

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЛОКАЛЬНЫХ ИТЕРАЦИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИИ В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ НИКИФОРОВА – КОЗЛОВА В РАМКАХ МЕТОДИКИ МИМОЗА

А. А. Синельникова, Э. И. Замалиев

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

Введение

Метод локальных итераций является многошаговым итерационным методом решения уравнений диффузионного типа. В настоящее время в методике МИМОЗА диффузионные уравнения модели турбулентного перемешивания (ТП) решаются неявным методом. Недостатком такого подхода является высокая вычислительная нагрузка и, следовательно, высокие траты процессорного времени. Применение метода локальных итераций (ЛИ) должно снизить вычислительную нагрузку и увеличить скорость расчета данного типа уравнений без потери, а возможно и с повышением, точности. В работе описаны метод ЛИ и метод ЛИ-М (модификация метода ЛИ), приведены алгоритм работы данного метода и некоторые аспекты его программной реализации.

Система уравнений трехмерной модели Никифорова – Козлова

Уравнения записаны в декартовой системе координат.

Изменение средних значений газодинамических величин (скорости, плотности, внутренней энергии) определяется уравнениями:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \operatorname{div} \vec{V} \quad (1)$$

$$\frac{dV_i}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial T_{ik}}{\partial x_k} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} = & -\frac{P}{\rho} \operatorname{div}(\vec{V} - \vec{W}) + \\ & + \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(2\rho D_t \nabla E) - \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \bar{q}_r + \omega \Phi \end{aligned} \quad (3)$$

Для тензора турбулентных напряжений принято представление [1]:

$$T_{ik} = 2\rho \frac{e_{ik}}{e} \Phi \quad (4)$$

Изменение массовых концентраций всех компонентов турбулентной смеси определяется турбулентной диффузией:

$$\frac{dc_k}{dt} = \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(2\rho D_t \nabla c_k) \quad (5)$$

где $k = 1, \dots, N$.

Изменение значений величин, характеризующих собственно турбулентность, описывается следующими уравнениями баланса.

Полная энергия турбулентности с учетом пульсаций плотности:

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{dt} = \\ = \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \left\{ \rho (3D_t \nabla \Phi - \vec{W} \Phi) \right\} - \frac{1}{\rho} \sigma_{mn} V_{mn} - \vec{W} \frac{d\vec{V}}{dt} - \omega \Phi \end{aligned} \quad (6)$$

Тензор «кинетической энергии» турбулентности:

$$\begin{aligned} \frac{de_{ij}}{dt} = & \operatorname{div}(3D_t \nabla e_{ij} - \vec{W} e_{ij}) - e_{ij} \operatorname{div} \vec{W} - V_{ik} e_{kj} - V_{jk} e_{kj} + \\ & + \frac{f_1}{2} (W_i G_j + W_j G_i) - L_{ij} - \frac{Q}{3} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (7)$$

Скорость диссипации кинетической энергии турбулентности:

$$\begin{aligned} \frac{dQ}{dt} = & \operatorname{div} \left(2,3 D_t \nabla Q - \vec{W} Q \right) - Q \operatorname{div} \vec{W} + \frac{3}{2} f_1 \vec{W} \vec{G} \frac{Q}{e} + \\ & + \psi \left\{ -\frac{4}{3} Q \operatorname{div}(\vec{V} - \vec{W}) - \gamma \omega \left(e_{mn} - \frac{1}{3} \delta_{mn} e \right) V_{mn} + \right. \\ & \left. + \beta \frac{R}{1+R} L_{mn} A_m W_n - 2 \frac{Q^2}{ke} \right\} + \\ & + (1 - \psi) \left\{ -3 \frac{e_{mn} V_{mn}}{e} Q - \frac{3}{2} \frac{Q^2}{e} - Q \frac{B}{1+10R} \operatorname{div} \vec{V} \right\} \end{aligned} \quad (8)$$

Скорость турбулентного потока массы:

$$\begin{aligned} \frac{dW_i}{dt} = & \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \left\{ \rho (2D_t \nabla W_i - \vec{W} W_i) \right\} - V_{im} W_m + \\ & + 2e_{im} A_m + f_1 R G_i - k_W \omega W_i \end{aligned} \quad (9)$$

Средняя интенсивность относительного квадрата пульсаций плотности:

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dt} = & \frac{1}{\rho^2} \operatorname{div} \left\{ \rho^2 (D_t \nabla R - \vec{W} R) \right\} + R \operatorname{div} \vec{W} + \\ & + 2\vec{W} \vec{A} - \frac{3}{2} \omega R \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь введены обозначения: \bar{q}_r – плотность потока энергии излучения в приближении лучистой теплопроводности; $e = e_{11} + e_{22} + e_{33}$ – кинетическая энергия турбулентности; $\omega = \frac{Q}{e}$ – частота турбулентных пульсаций; $D_t = \alpha_{Dt} \frac{\bar{e}e}{Q} \left[1 + \alpha_2 \frac{f_1 |\bar{W}| \sqrt{e}}{\bar{e}} \right]$ – коэффициент турбулентной диффузии:

Турбулентная диффузия величин и концентраций

Из уравнений (1) – (10) можно выделить те члены, которые описывают процесс турбулентной диффузии:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(2\rho D_t \nabla E) + \dots \\ \frac{dc_k}{dt} &= \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(2\rho D_t \nabla c_k), \quad k=1, \dots, N \\ \frac{d\Phi}{dt} &= \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(3\rho D_t \nabla \Phi) + \dots \\ \frac{de_{ij}}{dt} &= \operatorname{div}(3D_t \nabla e_{ij}) + \dots \\ \frac{dQ}{dt} &= \operatorname{div}(2.3D_t \nabla Q) + \dots \\ \frac{dW_i}{dt} &= \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(3\rho D_t \nabla W_i) + \dots \\ \frac{dR}{dt} &= \frac{1}{\rho^2} \operatorname{div}(\rho^2 D_t \nabla R) + \dots \end{aligned}$$

Из представленной системы уравнений можно выписать общий вид уравнения диффузии концентраций и турбулентных величин:

$$\frac{du}{dt} = \frac{1}{\rho^\alpha} \operatorname{div}(\chi \nabla u)$$

Коэффициент диффузии равен:

$$\chi = k_i \rho^\alpha D_t = \begin{cases} 3\rho D_t \\ 3D_t \\ 2.3D_t \\ 2\rho D_t \\ \rho^2 D_t \end{cases}$$

Подобное унифицированное представление коэффициента диффузии облегчает его использование при программной реализации счетных методов при разбиении на группы.

Описание и особенности метода локальных итераций

В основе метода лежит решение уравнения в явном виде за несколько подшагов с использованием специальных коэффициентов [2]. Рассматривается уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu$$

где L – линейный эллиптический самосопряженный оператор с коэффициентами, такой, что $Lu = \operatorname{div}(k(x, t) \operatorname{grad} u)$.

В рамках данной работы через u^n обозначается приближенное решение задачи на временном слое n , а через y^m – значение на подшаге m . Принципиальной особенностью метода ЛИ является правило построения многочлена Чебышева, корни которого используются для определения итерационных параметров.

Рассмотрим переход от u^n к u^{n+1} более подробно.

1. Задание начального приближения $y^0 = u^n$.

2. Вычисление верхней границы λ_∞ спектра оператора L_h по формуле:

$$\lambda_\infty = \max_{i \in \Omega_h} \sum_{k \in S_i} |l_k^i|$$

где l_k^i – разностные коэффициенты, связанные с узлом i , и зависящие не только от сетки, но и от коэффициента χ .

3. Вычисление степени многочлена Чебышева p по формуле

$$p = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{\tau \lambda_\infty + 1} \right\rceil$$

где $\lceil \cdot \rceil$ – округление до целого вверх.

4. Вычисление нулей многочлена Чебышева по формуле:

$$\beta_m \in K_p = \left\{ \cos \frac{2i-1}{2p} \pi, i = \overline{1, p} \right\}$$

и их упорядочивание.

5. Вычисление числа подшагов M и итерационных параметров a_m :

Метод ЛИ число ($M = p$):

$$a_m = \frac{\lambda_\infty}{1 + z_1} (z_1 - \beta_m), \quad m = \overline{1, p}$$

Метод ЛИ-М ($M = 2p - 1$):

$$a_m = \frac{\lambda_\infty}{1 + z_1} (z_1 - \beta_m), \quad m = \overline{1, p},$$

$$a_m = a_{m-p}, \quad m = \overline{p+1, 2p-1}$$

6. Выполнение итерационного процесса по подшкагам $m = \overline{1, M}$ по формуле:

$$y^m = \frac{1}{1 + \tau a_m} (u^n + \tau a_m y^{m-1} - \tau L_h y^{m-1})$$

7. Значение на последнем подшаге принимается в качестве функции на верхнем слое $u^{n+1} = y^M$.

Если расчет не закончен, то переходим к шагу 1 с $n = n + 1$.

В итоге решаются все $10 + N$ уравнений трехмерной модели Никифорова – Козлова для величин Φ , e_i , Q , W_i , R , E и c_N , где N равно количеству веществ.

Метод ЛИ не является асимптотически устойчивым при $t \rightarrow \infty$, что при больших временах расчета может привести к потере монотонности. Метод ЛИ-М монотонен, практически устойчив, и имеет первый порядок точности по времени.

Алгоритм работы метода локальных итераций

Все диффузионные уравнения модели можно условно разделить на пять групп, отличных коэффициентом диффузии. Таким образом, достаточно рассмотреть схему решения уравнений одной из групп. Решение диффузионного уравнения выполняется в несколько этапов.

1. Вычисление коэффициента диффузии χ . Коэффициент турбулентной диффузии известен.

$$\chi = k_i \rho^\alpha D_t = \begin{cases} 3\rho D_t \\ 3D_t \\ 2.3D_t \\ 2\rho D_t \\ \rho^2 D_t \end{cases}$$

2. Вычисление λ_∞ . Коэффициенты l_k^i вычисляются из геометрических коэффициентов, которые известны.

$$\lambda_\infty = \max_{i \in \Omega_h} \sum_{k \in S_i} |l_k^i|$$

3. Вычисление степени многочлена Чебышева, нулей многочлена Чебышева и итерационных параметров.

$$p = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{\tau \lambda_\infty + 1} \right\rceil$$

$$\beta_m \in K_p = \left\{ \cos \frac{2i-1}{2p} \pi, i = \overline{1, p} \right\}$$

$$a_m = \frac{\lambda_\infty}{1 + z_1} (z_1 - \beta_m), \quad m = \overline{1, p}$$

4. Выполнение итерационного процесса метода для каждого диффузионного уравнения из группы.

$$y^m = \frac{1}{1 + \tau a_m} (u^n + \tau a_m y^{m-1} - \tau L_h y^{m-1})$$

Приведенные выше этапы применяются для каждой группы диффузионных уравнений. Таким образом, каждая группа выполняет свое число подшагов. В настоящее время данный метод реализован для последовательной программы с целью валидации и верификации результатов.

Тестовые расчеты

Синтетический тест № 1

Рассматривается трехмерная область $R = [0, 2] \times [0, 1] \times [0, 5]$. Начальное распределение имеет вид

$$u(x) = \begin{cases} 1, & x < 1 \\ 2, & x \geq 1. \end{cases}$$

Расчет проводился на сгущающихся сетках, с разными шагами по времени для сетки 4N. Сетка 1N содержала 5 строк, 11 столбцов, 5 листов.

На рис. 1а. сравниваются решения, полученные по неявному методу, методу ЛИ и методу ЛИ-М на сетках с шагом $\tau = 0,001$ для величины $u(x)$. Расчеты представлены на момент времени $t = 0,1$ мс.

На рис. 1б сравниваются решения, полученные по неявному методу, методу ЛИ и методу ЛИ-М на сетке с разными шагами $\tau = 0,01, \tau = 0,005, \tau = 0,001, \tau = 0,0001$ для величины $u(x)$. Расчеты представлены на момент времени $t = 0,1$ мс.

Из рис. 1, видно, что при измельчении сетки метод ЛИ и ЛИ-М имеют тенденцию к сходимости и согласуются с неявным методом. Но с увеличением шага по времени (фактически увеличении числа подшагов) в решении по методу ЛИ проявляется немонотонность. В отличие от метода ЛИ, в его модификации подобная немонотонность не проявляется.

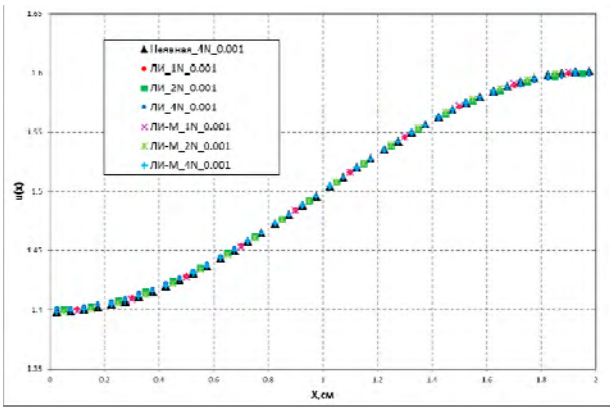
Синтетический тест № 2

Рассматривается трехмерная область $R = [0, 2] \times [0, 1] \times [0, 5]$. Начальное распределение имеет вид

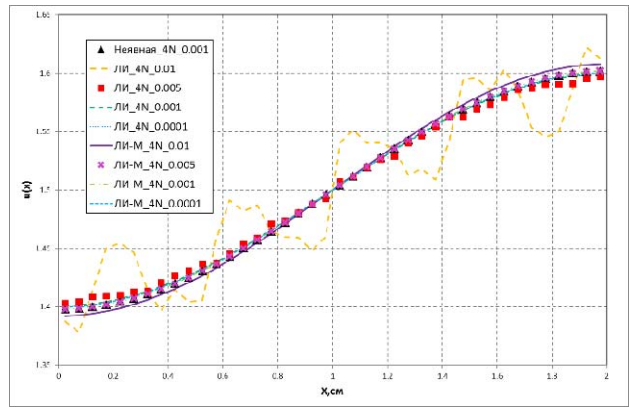
$$u(x) = (x - 1)^2$$

Расчет проводился на сгущающихся сетках с разными шагами по времени. Сетка 1N содержала 5 строк, 11 столбцов, 5 листов.

На рис. 2а приведены графики решения тестового расчета для величины $u(x)$, полученные по неявному методу, методу ЛИ и ЛИ-М. Расчеты представ-

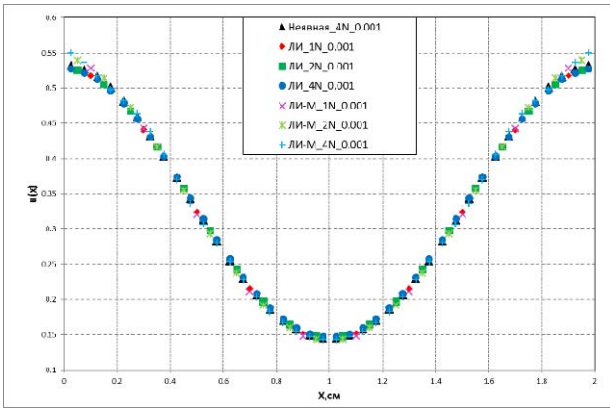


а

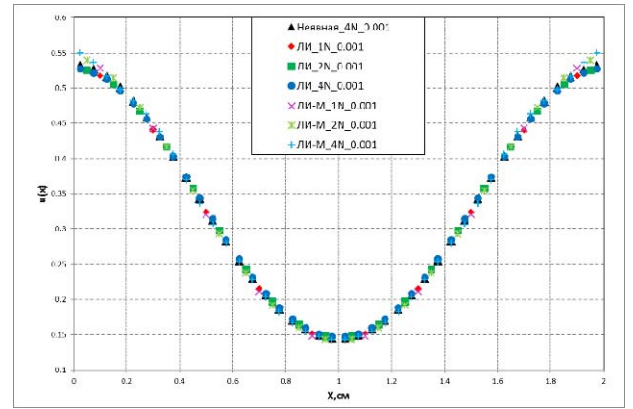


б

Рис. 1. Распределение величины $u(x)$ вдоль оси Ox : а – неявный метод, метод ЛИ и метод ЛИ-М на сетках с шагом $\tau = 0,001$, б – неявный метод, метод ЛИ и метод ЛИ-М на сетке с разными шагами по времени



а



б

Рис. 2. Распределение $u(x)$ вдоль оси Ox : а – неявный метод, метод ЛИ и метод ЛИ-М на сетках с шагом $\tau = 0,001$, б – неявный метод, метод ЛИ и метод ЛИ-М на сетке с разными шагами по времени

лены на сетках с шагом $\tau = 0,001$ на момент времени $t = 0,01$ мс.

На рис. 2б сравниваются решения, полученные по неявному методу, методу ЛИ и методу ЛИ-М на сетке с разными шагами $\tau = 0,01$, $\tau = 0,005$, $\tau = 0,001$, $\tau = 0,0001$ для величины $u(x)$. Расчеты представлены на момент времени $t = 0,01$ мс.

Из рис. 2 видно, что имеется тенденция к сходимости при измельчении сетки решений, полученных по методу ЛИ и ЛИ-М, к решению, полученному по неявному методу на самой подробной сетке. Расчеты по методам ЛИ и ЛИ-М почти совпадают. При увеличении числа подшагов решение по методу ЛИ проявляет неустойчивость.

Плоская бегущая волна

В трехмерной области решается уравнение диффузии, для которого точное решение имеет вид $u(x, t) = \sqrt{2(t+a-x)}$, где $a = 0,3$, а коэффициент диффузии равен $\chi = 2(t+a-x)$, плотность постоян-

на и равна $\rho = 10$. В начальный момент времени задано распределение $u(x, 0) = 0$, на левой и правой торце области задано точное решение, на остальных границах – нулевые потоки. Задача была посчитана на достаточно подробной сетке (201 столбец, 6 строк, 6 листов) с шагом $\tau = 0,0001$. Расчет проводился только методом ЛИ-М.

На рис. 3. представлены профили функции u вдоль координаты x на три различных момента времени $t = 0,1$, $t = 0,4$, $t = 0,6$ в сравнении с аналитическим решением. Из графиков видно, что полученное решение хорошо согласуется с точным решением на все моменты времени.

На рис. 4 представлен график зависимости числа «подшагов» от времени. Видно, как с изменением максимального значения коэффициента диффузии изменяется число подшагов метода.

Опыт Poggi

В опыте Poggi et al (1998) [3] в ударной трубе исследовалось развитие перемешивания на плоской

границе двух газов (воздуха и SF₆). Начальная геометрия задачи представлена на рис. 5, начальные данные для расчетов приведены в табл. 1. На правой границе области задано постоянное давление, равное 2,152 атм., на остальных границах задано условие «жесткая стенка». Для обоих веществ использовано уравнение состояния идеального газа.

Счет ТП начинается с момента $t_{TM} \approx 4,6$ мс (вскоре после прохождения УВ через границу газов), при этом в окрестностях контактной границы в слое шириной $2L_0$ ($L_0 = 0,15$ см) задаются начальные значения турбулентных величин: $e_0 = \Phi_0 =$

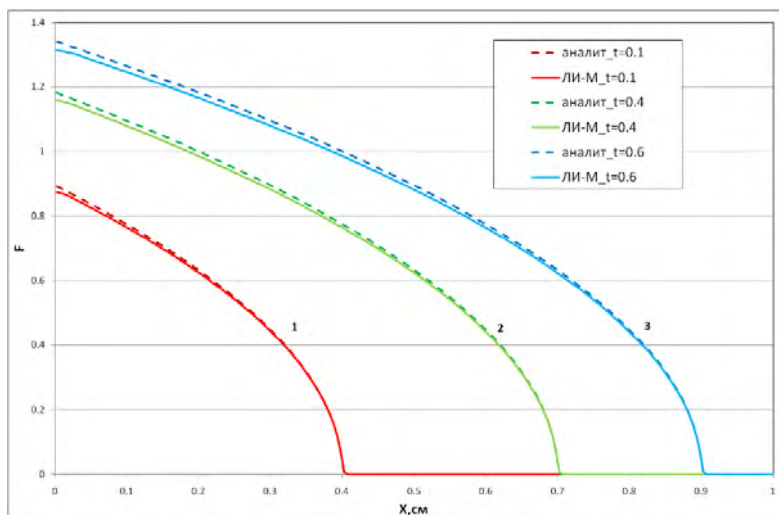


Рис. 3. Профили функции F вдоль координаты x : 1 – $t = 0,1$ мс, 2 – $t = 0,4$ мс, 3 – $t = 0,6$ мс

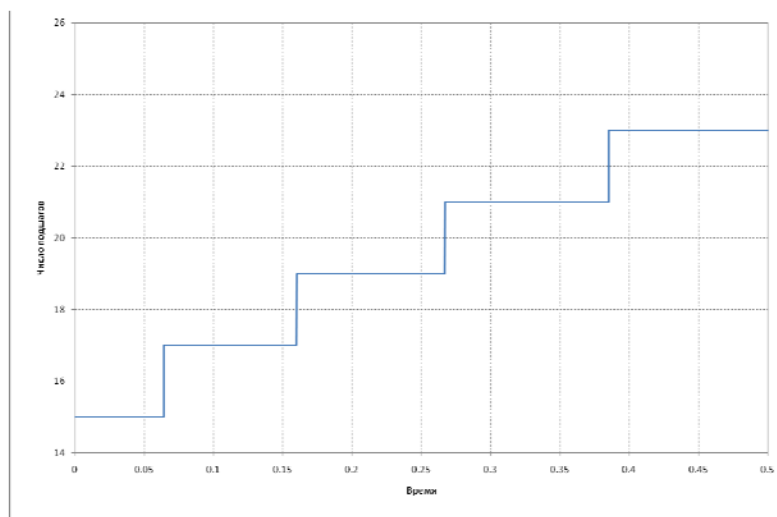


Рис. 4. График зависимости числа «подшагов» от времени

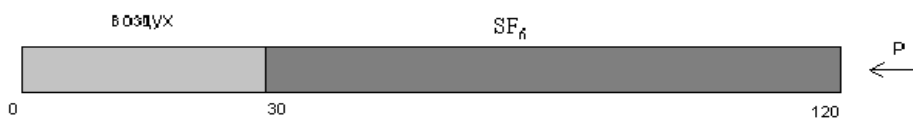


Рис. 5. Начальная постановка опыта Roggiatal, 1998

Таблица 1

Начальные данные

Вещество	$\rho_0, \text{г/см}^3$	$E_0, \text{см}^2/\text{мс}^2$	γ	CV, 102 Дж/(кг·К)
воздух	0,0012	2083,33	1,400	7,079
SF ₆ (эле-газ)	0,0060	1773,05	1,094	6,059

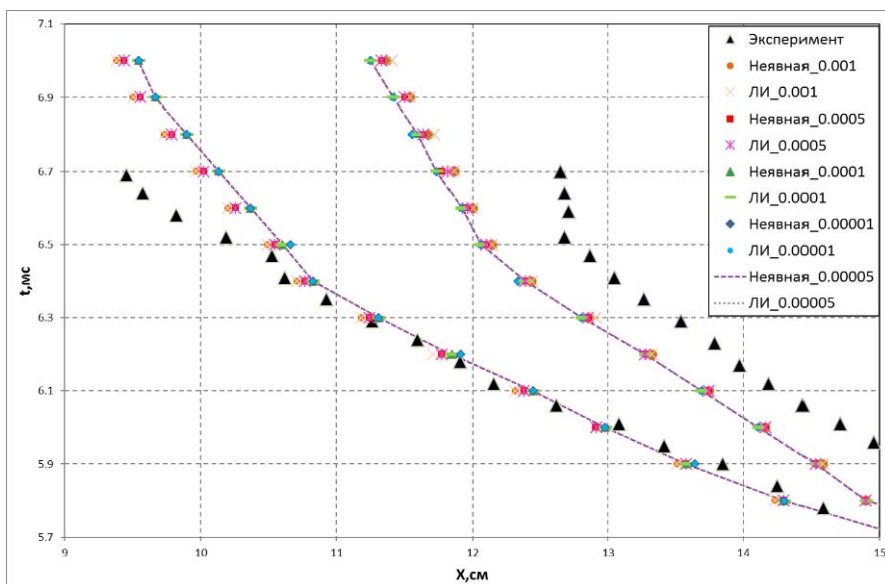


Рис. 6. Зона турбулентного перемешивания

Таблица 2

Времена расчета и ускорение по неявному методу и методу ЛИ-М в зависимости от шага τ

Шаг τ	Неявный метод, сек	Метод ЛИ-М, сек	Ускорение
0,001	5082	538	9,44
0,0005	8505	919	9,25
0,0001	43951	4800	9,15
0,00005	87836	8820	9,95
0,00001	424312	44405	9,56

$= 10 \text{ cm}^2/\text{ms}^2$, $e_1 = e_2 = e_0/3$, $Q_0 = 750 \text{ cm}^2/\text{ms}^2$, $W_0 = 0$ и $R_0 = 0,444 R$.

Была проведена серия расчетов с разными шагами по времени $\tau = 0,0005$, $\tau = 0,0001$, $\tau = 0,00005$, $\tau = 0,00001$. Задача считалась до момента времени $t = 7$ мс. Размер сетки 20025 ячеек. Максимальное число подшагов в методе ЛИ-М равно 3.

На рис. 6 приводится эволюция зоны ТП для расчетов по неявному методу и методу ЛИ-М с разными шагами по времени.

Из графика, рис. 6, видно, что зона ТП, полученная в расчетах имеет тенденцию к сходимости. Данные, полученные по неявному методу и методу ЛИ-М, хорошо согласуются.

В табл. 2 представлены времена расчета и ускорение по неявному методу и методу ЛИ-М в зависимости от шага τ .

Из табл. 2 видно, что ускорение по методу ЛИ-М составляет порядка 10 раз.

Заключение

1. Реализован метод ЛИ и ЛИ-М для решения диффузионных уравнений трехмерной модели турбулентного перемешивания Никифорова – Козлова в методике МИМОЗА.

2. Данная программа верифицирована на наборе тестов. Результаты синтетических тестов были удов-

летворительны для метода ЛИ-М, однако метод ЛИ показал неустойчивость при возрастании шага по времени. На основе расчета опыта Пожжи были сделаны предварительные замеры повышения производительности. Время расчета диффузионных уравнений уменьшилось примерно на порядок. Результаты, полученные в данной работе, показывают потенциал метода локальных итераций для решения диффузионных уравнений модели ТП Никифорова – Козлова.

3. Планируется дальнейшее развитие данной методики, ее распараллеливание и тестирование на производственно-методических задачах.

Литература

1. Андронов В. А., Козлов В. И., Никифоров В. В., Разин А. Н., Юдин Ю. А. Методика расчета турбулентного перемешивания в одномерных течениях (методика «ВИХРЬ») // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1994. Вып. 2. С. 59.

2. Жуков В. Т. О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений. // Математическое моделирование. 2010. Т. 22, № 10. С. 127–158.

3. Poggi F., Thoremby M.-H., Rodriguez G. Velocity measurements in gaseous mixtures induced by Richtmyer – Meshkov instability // Physics of Fluids, 1998. Vol. 10, N 11. P. 2698–2700.