

ЧИСЛЕННОЕ СРАВНЕНИЕ МОДИФИКАЦИЙ МЕТОДА СГЛАЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Е. С. Романова, С. Н. Полищук, М. Н. Вишнякова, А. А. Уткина

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

Введение

Метод сглаженных частиц (SPH) является бессеточным лагранжевым методом. Сплошная среда заменяется дискретной системой расположенных в пространстве частиц. Значения расчетных величин в любой точке пространства вычисляются по значениям в ближайших частицах с применением процедуры сглаживания по заданной интерполяционной функции.

В работе рассматривается три варианта метода SPH: классический метод [1], модификация Монагана [2] с представлением дискретных уравнений в виде схожем с уравнениями, построенными на Римановых решениях, и метод Паршикова [3], основанный на аналитических решениях задачи Римана. На примере решения ряда задач газовой динамики в одномерной и двумерной постановках проводится качественное и количественное сравнение численных решений по данным модификациям метода.

Варианты метода сглаженных частиц

Уравнения газовой динамики, отражающие основные законы сохранения массы, импульса и энергии, в переменных Лагранжа, имеют следующий вид:

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

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

Для замыкания системы используется уравнение состояния:

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

Для численного решения данных уравнений применяется метод SPH. Значение расчетной величины и ее градиента в методе вычисляются по формулам:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \sum_j \frac{m_j}{\rho(\vec{r}_j)} f(\vec{r}_j) W(\vec{r} - \vec{r}_j, h), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla f(\vec{r}) \rangle &= \sum_j \frac{m_j}{\rho(\vec{r}_j)} f(\vec{r}_j) \nabla W(\vec{r} - \vec{r}_j, h), \\ \nabla W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) &= W'(\vec{r} - \vec{r}_j, h) \frac{\vec{r} - \vec{r}_j}{|\vec{r} - \vec{r}_j|}, \end{aligned} \quad (2)$$

где h – длина сглаживания, W – интерполяционное ядро, в качестве которого используется сплайн третьей степени [1]:

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

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

Классический метод

Используя формулы (1) и (2) дискретная система уравнений газовой динамики для частицы с номером i запишется в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} &= \sum_j m_j (\vec{u}_i - \vec{u}_j) \nabla W_{ij}, \\ \frac{d\vec{u}_i}{dt} &= -\sum_j m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla W_{ij}, \\ \frac{d\varepsilon_i}{dt} &= -\sum_j m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{1}{2} \Pi_{ij} \right) (\vec{u}_i - \vec{u}_j) \nabla W_{ij}, \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} &= \vec{u}_i. \end{aligned} \quad (3)$$

Искусственная вязкость Π_{ij} вычисляется по формуле:

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

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

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

где c_i – скорость звука, α , β и ε – константы, которые полагаются, соответственно, равными 1, 2 и 0.1.

При интегрировании дифференциальных уравнений (3) по времени используется схема «предиктор-корректор», с консервативным расщеплением уравнения энергии [4].

Шаг «предиктор»:

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

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

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»:

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

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

Использование данной схемы позволяет гарантировать приближенное выполнение закона сохранения полной энергии.

Модификация Монагана

Монаган в работе [2] получил систему уравнений для классического метода SPH в виде, схожем с уравнениями, построенными на Римановых решениях для сжимаемой газовой динамики (уравнение сохранения массы остается неизменным):

$$\begin{aligned} & \frac{d\bar{u}_i}{dt} = \\ & = - \sum_j m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} - \frac{K u_{sig}(i, j)}{\rho_{ij}} (\bar{u}_i - \bar{u}_j) \frac{\bar{r}_i - \bar{r}_j}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} \right) \nabla W_{ij}, \\ & \frac{d\bar{\varepsilon}_i}{dt} = \sum_j m_j \frac{p_i}{\rho_i^2} (\bar{u}_i - \bar{u}_j) \nabla W_{ij} + \\ & + \sum_j m_j \frac{K u_{sig}(i, j)}{\rho_{ij}} \left(\varepsilon_i - \varepsilon_j - \frac{1}{2} \left((\bar{u}_i - \bar{u}_j) \frac{\bar{r}_i - \bar{r}_j}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} \right)^2 \right) W'_{ij}, \quad (4) \end{aligned}$$

$$u_{sig}(i, j) = c_i + c_j - 2(\bar{u}_i - \bar{u}_j) \frac{\bar{r}_i - \bar{r}_j}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|},$$

где $\rho_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j)$, $u_{sig}(i, j)$ – скорость сигнала, $K = 0,5\alpha$ (α – константа равная 1).

Слагаемое $\frac{K u_{sig}(i, j)}{\rho_{ij}} (\bar{u}_i - \bar{u}_j) (\bar{r}_i - \bar{r}_j) = 0$, если $(\bar{u}_i - \bar{u}_j) (\bar{r}_i - \bar{r}_j) \geq 0$.

Интегрирование по времени уравнений (4) выполняется по стандартной схеме «предиктор-корректор». Закон сохранения полной энергии не выполняется.

Метод Паршикова

В предыдущих вариантах метода SPH используется вязкие члены. Паршиков предложил метод [3], основанный на аналитических решениях Римана, что позволяет обходиться при сквозном счете ударных волн без явного включения искусственной вязкости.

Дискретизация уравнений газовой динамики для частицы с номером i имеет вид:

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -2 \sum_j m_j (U_i^R - U_j^R) W'_{ij}.$$

$$\frac{d\bar{u}_i}{dt} = -2 \sum_j m_j \left(\frac{P_{ij}^R}{\rho_i \rho_j} \right) \nabla W_{ij}, \quad (5)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\varepsilon_i + \frac{|\bar{u}_i|^2}{2} \right) = -2 \sum_j m_j \left(\frac{P_{ij}^R U_{ij}^R}{\rho_i \rho_j} \right) W'_{ij},$$

$$\frac{d\bar{r}_i}{dt} = \bar{u}_i,$$

где $U_i^R = \bar{u}_i \frac{\bar{r}_j - \bar{r}_i}{|\bar{r}_j - \bar{r}_i|}$ – проекция скорости на отрезок

взаимодействия частиц.

В работе [3] значение скорости U_{ij}^R и давления P_{ij}^R на границе взаимодействия вычисляются по формулам акустического приближения, в настоящей работе применяются формулы распада разрыва [5].

При интегрировании данных уравнений по времени используется явная разностная схема. Представление уравнения в форме полной энергии (5) гарантирует приближенное выполнение закона сохранения энергии.

Численное сравнение методов

Ниже на примере решения задач газовой динамики проводится сравнение рассмотренных вариантов метода SPH. При вычислении значений плотности трех модификаций использовалась следующая формула:

$$\rho_i = \sum_j m_j W_{ij}.$$

Радиус сглаживания в задачах выбирался либо постоянным: $h_i = \theta d_0$ (θ – заданная константа, d_0 – начальная расстановка между частицами), либо на каждом временном шаге подбирался так, чтобы обеспечить заданное число соседей [6]:

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

итерации, d – размерность задачи, N_i – текущее число соседних частиц, N_s – заданное желаемое число соседних частиц).

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 – $\rho = 1,2 \times 10^3$, $u = 0$, $p = 10^6$. На границах задано граничное условие – жесткая стенка.

Расстановка частиц осуществлялась равномерно вдоль оси абсцисс. Было проведено расчеты с числом частиц 250, 500, 1000 и 4000. Радиус сглаживания задан постоянный (θ равно 5).

На рис. 1 на момент времени $t = 0,04$ представлены графики зависимостей расчетных величин от координаты в расчете с числом частиц 4000 в сравнении с точным решением [5]. В табл. 1 приведена численная погрешность в расчетах.

Из приведенных данных видно, что по классическому методу на контактном разрыве наблюдается нефизический скачек в плотности, давлении и энергии. По другим вариантам скачек отсутствует. По всем трем модификациям наблюдается сходимость численного решения. Наиболее близкое численное решение к аналитическому получено по классическому методу. В расчете на сетке с числом частиц 4000 дисбаланс полной энергии для классического метода, для модификации Монагана и метода Паршикова составил $1.6e-13\%$, $5e-07\%$ и $7.8e-12\%$, соответственно.

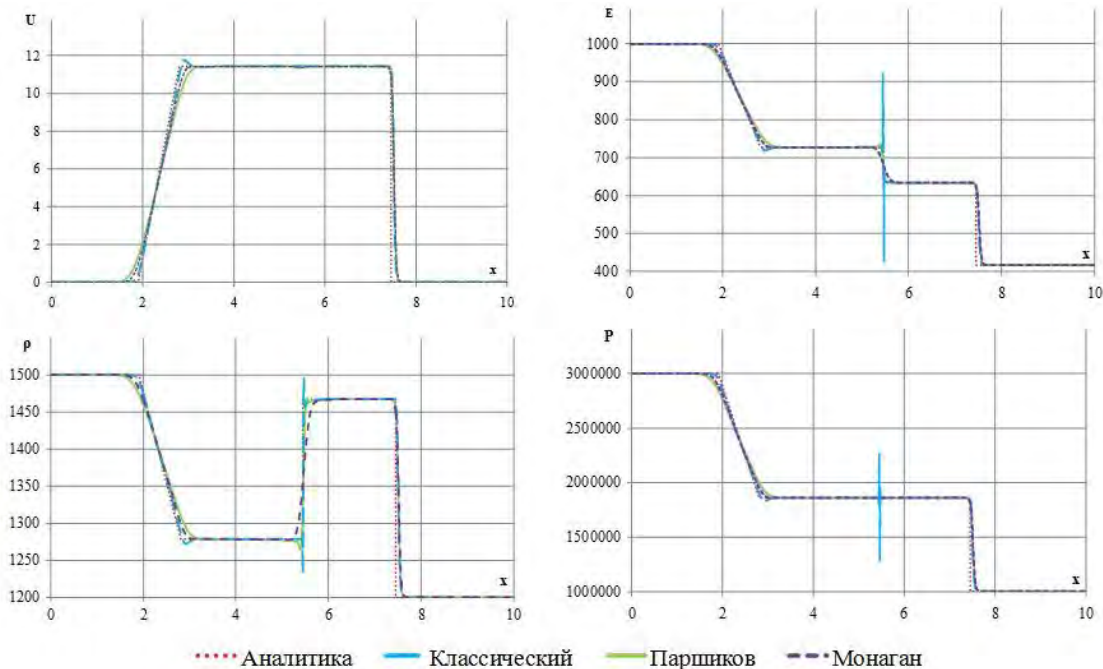


Рис. 1. Графики зависимости расчетных величин от координаты на момент времени $t = 0,04$

Таблица 1

Численная погрешность в расчетах

| Вариант метода | Число частиц | $\ U\ _{L1}$ | $\ E\ _{L1}$ | $\ P\ _{L1}$ | $\ \rho\ _{L1}$ |
|----------------------|--------------|--------------|--------------|--------------|-----------------|
| Классический метод | 250 | 0,36 | 8,7 | 0,016 | 9,6 |
| | 500 | 0,35 | 8,4 | 0,015 | 9,3 |
| | 1000 | 0,2 | 4,8 | 0,014 | 5,3 |
| | 4000 | 0,1 | 2,3 | 0,005 | 3,2 |
| Модификация Монагана | 250 | 0,5 | 12 | 0,013 | 15,6 |
| | 500 | 0,4 | 11 | 0,012 | 15,1 |
| | 1000 | 0,3 | 8,3 | 0,008 | 10 |
| | 4000 | 0,1 | 3,6 | 0,003 | 4,6 |
| Метод Паршикова | 250 | 0,6 | 15 | 0,018 | 16 |
| | 500 | 0,58 | 14 | 0,016 | 15 |
| | 1000 | 0,4 | 9,7 | 0,01 | 10 |
| | 4000 | 0,17 | 4,2 | 0,005 | 4,4 |

Задача о скачке уплотнения

В области $-15 \leq x \leq 15$ рассматривается одномерное течение нетеплопроводного идеального газа с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$. Расчетная область содержит две подобласти, со следующими параметрами: $\rho_1 = 4, U_1 = 0,866, P_1 = 1$ и $\rho_2 = 1, U_2 = 0, P_2 = 0$. На границах задано граничное условие – жесткая стенка.

Расстановка частиц осуществлялась равномерно вдоль оси абсцисс. Было проведено расчеты с числом частиц 250, 500, 1000 и 4000. Радиус сглаживания задан постоянный (θ равно 5).

На рис. 2 на момент времени $t = 8$ представлен график расчетной зависимости плотности от координаты в окрестности ударной волны в расчете с 4000 частиц. Численная погрешность в расчетах приведена в табл. 2.

Из приведенного графика видно, что классический метод и его модификация, предложенная Монаганом, сглаживают решение в окрестности фронта

ударной волны. Оригинальный метод Паршикова с расчетом распада разрыва по акустическому приближению также дает похожее сглаженное решение. По всем трем вариантам метода видна сходимость численного решения. Наиболее близкое численное решение к аналитическому получено по методу Паршикова.

Задача о взаимодействии двух ударных волн

В области $[0, 1]$ рассматривается одномерное течение идеального газа с показателем адиабаты $\gamma = 1,4$. Расчетная область содержит три подобласти расположенных в интервале $0, 0 \leq x \leq 0,1, 0,1 \leq x \leq 0,9$ и $0,9 \leq x \leq 1,0$, соответственно. В каждой области были определены следующие параметры: в первой подобласти – $\rho = 1, u = 0, p = 1000$, во второй подобласти – $\rho = 1, u = 0, p = 0,01$, в третьей подобласти – $\rho = 1, u = 0, p = 100$. На границах задано граничное условие – жесткая стенка.

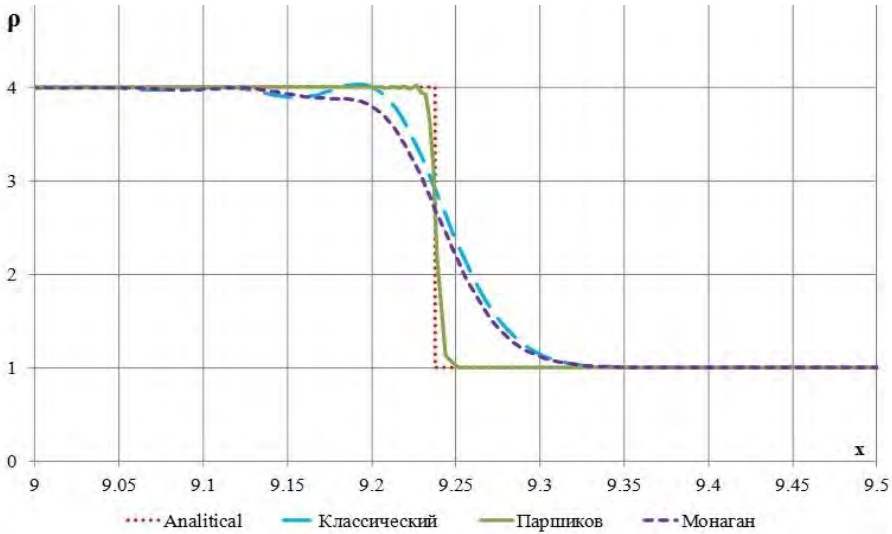


Рис. 2. График зависимости плотности от координаты на момент времени $t = 8$

Таблица 2

Численная погрешность в расчетах

| Вариант метода | Число частиц | $\ U\ _{L1}$ | $\ E\ _{L1}$ | $\ P\ _{L1}$ | $\ \rho\ _{L1}$ |
|----------------------|--------------|--------------|--------------|--------------|-----------------|
| Классический метод | 250 | 0,05 | 0,03 | 0,1 | 0,23 |
| | 500 | 0,03 | 0,013 | 0,04 | 0,13 |
| | 1000 | 0,04 | 0,011 | 0,03 | 0,1 |
| | 4000 | 0,01 | 0,004 | 0,01 | 0,03 |
| Модификация Монагана | 250 | 0,6 | 0,03 | 0,1 | 0,25 |
| | 500 | 0,3 | 0,14 | 0,04 | 0,12 |
| | 1000 | 0,25 | 0,1 | 0,03 | 0,1 |
| | 4000 | 0,009 | 0,004 | 0,01 | 0,04 |
| Метод Паршикова | 250 | 0,027 | 0,012 | 0,025 | 0,09 |
| | 500 | 0,025 | 0,011 | 0,022 | 0,07 |
| | 1000 | 0,01 | 0,004 | 0,011 | 0,04 |
| | 4000 | 0,007 | 0,003 | 0,01 | 0,03 |

Расстановка частиц осуществлялась равномерно вдоль оси абсцисс. Было проведено расчеты с числом частиц 250, 500, 1000 и 4000. Радиус сглаживания для классического метода был задан постоянный (θ равно 5), для модификации Монагана и метода Паршикова вычислялся как $h_i = Km_i / \rho_i$ (K равно 1). С постоянным радиусом сглаживания последние два варианта метода не удовлетворительно описывают аналитическое решение.

На рис. 3 на момент времени $t = 0,038$ представлен график расчетной зависимости плотности от координаты в расчете с 4000 частиц. Задача не имеет аналитического решения, результаты расчетов сравниваются с решением, полученным по разностному методу. В табл. 3 приведена численная погрешность в расчетах.

Из приведенных данных видно, что более точное решение получено по методу Паршикова. Численное решение, полученное по модификации Монагана, сильно сглаживает решение. Дисбаланс полной энергии в расчетах на сетках с числом частиц 4000 для классического метода, для модификации

Монагана и метода Паршикова составил $5.8e-13\%$, $4.63e-01\%$ и $5.68e-12\%$, соответственно.

Задача о сильном взрыве

Рассматривается 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 плоской постановке до момента времени 0,004. Расчетная область ограничена квадратом $-3 \leq x, y \leq 3$. Число частиц задано равным $1200 \times 1200 = 1440000$. Радиус сглаживания так, чтобы обеспечить число соседей у частиц равное 35.

На рис. 4 представлена динамика разлета частиц по трем вариантам метода SPH. Стоит отметить, что в классическом методе при формировании ударной волны наблюдается «слоистое» движение частиц; по другим вариантам движение частиц «плавное», экспоненциальное.

На рис. 5 на момент времени $t = 0,004$ представлен график расчетной зависимости плотности от координаты.

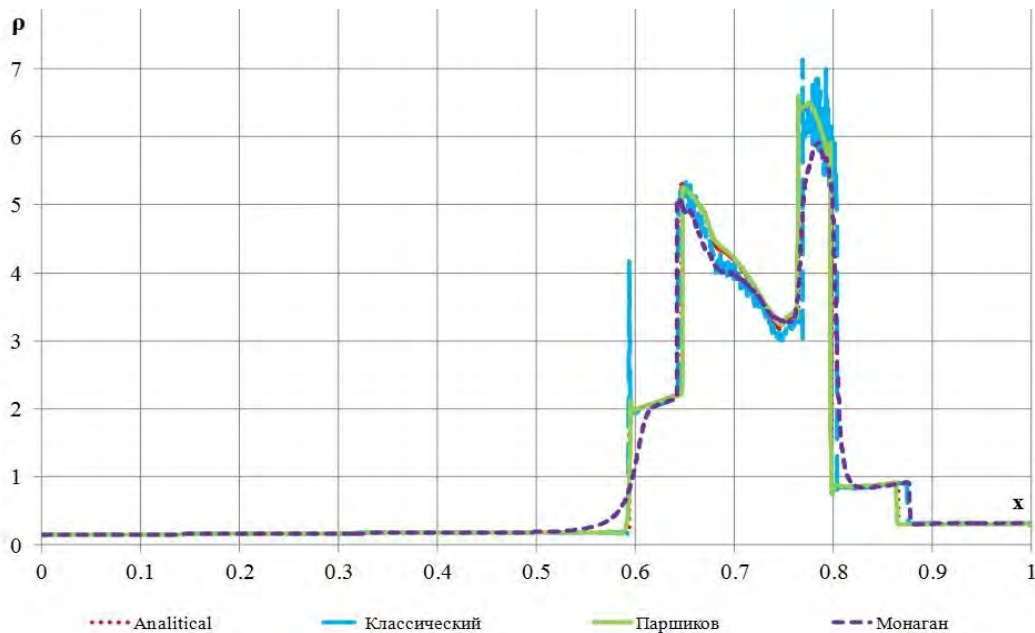


Рис. 3. График зависимости плотности от координаты на момент времени $t = 0,038$

Таблица 3

Численная погрешность в расчетах

| Метод / Число частиц | $\ \rho\ _{L1}$ | | | | $\ \rho\ _{L2}$ | | | |
|----------------------|-----------------|------|------|-------|-----------------|------|------|------|
| | 250 | 500 | 1000 | 4000 | 250 | 500 | 1000 | 4000 |
| Классический метод | 0,2 | 0,12 | 0,1 | 0,096 | 0,6 | 0,5 | 0,47 | 0,46 |
| Модификация Монагана | 0,23 | 0,18 | 0,14 | 0,13 | 0,45 | 0,42 | 0,4 | 0,36 |
| Метод Паршикова | 0,1 | 0,07 | 0,04 | 0,007 | 0,45 | 0,33 | 0,23 | 0,08 |

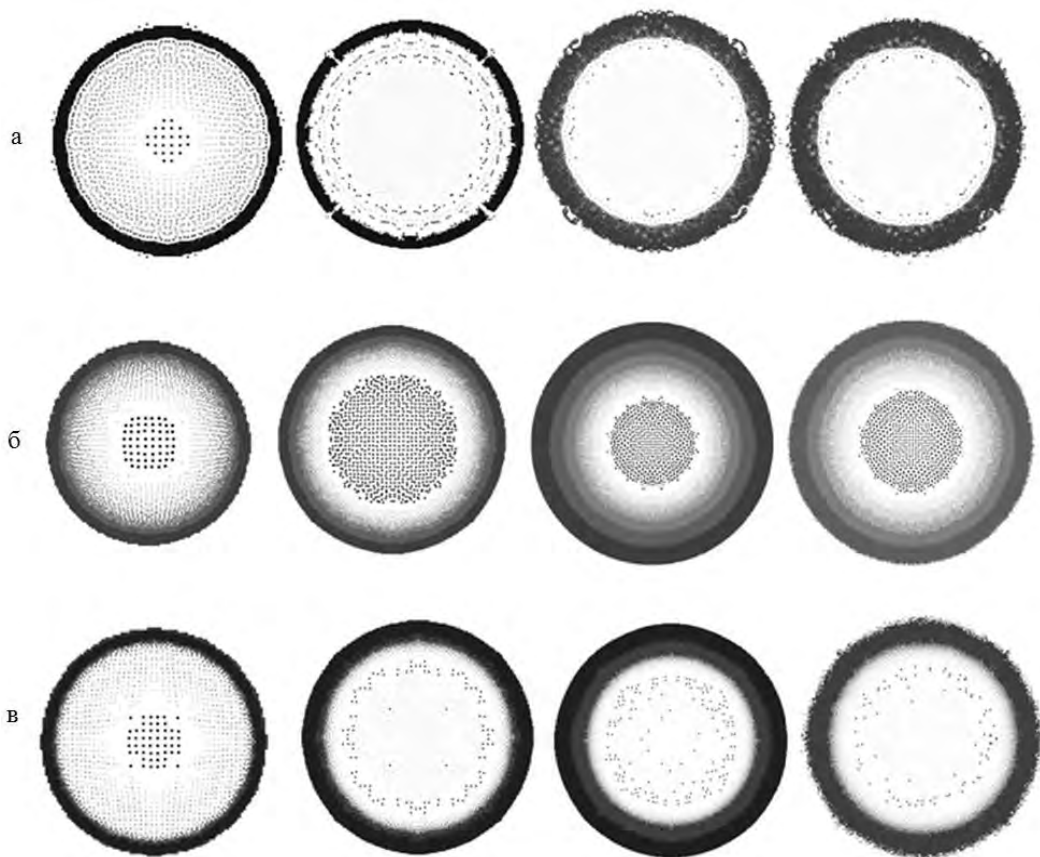


Рис. 4. Динамика разлета частиц: а – по классическому методу, б – по модификации Монагана, в – по методу Паршикова

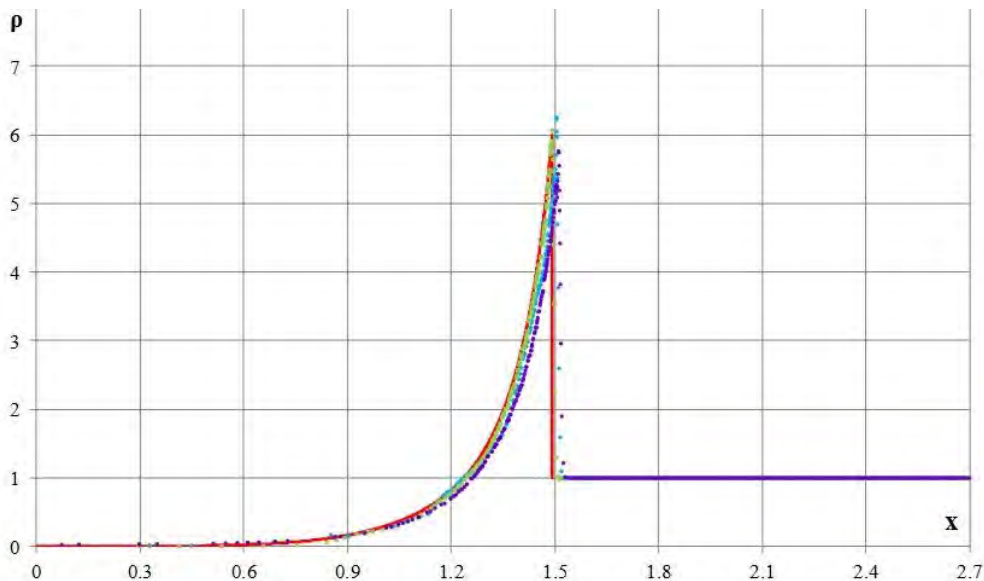


Рис. 5. График зависимости плотности от координаты на момент времени $t = 0,004$

Погрешность в норме L1 в расчетах по классическому методу составила 0,117, по модификации Монагана – 0,145 и по методу Паршикова – 0,078. Дисбаланс полной энергии, соответственно, по трем вариантам метода составил $2.3e-11\%$, $1.1e-04\%$ и $2.1e-11\%$.

Заключение

В работе рассмотрено три модификации метода SPH: классический метод, модификация Монагана и метод Паршикова. Использование схемы «предиктор-корректор» с консервативным расщеплением энергии для классического метода и представление

уравнения сохранения энергии в форме полной энергии для метода Паршикова позволяют обоим вариантам метода приближенно сохранять полную энергию (максимальный дисбаланс энергии не превышает $1e-10\%$).

По всем вариантам метода SPH получено качественное и количественное согласие численных решений рассмотренных задач газовой динамики в сравнении с аналитическими решениями. Показана сходимость численных решений по числу частиц. В задаче распада разрыва по классическому методу на контактном разрыве наблюдается нефизический скачок в плотности, давлении и энергии, в то время как по другим вариантам скачок отсутствует. В задачах о скачке уплотнения показано, что использование формул распада разрыва [5] в методе Паршикова позволяет более точно описывать фронт ударной волны. В задаче о сильном взрыве при формировании ударной волны наблюдается «слоистое» движение частиц в расчете по классическому методу, по другим вариантам метода движение частиц «плавное», экспоненциальное.

Литература

1. Monaghan J. J. Smoothed particle hydrodynamics // Annual reviews of astronomy and astrophysics, 1992. N 30. P. 543–575.
2. Monaghan J. J. SPH and Riemann solvers // Journal of computational physics, 1997. N 136. P. 298–307.
3. Паршиков А. Н. Применение решения задачи Римана в методе частиц // Журнал Вычислительной математики и математической физики, 1999, Т. 39, № 7. С. 1216–1225.
4. 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.
5. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
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.