

УДК 519.6

РАСЧЕТ МНОГОМЕРНЫХ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕЧЕНИЙ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БЛОЧНО-СТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА В МЕТОДИКЕ "ЛЭГАК"

Н. А. Володина, С. А. Краюхин, А. О. Наумов, С. В. Стародубов, А. П. Тихонова,
Т. В. Резвова, К. В. Циберев, М. О. Ширшова, Е. В. Шувалова
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Приводится описание реализации в методике ЛЭГАК алгоритмов расчета многомерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды с использованием блочно-структурированных сеток специального вида. Под сетками специального вида подразумеваются блочно-структурированные сетки с элементами нерегулярной стыковки на границах блоков, а именно имеющие сопряжение квазисферической и кубической сеток и кратное соотношение ячеек на границах блоков. Основными преимуществами использования сеток специального вида в методике ЛЭГАК являются возможность локального увеличения подробности расчетной сетки при моделировании разномасштабных конструкций и для более точного описания отдельных физических процессов, а также возможность выбора более адаптированной к течению расчетной сетки для прикладных задач. Рассматриваются методы организации вычислений на блочно-структурированных сетках, алгоритмы модификации счетных программ и применяемые алгоритмы распараллеливания. Для демонстрации работоспособности методики приведены результаты расчетов нескольких методических задач с использованием блочно-структурированных сеток.

Ключевые слова: методика ЛЭГАК, блочно-структурированные сетки, квазисферические сетки, кратная стыковка.

Введение

Методика ЛЭГАК [1] — это конечно-разностная лагранжево-эйлерова методика, использующая регулярную расчетную сетку. В двумерной геометрии это сетка, состоящая из выпуклых четырехугольников, в трехмерной — из выпуклых шестигранников.

В настоящий момент основная технология проведения расчетов по методике ЛЭГАК предполагает использование либо регулярных квазисферических, либо регулярных квадратных (кубических) сеток. Применение квазисферических листовых сеток имеет ряд недостатков, основным из которых является то, что линии сетки сходятся в одну точку (в центре) или одну прямую (на ось). Из-за этого ячейки сетки в угловых направлениях имеют существенно разный характерный размер. Квадратные (кубические) же сетки являются менее адаптированными для численного моделирования систем, движение в которых происходит преимущественно в радиальном направлении.

Общей проблемой для всех регулярных сеток является то, что при расчете задач с разномасштабными элементами конструкций, влияющими на работу моделируемого изделия, используемая расчетная сетка может состоять из огромного количества точек.

Оценка влияния данных факторов привела к обеспечению возможности использования в расчетах комбинированных блочно-структурированных сеток специального вида. Под блочно-структурированными сетками специального вида в данной работе подразумеваются блочно-структурированные

сетки с элементами нерегулярной стыковки на границах блоков, а именно имеющие сопряжение квазисферической и кубической сеток и кратное соотношение ячеек на границах блоков. Пример такой сетки для двумерного случая приведен на рис. 1.

Основными преимуществами использования сеток специального вида в методике ЛЭГАК являются возможности:

- выбора расчетной сетки, более адаптированной к течению в значительной части счетной области прикладных задач;
- локального увеличения подробности расчетной сетки при моделировании разномасштабных конструкций и для более точного описания отдельных физических процессов (подробная сетка используется только в выделенных частях вычислительной области);
- значительного сокращения количества счетных точек в тех частях вычислительной области, где не требуется высокой точности решения;
- существенного сокращения календарных сроков расчета задач за счет изменения топологии сетки в центральных и осевых частях системы (уход от особенностей, связанных с наличием осей и центра при использовании квазисферических сеток).

Стоит отметить, что, помимо применения блочно-структурированных сеток специального вида, в рамках данной работы реализована возможность использования блочно-структурированных кубических и квазисферических сеток с кратным соотношением числа ячеек между блоками (*кратных* сеток). Наиболее распространенные варианты блочно-структурированных кратных сеток приведены на рис. 2.

Блочно-структурированные расчетные сетки используются во многих газодинамических методиках. Схожий подход к организации вычислений на блочно-структурированных сетках применяется, например, в работе [2]. Аналог блочно-структурированных сеток специального вида встречается, например, в работе [3]. Среди альтернативных способов локального увеличения подробности регулярной расчетной сетки для выделения особенностей течения можно отметить адаптивно-встраиваемые дробные сетки, применяемые, например, в методике ЭГАК [4].

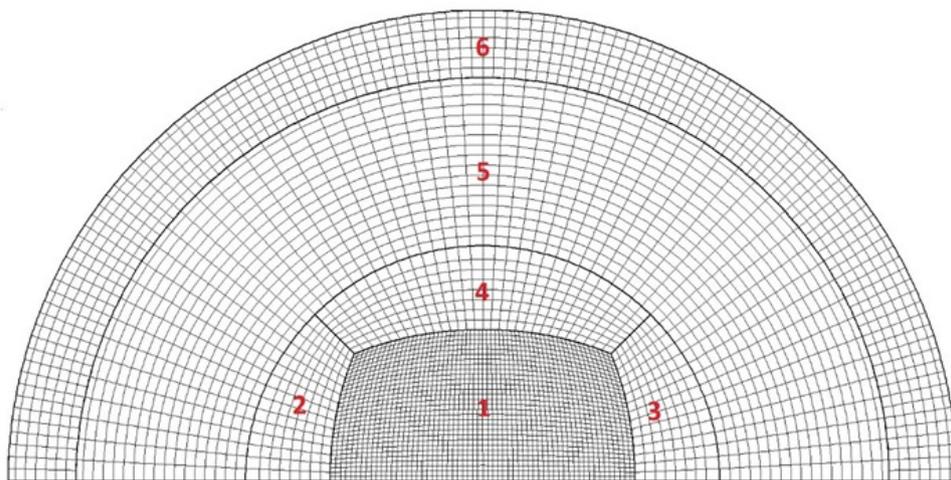


Рис. 1. Пример блочно-структурированной сетки специального вида с нумерацией блоков

Методы организации вычислений на блочно-структурированных сетках

Межблочное взаимодействие было решено осуществлять при помощи создания сеточного перехлеста (приграничного фиктивного слоя) для обменов данными между блоками. Выбор такого подхода обусловлен уже накопленным опытом при организации межпроцессорных обменов и реализации *каскадных* сеток. Существенным преимуществом данного подхода является минимизация изменений

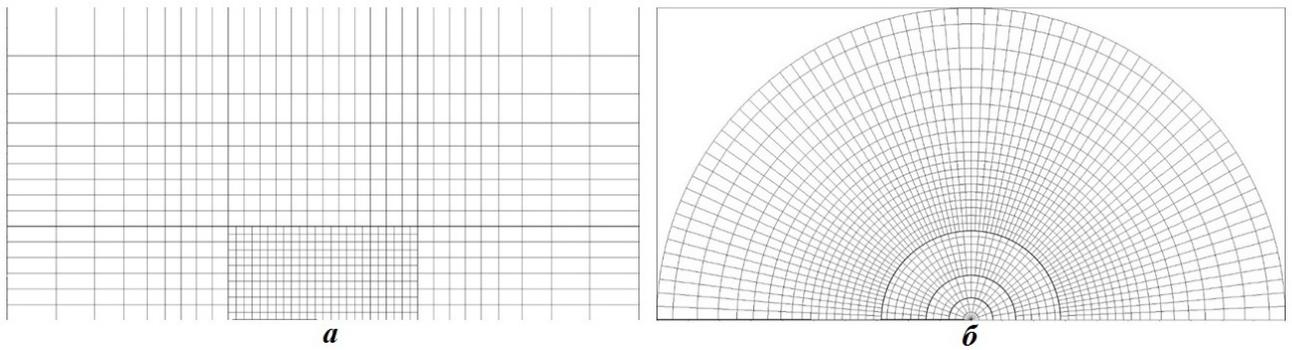


Рис. 2. Примеры квадратной (а) и квазисферической (б) блочно-структурированных сеток с кратным соотношением числа ячеек между блоками

в алгоритмах счетных модулей и технологии проведения расчетов: большинство алгоритмов для организации расчетов на блочно-структурированных сетках реализуется в виде вспомогательного (сервисного) инструментария счетной части программы и скрыто как от разработчиков счетных модулей, так и от специалиста, занимающегося проведением расчетов.

Для создания сеточного перехлеста необходима информация о взаимном расположении блоков по отношению друг к другу, т. е. их соседстве. Данная информация содержит номера соприкасающихся блоков, номера границ соприкосновения, а также диапазоны индексов соприкасающихся узлов для двух пространственных направлений. Получить такую информацию можно на старте расчета задачи при помощи попарного сравнения координат граничных узлов различных блоков, а можно задать ее вручную в редакторе соседства сервиса LEdit [5].

Регулярное пространственное разбиение геометрии задачи на блоки подразумевает три возможных варианта соседства блоков:

- по границе;
- ребру;
- вершине в трехмерном случае.

При этом информацию о соседстве блоков по границам принято считать основной, поскольку она позволяет однозначно определить соседство блоков по ребрам и вершинам на основе анализа взаимного расположения нескольких блоков без необходимости сравнения узлов. Данный подход позволяет минимизировать количество задаваемой пользователем информации о соседстве блоков (в случае задания вручную в редакторе соседства сервиса LEdit).

Структура блоков сетки, имеющей сопряжение квазисферической и кубической сеток, является фиксированной. Нумерация блоков в ней следующая (см. рис. 1):

- 1 — центральный блок с кубической сеткой, сформированный на основе прямоугольного параллелепипеда с возможным скруглением границ;
- 2 — блок сетки, смежный с центральным блоком по грани с минимальной координатой X ;
- 3 — блок сетки, смежный с центральным блоком по грани с максимальной координатой X ;
- 4 — блок сетки, смежный с центральным блоком по грани с максимальной координатой Y ;
- 5 и последующие блоки — окружающие последовательно вложенные блоки с регулярной квазисферической сеткой.

Поскольку в трехмерном случае сетка не имеет листовой структуры, то наложить один окружающий блок регулярной квазисферической сетки аналогично двумерному случаю не представляется возможным. Поэтому двумерному блоку 5 (см. рис. 1) будет соответствовать совокупность от четырех до шести блоков (в зависимости от типа симметрии геометрии); двумерному блоку 6 — еще один набор от четырех до шести блоков и т. д. (рис. 3).

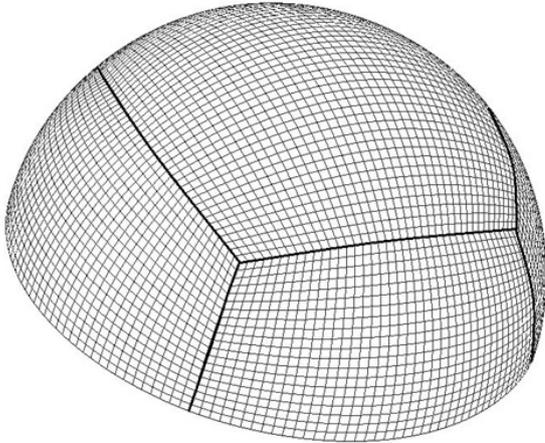


Рис. 3. Внешняя поверхность блочно-структурированной сетки специального вида в трехмерном случае

На основе информации о соседстве блоков после выполнения процедур чтения данных из файла разреза [5] формируется сеточный перекрест на границах взаимодействующих блоков (*блочный перекрест*). Процедура создания блочного перекреста выполняется один раз при старте задачи, а также повторно в случае изменения геометрии задачи в процессе расчета (разрезания, сгущения, разрезания или склейки блоков по приказам тактики счета). Организована такая процедура следующим образом: если текущий процесс является граничным и у рассчитываемого на нем блока по какой-либо границе присутствует блок-сосед, то по этой границе сеточные массивы расширяются на два элемента — узла или ячейки.

Процедура формирования блочного перекреста приводит к изменению принципа индексации узлов и ячеек. Ранее в базовой версии методики

ЛЭГАК индексация узлов и ячеек в математической области по каждому пространственному направлению выполнялась, начиная с единицы, так что значение индекса последней ячейки (узла) совпадало с количеством ячеек (узлов) в данном направлении. Теперь при расширении массивов на границах Γ_0 и Γ_2 (рис. 4) индексация узлов (ячеек) начинается с -1 ($-1, 0, 1$ и т. д.). При расширении массивов на границах Γ_1 и Γ_3 индексация их элементов продолжается до последней ячейки (узла), и, таким образом, индекс последнего элемента массива не совпадает с количеством ячеек (узлов). На рис. 4 представлен наглядный пример старой и новой индексаций столбцов блока с двумерной прямоугольной сеткой при соседстве по границам Γ_2 и Γ_3 .

Для удобства организации взаимодействия блоков на контактных границах в процессе счета и в дополнение к информации о соседстве по границам блока используется набор данных, определенный для всех взаимодействий между различными блоками. Каждый такой набор данных содержит ин-

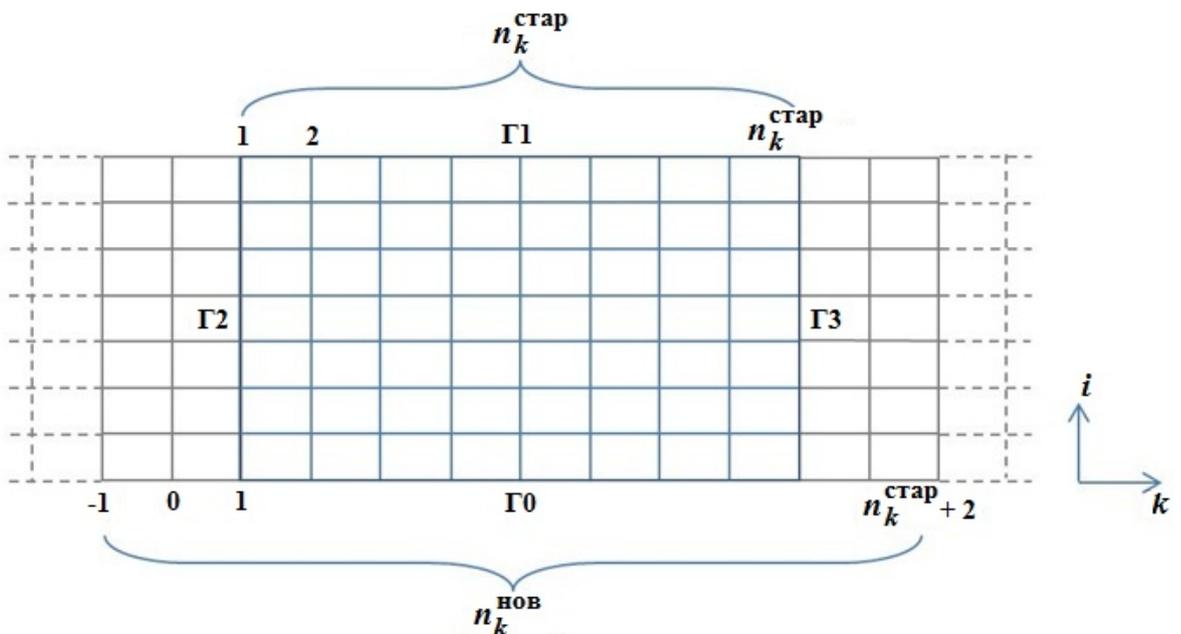


Рис. 4. Старая и новая индексация столбцов двумерной прямоугольной сетки

формацию о номерах взаимодействующих блоков, индексах взаимодействующих фрагментов, идентификаторах взаимодействующих процессов и т. д.

При кратном соотношении размеров ячеек счетной сетки прямые обмены между блоками провести не удастся из-за различия сеточных шаблонов в перехлесте и блоке-соседе. Пример различия сеточных шаблонов для кратности 2 по всем направлениям приведен на рис. 5.

При выполнении обменов перехлестами для блоков с кратной сеткой необходимо проводить интерполяцию величин при передаче данных из области с грубой сеткой в область с подробной сеткой и усреднение величин в обратном случае.

Интерполяция величин осуществляется по следующему алгоритму:

1. Значения ячеечных величин, за исключением объема, дублируются.
2. Значения узловых величин, за исключением времен детонации, интерполируются линейно.
3. Времена детонации в дополнительных узлах рассчитываются по алгоритму, схожему с алгоритмом итерационной коррекции времен детонации [6].
4. Объем пересчитывается в соответствии с новыми значениями координат узлов сетки.

В случае усреднения определение величин для новой ячейки осуществляется поэтапно следующим образом:

1. Величины, определенные в узлах сетки, не пересчитываются.
2. Объем пересчитывается в соответствии с новыми значениями координат узлов сетки, поскольку объем новой ячейки не равен сумме объемов старых ячеек.
3. Значения ячеечных величин усредняются, исходя из выполнения законов сохранения. Например, усреднение данных в ячейках в случае кратной стыковки по столбцам проводится по формулам (рис. 6)

$$\beta_{k-1,i,s}^{\text{НОВ}^{iv}} = \frac{\beta_{k-1,i,s}^{iv} V_{k-1,i,s} + \beta_{k,i,s}^{iv} V_{k,i,s}}{V_{k-1,i,s} + V_{k,i,s}}; \quad (1)$$

$$\alpha_{k-1,i,s}^{\text{НОВ}^{iv}} = \frac{\alpha_{k-1,i,s}^{iv} \rho_{k-1,i,s} V_{k-1,i,s} + \alpha_{k,i,s}^{iv} \rho_{k,i,s} V_{k,i,s}}{\rho_{k-1,i,s} V_{k-1,i,s} + \rho_{k,i,s} V_{k,i,s}}; \quad (2)$$

$$e_{k-1,i,s}^{\text{НОВ}^{iv}} = \frac{e_{k-1,i,s}^{iv} \alpha_{k-1,i,s}^{iv} \rho_{k-1,i,s} V_{k-1,i,s} + e_{k,i,s}^{iv} \alpha_{k,i,s}^{iv} \rho_{k,i,s} V_{k,i,s}}{\alpha_{k-1,i,s}^{iv} \rho_{k-1,i,s} V_{k-1,i,s} + \alpha_{k,i,s}^{iv} \rho_{k,i,s} V_{k,i,s}}; \quad (3)$$

$$E_{k-1,i,s}^{\text{НОВ}} = \sum_{iv=1}^{n_{vv}} \alpha_{k-1,i,s}^{\text{НОВ}^{iv}} e_{k-1,i,s}^{\text{НОВ}^{iv}}; \quad (4)$$

$$\rho_{k-1,i,s}^{\text{НОВ}} = \frac{\rho_{k-1,i,s} V_{k-1,i,s} + \rho_{k,i,s} V_{k,i,s}}{V_{k-1,i,s} + V_{k,i,s}}, \quad (5)$$

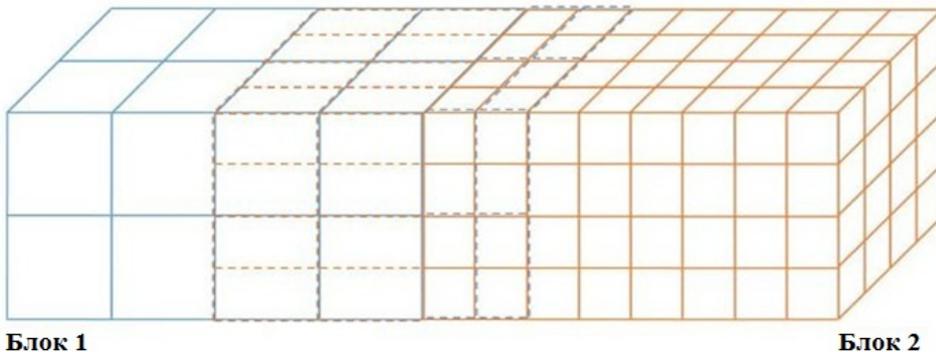


Рис. 5. Неоднородность сеточных шаблонов при кратной стыковке

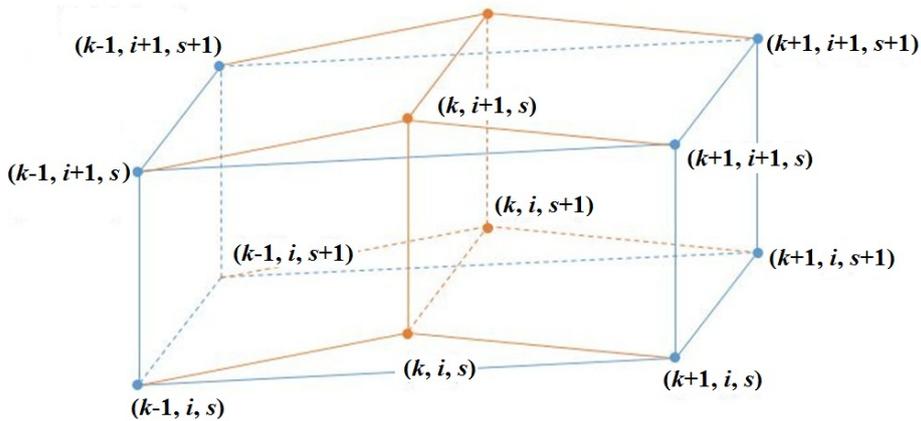


Рис. 6. Усреднение данных в ячейках в случае кратной стыковки по столбцам (оранжевым цветом обозначены старые ячейки, синим — новая)

где α — массовая концентрация вещества; β — объемная концентрация вещества; e — удельная внутренняя энергия вещества; iv — номер вещества; n_{vv} — количество веществ; ρ — плотность ячейки; E — удельная внутренняя энергия ячейки; V — объем ячейки; k, i, s — индекс ячейки по столбцам, строкам и листам соответственно.

4. Давление и скорость звука в новой ячейке рассчитываются из уравнения состояния по новым значениям плотностей и удельных внутренних энергий.

Для блочно-структурированной сетки специального вида характерны следующие особенности, накладывающие дополнительные ограничения на процедуру обменов данными между блоками:

- наличие особой точки — общего узла для трех или четырех соседствующих регулярных блоков;
- нестандартное для методики ЛЭГАК расположение границ для части блоков (переходы *строка—столбец*, *строка—лист*^{*}, *столбец—лист* на границе блоков);
- обратное направление возрастания индексов вдоль линий сетки для части блоков.

На рис. 7 выделены особые точки двумерной блочно-структурированной сетки специального вида — общие узлы для трех соседствующих регулярных блоков. Для трехмерной сетки особыми точками являются общие узлы одновременно для трех или четырех соседствующих регулярных блоков.

Соседство между центральным и смежными с ним блоками существует лишь по границе блока. Для двумерного случая это отражено на рис. 8, где схематично изображены "развернутые" блоки 1–4.

По причине отсутствия блоков, соседствующих только по ребру, массивы величин (как ячеечных, так и узловых), содержащие вспомогательные элементы блочного перехлеста, будут содержать виртуальные элементы, которые не имеют реальных данных в соседнем блоке. Данная особенность проиллюстрирована на примере массива, изображенного на рис. 9. Элементы массива, выделенные синим цветом, — собственные элементы, зеленым цветом — заполняемые при обменах блочным перехлестом, красные — фиктивные элементы.

На рис. 10 показан один из вариантов нестандартного для методики ЛЭГАК расположения границ между центральным и смежными с ним блоками. На данном рисунке выделена граница между блоками 1 и 3. Для блока 1 данная граница является границей ГЗ (см. рис. 4), а для блока 3 — границей Г0. Соответственно данная ориентация блоков приводит к переходу *строка—столбец* на границе блоков 1 и 3.

^{*} Следует отметить, что понятие *лист* в данном случае является традиционным названием третьего сеточного направления в методике ЛЭГАК и не имеет отношения к листовой структуре счетной сетки.

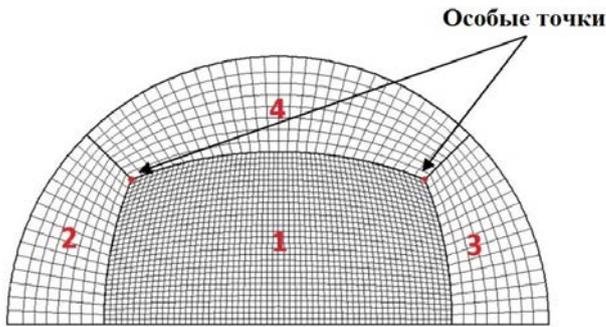


Рис. 7. Особые точки блочно-структурированной сетки специального вида

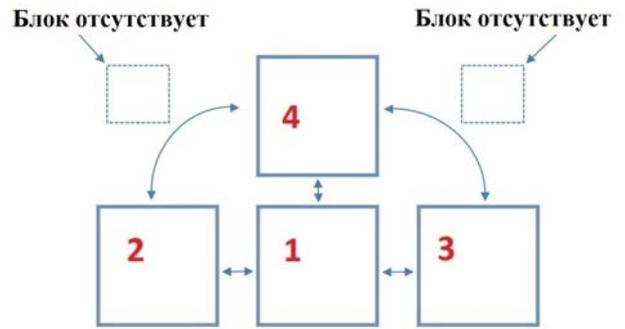


Рис. 8. Схема взаимодействия блоков центральной части блочно-структурированной сетки специального вида

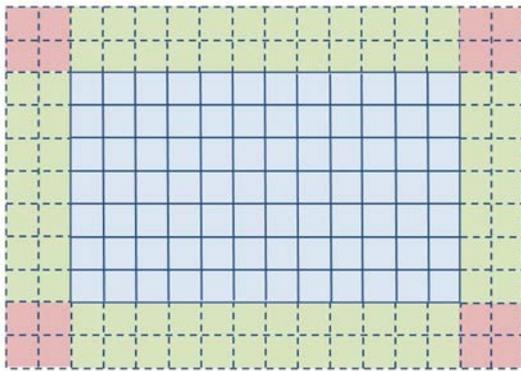


Рис. 9. Иллюстрация массива данных для блока 1

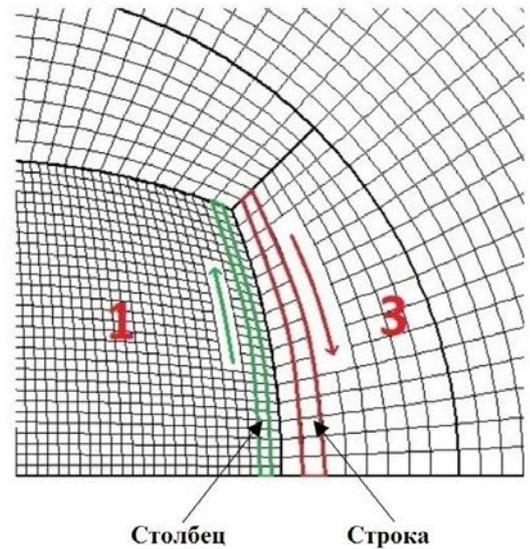


Рис. 10. Расположение строк и столбцов на границе блоков 1 и 3

Помимо перехода *строка—столбец* на границе блоков данная ориентация блоков приводит к обратному направлению возрастания индексов вдоль линий сетки. Эта особенность также продемонстрирована на рис. 10.

В силу указанной особенности на границах блоков с нестандартным расположением (переходы *строка—столбец*, *строка—лист*, *столбец—лист*) и смены направления возрастания индексов обмена происходят с предварительной перестановкой элементов в буферных массивах.

Алгоритмы модификации счетных программ

С учетом того, что наибольшие изменения методики ЛЭГАК для обеспечения возможности проведения расчетов с использованием блочно-структурированных сеток специального вида касаются сервисных процедур счетной части программы, модернизацию счетных программ, в основном, можно разделить на три этапа:

- 1) переработка кодов из-за введения новой индексации массивов;
- 2) адаптация счетных алгоритмов к работе с особыми точками и нестандартной ориентацией блоков;
- 3) корректировка счетных алгоритмов для повышения точности расчетов на границах блоков с кратным переходом.

Для адаптации счетных алгоритмов к работе с особыми точками реализованы две функции, позволяющие исключить фиктивные элементы массивов из счетных циклов. Формально каждый цикл программы, реализующей алгоритмы методики, который работает с блочным перехлестом, должен содержать функции проверки на фиктивность узла или ячейки. Однако число циклов, в которых необходимо вызывать функции такой проверки, удалось существенно сократить путем инициализации данных в фиктивных узлах и ячейках какими-либо реальными значениями. Например, можно на начальном этапе скопировать данные фиктивных узлов и ячеек из ближайшего узла, являющегося особой точкой, и из ячейки, содержащей данный узел.

Такой подход позволяет не вызывать функции проверки на фиктивность узла или ячейки в циклах, которые работают по принципу *расчета в точке*. Примером такого цикла является цикл расчета объемов ячеек: объем фиктивной ячейки в любом случае не будет использован алгоритмами счетных модулей, однако отсутствие функций-проверок не испортит код визуально и не приведет к снижению производительности из-за дополнительных ветвлений.

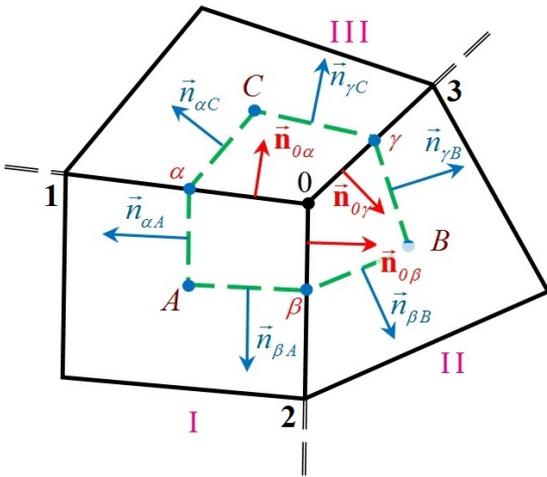


Рис. 11. Фрагмент счетной сетки с балансными ячейками для интегрирования уравнения движения в особой точке

Как и во многих других методиках, расчет течения сплошной среды на каждом временном шаге в методике ЛЭГАК осуществляется в два этапа. На первом (лагранжевом) этапе сетка увлекается веществом и рассчитываются изменения величин за счет действующих сил. На втором (эйлеровом) этапе происходит перестроение сетки по некоторым законам и рассчитываются консервативные потоки величин с одной сетки на другую.

На лагранжевом этапе для определения новых скоростей в особых точках требуется модификация соотношений для вычисления скоростей. Рассмотрим фрагмент счетной сетки, выделенный на рис. 11.

В методике ЛЭГАК термодинамические параметры определяются в центрах ячеек счетной области сетки и считаются постоянными внутри этих ячеек. Скорости вычисляются в узлах счетной сетки и считаются постоянными внутри области, которая строится следующим образом. Обозначим центры ячеек, окружа-

ющих особый узел 0, как A, B, и C. На ребрах 0-1, 0-2, 0-3 отметим точки alpha, beta, и gamma, которые делят поверхности вращения, образованные этими ребрами, на равные по площади части. Соединим все перечисленные точки. При этом будем полагать, что объемы вращения на угол $\alpha = \pm 0,5$ рад вокруг оси Ox подобластей, входящих в контур, равны одной четверти от объемов вращения соответствующих исходных ячеек, т. е. $V_{0\alpha\beta} = 0,25V_A$, $V_{0\beta\gamma} = 0,25V_B$, $V_{0\gamma\alpha} = 0,25V_C$. Проинтегрировав уравнение движения по области, представляющей собой объем вращения контура AalphaCgammaBbeta на угол $\alpha = \pm 0,5$ рад вокруг оси Ox, можно вывести соотношения для определения новых скоростей в узле 0:

$$\begin{aligned} \vec{u}_0^{n+1} = \vec{u}_0^n - \frac{\tau}{4m_0} & \left\{ (y_0^\delta + y_1^\delta) \begin{pmatrix} y_1 - y_0 \\ -(x_1 - x_0) \end{pmatrix} \left[(p^{n+\sigma} + q^n)_C - (p^{n+\sigma} + q^n)_A \right] + \right. \\ & + (y_0^\delta + y_2^\delta) \begin{pmatrix} -(y_2 - y_0) \\ x_2 - x_0 \end{pmatrix} \left[(p^{n+\sigma} + q^n)_B - (p^{n+\sigma} + q^n)_A \right] + \\ & \left. + (y_0^\delta + y_3^\delta) \begin{pmatrix} y_3 - y_0 \\ -(x_3 - x_0) \end{pmatrix} \left[(p^{n+\sigma} + q^n)_B - (p^{n+\sigma} + q^n)_C \right] \right\}, \end{aligned}$$

где τ — шаг по времени; $m_0 = \frac{1}{4} (\rho_A V_A + \rho_B V_B + \rho_C V_C)$ — масса узла 0; $\delta = 0$ для плоского случая, $\delta = 1$ для осесимметричного случая; $p^{n+\sigma}$ — предвычисленное давление; выражения вида $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

обозначают векторы-столбцы с координатами a, b .

На эйлеровом этапе для ячеек вблизи особых точек не представляется возможным построить поле концентраций [7] в восьми окружающих ячейках для определения вытекающих веществ. Поэтому вытекающее вещество определяется на основе упрощенного анализа, осуществляемого по трем ячейкам: *донорной*, *акцепторной* и ячейке *назад по потоку*. Эти ячейки однозначно определяются для любого направления (строки, столбцы). Также для корректного перетекания веществ необходимо обеспечить расчет потоков через грани граничных ячеек в идентичном направлении для разных блоков.

Для согласования решения вблизи границ блоков сетки с кратным переходом требуется несколько дополнительных модификаций на лагранжевом и эйлеровом этапах расчета.

На лагранжевом этапе необходимо обеспечить согласованное движение промежуточных граничных узлов (узлов на границе с кратным переходом, которых нет в базовой сетке), а также построение корректного контура интегрирования уравнения движения для общих граничных узлов.

На эйлеровом этапе необходимо произвести предварительный расчет потоков для граничных ячеек в блоках с более мелкой сеткой и передать их в блоки с более крупной сеткой через соответствующие границы для обеспечения идентичности расчетов на границах с кратным переходом.

Алгоритмы распараллеливания

При расчете задач с использованием блочно-структурированных сеток специального вида в методике ЛЭГАК используется трехуровневая схема распараллеливания:

- 1) по блокам в модели распределенной памяти с использованием технологии MPI;
- 2) по параобластям на основе пространственной декомпозиции в модели распределенной памяти с использованием технологии MPI;
- 3) по итерациям счетных циклов в модели общей памяти с использованием технологии OpenMP.

Для реализации первого уровня распараллеливания применяется автоматическая многоблочная декомпозиция, распределяющая процессы (либо группы процессов в случае гетерогенной вычислительной системы) для блоков по соотношению количества ячеек.

На втором уровне распараллеливания выполняется автоматическая декомпозиция внутри блока, которая строится по стандартному алгоритму методики ЛЭГАК с учетом коэффициента производительности вычислительного устройства (в случае гетерогенной вычислительной системы).

Получаемая декомпозиция является несогласованной между различными блоками: расчет декомпозиции внутри блоков производится независимо, и граница MPI-фрагмента может приходиться на граничный узел, которого нет в одном из блоков. Пример такой ситуации приведен на рис. 12, где синим цветом отображены линии сетки, а оранжевым цветом выделены границы MPI-фрагментов.

Для правильной работы программы межблочных обменов в аналогичной ситуации обмены блочными перехлестами происходят в том числе и в перехлестах MPI-фрагментов. Этот способ позволяет корректно произвести интерполяцию и усреднение величин при проведении обменов для кратностей 1:2 и 1:3. Однако для кратности 1:4 и более расширения перехлестами MPI-фрагментов уже не хватает. Выходом из данной ситуации, когда требуется сеточное сгущение с кратностью более 1:3, является использование нескольких уровней кратных сеток.

На втором уровне распараллеливания доступна возможность динамической балансировки вычислительной нагрузки в процессе счета. Балансировка выполняется при разбалансировке вычислительной нагрузки по параобластям блока более 15%. Использование динамической балансировки вычислительной нагрузки позволило сохранить эффективность распараллеливания на уровне 80% и выше по данным системы STK [8] для прикладных задач.

Третий уровень распараллеливания реализован с использованием технологии OpenMP, при этом количество последовательных частей кода сведено к минимуму.

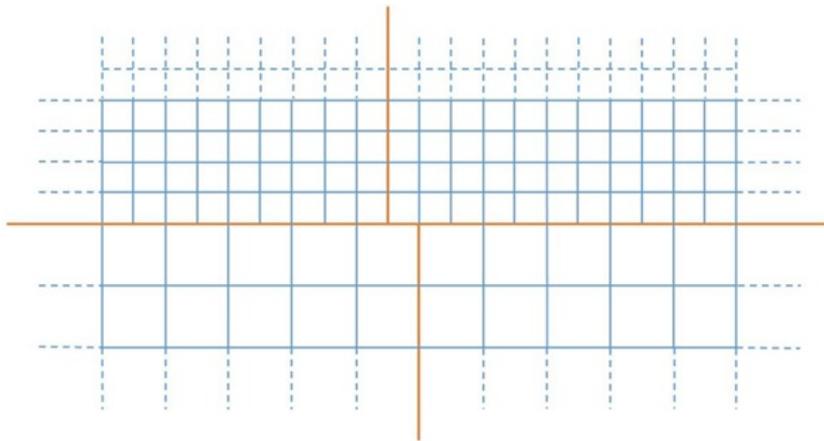


Рис. 12. Пример несогласованности декомпозиции на границе блоков

Примеры тестовых расчетов

Задача 1. Точечный взрыв (задача Седова). Здесь представлены результаты расчетов трехмерной тестовой задачи о сферически-симметричном взрыве. В области $0 < X < 10$ см, $0 < Y < 10$ см, $0 < Z < 10$ см задан идеальный газ с параметрами $\rho_2 = 1$ г/см³, $e_2 = 0$, $\gamma = 1,4$ (вещество 2). Внутри этой области в сфере радиусом 1 см с центром $(0,0,0)$ задан идеальный газ с параметрами $\rho_1 = 1$ г/см³, $e_1 = 1$ кДж/г, $\gamma = 1,4$ (вещество 1). Граничные условия: на плоскостях симметрии $X = 0$, $Y = 0$, $Z = 0$ заданы *жесткие стенки*, остальные границы — *свободные поверхности*.

Аналитическое решение задачи в виде зависимости $R(t)$ положения ударной волны [9] рассчитывается по формуле $R(t) = a(\gamma) \left(\frac{Et^2}{\rho_1} \right)^{1/5}$, где для $\gamma = 1,4$ значение $a(\gamma) = 1,033$; $E = \frac{4}{3}\pi R_0^3 \rho_1 e_1$ — энергия, выделившаяся в результате взрыва; ρ_1 — начальная плотность; t — время.

Целью расчетов является оценка влияния использования блочно-структурированных сеток на положение ударной волны.

Стандартная сетка является кубической со стороной ячейки 0,05 см. Общее число точек в задаче 8 млн.

В первом случае используется блочно-структурированная кратная сетка. Для ее построения область задачи разбивается на 8 блоков сечениями плоскостей $X = 4$ см, $Y = 4$ см и $Z = 4$ см. В центральном блоке сторона ячейки составляет 0,05 см, в остальных — 0,1 см по всем направлениям. Общее число точек в задаче $\sim 1,5$ млн.

Во втором случае используется блочно-структурированная сетка специального вида. Центральный блок ограничен плоскостями $X = 4$ см, $Y = 4$ см и $Z = 4$ см и построен с использованием скругления границ. Внешние блоки получены экструзией центрального блока из сферы радиусом $R = 10$ см и разрезанием сферы плоскостями, проходящими через центр сферы и грани параллелепипеда. В центральном блоке шаг сетки задавался $\sim 0,05$ см по всем направлениям. Во внешних блоках сетка по углу определялась числом строк, столбцов и листов в центральном блоке с прореживанием в 2 раза, по радиусу размер сетки составлял 0,1 см. Общее число точек в задаче ~ 1 млн.

На рис. 13 приведена постановка задачи с кубической стандартной и блочно-структурированными сетками. На рис. 14 показаны картины распространения ударной волны, полученные на этих сетках на момент времени 800 мкс.

Из рис. 15 видно, что при уменьшении пространственного шага численное решение приближается к аналитическому. Использование блочно-структурированных сеток демонстрирует по точности практически такой же результат, как использование стандартной сетки с шагом 0,05 см. Сферическая симметрия течения в расчете на блочно-структурированной сетке специального вида нарушается не более чем на 1%. Время проведения расчетов с использованием блочно-структурированных

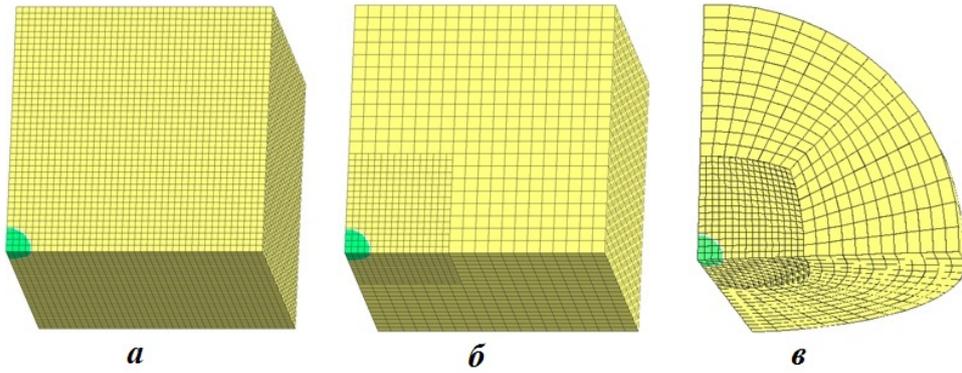


Рис. 13. Задача 1. Используемые расчетные сетки (при визуализации сетка прореживалась в 5 раз): *a* — стандартная; *б* — блочно-структурированная кратная; *в* — блочно-структурированная специального вида

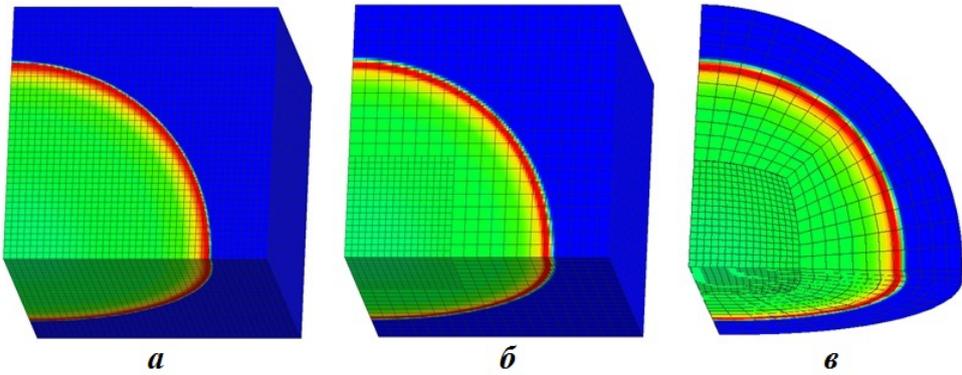


Рис. 14. Задача 1. Положение УВ в расчетах с различными типами сеток на момент времени 800 мкс (при визуализации сетка прореживалась в 5 раз): *a* — стандартная; *б* — блочно-структурированная кратная; *в* — блочно-структурированная специального вида

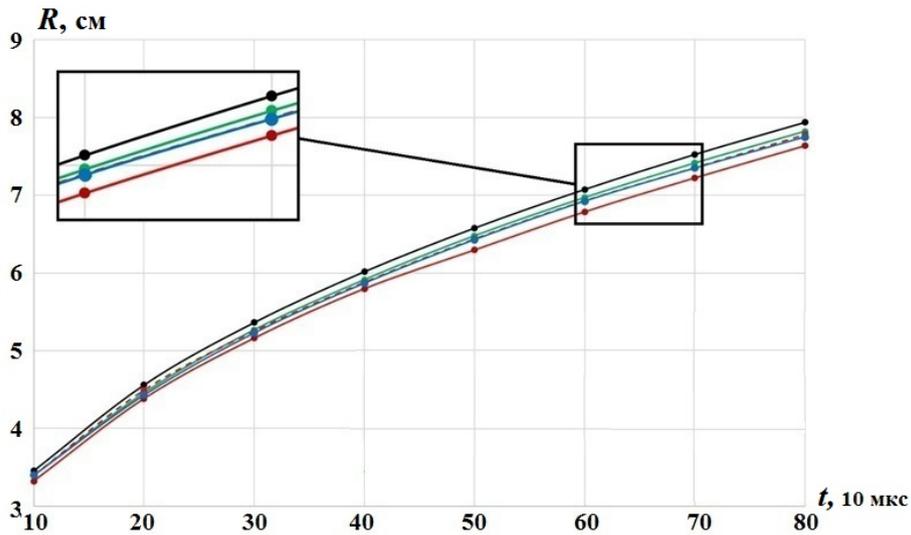


Рис. 15. Задача 1. (R, t) -зависимости положения ударной волны на оси Ox : —●— — аналитическое решение; —●— — регулярная кубическая сетка, $h = 0,1$ см; —●— — регулярная кубическая сетка, $h = 0,05$ см; - - -●- - блочно-структурированная кратная сетка, $h = 0,05/0,1$ см; —●— — блочно-структурированная сетка специального вида, $h = 0,05/0,1$ см

сеток снижается пропорционально уменьшению числа точек в задаче. Накладные расходы на организацию обменов между блоками в расчетах составили не более 15% от времени счетного шага.

Задача 2. Обжатие газа тяжелой сферической оболочкой. В сферической области радиусом $R = 8$ с центром в начале координат находится идеальный газ с параметрами $\gamma_1 = 5/3$, $\rho_1^0 = 1 \text{ г/см}^3$, $e_1^0 = 0$, $p_1^0 = 0$, $u_1^0 = 0$. В сферическом слое $8 \text{ см} \leq R \leq 10 \text{ см}$ находится тяжелая оболочка, описываемая также уравнением состояния для идеального газа, с параметрами $\gamma_2 = 5/3$, $\rho_2^0 = 25 \text{ г/см}^3$, $e_2^0 = 0$, $p_2^0 = 0$, $u_2^0 = 0$. На внешней границе $R = 10$ задано постоянное давление, равное единице. При такой постановке оболочка начинает двигаться к центру, сжимая центральную область с легким газом. В качестве оцениваемой величины выступает радиус центральной области на момент максимального сжатия легкого газа. Асимптотическое значение этого радиуса равно 1,7 см и достигается на момент времени 330 мкс. Это решение было получено в расчете одномерной задачи в лагранжевой постановке на очень подробной сетке. Задача с похожей постановкой встречается в сборнике [10].

Задача рассчитывалась в двумерном осесимметричном приближении с использованием неподвижной сетки. Счетная область состояла из четырех блоков. Первый блок — центральный, имеющий прямоугольную форму. Слева, справа и сверху к этому блоку примыкают три внешних блока. Размеры центрального блока: $-4 \text{ см} \leq x \leq 4 \text{ см}$, $0 \leq y \leq 4 \text{ см}$. Границы, соединяющие внешние блоки, проходят по прямым $y = \pm x$.

Для постановки граничного условия в области $10 \text{ см} \leq R \leq 12 \text{ см}$ над оболочкой было задано вспомогательное вещество с параметрами $\gamma_3 = 1$, $\rho_3^0 = 0,001 \text{ г/см}^3$, $e_3^0 = 0$, $p_3^0 = 1 \text{ ГПа}$, $u_3^0 = 0$, значения которых в процессе счета не менялись. В расчетах использовалась искусственная квадратичная вязкость в тензорной форме [11]. Распределение веществ в области, разделенной на блоки, приведено на рис. 16.

Построение сетки выполнялось следующим образом. В центральном блоке строилась квадратная сетка с заданным характерным размером. В верхнем внешнем блоке число столбцов равнялось числу столбцов центрального блока. В левом и правом внешних блоках число столбцов равнялось числу строк центрального блока. Количество строк во всех внешних блоках было одинаковым. Внешние границы разбивались равномерно. Вдоль лучей, соединяющих точки внутренних и внешних границ, точки распределялись также равномерно.

Расчеты проводились на последовательно сгущающихся сетках. В табл. 1 приведены их количественные характеристики.

Все расчеты проводились до момента $t = 350 \text{ мкс}$. К этому времени газ достигает состояния максимального сжатия и начинает расширяться.

В табл. 2 приведены расчетные значения средней плотности газа и соответствующие этим значениям радиусы области, занимаемой газом на моменты максимального сжатия. Для оценки порядка

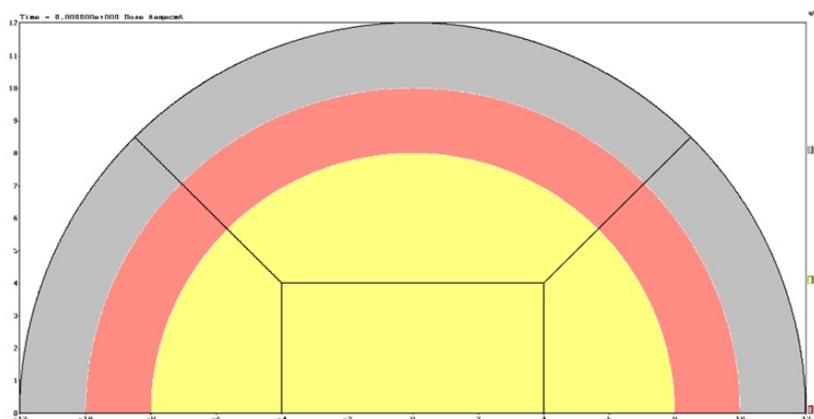


Рис. 16. Задача 2. Схема разбиения на блоки и распределение веществ в начальный момент времени

Таблица 1

Разбиения блоков в задаче 2

Шаг сетки в центральном блоке, см	Разбиение центрального блока	Разбиение верхнего блока	Разбиение левого и правого блоков
0,05	80 × 160	160 × 160	160 × 80
0,025	160 × 320	320 × 320	320 × 160
0,0125	320 × 640	640 × 640	640 × 320

Таблица 2

Результаты расчетов задачи 2

Шаг сетки в центральном блоке, см	Время максимального сжатия, мкс	Средняя плотность, г/см ³	Усредненный радиус области с газом, см	Среднеквадратичное отклонение, см
0,05	327,4	97,73	1,7368	0,018
0,025	329,1	100,35	1,7211	0,014
0,0125	330,0	101,91	1,7127	0,013

нарушения сферической симметрии в таблице приведены среднеквадратичные отклонения радиуса границы *газ–оболочка* на основании несмещенной оценки.

Из табл. 2 видно, что при уменьшении характерного размера ячеек счетной сетки усредненное значение радиуса области, занимаемой газом на момент максимального сжатия, приближается к асимптотическому решению $R = 1,7$ см. Усредненное значение радиуса области вычисляется по формуле $R = \sqrt[3]{3V/4\pi}$, где V — объем, занимаемый газом на момент максимального сжатия.

На рис. 17 приведен график сходимости значений усредненного радиуса области, занимаемой газом на моменты максимального сжатия. С помощью метода наименьших квадратов построена прямая, аппроксимирующая зависимость радиуса от размера ячеек счетной сетки. Из рис. 17 видно, что усредненный радиус сходится к значению 1,705 см.

Накладные расходы на организацию обменов между блоками для данной тестовой задачи составили не более 10 % от времени счетного шага.

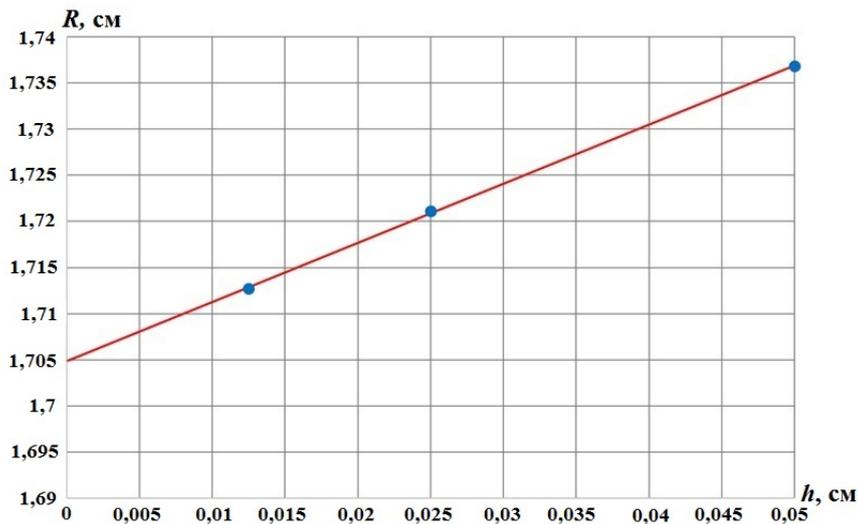


Рис. 17. Задача 2. Зависимость усредненного радиуса области с газом от характерного размера ячеек сетки на момент максимального сжатия

Задача 3. Сферическая детонационная волна. Далее представлены результаты расчета двумерной задачи о распространении сферической детонационной волны. В области, которая представляет собой квадрат со стороной 2 см, инициируется взрывчатое вещество (ВВ) в одной из вершин, расположенной в точке $(0,0)$. Расчет детонации осуществляется с использованием пошагового алгоритма расчета идеальной детонации [6]. Расчеты проводились в осесимметричной постановке на эйлеровой неподвижной сетке со стороной ячейки 0,01 см; Ox — ось симметрии. Заданы граничные условия: слева — жесткая стенка, сверху и справа — свободные поверхности.

На начальный момент времени вся область заполнена ВВ с постоянной скоростью детонации $D = 8,8$ км/с. Для ВВ и ПВ используется уравнение состояния идеального газа с $\gamma = 3$.

Целью расчетов являлась проверка работоспособности пошагового алгоритма идеальной детонации на блочно-структурированных кратных сетках. Для этого область разбивалась на четыре части и задавалось кратное сгущение расчетной сетки в различных блоках.

На рис. 18 приведена картина распространения сферической детонационной волны для различных вариантов кратной сетки. В табл. 3 приведены погрешности расчетных времен детонации по сравнению с аналитическим решением для этих вариантов. Видно, что при использовании кратных счетных сеток различного типа погрешность расчетных времен детонации не превышает 0,4% по сравнению с аналитическим решением, что подтверждает правильность интерполяции времен детонации.

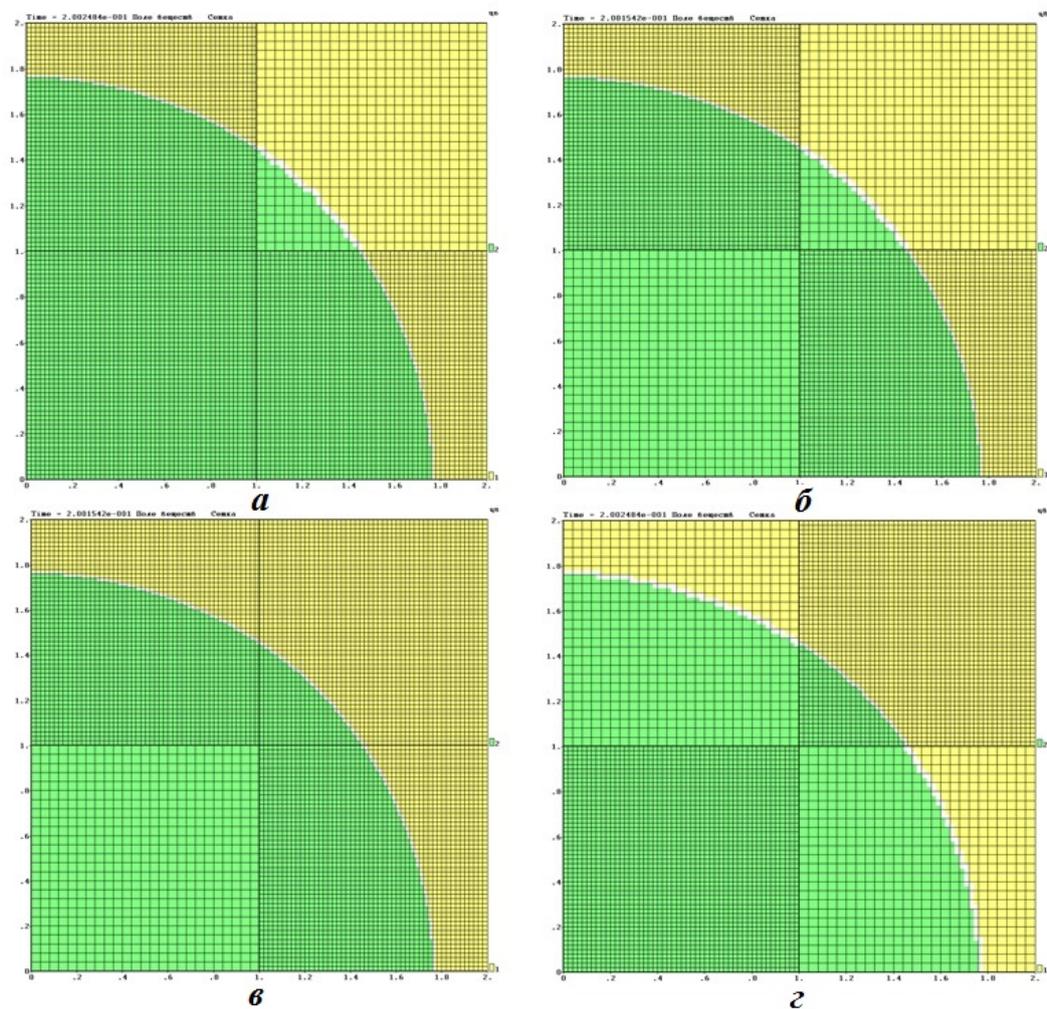


Рис. 18. Задача 3. Распространение сферической детонационной волны для различных вариантов кратной сетки: а — вариант 1; б — вариант 2; в — вариант 3; г — вариант 4

Задача 3. Погрешность расчетных времен детонации (%)

Вариант сетки	Угол, град				
	0	22,5	45	67,5	90
1	0	0,248	0	0,248	0
2	0	0,2323	0	0,2323	0
3	0	0,2323	0	0,2323	0
4	0	0,27279	0	0,27279	0

Заключение

В работе представлено описание особенностей реализации алгоритмов расчета многомерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды с использованием блочно-структурированных сеток специального вида в методике ЛЭГАК.

На примере трех тестовых задач показана работоспособность реализованных методов и алгоритмов. Результаты, полученные в расчетах с использованием блочно-структурированных сеток специального вида, качественно согласуются с аналитическими данными, а также с результатами расчетов на стандартной сетке.

Список литературы

1. Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф., Авдеев П. А., Артамонов М. В., Бакулина Е. А., Безрукова И. Ю., Борляев В. В., Володина Н. А., Наумов А. О., Огнева Н. Э., Резвова Т. В., Резяпов А. А., Стародубов С. В., Тарадай И. Ю., Тихонова А. П., Циберева К. В., Шанин А. А., Ширшова М. О., Шувалова Е. В. Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41–50.
Bakhrakh S. M., Velichko S. V., Spiridonov V. F., Avdeev P. A., Artamonov M. V., Bakulina E. A., Bezrukova I. Yu., Borlyayev V. V., Volodina N. A., Naumov A. O., Ogneva N. E., Rezvova T. V., Rezyapov A. A., Starodubov S. V., Taraday I. Yu., Tikhonova A. P., Tsibereva K. V., Shanin A. A., Shirshova M. O., Shuvalova E. V. Metodika LEGAK-3D raschyeta tryekhmernykh techeniy mnogo-komponentnoy sploshnoy sredy i printsipy eye realizatsii na mnogoprotsessornykh EVM s raspredelyennoy pamatyu // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2004. Vyp. 4. S. 41–50.
2. Рыбаков А. А. Внутреннее представление и механизм межпроцессного обмена для блочно-структурированной сетки при выполнении расчетов на суперкомпьютере // Программные системы: теория и приложения. 2017. № 1(32). С. 121–134.
Rybakov A. A. Vnutrennee predstavlenie i mekhanizm mezhprotsessornogo obmena dlya blochno-strukturirovannoy setki pri vypolnenii raschetov na superkompyutere // Programmnyye sistemy: teoriya i prilozheniya. 2017. № 1(32). S. 121–134.
3. Colella P., Dorr M., Hittinger J., McCorquodale P., Martin D. F. High-order finite-volume methods on locally-structured grids // Numerical Modeling of Space Plasma Flows: Astronom-2008. Vol. 406. P. 207.
4. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Городничев А. В., Воронов Е. Г., Гужова А. Р., Дегтяренко Л. И., Жарова Г. В., Кучерова П. А., Стадник А. Л., Ховрин Н. А. Комплекс программ ЭГАК++ для моделирования на адаптивно-встраиваемой дробной счетной сетке // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 1. С. 20–28.
Yanilkin Yu. V., Belyaev S. P. Gorodnichev A. V., Voronov E. G., Guzhova A. R., Degtyarenko L. I., Zharova G. V., Kucherova P. A., Stadnik A. L., Khovrin N. A. Kompleks programm EGAK++ dlya

- modelirovaniya na adaptivno-vstraivayushcheysya drobnoy schyetonoy setke // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov.* 2003. Vyp. 1. S. 20–28.
5. *Авдеев П. А., Артамонов М. В., Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф., Пришташ М. М.* Интегрированная система сопровождения счета задач в пакете программ ЛЭГАК-3D // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов.* 2010. Вып. 4. С. 35–43.
Avdeev P. A. Artamonov M. V., Bakhrakh S. M., Velichko S. V., Spiridonov V. F., Pristash M. M. Integrirovannaya sistema soprovozhdeniya schyeta zadach v pakete programm LEGAK-3D // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov.* 2010. Vyp. 4. S. 35–43.
6. *Володина Н. А., Краюхин С. А.* Алгоритм итерационной коррекции времен детонации за счет учета направления движения детонационной волны в методике ЛЭГАК // *Там же.* 2019. Вып. 3. С. 35–47.
Volodina N. A., Krayukhin S. A. Algoritm iteratsionnoy korrektsii vremeyen detonatsii za schyot ucheta napravleniya dvizheniya detonatsionnoy volny v metodike LEGAK // *Tam zhe.* 2019. Vyp. 3. S. 35–47.
7. *Бахрах С. М., Безрукова И. Ю., Борляев В. В., Егоршин С. П., Проневич С. Н., Резцова Т. В., Спиридонов В. Ф., Тихонова А. П., Циберева К. В.* Корректировка сетки и пересчет величин в комплексе программ ЛЭГАК-3D // *"Молодежь в науке". Сб. докл. III науч.-тех. конф. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2004. С. 49–54.*
Bakhrakh S. M., Bezrukova I. Yu., Borlyayev V. V., Egorshin S. P., Pronevich S. N., Rezvova T. V., Spiridonov V. F., Tikhonova A. P., Tsiberev K. V. Korrektirovka setki i pereschyet velichin v komplekse programm LEGAK-3D // *"Molodyezh v nauke". Sb. dokl. III nauch.-tekh. konf. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2004. S. 49–54.*
8. *Новаев Д. А., Бартнев Ю. Г., Липов Д. И., Колмаков С. И., Киселёв А. Б., Серова Т. Н., Худякова Л. В.* Программные средства STK для исследования эффективности выполнения параллельных приложений // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов.* 2011. Вып. 4. С. 72–81.
Novayev D. A., Bartnev Yu. G., Lipov D. I., Kolpakov S. I., Kislyev A. B., Serova T. N., Khudyakova L. V. Programmnye sredstva STK dlya issledovaniya effektivnosti vypolneniya parallelnykh prilozheniy // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov.* 2011. Vyp. 4. S. 72–81.
9. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
Landau L. D., Lifshits E. M. Teoreticheskaya fizika. T. VI. Hidrodinamika. M.: Nauka, 1986.
10. *Янилкин Ю. В., Бондаренко Ю. А., Гончаров Е. А., Гужова А. Р., Колобянин В. Ю., Софронов В. Н., Стаценко В. П.* Тесты для гидрокодов, моделирующих ударноволновые течения в многокомпонентных средах. Т. 1. Газодинамика. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2017.
Yanilkin Yu. V., Bondarenko Yu. A., Goncharov E. A., Guzhova A. R., Kolobyanin V. Yu., Sofronov V. N., Statsenko V. P. Testy dlya gidrokodov, modeliruyushchikh udarnovolnovye techeniya v mnogokomponentnykh sredakh. T. 1. Gazodinamika. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2017.
11. *Наумов А. О.* Об одной форме искусственной вязкости тензорного вида для расчета трехмерных газодинамических течений // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов.* 2021. Вып. 2. С. 24–43.
Naumov A. O. Ob odnoy forme iskusstvennoy vyzkosti tenzornogo vida dlya raschyeta tryekhmernykh gazodinamicheskikh techeniy // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov.* 2021. Vyp. 2. S. 24–43.

Статья поступила в редакцию 15.02.22.