

УДК 519.6

СРАВНЕНИЕ WPH И DISPH МЕТОДОВ ЧАСТИЦ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ НЕУСТОЙЧИВОСТЕЙ

Ф. А. Сапожников, В. С. Рыкованов
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина",
г. Снежинск Челябинской области)

Сравниваются два метода частиц — WPH и DISPH — на задачах, в которых происходят зарождение и рост неустойчивостей. Для определения вносимых методами погрешностей рассчитываются тестовые задачи, имеющие аналитическое решение. Для моделирования статического равновесия используется тест "Перенос куба", для динамического равновесия — тест "Вихрь Грешо—Чена". Проводится моделирование неустойчивости Рэля—Тейлора в трехмерной постановке α -Group и расширенной постановке, вычисляется коэффициент скорости роста пузырей. Проводится моделирование неустойчивости Кельвина—Гельмгольца с одномодовым и многомодовым возмущением в двумерной и трехмерной постановках. Вычисляется коэффициент скорости роста зоны перемешивания. Для моделирования неустойчивости Рихтмайера—Мешкова выбрана задача "Обратный шеврон", имеющая экспериментальные результаты. Во всех тестах, рассчитанных по методу WPH, получается меньшая ошибка и счет выполняется быстрее, чем по DISPH. Делается вывод о целесообразности применения метода WPH для моделирования задач, требующих описания роста неустойчивостей.

Ключевые слова: гидродинамика сглаженных частиц, метод SPH, гидродинамика взвешенных частиц, метод WPH, программа "Молох", вихрь Грешо—Чена, неустойчивость Рэля—Тейлора, неустойчивость Кельвина—Гельмгольца, неустойчивость Рихтмайера—Мешкова.

Введение

В работе [1] было проведено сравнение двух разновидностей метода сглаженных частиц (SPH) — WPH и DISPH — при решении задач с ударными волнами. Настоящая статья является продолжением и посвящена сравнению этих методов на задачах расчета неустойчивостей.

Развитие неустойчивости — это достаточно сложный процесс, на который сильное влияние оказывают численные ошибки методики счета. Для определения вносимых методами погрешностей необходимо выполнить тесты, которые имеют аналитическое решение.

Тест на статическое равновесие "Перенос куба" показывает, как влияет метод на результат равномерного переноса образца, находящегося в равновесии, сквозь моделируемое пространство. Тест на динамическое равновесие "Вихрь Грешо—Чена" позволяет определить степень влияния численной вязкости.

Показательным тестом при моделировании неустойчивости Рэля—Тейлора является трехмерная (3D) постановка α -Group. Расчеты с различным числом частиц позволяют определить коэффициент скорости роста пузырей, значения которого можно сравнить с полученными по другим методикам.

Для моделирования неустойчивости Кельвина—Гельмгольца необходимо рассмотреть как одномодовое, так и многомодовое возмущение, накладываемое на границу двух веществ, в двумерной (2D)

и 3D постановках. Критерием оценки правильности счета будет служить близость к результатам других программ зависимости от времени максимальной плотности кинетической энергии в y -направлении и коэффициента скорости роста зоны перемешивания.

Для моделирования неустойчивости Рихтмайера—Мешкова показательным тестом является задача "Обратный шеврон", имеющая экспериментальные данные.

Вывод о целесообразности применения того или иного метода при моделировании задач с неустойчивостями будет сделан по близости к эталонному решению и скорости счета.

Результаты расчетов

В программном комплексе "Молох" [2] реализован 3D метод частиц, т. е. используется 3D (сферическое) ядро, а именно Wendland C4 [3]. Поэтому, для счета задач в одномерной (1D) и 2D постановках необходимо использовать 3D образцы, правда, можно уменьшить их линейные размеры по "второстепенным" направлениям. Везде, где не определено иное, используются периодические граничные условия.

Исследование влияния способа расстановки частиц и нахождение оптимального с точки зрения точности описания среды приведены в [4], где показано, что частицы, расставленные в узлах границентрированной кубической (ГЦК) решетки, дают наименьшую ошибку описания среды. Поэтому в тестах начальная расстановка частиц выполняется с использованием шаблона ГЦК решетки.

Тест на статическое равновесие "Перенос куба" (тест 1). Этот тест показывает, как влияют ошибки разностной схемы и самой формулировки метода частиц на решение задачи. Аналитическое решение данного теста — начальное состояние [4].

Рассчитывается образец с размерами $L \times L \times L$, где $L = 1$ м. Количество частиц $64 \times 64 \times 64$ (всего 262 144). Давление 2,5 Па; плотность 1 кг/м^3 . В области $L/4 \leq x, y, z \leq 3L/4$ плотность равна 4 кг/м^3 . Уравнение состояния (УРС) — для идеального газа с $\gamma = 1,4$. Ядро содержит 180 *соседей*. Время счета — 10 с.

Было рассмотрено два случая: система покоится и система движется как единое целое со скоростью $v_x = 142,3 \text{ м/с}$, $v_y = 31,4 \text{ м/с}$, $v_z = 7,7 \text{ м/с}$ при заданных периодических граничных условиях. За время $t = 10$ с система пройдет около 1 000 своих длин и придет в начальное положение. Так как образец по построению находится в гидростатическом равновесии, то с точки зрения физики изменений не должно происходить, любые отклонения от начальной формы суть ошибки метода.

Неподвижная система выявляет влияние самой схемы на решение, а при движении будет определяться наличие галилеевской инвариантности.

На рис. 1, *а* показано начальное расположение частиц. Выбор формы области с высокой плотностью — куба — обусловлен попыткой выявить влияние частиц. Применение SPH-метода в классической формулировке [5, appendix F1] приводит к деформации куба в шар. Движение системы как

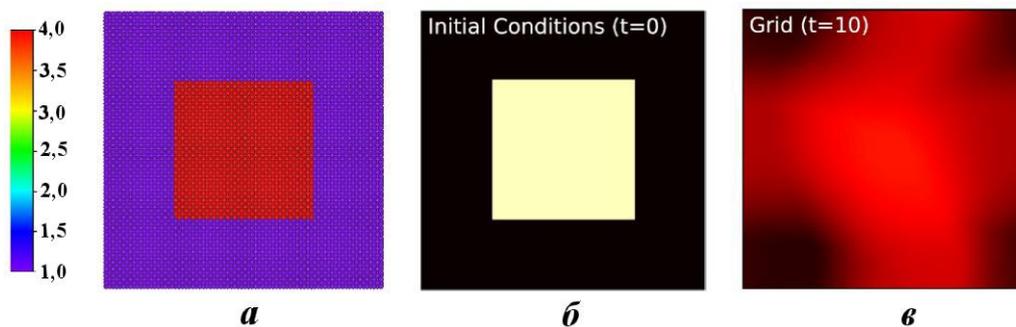


Рис. 1. Тест 1. Начальная расстановка частиц (*а*) и плотность на неподвижной сетке [5] при $t = 0$ (*б*) и $t = 10$ с (*в*)

целого может привести к размытию высокоплотной области (рис. 1, б), как произошло с сеткой в работе [5].

На рис. 2 показаны результаты счета по методам WPH и DISPH. Оба метода сохранили исходную ГЦК решетку частиц. При использовании WPH перенос куба произошел без изменений, тогда как при DISPH размазались границы. Это можно объяснить, во-первых, наличием в DISPH имманентной ошибки нулевого порядка сходимости (так называемая E_0 -ошибка). Она означает, что если даже частицы имеют равное давление, то все равно присутствуют результирующие силы, действующие на них, особенно когда расположение частиц не является полностью симметричным, что наблюдается на границе сред с различными плотностями. Во-вторых, в DISPH реализована искусственная теплопроводность, которая, стабилизируя внутреннюю энергию, приводит к ее размытию по соседним частицам. Для обоих методов потребовалось примерно одинаковое астрономическое время на счет задачи. Итак, в данном тесте WPH показал себя предпочтительнее.

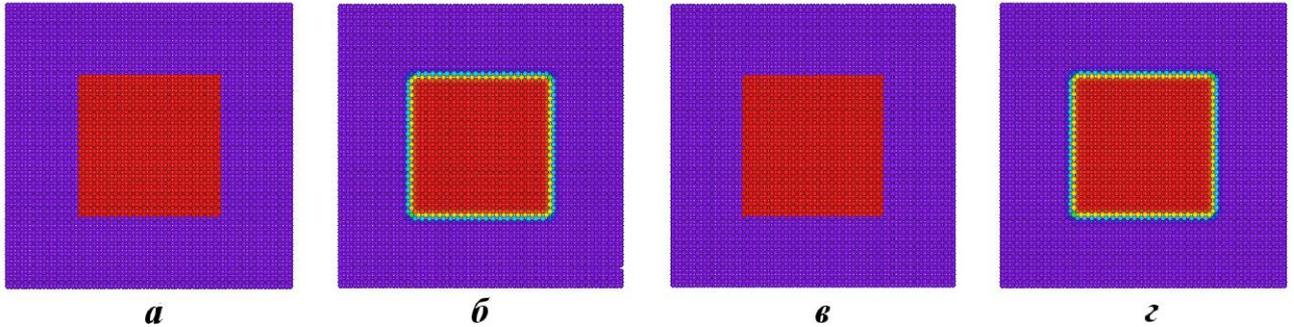


Рис. 2. Тест 1. Частицы, окрашенные по плотности, при $t = 10$ с: а — WPH, система покоится; б — DISPH, система покоится; в — WPH, система движется; з — DISPH, система движется

Тест на динамическое равновесие "Вихрь Грешо—Чена" (тест 2). Данный тест, предложенный в работе [6], используется для проверки таких характеристик численной схемы, как точность, сохранение симметрии, сохранение момента импульса, влияние сетки (в сеточных методах) или влияние расстановки частиц (в бессеточных методах). По построению вихрь находится в динамическом равновесии, т. е. должен быть стабильным постоянно, но на практике будет затухать из-за численной вязкости метода. Это хорошее тестирование численной вязкости, возникающей при сдвиговом течении. Аналитическое решение данного теста — начальное состояние.

Рассчитывается образец с размерами $L \times L \times L$, где $L = 1$ м. Количество частиц $N \times N \times N$, $N = 64; 128; 256$. Плотность равна 1 кг/м^3 . УРС — для идеального газа с $\gamma = 5/3$. Ядро содержит 90 и 180 соседей. Время счета — 3 с. Давление задается по формуле

$$P = P_0 + \begin{cases} 12,5r^2, & 0 \leq r \leq 0,2; \\ 12,5r^2 - 20r + 4 + 4 \ln(5r), & 0,2 \leq r \leq 0,4; \\ 2(2 \ln 2 - 1), & 0,4 \leq r \leq 1, \end{cases}$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ — расстояние до центра вихря; P_0 — фоновое давление.

Рассмотрим результаты расчетов для $P_0 = 5 \text{ Па}$ — дозвуковое течение с максимальным числом Маха, равным 0,35, и средним, равным 0,2. На рис. 3 показаны зависимости азимутальной скорости (v_ϕ) от расстояния до центра вихря (r) для 1000 случайных частиц на конец расчета для обоих методов при количестве соседей 90. Видно, что метод WPH лучше описывает вихрь, давая более точное и менее шумное решение.

При числе соседей, равном 90, получены порядки сходимости $\alpha_{\text{WPH}}^{L_1} \approx 0,62$ и $\alpha_{\text{DISPH}}^{L_1} \approx 0,33$. Это соответствует данным, полученным в работах [7–9], где было показано, что скорость сходимости для DISPH можно увеличить до 0,6, если увеличить количество соседей до 180. Для 90 соседей скорость сходимости у WPH больше в 2 раза, чем у DISPH, а сама ошибка меньше в 3 раза. На рис. 4

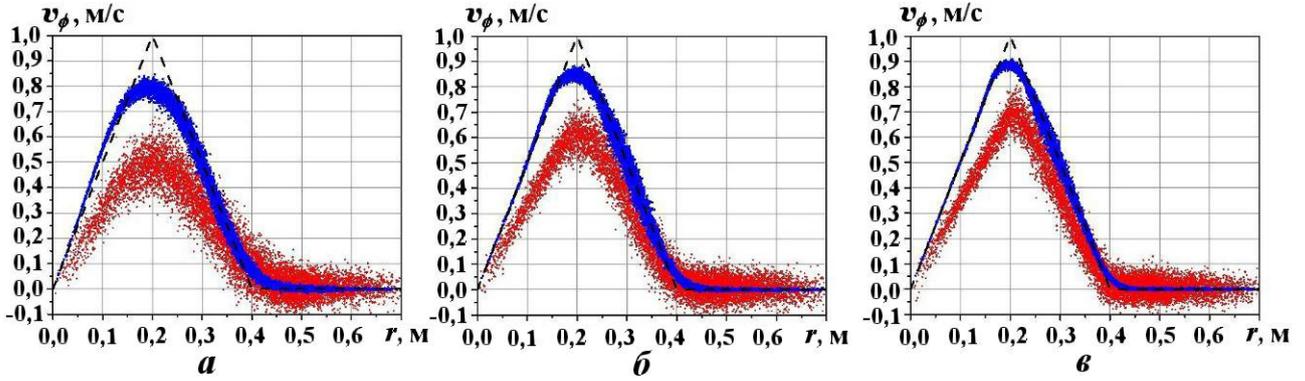


Рис. 3. Тест 2. Зависимости $v_\phi(r)$, $t = 3$ с, 90 соседей: а — 64^3 частиц; б — 128^3 частиц; в — 256^3 частиц; --- — эталон; ● — WPH; ● — DISP

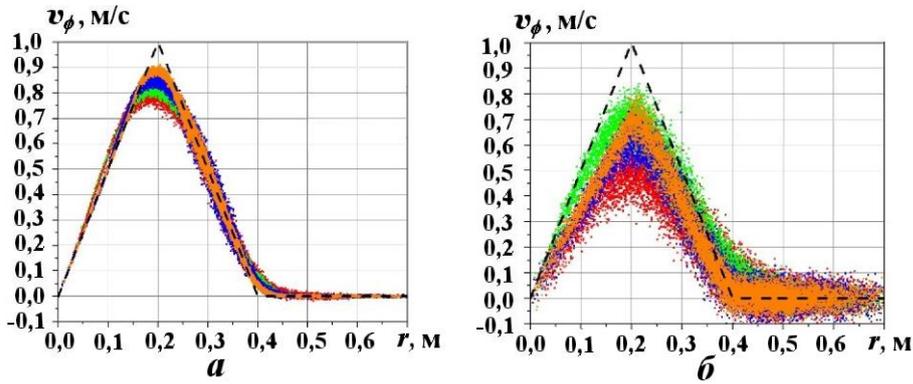


Рис. 4. Тест 2. Зависимости $v_\phi(r)$, $t = 3$ с: а — WPH; б — DISP; --- — эталон; ● — 64^3 частиц, 90 соседей; ● — 64^3 частиц, 180 соседей; ● — 128^3 частиц, 90 соседей; ● — 256^3 частиц, 90 соседей

показаны азимутальные скорости для каждого метода для разного количества частиц по направлению. Увеличение количества соседей с 90 до 180 для WPH улучшило результат незначительно, а для DISP превзошло самый подробный расчет с меньшим количеством соседей. Конечно, увеличение количества соседей в 2 раза ведет к замедлению расчета примерно в те же 2 раза, так что для проведения расчетов, требующих значительных вычислительных ресурсов, достаточно 90 соседей на частицу. Увеличение количества соседей в 2 раза (до 180) уменьшило шум и приблизило результат к эталонному, что подтверждается данными, приведенными на рис. 5.

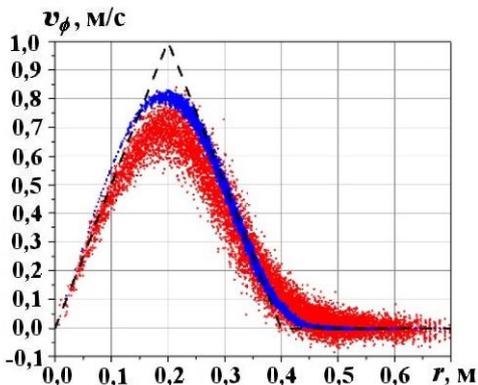


Рис. 5. Тест 2. Сравнение v_ϕ для методов WPH и DISP при 64^3 частицах и 180 соседах: --- — эталон; ● — WPH; ● — DISP

На рис. 6 показаны частицы, окрашенные по удельной кинетической энергии. Видно, что для WPH при 180 соседах начальная решетка максимально сохранилась, т. е. сохранился 2D характер задачи. На рис. 7 приведены пространственные распределения ($z = 0$) удельной кинетической энергии. Видно, что оба метода сохранили симметрию вихря. При расчете по методу WPH было сделано 3 059 шагов, по DISP — 3 686, т. е. по методу WPH посчитано в 1,44 раза быстрее.

При количестве соседей 90 использование обоих методов деформировало исходную ГЦК решетку частиц, хотя при WPH она нарушилась меньше. При количестве соседей 180 для WPH решетка сохранилась, тогда как использование DISP нарушило ее, изменив процесс с 2D на 3D.

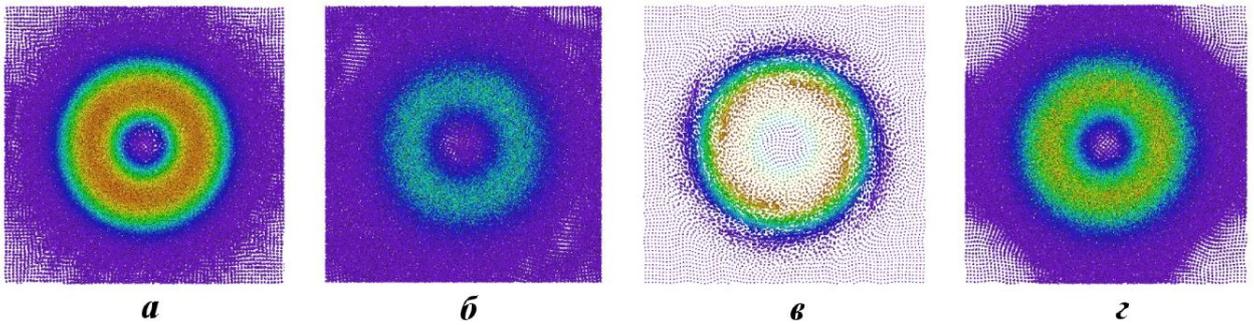


Рис. 6. Тест 2. Частицы, окрашенные по удельной кинетической энергии, при $t = 3$ с: *a* — WPH, 90 соседей; *б* — DISPH, 90 соседей; *в* — WPH, 180 соседей; *г* — DISPH, 180 соседей

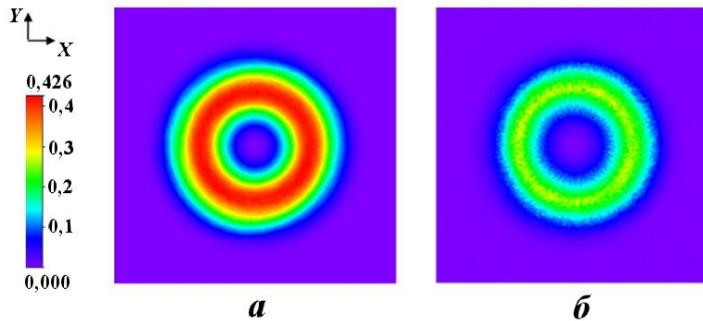


Рис. 7. Тест 2. Пространственные распределения удельной кинетической энергии: *a* — WPH; *б* — DISPH

При 90 соседях в ядре метод WPH показал более точный и менее шумный результат. Симметрия вихря была сохранена при обоих методах. Ошибка WPH в норме L_1 была в 3 раза меньше, а скорость сходимости результата к аналитическому решению — в 2 раза больше, чем у DISPH.

Придание движения вихрю как целому не повлияло на результат, что свидетельствует о преимуществе лагранжевых методов (WPH и DISPH), не вносящих ошибок при моделировании процессов в движущихся веществах.

По методу WPH было посчитано от 1,2 до 1,75 раза быстрее, чем по DISPH. В данном тесте решение по WPH было более точным, менее шумным, а результат был получен быстрее.

Моделирование неустойчивости Рэлея—Тейлора в 3D постановке α -Group (тест 3).

Стандартная постановка α -Group. Механизмы зарождения и развития неустойчивости Рэлея—Тейлора подробно исследуются во многих работах. Наиболее обстоятельное исследование развития такой неустойчивости проведено в работе [10], где представлено прямое численное моделирование по кодам ведущих научных центров.

Неустойчивость Рэлея—Тейлора возникает на границе двух сред, когда вещество с высокой плотностью находится над веществом с низкой плотностью в поле тяжести. При нарастании возмущения на границе раздела двух веществ легкое вещество проникает в тяжелое, формируя пузырьки, а тяжелое проникает в легкое, формируя струи. Зададим геометрию задачи, как показано на рис. 8. Невозмущенная граница раздела двух веществ

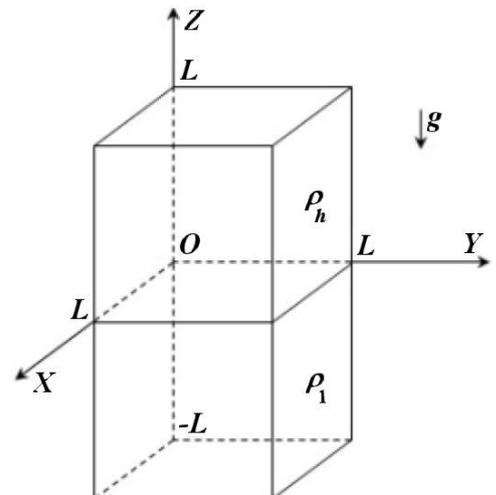


Рис. 8. Геометрия задачи 3

лежит в плоскости XOY . Для корректного наложения многомодового возмущения образец необходимо переместить так, чтобы выполнялись следующие условия: $x \in [L, 2L]$, $y \in [L, 2L]$, $z \in [-L, L]$.

При моделировании данной задачи по сеточным методикам [10] обычно начальное возмущение вносится в поле плотности через изменение положения границы раздела двух веществ вдоль оси OZ по формуле

$$h_z^0(x, y) = \sum_{k_x, k_y} \left(a_k \cos(k_x x) \cos(k_y y) + b_k \cos(k_x x) \sin(k_y y) + c_k \sin(k_x x) \cos(k_y y) + d_k \sin(k_x x) \sin(k_y y) \right),$$

где x, y, z — координаты частицы; a_k, b_k, c_k, d_k — амплитуды; k_x, k_y — волновые числа многомодового возмущения. Поле скоростей возмущается по формуле

$$v_z^0(x, y) = \sum_{k_x, k_y} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \left(a_k \cos(k_x x) \cos(k_y y) + b_k \cos(k_x x) \sin(k_y y) + c_k \sin(k_x x) \cos(k_y y) + d_k \sin(k_x x) \sin(k_y y) \right).$$

Так как изначально вещества покоятся, то возмущение просто присваивается скоростям частиц, находящихся на границе двух веществ, однако на самой границе частиц может вовсе не быть — все зависит от алгоритма их размещения в пространстве. Поэтому необходимо возмутить близкие по z к границе частицы и провести исследование влияния глубины распространения возмущения на результат. Будем уменьшать возмущение скорости экспоненциально при удалении от границы раздела по формуле $v_z = v_z^0 e^{-\beta|z|/L}$ (большее значение параметра β соответствует меньшей глубине возмущения).

Расчет выполнялся для образца с размерами $L \times L \times 2L$, где $L = 0,1$ м. Плотность тяжелого вещества $\rho_h = 3000$ кг/м³, легкого — $\rho_l = 1000$ кг/м³; число Атвуда $A = 0,5$; ускорение $g = -0,02$ м/с². УРС — для идеального газа с $\gamma = 5/3$. Граничные условия по x и y — периодические, по z — жесткие стенки. Ядро содержит 90 соседей. Время счета — 8 с.

Так как система в начальный момент времени находится в гидростатическом равновесии, то давление и плотность в каждой точке можно вычислить по формулам

$$P = P_0 \left(1 - \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{\rho_0 g z}{P_0} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}}; \quad \rho = \rho_0 \left(1 - \frac{\gamma - 1}{1} \frac{\rho_0 g z}{P_0} \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}},$$

где $P_0 = \pi(\rho_h + \rho_l)g2L$; $\rho_0 = \begin{cases} \rho_l, & z \leq h_0; \\ \rho_h, & z > h_0. \end{cases}$

Для метода WPH проведено пять расчетов со 128 или 256 частицами вдоль оси OX (полное количество частиц 4 194 304 и 33 554 432, соответственно):

- 1) 128 частиц, $\beta = 5$;
- 2) 128 частиц, $\beta = 20$;
- 3) 128 частиц, $\beta = 200$;
- 4) 256 частиц, $\beta = 20$;
- 5) 256 частиц, $\beta = 200$.

Для метода DISPH был проведен только один расчет в постановке 5 как самый подробный и близкий к исходной постановке из работы [10]. Неустойчивость Рэлея—Тейлора не развилась не только за 8, но даже за 15 секунд.

На рис. 9, помимо результатов для всех расчетов по программному комплексу "Молох", приведены результаты по другим программам из работы [10] (цвета определены в [10]; сплошная линия относится к 256 ячейкам по направлению, пунктир — к 128, круги — к эксперименту). Объемная концентрация тяжелого вещества в слое рассчитывалась по формуле

$$\langle f_h \rangle(z) = \frac{1}{L^2} \iint f_h(\mathbf{r}) dx dy,$$

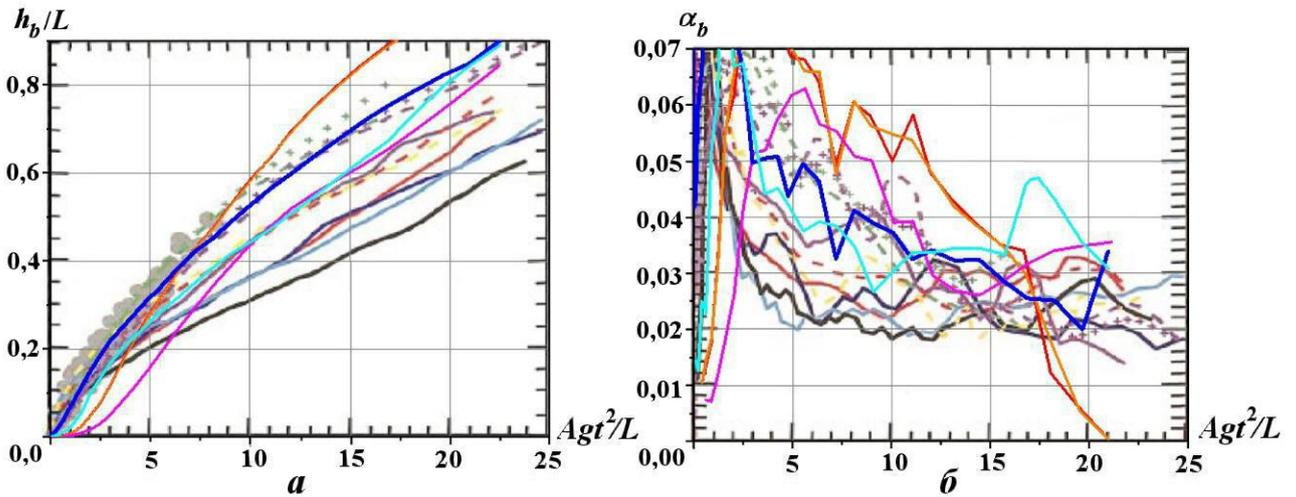


Рис. 9. Тест 3 в стандартной постановке. Зависимости от времени положения фронта пузырьков (*a*) и коэффициента скорости роста пузырьков (*б*): — 128 частиц, $\beta = 5$; — 128 частиц, $\beta = 20$; — 128 частиц, $\beta = 200$; — 256 частиц, $\beta = 20$; — 256 частиц, $\beta = 200$; остальные обозначения — из [10]

где $f_h(\mathbf{r})$ — объемная концентрация тяжелого вещества в точке пространства. Положение фронта пузырьков h_b принималось равным координате z , при которой $\langle f_h \rangle = 99\%$. На рис. 9, *a* приведены зависимости h_b от времени.

На автомодельной стадии развития неустойчивости Рэля—Тейлора положение фронта пузырьков h_b можно описать линейной зависимостью $h_b = \alpha_b Agt^2$. Коэффициент скорости роста пузырьков α_b рассчитывался путем дифференцирования h_b по Agt^2 :

$$\alpha_b = \frac{h_b^{i+1} - h_b^i}{Ag(t_{i+1}^2 - t_i^2)},$$

где i — шаги времени сохранения данных. Сильные изломы графиков, приведенных на рис. 9, *б*, можно объяснить достаточно большими промежутками между моментами времени, в которые происходил анализ результатов — 0,5 с. Падение α_b до 0 соответствует моменту, когда фронт пузырьков достиг верхней жесткой стенки.

По мнению авторов, результаты расчетов в постановках 4 и 5 выглядят наиболее предпочтительными — наблюдается хорошее согласие с результатами по другим программам. На рис. 10 показана объемная концентрация тяжелого вещества на разные моменты времени. Можно утверждать, что

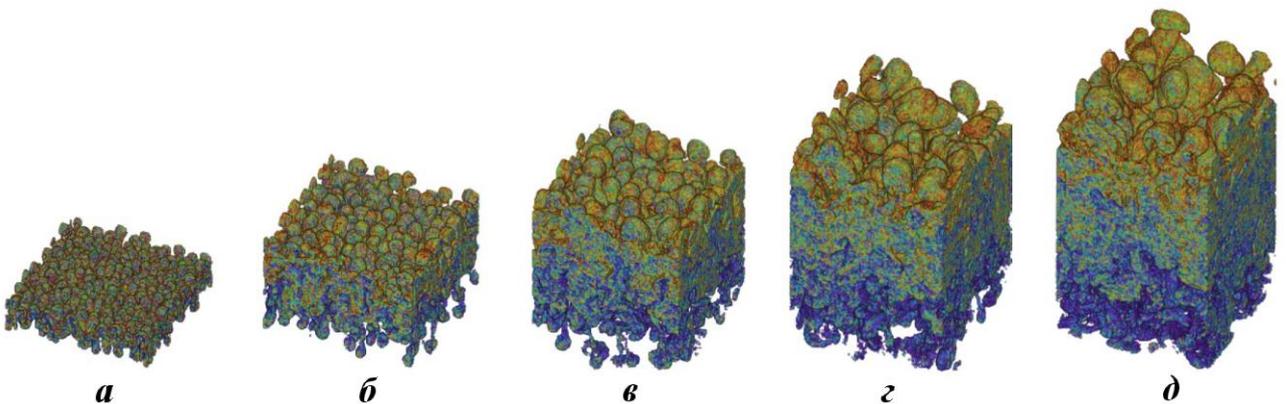


Рис. 10. Тест 3 в стандартной постановке. Объемная концентрация тяжелого вещества на моменты времени: *a* — 5 с; *б* — 7,5 с; *в* — 10 с; *г* — 12,5 с; *д* — 15 с

при введении возмущения в поле скорости необходимо распространять его только на ближние к границе раздела веществ частицы, т. е. использовать $\beta = 20$. Для расчета $4 \alpha_b \approx 0,025$.

Итак, при моделировании неустойчивости Рэлея—Тейлора в постановке α -Group по методу WPH получены результаты, сравнимые с результатами по другим программам, а по DISPH развития неустойчивости не получено.

Расширенная постановка α -Group. Из рис. 9, б видно, что значение α_b меняется и не выходит на константу, однако сами пузырьки уже достигли верхнего края системы. Из этого можно сделать вывод, что высота системы оказалась недостаточной. Поэтому было принято решение увеличить высоту системы в 1,5 раза — с $2L$ до $3L$, а время счета — с 15 до 20 с. Постановка расчета осталась прежней, но с некоторыми изменениями в постановках 1 и 2:

- 1) 256 частиц вдоль оси OX (полное количество частиц 50 331 648), $\beta = 100$;
- 2) 512 частиц вдоль оси OX (полное количество частиц 402 653 184), $\beta = 100$.

На рис. 11, а показаны зависимости h_b от времени для трех расчетов по программе "Молох". Видно, что увеличение количества частиц приводит к более медленному росту пузырьков.

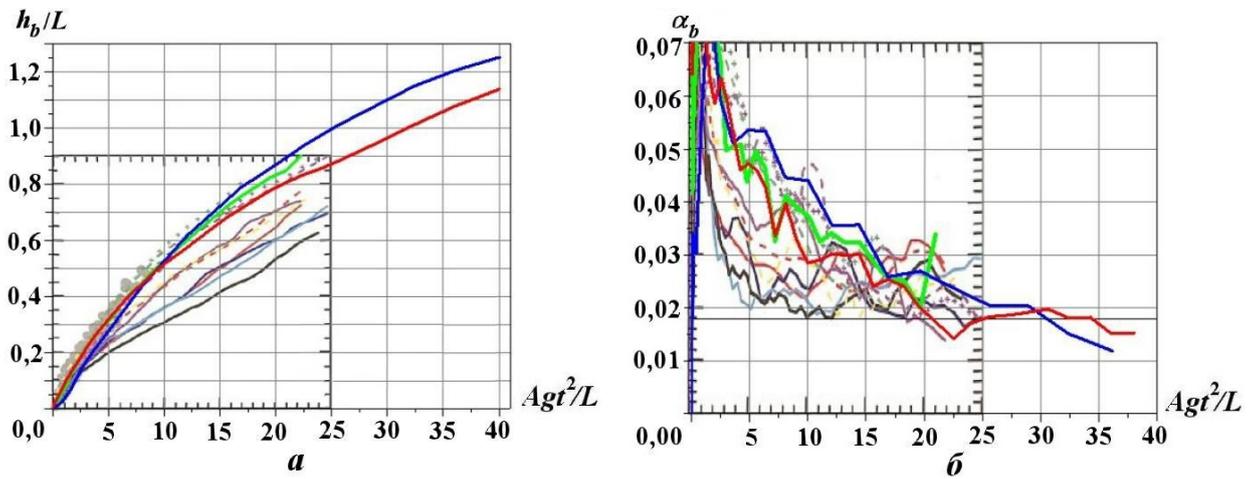


Рис. 11. Тест 3 в расширенной постановке. Зависимости от времени положения фронта пузырьков (а) и коэффициента скорости роста пузырьков (б): — "Молох", 256 частиц, $\beta = 20$; — "Молох", 256 частиц, $\beta = 100$; — "Молох", 512 частиц, $\beta = 100$; остальные обозначения — из [10]

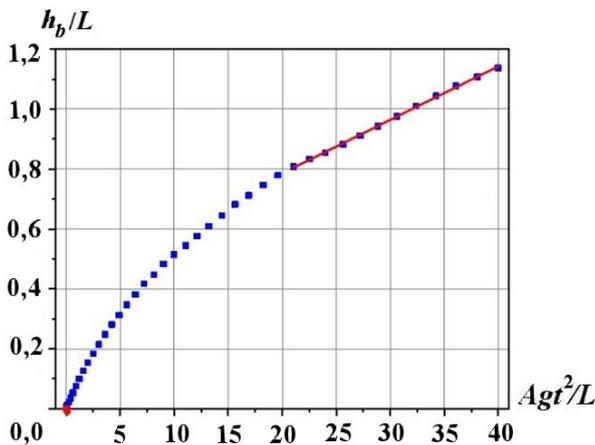


Рис. 12. Тест 3 в расширенной постановке. Аппроксимация положения фронта пузырьков: ■ — "Молох", 512 частиц; — — $\alpha_b = 0,018$

Из рис. 11, б видно, что коэффициент скорости роста пузырьков α_b в более подробном расчете вышел на стационарное значение. Но определить это значение точно достаточно трудно. Поэтому определим его через наклон прямой, аппроксимирующей зависимость h_b/L от Agt^2/L (рис. 12). Полученное значение — $\alpha_b = 0,0180 \pm 0,0002$ (черная горизонтальная линия на рис. 11, б). Это согласуется с результатами из работы [10], однако необходимо провести дальнейшие исследования метода и постановки расчета для получения результатов, близких к [10].

Моделирование неустойчивости Кельвина—Гельмгольца (тест 4).

Постановка задачи со сглаженной границей веществ. Неустойчивость Кельвина—Гельмгольца развивается на границе двух разноплотных веществ, которые движутся друг относительно друга. Например, такая неустойчивость возникает на боковых поверхностях струй и пузырьков в неустойчивости Рэлея—Тейлора. Рассмотрим постановку с ненулевой толщиной границы между веществами [11] — гладким переходом и заданным начальным возмущением. Будем анализировать результаты расчетов качественно и количественно, сравнивая с другими программами максимум плотности кинетической энергии $\gamma = \max(\rho v_y^2/2)$ в направлении OY . Данная величина очень чувствительна к шуму в поле скоростей [11]. Ее рост начинается с конечного возмущения, заданного в расчете, и далее отражает развитие неустойчивости и ошибку в скоростях:

- на границе веществ из-за несбалансированности давления;
- в образце из-за численного шума в скорости и плотности.

Было проведено три расчета:

- 1) количество частиц $128 \times 128 \times 32$; размер образца $L \times L \times L/4$;
- 2) количество частиц $256 \times 256 \times 32$; размер образца $L \times L \times L/8$;
- 3) количество частиц $512 \times 512 \times 32$; размер образца $L \times L \times L/16$,

где $L = 1$ м. Давление 2,5 Па; УРС — для идеального газа с $\gamma = 5/3$. Ядро содержит 180 соседей. Время счета — 2,5 с. Плотность задается по формуле

$$\rho(y) = \begin{cases} \rho_1 - \rho_m e^{(y-0,25)/\Delta y}, & 0 \leq y < 0,25; \\ \rho_2 + \rho_m e^{(0,25-y)/\Delta y}, & 0,25 \leq y < 0,50; \\ \rho_2 + \rho_m e^{(y-0,75)/\Delta y}, & 0,50 \leq y < 0,75; \\ \rho_1 - \rho_m e^{(0,75-y)/\Delta y}, & 0,75 \leq y \leq 1, \end{cases}$$

где $\rho_1 = 1$ кг/м³; $\rho_2 = 2$ кг/м³; $\rho_m = (\rho_1 - \rho_2)/2$ кг/м³; $\Delta y = 0,025$ м — сглаживающий параметр. Начальное распределение скоростей определяется по формуле

$$v_x(y) = \begin{cases} v_1 - v_m e^{(y-0,25)/\Delta y}, & 0 \leq y < 0,25; \\ v_2 + v_m e^{(0,25-y)/\Delta y}, & 0,25 \leq y < 0,50; \\ v_2 + v_m e^{(y-0,75)/\Delta y}, & 0,50 \leq y < 0,75; \\ v_1 - v_m e^{(0,75-y)/\Delta y}, & 0,75 \leq y \leq 1, \end{cases}$$

где $v_1 = 0,5$ м/с; $v_2 = -0,5$ м/с; $v_m = 0,5$ м/с.

В систему вносится начальное возмущение $v_y(x) = \Delta v_y \sin(2\pi x/\lambda)$, где $\Delta v_y = 10^{-2}$ м/с — амплитуда возмущения. Время линейной стадии роста неустойчивости определяется по формуле

$$\tau_{KH} = \frac{\lambda(\rho_1 + \rho_2)}{\sqrt{\rho_1 \rho_2} |v_2 - v_1|},$$

где $\lambda = 0,5$ м — длина волны. Тогда $\tau_{KH} \approx 1,06$ с.

На рис. 13 показаны начальные распределения плотности, а также x - и y -компонент скорости. Для данной постановки число Маха равно 0,3. На рис. 14, 15 показаны распределения плотности на моменты времени 1,5 и 2,5 с для обоих методов с различным общим количеством частиц. Наблюдается качественное согласие результатов, полученных по двум методам.

В качестве эталонного решения будем использовать решение, полученное по программе Pencil [12], в которой реализована эйлерова магнитогидродинамика на неподвижной сетке.

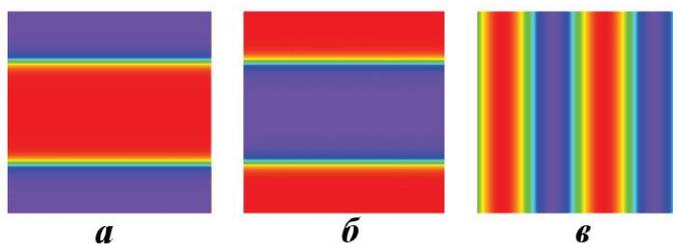


Рис. 13. Тест 4. Начальные распределения плотности (а), v_x (б) и v_y (в)

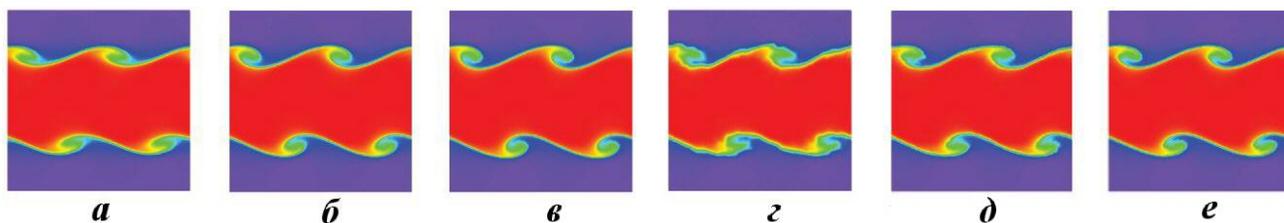


Рис. 14. Тест 4. Распределения плотности при $t = 1,5$ с: а — WPH, 128^2 частиц; б — WPH, 256^2 частиц; в — WPH, 512^2 частиц; г — DISPH, 128^2 частиц; д — DISPH, 256^2 частиц; е — DISPH, 512^2 частиц

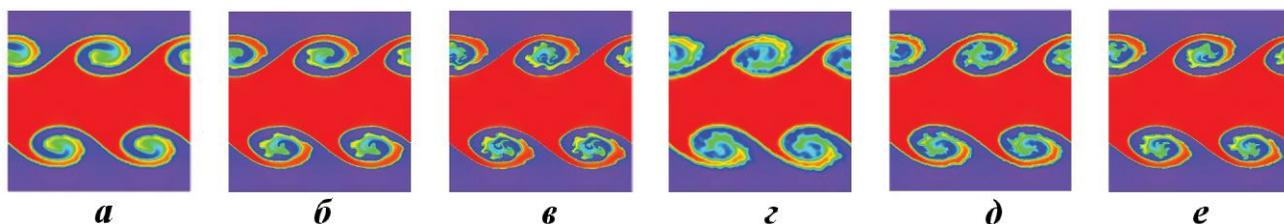


Рис. 15. Тест 4. Распределения плотности при $t = 2,5$ с: а — WPH, 128^2 частиц; б — WPH, 256^2 частиц; в — WPH, 512^2 частиц; г — DISPH, 128^2 частиц; д — DISPH, 256^2 частиц; е — DISPH, 512^2 частиц

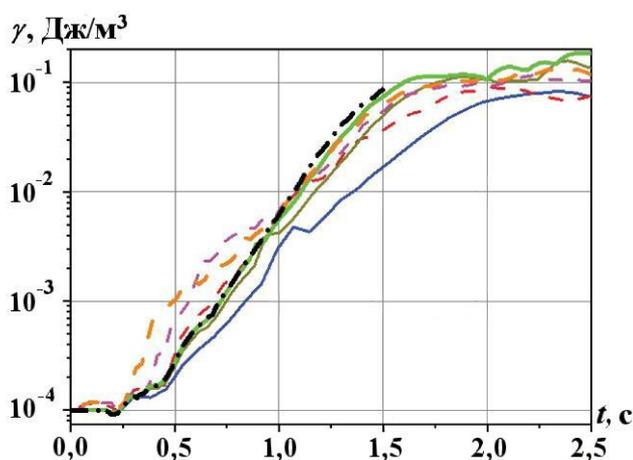


Рис. 16. Зависимости γ от времени: - - - эталон, Pencil; — "Молох", 128 частиц, WPH; — "Молох", 256 частиц, WPH; — "Молох", 512 частиц, WPH; - - - "Молох", 128 частиц, DISPH; - - - "Молох", 256 частиц, DISPH; - - - "Молох", 512 частиц, DISPH

Из рис. 16, на котором показаны зависимости максимальной плотности кинетической энергии в y -направлении (γ) от времени, можно сделать следующие выводы:

- 1) $\gamma(t)$, полученные по методу WPH, сходятся к эталонному решению при увеличении количества частиц;
- 2) $\gamma(t)$ по WPH повторяют нюансы эталонного решения на всех стадиях развития неустойчивости;
- 3) $\gamma(t)$, полученные по методу DISPH до момента времени времени 1 с, имеют большое отличие от эталонного решения, а после этого момента приближаются к решению по WPH.

При счете по WPH сделано 13 207 шагов, а по DISPH — 13 977, т. е. по WPH посчитано на 5 % быстрее. Итак, при моделировании неустойчивости Кельвина—Гельмгольца со сглаженной границей по методу WPH получены результаты, сравнимые с результатами по другим программам и отличающиеся от результатов по DISPH.

Постановка с 2D многомодовым возмущением. В реальных задачах возмущение границы между материалами носит многомодовый характер. Промоделируем поведение веществ при таком возмущении методом WPH.

Расчет в 2D постановке проводится с количеством частиц $1024 \times 1024 \times 16$ (всего 16 777 216). Размер образца $1 \text{ м} \times 1 \text{ м} \times 0,25 \text{ м}$. Давление 2,5 Па; УРС — для идеального газа с $\gamma = 5/3$. Ядро содержит 180 соседей. Время счета — 4 с. Плотность и начальное распределение скоростей задаются соответственно по формулам

$$\rho(y) = \begin{cases} \rho_1, & 0 \leq y < 0,25; \\ \rho_2, & 0,25 \leq y < 0,75; \\ \rho_1, & 0,75 \leq y \leq 1; \end{cases} \quad v_x(y) = \begin{cases} v_1, & 0 \leq y < 0,25; \\ v_2, & 0,25 \leq y < 0,75; \\ v_1, & 0,75 \leq y \leq 1, \end{cases}$$

где $\rho_1 = 1 \text{ кг/м}^3$; $\rho_2 = 2 \text{ кг/м}^3$; $v_1 = 0,5 \text{ м/с}$; $v_2 = -0,5 \text{ м/с}$. В систему вносится начальное возмущение

$$v_y(x) = \sum_{i=1}^{32} a_i \sin(k_i x) \left[e^{-100(y-0,25)^2} + e^{-100(y-0,75)^2} \right],$$

где коэффициенты a_i и k_i — случайные числа.

На рис. 17 показаны начальные распределения плотности, а также x - и y -компоненты скорости. На рис. 18 представлен процесс развития неустойчивости. К моменту времени 0,5 с зарождается около 20 вихрей, однако они начинают объединяться, и уже к $t = 1$ с в системе остается около 10 вихрей. Процесс продолжается, и к моменту $t = 3$ с остается всего 2-3 доминантных вихря.

Найдем две ширины зоны перемешивания с концентрациями тяжелого вещества 1–99 и 10–90 % следующим образом:

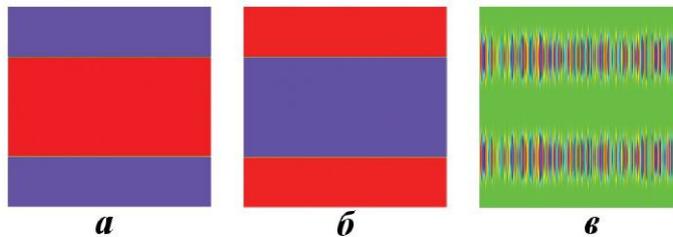


Рис. 17. Тест 4 с 2D многомодовым возмущением. Начальные распределения плотности (а), скоростей v_x (б) и v_y (в)

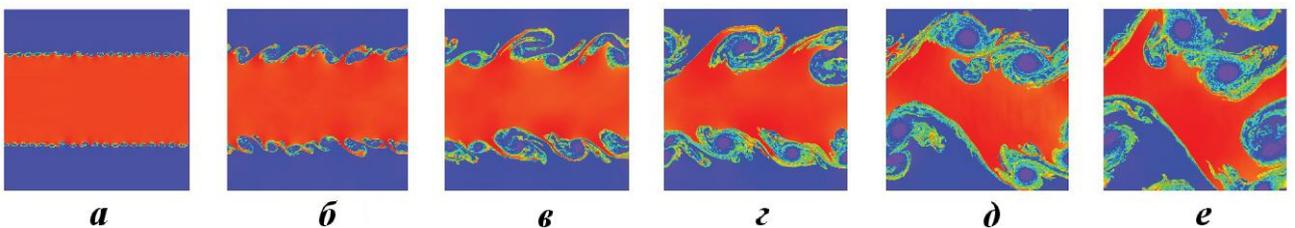


Рис. 18. Тест 4 с 2D многомодовым возмущением. Распределения плотности на моменты времени: а — 0,5 с; б — 1 с; в — 1,5 с; г — 2 с; д — 3 с; е — 4 с

1. Построим одномерное распределение концентрации тяжелого вещества вдоль оси OY , усреднив ее по осям OX и OZ . На рис. 19 показаны такие распределения на различные моменты времени.
2. Определим y -координаты концентраций тяжелого вещества в 1 и 99% для левой и правой частей графика.
3. Найдем модуль разности y -координат для концентраций тяжелого вещества 1 и 99% и усредним по левой и правой частям графиков.
4. Определим y -координату концентраций тяжелого вещества в 10 и 90% как для левой, так и для правой части графика.
5. Найдем модуль разности y -координат для концентраций 10 и 90% и усредним по левой и правой частям графиков.

На рис. 20 показаны две зависимости от времени ширины зоны перемешивания с концентрациями тяжелого вещества 1–99 и 10–90%. Если аппроксимировать полученные зависимости прямыми, то их наклон α_{sh} будет равен 0,164 и 0,113 соответственно. Усредненный наклон равен 0,1385.

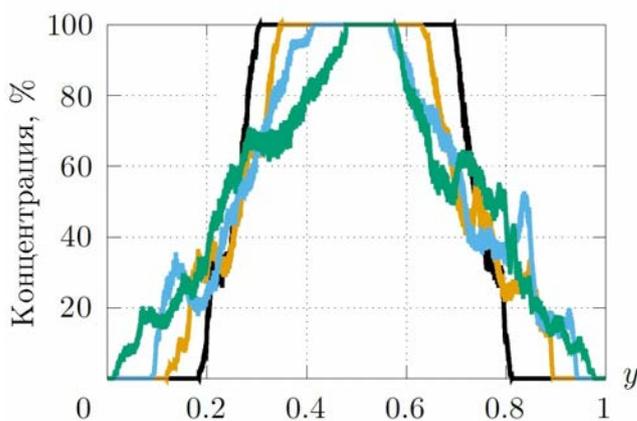


Рис. 19. Тест 4 с 2D многомодовым возмущением. Профили концентрации тяжелого вещества, $t = 1$ (—); 2 (—); 3 (—); 3,5 с (—)

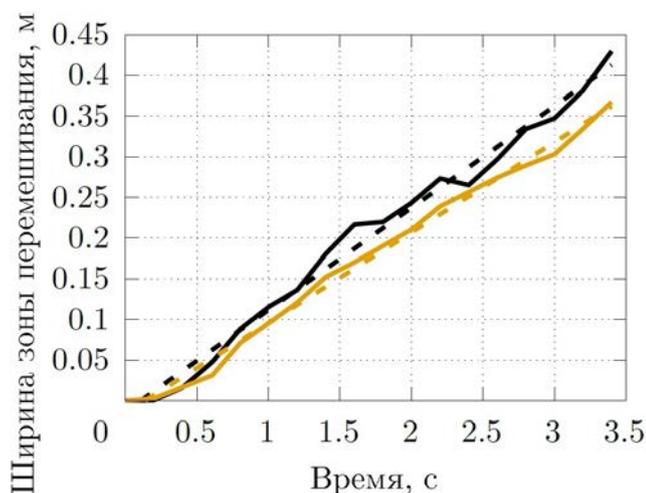


Рис. 20. Тест 4 с 2D многомодовым возмущением. Зависимости от времени ширины зоны перемешивания с разными концентрациями тяжелого вещества: — — 1–99%; — — 10–90%; - - - $\alpha_{sh} = 0,164$; - · - $\alpha_{sh} = 0,113$

Ширина зоны перемешивания определяется по формуле [13]

$$L = (\alpha_{sh,b} + \alpha_{sh,s})(v_1 - v_2)t = (\alpha_{sh,b} + \alpha_{sh,s}) \cdot 1 \cdot t = (\alpha_{sh,b} + \alpha_{sh,s})t,$$

где $\alpha_{sh,b}$ и $\alpha_{sh,s}$ — безразмерные параметры, определяющие глубину проникновения легкого вещества в тяжелое и наоборот; t — время. Это соответствует линейной зависимости ширины зоны перемешивания от времени, а $\alpha_{sh,b} + \alpha_{sh,s}$ — угол наклона этой прямой. В работе [13] $\alpha_{sh,b} + \alpha_{sh,s} = 0,178$ по (κ, ε) -модели по фронтам турбулентной диффузии для несжимаемого случая, тогда как в данной работе было получено значение $\alpha_{sh,b} + \alpha_{sh,s} = 0,14$.

Постановка с 3D многомодовым возмущением. Исследуем, как повлияет трехмерное многомодовое возмущение на поведение границы веществ. Расчет в 3D постановке проводится с количеством частиц $512 \times 512 \times 512$ (всего 134217728). Размер образца $1 \text{ м} \times 1 \text{ м} \times 1 \text{ м}$. Давление 2,5 Па; УРС — для идеального газа с $\gamma = 5/3$. Ядро содержит 180 соседей. Время счета — 3,5 с. Начальное распределение плотностей и скоростей такое же, как в 2D постановке. Начальное возмущение скорости строится следующим образом:

$$v_y(x, z) = \sum_{k_x, k_z} \left(a_k \cos(k_x x) \cos(k_z z) + b_k \cos(k_x x) \sin(k_z z) + c_k \sin(k_x x) \cos(k_z z) + d_k \sin(k_x x) \sin(k_z z) \right),$$

где x, y, z — координаты частицы; a_k, b_k, c_k, d_k — амплитуды; k_x, k_z — волновые числа многомодового возмущения — случайные числа.

На рис. 21 показаны начальные распределения плотности, а также x - и y -компонент скорости.

На рис. 22 показан процесс развития неустойчивости. К моменту времени $t = 1$ с зарождается множество различных по амплитуде вихрей, но, в отличие от расчета в постановке 2D, где произошло вырождение 20 вихрей в 2 вихря, в расчете в постановке 3D наблюдается развитая зона турбулентности.

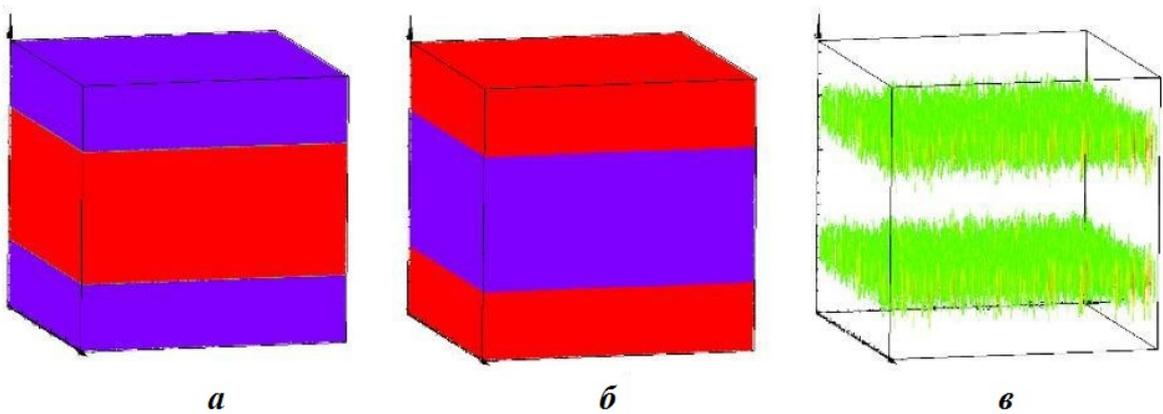


Рис. 21. Тест 3 с 3D многомодовым возмущением. Начальные распределения плотности (а), v_x (б) и v_y (в)

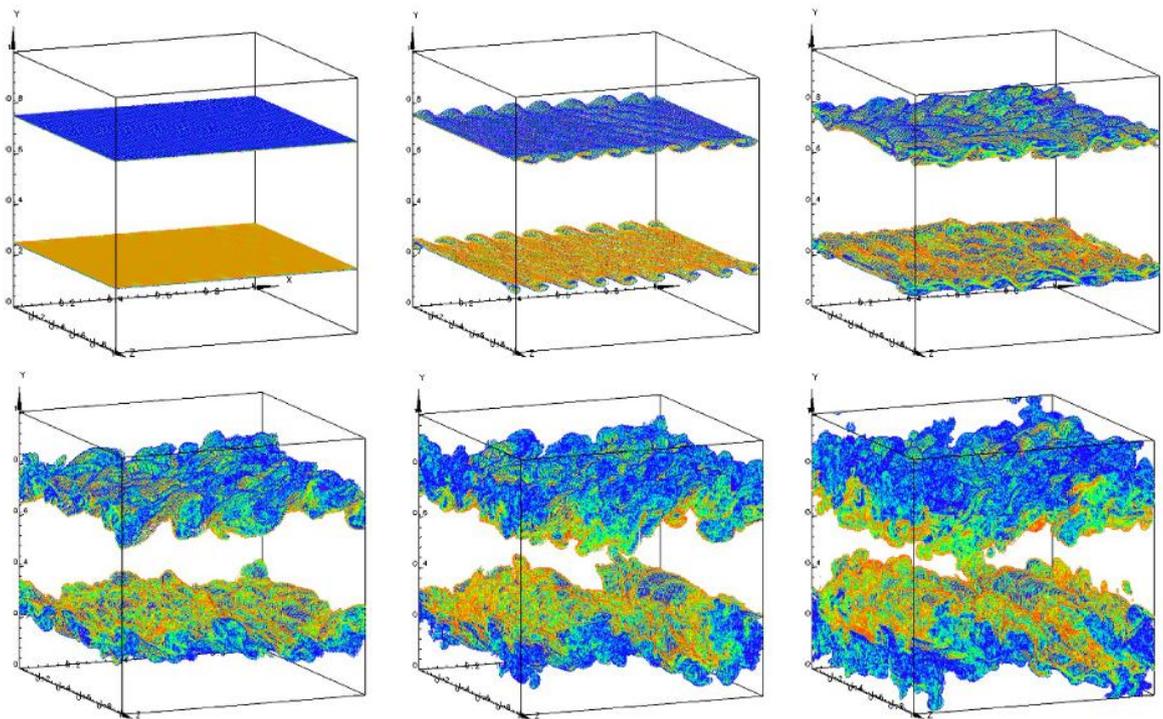


Рис. 22. Тест 3 с 3D многомодовым возмущением. Частицы тяжелого вещества с концентрацией от 1 до 99%, окрашенные по плотности, $t = 1; 1,5; 2; 2,5; 3; 3,5$ с

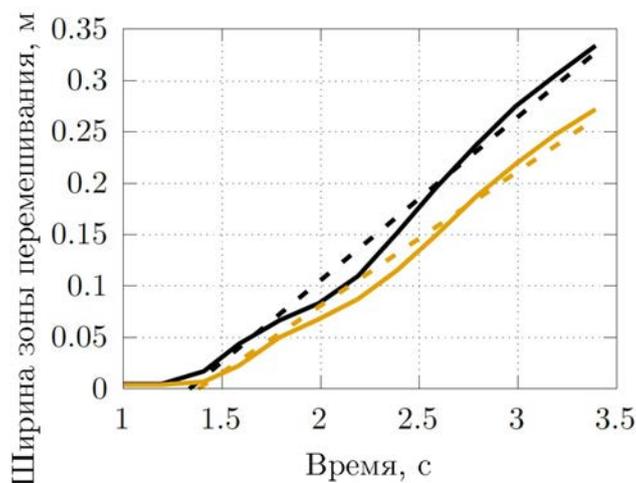


Рис. 23. Тест 3 с 3D многомодовым возмущением. Зависимости от времени ширины зоны перемешивания с разными концентрациями тяжелого вещества: — — 1–99%; — — 10–90%; - - - — $\alpha_{sh} = 0,188$; - - - — $\alpha_{sh} = 0,157$

На рис. 23 приведены зависимости от времени ширины зоны перемешивания с концентрациями тяжелого вещества 1–99 и 10–90%. Если аппроксимировать полученные зависимости прямыми, то их наклон будет равен 0,188 и 0,157 соответственно. Усредненный наклон равен 0,1725, т. е. в 3D постановке $\alpha_{sh,b} + \alpha_{sh,s} = 0,17$.

Итак, при моделировании неустойчивости Кельвина–Гельмгольца с многомодовым возмущением (число Маха 0,3) в 2D случае не была достигнута развита турбулентность, тогда как в 3D ее достигнуть удалось. Коэффициент скорости роста зоны перемешивания $\alpha_{sh,b} + \alpha_{sh,s} \approx 0,17$, взятый из 3D расчета, хорошо согласуется с результатом из работы [13].

Моделирование неустойчивости Рихтмайера–Мешкова — "Обратный шеврон" (тест 5). Тест "Обратный шеврон" [14] моделирует неустойчивость Рихтмайера–Мешкова, возникающую при прохождении ударной волны через границу раздела двух веществ. Зададим геометрию задачи, как показано на рис. 24 (размеры указаны в см). Угол на границе третьего и четвертого веществ составляет 157° .

Расчет выполнялся с количеством частиц $370 \times 74 \times 18$ (всего 492 840). Размер образца $1 \text{ м} \times 0,2 \text{ м} \times 0,05 \text{ м}$. Граничные условия по x слева — свободные, по x справа — жесткая стенка, по y и z — периодические. Ядро содержит 90 соседей. Время счета — 0,004 с.

Данные по областям:

- 1) $\rho = 1,91 \text{ кг/м}^3$; $P = 170 \text{ Па}$; УРС — для идеального газа с $\gamma = 1,397$; $v_x = 129 \text{ м/с}$;
- 2) $\rho = 1,31 \text{ кг/м}^3$; $P = 100 \text{ Па}$; УРС — для идеального газа с $\gamma = 1,397$; $v_x = 0$;
- 3) $\rho = 5,89 \text{ кг/м}^3$; $P = 100 \text{ Па}$; УРС — для идеального газа с $\gamma = 1,0937$; $v_x = 0$;
- 4) $\rho = 1,31 \text{ кг/м}^3$; $P = 100 \text{ Па}$; УРС — для идеального газа с $\gamma = 1,397$; $v_x = 0$.

Разделение газов в эксперименте происходило при помощи тонких мембран, нанесенных на сетку из проволочек (рис. 25, а), которые являлись зародышами возмущений при их разрушении. Поэтому в расчете необходимо учесть эти возмущения при построении образца. Границы между областями 2, 3 и 3, 4 возмущаются соответственно по следующим законам:

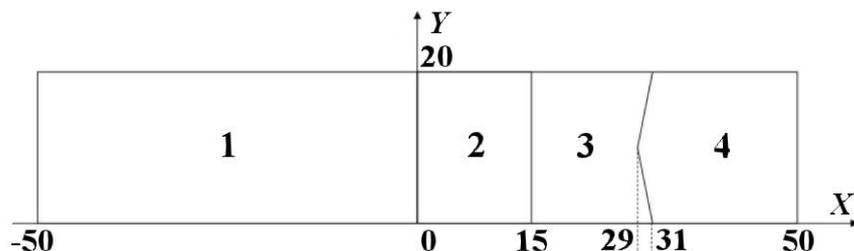


Рис. 24. Геометрия задачи "Обратный шеврон": 1 — воздух за фронтом ударной волны; 2, 4 — покойщийся воздух; 3 — гексафторид серы (SF_6)

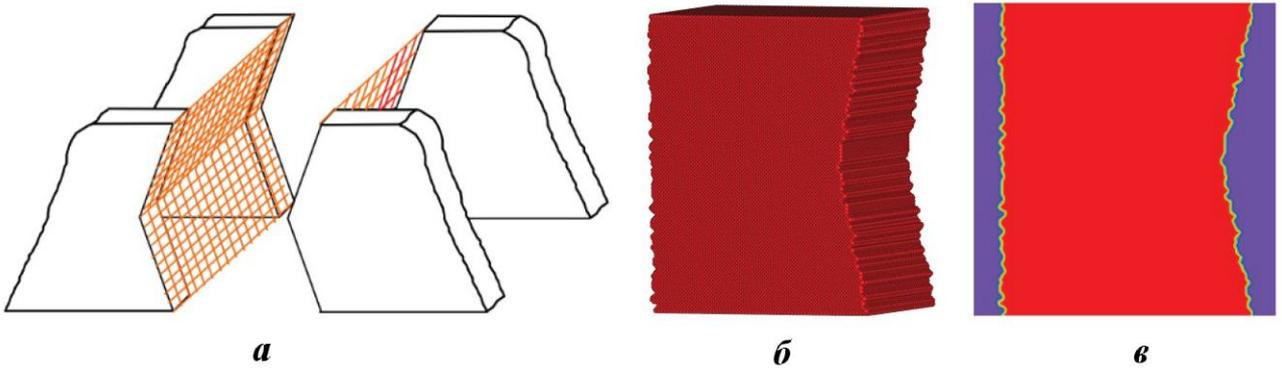


Рис. 25. Мембраны, разделяющие газы в эксперименте [12] (а), 3D расстановка частиц SF₆ (б) и профиль плотности в плоскости $z = 0$ (в) в начальный момент времени

$$h_x^{23}(y) = \sum_{i=1}^{32} a_i^{23} \sin(k_i^{23}y); \quad h_x^{34}(y) = \sum_{i=1}^{32} a_i^{34} \sin(k_i^{34}y),$$

где h — смещение границы вдоль оси OX относительно ее первоначальной позиции в зависимости от y -координаты; коэффициенты a_i^{23} , a_i^{34} и k_i^{23} , k_i^{34} — случайные числа. На рис. 25, б, в показаны полученные возмущенные границы.

На рис. 26 показано сравнение результатов расчета с экспериментом. Видно, что по методу DISPH развитие неустойчивости в полной мере не получено. В расчете по WPH сделано 3875 шагов, по DISPH — 5063, т. е. по WPH посчитано на 30% быстрее.

Итак, при моделировании неустойчивости Рихтмайера—Мешкова по методу WPH получены результаты, сравнимые с экспериментальными данными, а по DISPH — нет.

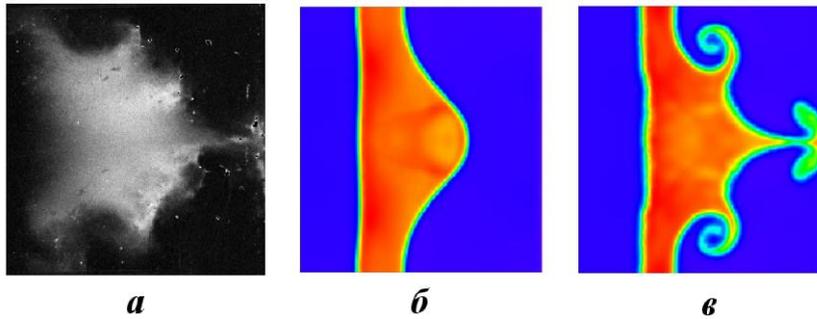


Рис. 26. Тест 5. Плотности при $t = 0,004$ с: а — эксперимент; б — WPH; в — DISPH

Заключение

В данной статье были рассмотрены задачи на развитие неустойчивостей. Прежде чем приступать к моделированию неустойчивостей, необходимо определить вносимые методами погрешности. Это можно сделать с помощью двух тестов на статическое и динамическое равновесие, которые имеют аналитическое решение. В тесте на статическое равновесие "Перенос куба" хорошо показали себя оба метода. В тесте на динамическое равновесие "Вихрь Грешо—Чена" метод WPH превзошел DISPH как по точности и малости шума, так и по скорости счета.

Для моделирования неустойчивости Рэля—Тейлора была выбрана 3D постановка α -Group. По методу DISPH при заданном малом возмущении развитие неустойчивости не было получено, тогда как результаты по WPH хорошо согласуются с полученными другими авторами. Был вычислен коэффициент скорости роста пузырей $\alpha_b \approx 0,018$.

При моделировании неустойчивости Кельвина—Гельмгольца метод WPH превзошел DISPН как по точности расчета, так и по скорости вычислений. По WPH получено корректное развитие неустойчивости даже при возмущении, заданном в 106 раз меньше, чем у DISPН. Для WPH были проведены расчеты с многомодовым возмущением в 2D и 3D постановках. Был вычислен коэффициент скорости роста зоны перемешивания: $\alpha_{sh,b} + \alpha_{sh,s} \approx 0,14$ для 2D расчета и $\sim 0,17$ для 3D расчета.

Для моделирования неустойчивости Рихтмайера—Мешкова была выбрана задача "Обратный шеврон", имеющая экспериментальные данные. При малом количестве точек использование метода DISPН не дало развития неустойчивости, тогда как результаты, полученные по WPH, качественно согласуются с результатами эксперимента.

Было показано, что во всех тестах по методу WPH получена меньшая ошибка и они посчитаны быстрее, чем по DISPН. Таким образом, делается вывод о целесообразности применения метода WPH при моделировании задач развития неустойчивостей.

Список литературы

1. Сапожников Ф. А., Рыкованов В. С. Сравнение WPH и DISPН методов частиц при моделировании ударных волн // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2023. Вып. 3. С. 34—54.
Sapozhnikov F. A., Rykovanov V. S. Srovnienie WPH i DISPН metodov chastits pri modelirovanii udarnykh voln // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2023. Vyp. 3. S. 34-54.
2. Сапожников Ф. А., Ионов Г. В., Дрёмов В. В. Программный комплекс "Молох" для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных материалах // Там же. 2011. Вып. 4. С. 50—57.
Sapozhnikov F. A., Ionov G. V., Dremov V. V. Programmnyy kompleks kompleks "Molokh" dlya molekulyarno-dinamicheskogo modelirovaniya protsessov v kondensirovannykh materialakh // Tam zhe. 2011. Vyp. 4. S. 50—57.
3. Wendland H. Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree // *Advances in Computational Mathematics*. 1995. Vol. 4. P. 389—396.
4. Diehl S., Rockefeller G., Fryer C. L., Riethmiller D., Statler T. S. Generating optimal initial conditions for smoothed particle hydrodynamics simulations // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2015. Vol. 32. P. 1—18.
5. Hopkins P. F. A new class of accurate, mesh-free hydrodynamic simulation methods // *Ibid.* Vol. 450. P. 53—110.
6. Gresho P. M., Chan S. T. On the theory of semi-implicit projection methods for viscous incompressible flow and its implementation via a finite element method that also introduces a nearly consistent mass matrix. Part 2: Implementation // *Int. J. Numerical Methods Fluids*. 1990. Vol. 11. P. 621—659.
7. Dehnen W., Aly H. Improving convergence in smoothed particle hydrodynamics simulations without pairing instability // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2012. Vol. 425. P. 1068—1082.
8. Hu C.-Y., Naab T., Walch S., Moster B. P., Oser L. SPHGal: smoothed particle hydrodynamics with improved accuracy for galaxy simulations // *Ibid.* 2014. Vol. 443. P. 1173—1191.
9. Zhu Q., Hernquist L., Li Y. Numerical convergence in smoothed particle hydrodynamics // *The Astrophysical Journal*. 2015. Vol. 800. P. 6.
10. Dimonte G., Youngs D. L., Dimitis A., Weber S., Marinak M., Wunsch S., Garasi C., Robinson A., Andrews M. J., Ramaprabhu P., Calder A. C., Fryxell B., Biello J., Dursi L., MacNeice P., Olson K., Ricker P., Rosner R., Timmes F., Tufo H., Young Y.-N., Zingale M. A comparative study of the Rayleigh—Taylor instability using high-resolution three-dimensional numerical simulations: the Alpha-Group collaboration // *Physics of Fluids*. 2004. Vol. 16, No 5. P. 1668—1693.

11. *McNally C. P., Lyra W., Passy J.-C.* A well-posed Kelvin-Helmholtz instability test and comparison // The Astrophysical Journal Supplement Series. 2012. Vol. 201. P. 18–35.
12. URL: nordita.org/software/pencil-code.
13. *Avramenko M. I., Shushlebin A. N.* Numerical simulation of the Self-similar problem on shear turbulent mixing using $\kappa - \varepsilon$ -model // Zababakhin Scientific Talks —2005. 2006. P. 329–334.
14. *Holder D. A., Barton C. J.* Shock tube Richmyer–Meshkov experiments: inverse chevron and half height // Proc. 9th Int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing. 2004. http://www.iwpctm.org/proceedings/IWPCTM9/Papers/Holder_Barton/Paper.pdf.

Статья поступила в редакцию 13.02.23.
