выполнять расчет взаимодействия частиц без списков соседей). При вычислении радиуса сглаживания по другим алгоритмам реализация процедуры установления соседства очевидно существенно усложняется. Приходится либо каким-то образом группировать частицы по длине сглаживания или применять иерархические древовидные структуры [6], упрощающие вычисления.

Однако в задачах со значительным сжатием и разрежением вещества использование постоянного радиуса сглаживания может привести к существенному снижению точности решения, вследствие избыточного числа соседей у частиц в зонах ударных волн, и потере связи частиц в зонах разрежения. Поэтому использование алгоритмов с переменной длиной сглаживания является неизбежным при решении данных задач.

Решение задач

Ниже представлены результаты расчетов тестовых задач с использованием различных алгоритмов вычисления радиуса сглаживания. При вычислении значения плотности на новый момент времени во всех расчетах использовалась следующая формула:

$$\rho_i^{n+1} = \sum_j m_j W_{ij}.$$

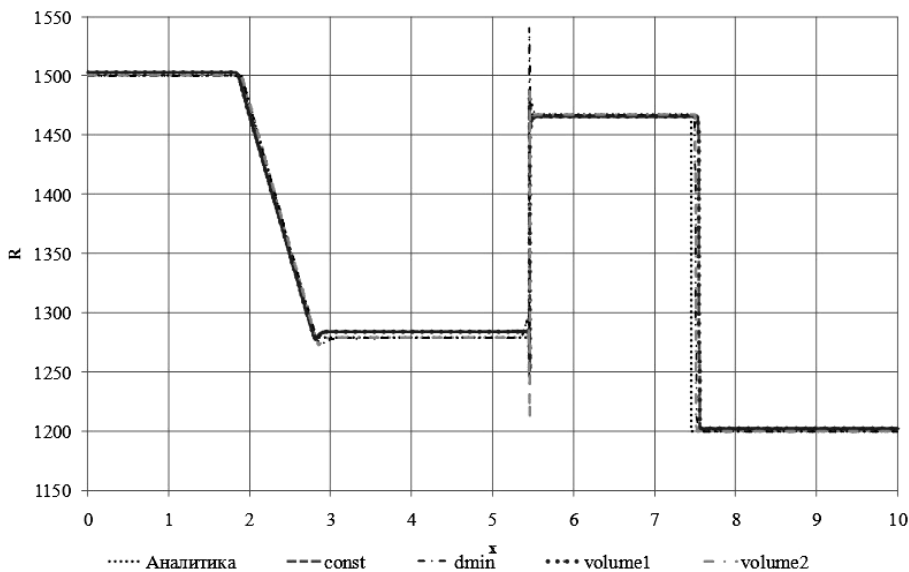


Рис. 1. График зависимости плотности от координаты на момент времени 0,04

Введены следующие условные обозначения рассмотренных алгоритмов: const – постоянный радиус сглаживания (6), dmin – радиус сглаживания, вычисляемый по расстоянию до ближайшей частицы (7), volume1 (8), volume2 (9) – подходы, в которых при вычислении длины сглаживания учитывается объем занимаемый частицей, neighbors – алгоритм, обеспечивающий заданное число соседей (10), divU – алгоритм с корректированием радиуса сглаживания на каждом временном шаге (11).

Распад произвольного разрыва

В области [0, 10] рассматривается одномерное течение идеального газа с показателем адиабаты $\gamma = 3$. В центре области реализуется контактный разрыв: слева от контакта $\rho = 1,5 \times 10^3$, $u = 0$ и $p = 3 \times 10^6$, справа – $\rho = 1,2 \times 10^3$, $u = 0$, $p = 10^3$. На границах задано граничное условие – жесткая стенка. Расстановка частиц выполнена равномерно, число частиц задано равным 4816.

На рис. 1 на момент времени $t = 0,04$ представлены графики расчетной зависимости плотности от координаты в сравнении с точным решением в расчетах по различным алгоритмам. Численная погрешность в норме $L1$ представлена в табл. 1 (в последних трех столбцах в начальный момент радиус сглаживания вычисляется по указанным алгоритмам, а затем выполняется его пересчет с учетом дивергенции скорости (алгоритм divU)).

Суммарное время, потраченное на процедуру поиска соседей частиц (нормированное на число временных шагов) представлено в табл. 2.

Таблица 1

Численная погрешность в расчетах

Алгоритм	const	dmin	volume1	volume2	neighbors (каждый шаг)	dmin + divU	volume1+ divU	volume2 + divU
$\ \rho\ _{L1}$	4,164	2,832	4,156	2,759	1,532	2,704	4,129	2,733

Суммарное время, потраченное на процедуру поиска соседства

Алгоритм	const	dmin	volume1	volume2	neighbors (каждый шаг)	dmin + divU	volume1+ divU	volume2 + divU
Время	0,0027	0,0043	0,0067	0,0056	0,0311	0,0067	0,0049	0,0061

Из полученных результатов видно, что при использовании различных алгоритмов вычисления радиуса сглаживания подход $\text{div}U$ позволяет незначительно увеличить точность решения. Алгоритм neighbors является наиболее трудоемким, но вместе с тем позволяет получить наиболее точное численное решение.

Задача о взаимодействии двух ударных волн

Задача решается на отрезке $[0, 1]$ до момента времени $t = 0,038$. Расчетная область разбита на три отрезка $0 \leq x \leq 0,1$ ($\rho = 1, u = 0, p = 10^3$), отрезка $0,1 \leq x \leq 0,9$ ($\rho = 1, u = 0, p = 10^{-2}$), отрезка $0,9 \leq x \leq 1,0$ ($\rho = 1, u = 0, p = 10^2$). На границах задано граничное условие – жесткая стенка.

Расстановка частиц выполнена равномерно, число частиц задано 4000. На рис. 2 на момент времени 0,038 представлен график расчетной зависимости плотности от координаты в сравнении с решением, полученным по разностному методу. Численная

погрешность в расчетах в норме $L1$ представлена в табл. 3.

Суммарное время, потраченное на процедуру поиска соседей частиц (нормированное на число временных шагов) представлено в табл. 4.

Наиболее точное численное решение получено по алгоритму volume2, при этом время, потраченное на процедуру поиска соседства, сопоставимо с остальными алгоритмами.

Задача о сильном взрыве

Ниже решается задача с начальной энергией $E_0 = 10^7$, сосредоточенной в шаре радиуса 0,1. Показатель адиабаты $\gamma = 1,4$, плотность $\rho = 1$. Газ находится в состоянии покоя $u = 0$. Задача решалась в двумерной плоской постановке $-3 \leq z, r \leq 3$. Расстановка частиц выполнялась равномерно с шагом 0,005. На границах задано граничное условие – жесткая стенка. Расчеты проводились с числом частиц 1440000.

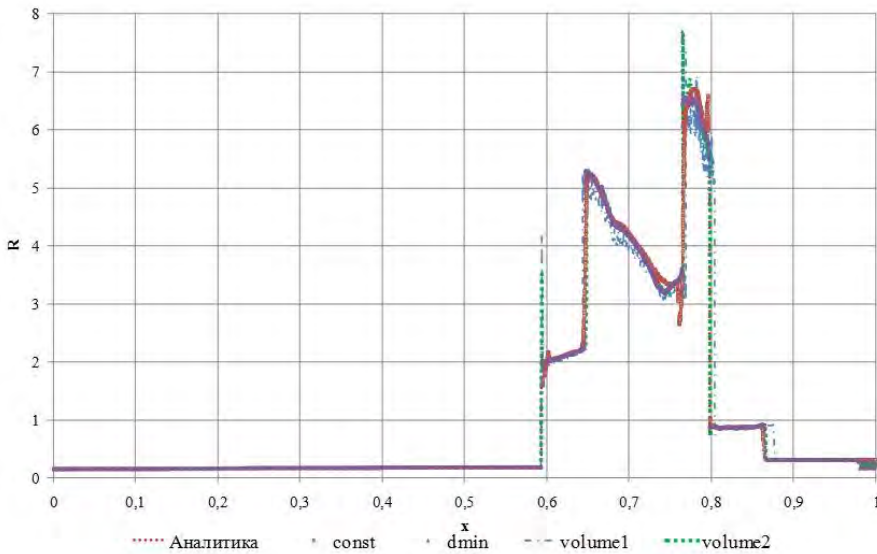


Рис. 2. График зависимости плотности от координаты на момент времени 0,038

Таблица 3

Численная погрешность в расчетах

Алгоритм	const	dmin	volume1	volume2	dmin + divU	volume1+ divU	volume2 + divU
$\ \rho\ _{L1}$	0,033	0,355	0,099	0,020	1,141	0,341	0,243

Таблица 4

Суммарное время, потраченное на процедуру поиска соседства

Алгоритм	const	dmin	volume1	volume2	dmin + divU	volume1+ divU	volume2 + divU
Время	0,0041	0,0135	0,0090	0,0073	0,0211	0,0667	0,0361

На рис. 3 на момент времени 0,004 представлены графики расчетной зависимости плотности от координаты в сравнении с точным решением при использовании разных алгоритмов вычисления радиуса сглаживания.

Из графика видно, что использование постоянного радиуса сглаживания (алгоритм const) приводит к неверному численному решению, что связано с потерей соседства частиц на волне разрежения в процессе счета.

Суммарное время, потраченное на процедуру поиска соседей частиц (нормированное на число временных шагов) представлено в табл. 5.

Суммарное время, потраченное на процедуру поиска соседства

Алгоритм	const	volume1	volume2
Время	0,491	3,270	3,505

Наилучшее согласие численного решения с аналитическим получено при использовании алгоритма neighbors (с желаемым числом соседей 35). В качестве начального алгоритма вычисления радиуса сглаживания использовался volume1. На рис. 4 на момент времени 0,008 представлены графики

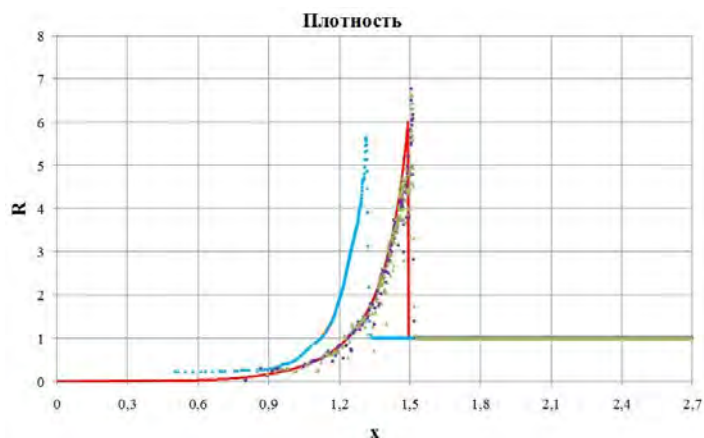


Рис. 3. Графики зависимости плотности от координаты на момент времени 0,004

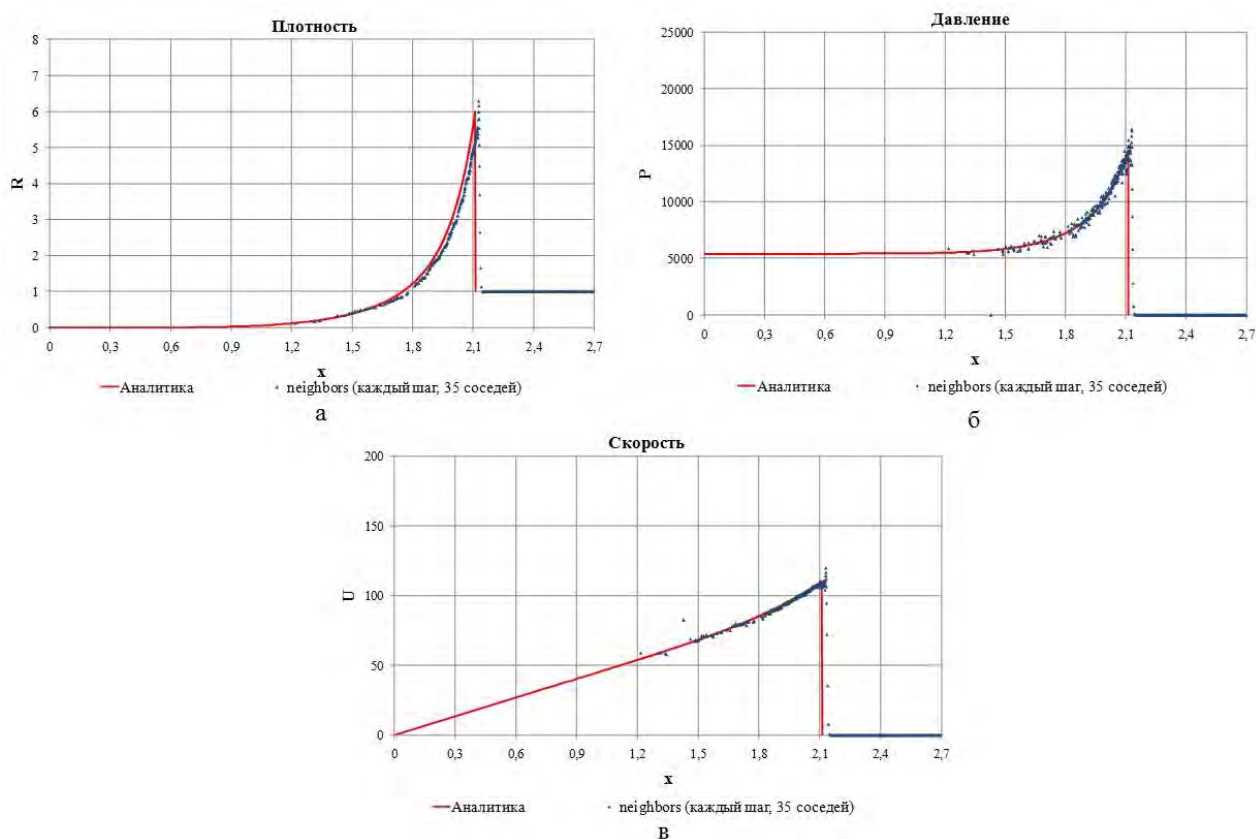


Рис. 4. Графики зависимости от координаты на момент времени 0,008: а – плотности, б – давления, в – скорости

Численная погрешность в расчетах

Алгоритм	neighbors (20 соседей)	neighbors (25 соседей)	neighbors (35 соседей)	neighbors (40 соседей)	neighbors (50 соседей)
$\ \rho\ _{L1}$	0,117	0,067	0,061	0,091	0,531

Таблица 7

Численная погрешность в расчетах

Алгоритм	neighbors(1)	neighbors(5)+ divU	neighbors(10) + divU	neighbors(13)+ divU
$\ \rho\ _{L1}$	0,061	0,105	0,0864	0,114

Таблица 8

Суммарное время, потраченное на процедуру поиска соседства

Алгоритм	neighbors(1)	neighbors(5)+ divU	neighbors(10) + divU	neighbors(13)+ divU
Время	8,038	3,435	2,752	2,540

расчетной зависимости плотности, давления и скорости от координаты в сравнении с точным решением при использовании алгоритма neighbors на каждом расчетном шаге.

В табл. 6 приведена численная погрешность в норме $L1$ на момент времени 0,008 в расчетах с алгоритмом neighbors с различным желаемым числом соседей у частиц (указано в скобках). Из табл. 6 видно, что наилучшее согласие с аналитическим решением получено при выборе 35 желаемых соседей у частиц.

Численная погрешность для расчетов с алгоритмом neighbors в комбинации с divU представлена в табл. 7. Алгоритм neighbors вызывался каждые 1, 5, 10 и 13 шагов (в таблице указано в скобках), число желаемых соседей у частиц задано равным 35.

Суммарное время, затраченное на процедуру поиска соседей частиц (нормированное на число временных шагов) представлено в табл. 8.

Из полученных результатов видно, что по быстрдействию и точности получаемого численного решения лучшим является расчет с подправкой радиуса сглаживания по алгоритму neighbors через каждые 10 временных шагов. Время, потраченное на процедуру поиска соседей сопоставимо с расчетами по алгоритмам volume1 и volume2.

Заключение

Анализ результатов расчетов приведенных задач газовой динамики показал, что с использованием постоянного радиуса сглаживания не всегда удается получить решение с требуемой точностью, что связано как с потерей соседства у частиц, так и с избыточным их числом на фронтах ударных волн. Использование переменного радиуса сглаживания по приведенным алгоритмам позволяет решить данную проблему. Наиболее устойчивым для счета является алгоритм с поддержанием желаемого числа соседей у частиц. На задаче о сильном взрыве получено, что более точное решение получается при числе желаемых соседей порядка 30–40. Комбинирование данного алгоритма с алгоритмом вычисления радиуса

сглаживания по дивергенции скорости не существенно влияет на точность численного решения.

Наиболее быстрым по затраченному времени на процедуру поиска соседства является алгоритм с постоянным радиусом сглаживания. Остальные алгоритмы в два и более раз трудозатратны по вычислениям. Самым затратным по вычислениям является алгоритм с поддержанием заданного желаемого числа соседей у частиц. Однако на задаче о сильном взрыве показано, что время по комбинированному алгоритму при поправке длины сглаживания под желаемое число соседей через каждые 10 шагов сопоставимо с временем в расчетах с другими алгоритмами выбора переменного радиуса сглаживания.

Литература

1. Monaghan J. J. Smoothed particle hydrodynamics // Annual reviews of astronomy and astrophysics, 1992. N 30. P. 543–575.
2. Бондаренко Ю. А. Консервативное расщепление уравнения энергии в разностных схемах типа «крест» для Лагранжевой газодинамики // Журнал Вычислительной математики и математической физики, 1997. Т. 37, № 8. С. 1020–1023.
3. Алиев А. В., Тарнавский Г. А. Иерархический SPH-метод для математического моделирования в гравитационной газовой динамике // Сибирские электронные математические известия, 2007. Т. 4. С. 376–434.
4. Tricco T. S. Simulating astrophysical magnetic fields with smoothed particle magnetohydrodynamics. Melburn.: School of mathematical science Monach University, 2015.
5. Паршиков А. Н. Применение решения задачи Римана в методе частиц // Журнал Вычислительной математики и математической физики, 1999. Т. 39, № 7. С. 1216–1225.
6. Hernquist L., Katz N., TreeSPH: A Unification of SPH with the Hierarchical Tree Method, The Astrophysical Journal Supplements Series, 70 (1989 June), 419–446.