

УДК 519.688

Эйлеровы численные методики ЭГАК и ТРЭК для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды

**Ю. В. Янилкин, С. П. Беляев,
Ю. А. Бондаренко, Е. С. Гаврилова,
Е. А. Гончаров, А. Д. Горбенко,
А. В. Городничев, Е. В. Губков,
А. Р. Гужова, Л. И. Дегтяренко,
Г. В. Жарова, В. Ю. Колобянин,
В. Н. Софронов, А. Л. Стадник,
Н. А. Ховрин, О. Н. Чернышова,
И. Н. Чистякова, В. Н. Шемяков**

Дан обзор основных алгоритмов, лежащих в основе лагранжево-эйлеровых методик ЭГАК и ТРЭК, предназначенных для моделирования 2D и 3D течений многокомпонентной среды с большими деформациями, включая стадию турбулентного перемешивания. Приводятся результаты некоторых расчетов, дающих представление о точности и эффективности методик.

Введение

Использование эйлеровых и произвольно лагранжево-эйлеровых (ALE) методов для ударно-волновых течений многокомпонентной сплошной среды приобретает все больший вес из-за присущих им по сравнению с лагранжевыми методами преимуществ, среди которых наиболее важными являются их безавзвонность, более простая подготовка начальных данных, меньшая трудоемкость проведения расчетов и меньшая зависимость результатов от квалификации исполнителя расчетов.

Однако эйлеровы методы при всей их привлекательности требуют решения ряда сложных проблем. Основные из них следующие: аппроксимация уравнений лагранжевой газодинамики для случая многокомпонентной среды из-за появления так называемых смешанных ячеек; относительно меньшая (по сравнению с лагранжевыми методами) точность, обусловленная необходимостью решения уравнения адвекции; определение положения контактных границ и расчета их движения по неподвижной счетной сетке; проблемы моделирования различных физических процессов: горения и детонации ВВ, теплопроводности, упругопластики и др.; необходимость использования

не однородной сетки; проблема эффективного распараллеливания при реализации программ на параллельных компьютерах.

От решения указанных проблем зависит эффективность и точность эйлеровых методов. Ниже описываются алгоритмы, применяемые нами для повышения эффективности и точности методик ЭГАК (2D) и ТРЭК (3D).

Отметим, что хотя методики ЭГАК и ТРЭК в основном используются для проведения расчетов на неподвижных сетках, при реализации программ в них применяется ALE подход. В соответствии с этим аппроксимация уравнений производится в два этапа: лагранжев и эйлеров этапы. Используется единая счетная сетка, которая в процессе счета может двигаться достаточно произвольно. Счетные ячейки представляют собой: в 2D случае четырехугольники, в 3D случае шестигранники. Компонентами могут быть: разные вещества со своими уравнениями состояния; разные фазовые состояния одного вещества, такие, как: ВВ-ПВ, вода-пар и др.; разные фракции дисперсной примеси; вакуум; абсолютно твердые тела.

Описание всех алгоритмов методик невозможно в рамках одной работы, поэтому ниже основное внимание уделим проблемам, решение которых является специфическим для указанных методик.

Методы расчета смешанных ячеек в лагранжевой газодинамике

Основные уравнения и предположения

Предполагается, что в расчетной области может быть несколько компонентов (веществ) с различными УРС. При этом границы разделов веществ могут не совпадать с линиями счетной сетки, более того, в области возможно наличие смесей, в которых границы между веществами отсутствуют. Смеси в общем случае являются гетерогенными, каждый компонент которых может иметь свой УРС, хотя возможно наличие и гомогенных смесей. Используется односкоростная модель многокомпонентной среды, каждый компонент которой выделяется полным набором термодинамических параметров: плотностью, удельной внутренней энергией и объемной концентрацией.

Скорость \bar{u} определена в узлах счетной сетки, скалярные величины $\rho_i, e_i, P_i, P, \beta_i = V_i/V$ определены в центрах ячеек; здесь ρ – плотность; e – удельная внутренняя энергия; P – давление; V – объем; β – объемная концентрация; $i = 1, \dots, J$ – номер компонента.

Исходная система дифференциальных уравнений многокомпонентной газодинамики имеет следующий вид:

$$\frac{d\bar{u}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \text{grad}(P + q); \tag{1}$$

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \text{div}\bar{u}_i; \tag{2}$$

$$\frac{d\beta_i}{dt} = \beta_i (\text{div}\bar{u}_i - \text{div}\bar{u}); \tag{3}$$

$$\frac{de_i}{dt} = -\frac{P_i + q_i}{\rho_i} \text{div}\bar{u}_i. \tag{4}$$

Здесь q и q_i – счетные вязкости; $i = 1, 2, \dots, J$.

Уравнения (1)–(4) замыкаются УРС компонентов среды

$$P_i = P_i(\rho_i e_i). \quad (5)$$

Уравнение (3) является следствием уравнения (2), оно приведено только для того, чтобы подчеркнуть, что в случае многокомпонентной среды объемные концентрации тоже должны быть определены на новый момент времени.

В настоящей работе рассматриваются лишь проблемы, связанные с расчетом смешанных ячеек, в связи с чем разностные уравнения приводятся ниже только в необходимом объеме (например, опускаются все детали пространственной аппроксимации дифференциальных операторов).

Система (1)–(5) не замкнута. В частности, в ней не определены: давление P для среды в целом; дивергенции скорости компонентов $\text{div} \bar{u}_i$; искусственная вязкость q ячейки в целом и искусственные вязкости компонентов q_i . Для замыкания системы необходимы дополнительные предположения относительно состояния смеси в смешанных ячейках.

Основные методы замыкания

До недавнего времени основным практически используемым предположением являлось предположение об одинаковой сжимаемости компонентов [1] (метод 1)

$$\text{div} \bar{u}_i = \text{div} \bar{u}. \quad (6)$$

Применяется также метод 2, основанный на предположении о равенстве давлений компонентов с учетом их вязкостей в следующей форме:

$$P_i + q_i = P_k + q_k. \quad (7)$$

Использование данного предположения приводит к итерационному способу решения системы уравнений (2), (4) и (5) [2].

Нами используется также метод 3, основанный на предположении об одинаковом приращении давлений компонентов [3]. Этот метод приводит к безытерационному алгоритму, который показал значительно более высокую точность в расчетах задач со смесями по сравнению с методом 1. Метод 3 основан на замыкающих соотношениях $\Delta P_i = \Delta P_k$, или

$$\rho_i c_i^2 \text{div} \bar{u}_i = \rho_k c_k^2 \text{div} \bar{u}_k. \quad (8)$$

В работе [4] метод 3 был модифицирован алгоритмом выравнивания давлений компонентов (метод 3Р), что значительно увеличило его точность.

Задача 1. Прохождение ударной волны по смеси двух газов. Результаты расчетов приводятся на рис. 1 в виде давлений (среднего и компонентов) в зависимости от расстояния на момент времени $t = 25$ для трех методов. На рис. 2 приводятся аналогичные профили плотностей компонентов.

Анализируя результаты расчетов, отметим, что в расчетах по методу 3 профили среднего давления отличаются друг от друга, однако достаточно близки, близки также и скорости распространения УВ. Расчет по методу 1 дает заметно отличающиеся результаты как по амплитуде давления за фронтом УВ, так и по скорости фронта. В этом расчете давления компонентов резко отличаются друг от друга и от среднего значения, в то время как в расчете по методу 3 они близки, хотя и не полностью совпадают, как это имеет место в расчетах с выравниванием давлений компонентов. Метод 3Р практически полностью совпадает с методом 2 [3], использующим предположение о равенстве давлений компонентов.

ЭЙЛЕРОВЫ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДИКИ ЭГАК И ТРЭК ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МНОГОМЕРНЫХ ТЕЧЕНИЙ

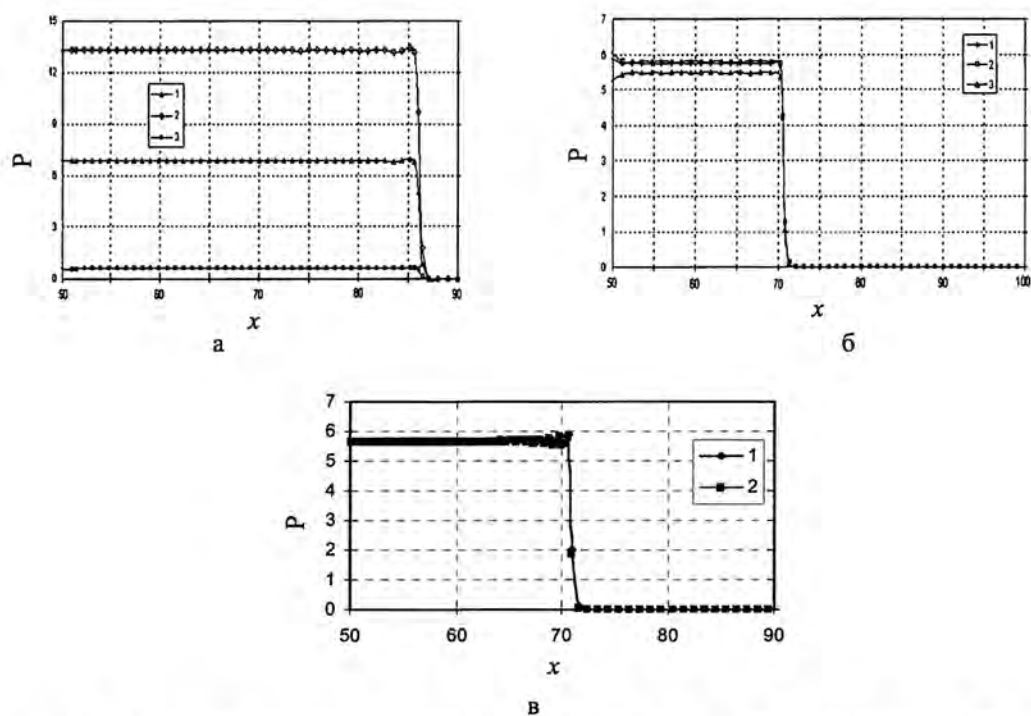


Рис. 1. Профили давления в задаче 1, $t = 25$; а – метод 1; б – метод 3; в – метод 3P;
 1 – среднее давление; 2 – давление компонента 1; 3 – давление компонента 2

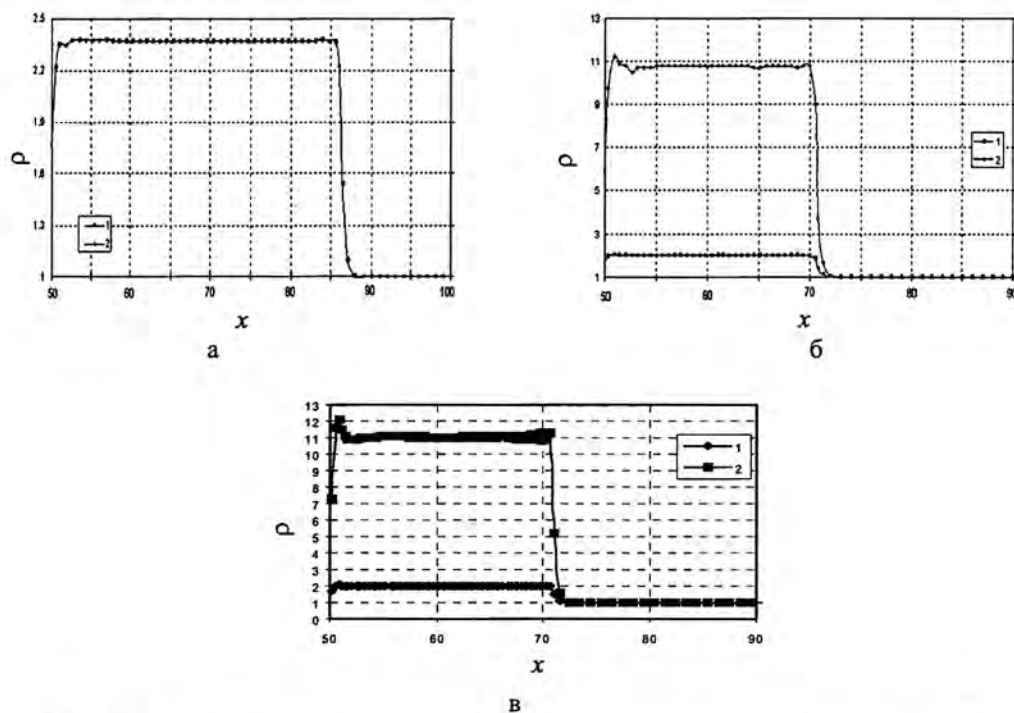


Рис. 2. Профили плотности в задаче 1, $t = 25$; а – метод 1; б – метод 3; в – метод 3P;
 1 – плотность компонента 1; 2 – плотность компонента 2

Профили плотности также показывают, что метод 1 дает неприемлемый по точности результат. Плотности обоих компонентов в этом расчете одинаковы в полном соответствии с принятым предположением, только первый компонент сильно пережат, а второй, наоборот, недожат. Методы 3 и 3P по сравнению с методом 1 значительно более точные. Полученные в расчетах по этим методам сжатия за фронтом УВ близки к ожидаемым. В то же время видно, что из этих трех методов следует отдать предпочтение методу 3P (плотности за фронтом практически совпадают с ожидаемыми).

Аппроксимация уравнения адвекции

Особенности применения методов CM, DM и PPM

Одним из наиболее успешно применяемых методов, позволяющих повысить точность решения уравнения адвекции для многокомпонентного случая, является метод концентраций (метод CM) [5]. Этот метод лежит в основе методик ЭГАК и ТРЭК и именно в методике ЭГАК был разработан его первый вариант.

В методе концентраций для выделения разных компонентов используются их индивидуальные параметры термодинамического состояния, количество которых увеличивалось по мере развития метода. В случае газодинамики их полный набор включает плотности (или массовые концентрации (доли), отсюда и название метода), энергии и объемные концентрации. При этом уравнения неразрывности и энергии записываются для каждого компонента в отдельности. Суть метода концентраций заключается в том, что в нем для расчета потоков из смешанных ячеек используется специальный алгоритм, основанный на локальном восстановлении положения контактных границ по полю концентраций. Метод позволяет локализовать положение границ с точностью до одной счетной ячейки. Мы не будем касаться всех алгоритмов этого метода (они подробно изложены в разных работах, например, в обзорной работе [6]), а остановимся лишь на некоторых проблемах, которые возникают при его использовании совместно с методами DM и PPM.

Формулу для определения потоков объема компонентов через сторону (грань) ячейки можно записать в следующем общем виде:

$$\Delta V_i = \Delta V \beta_{\Delta V}^i. \quad (9)$$

Здесь ΔV – суммарный поток объема через текущую сторону; $\beta_{\Delta V}^i$ – некоторое значение объемной концентрации для i -го компонента. Для вычисления $\beta_{\Delta V}^i$ могут использоваться 3 метода: метод DM, метод CM и метод PPM в зависимости от ситуации. Когда в донорной ячейке по полю концентраций удастся восстановить положение контактной границы, используется метод CM, в противном случае используется метод PPM. Фактически метод PPM используется для вычисления потоков из смешанной ячейки в смешанную или из смешанной в чистую при наличии в данной ячейке тонкого слоя другого вещества.

После определения потоков объемов компонентов потоки массы определяются по аналогичной формуле

$$\Delta M_i = \Delta V_i \rho_i^*, \quad (10)$$

где ρ_i^* – значение плотности в потоке, определяемое либо донорным методом, либо методом PPM. Если для расчета потока объема использовался метод CM, то для плотности применяется метод DM, в противном случае применяется метод PPM.

Для вычисления потоков энергии и других величин, определенных на единицу массы компонента, используется аналогичный подход, только в формуле (10) вместо ΔV_i пишется ΔM_i , а вместо ρ_i^* – соответствующая величина.

Детали реализации указанной технологии применения разных методов в методиках ЭГАК и ТРЭК приводятся в работе [7].

Задача 2. Взрыв в экспоненциальной атмосфере. Для данной задачи известно, что на время $t \sim 35$ происходит так называемый прорыв ударной волны, когда ее скорость стремится к бесконечности. Результаты расчетов данной задачи по методам DM и PPM в 2D приближении приводятся на рис. 3 в виде внутренней энергии атмосферы и на рис. 4 в виде $X - t$ диаграммы фронта ударной волны в направлении вверх. Из рис. 4 видно, что метод DM дает качественно неверный результат, который не улучшается с уменьшением размеров ячеек. Метод PPM позволяет получить приемлемый по точности результат.

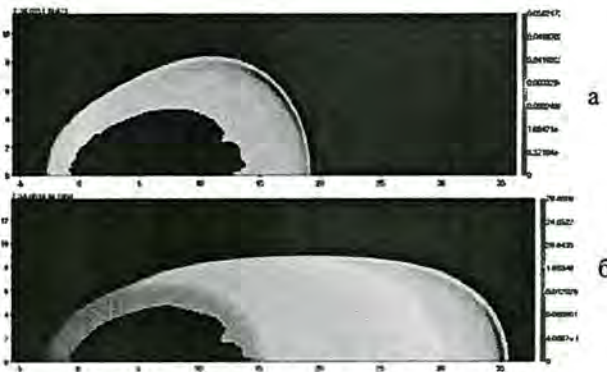


Рис. 3. Внутренняя энергия атмосферы, $t = 34$:
а – метод DM; б – метод PPM

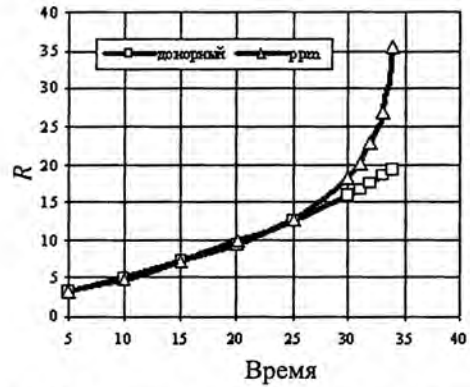


Рис. 4. Зависимость радиуса ударной волны от времени

Аппроксимация уравнения теплопроводности

При аппроксимации уравнения теплопроводности в смешанных ячейках необходимо вводить дополнительные (по сравнению с газодинамикой) замыкающие соотношения. В настоящее время при расчете теплопроводности широко используется предположение о мгновенном выравнивании температур веществ внутри смешанных ячеек. Кроме этого предположения в методиках ЭГАК и ТРЭК используется также метод, основанный на предположении о наличии в смешанных ячейках теплообмена между веществами.

Основная идея этого метода заключается в разделении процесса теплопроводности на два этапа. На первом этапе решается обычное уравнение теплопроводности для средней энергии среды, на втором – осуществляется теплообмен между компонентами внутри смешанных ячеек.

Этап 1. Рассматривается уравнение теплопроводности

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \text{div}(\chi \text{grad} U); \quad U = T^4, \tag{11}$$

где ρ , e , χ , T – осредненные параметры среды: плотность, удельная внутренняя энергия, коэффициент теплопроводности и температура.

Сеточные функции плотности, удельной внутренней энергии и температуры определены в центре ячейки, а тепловые потоки в узлах сетки в $2D$ случае и на гранях в $3D$ случае. Уравнение (11) аппроксимируется неявной разностной схемой

$$\frac{e^{n+1} - e^n}{\tau} = \left(\frac{\text{div}(\chi \text{grad} T)}{\rho} \right)^{n+1}. \quad (12)$$

Метод решения системы конечно-разностных уравнений (12) в $2D$ случае описан в работе [8]. В $3D$ случае используется метод локальных итераций, предложенный в работах [9, 10]. В основе этого метода лежит явный оператор послойного перехода, представляющий собой цикл s элементарных шагов, каждый из которых по трудоемкости эквивалентен одному шагу традиционной явной схемы. Данный метод удобен для реализации на параллельных машинах.

Этап 2. После работы первого этапа известны средние потоки тепла через стороны (границы) ячейки. На втором этапе в смешанных ячейках эти потоки распределяются между компонентами, затем осуществляется теплообмен между веществами через контактную границу между компонентами. Отметим только, что в наших методиках положение контактных границ в смешанной ячейке восстанавливается по полю концентраций. В $2D$ случае граница аппроксимируется отрезком прямой, а в $3D$ случае – плоскостью. Остальные детали алгоритмов решения уравнения теплопроводности можно найти в работе [8].

Задача 3. Теплообмен в двухкомпонентной среде. Прямоугольный параллелепипед разделен плоскостью на две части. В первой области находится горячий легкий газ ($\rho_1 = 0,1$, $e_1 = 10$, $\chi_1 = 1$, $c_V = 1$), а во второй области – холодный тяжелый газ ($\rho_2 = 10$, $e_2 = 1$, $\chi_2 = 0,5$, $c_V = 1$). На границах задаются равные нулю потоки. Проведены расчеты в следующих постановках. Граница раздела веществ совпадает с линиями счетной сетки (лагранжев расчет), граница раздела веществ не совпадает с линиями счетной сетки, в смешанных ячейках используется предположение о равенстве температур веществ (метод 1), граница раздела веществ не совпадает с линиями счетной сетки, в смешанных ячейках осуществляется теплообмен между веществами (метод 2). Задача одномерная, однако расчеты проведены в $3D$ геометрии. Результаты расчетов приводятся на рис. 5.

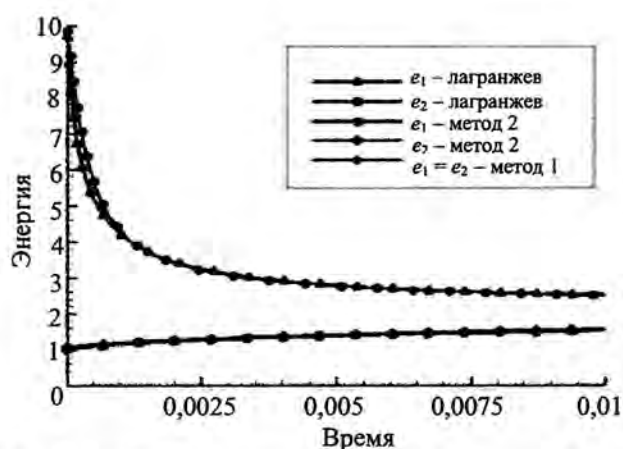


Рис. 5. График зависимости удельной внутренней энергии компонентов от времени

Из представленных графиков видно, что расчеты по методу 2 хорошо согласуются с лагранжевыми. Для метода 1 кривые для разных компонентов совпадают в силу особенности метода.

Использование адаптивно-встраиваемой дробной сетки.

Для повышения точности и уменьшения времени счета 2D расчетов в методике ЭГАК используется адаптивно-встраиваемая дробная счетная сетка (в 3D случае это еще не реализовано). Основные свойства используемой сетки: новые ячейки получаются отрезками, проведенными через середины сторон более крупных ячеек; способ дробления ячеек одинаковый на всех уровнях; максимальное число уровней дробления – 5; соседние ячейки отличаются только на один уровень; после дробления ячейки-мамы не уничтожаются; реализованы алгоритмы автоматического создания и уничтожения дробных ячеек.

Задача 4. Удар цилиндра по жесткой стенке. Начальная геометрия задачи и начальная счетная сетка показаны на рис. 6,а. В расчете использовалось дробление сетки до 2-го уровня в области, занятой цилиндром. Расчет проводился в упругопластическом приближении, результаты расчетов показаны на рис. 6,б,в. Коэффициент ускорения расчета при использовании дробной сетки составил ~ 6,5.

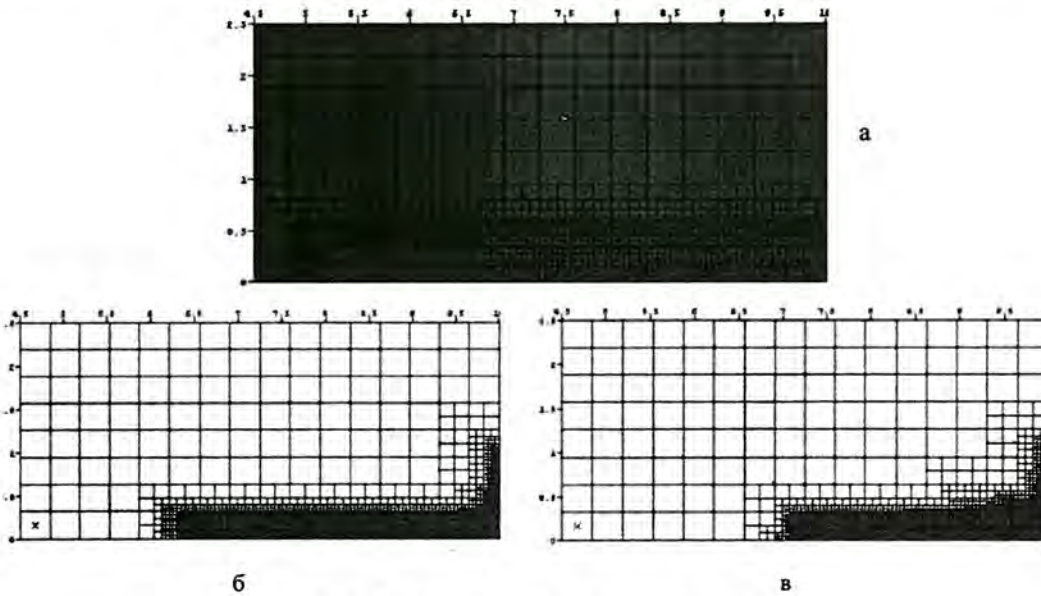


Рис. 6. Удар цилиндра по жесткой стенке

Задача 5. Распространение тепловой волны. Рассматривается сферически симметричная задача. Имеются две области, заполненные разными веществами. В первой области ($R < R_1 = 0,02$) содержится идеальный газ $\gamma = 5/3$ и начальными данными $\rho_1 = 1,0$, $e_1 = 1,0$. Во второй области ($R_1 \leq R \leq R_2 = 0,03$) – вещество с $\rho_2 = 5,0$, $e_2 = 0,0$ и уравнением состояния Ми-Грюнайзена. Начальная геометрия задачи и начальная сетка показаны на рис. 7,а. Эта сетка остается без изменения в процессе счета. Кроме того, задается и поддерживается в процессе счета дробная сетка второго уровня на фронте тепловой волны.

Результаты расчета приводятся на рис. 7,в,г в виде растровой картины энергии одного из веществ и счетной сетки на два момента времени. На рис. 7,б представлены графики зависимости энергии в 1-м веществе вдоль координаты x для трех строк основной сетки. Фронт тепловой волны в данный момент времени соответствует радиусу $R = 0,0265$. Радиус $R = 0,0205$ соответствует ячейкам, расположенным до стационарной области дробления, $R = 0,0255$ – ячейкам, распо-

женным после стационарной области дробления по направлению распространения тепла. Из приведенных графиков видно, что при комбинированном использовании стационарной сетки в центре области и подвижной дробной сетки на фронте волны симметрия течения практически не нарушена.

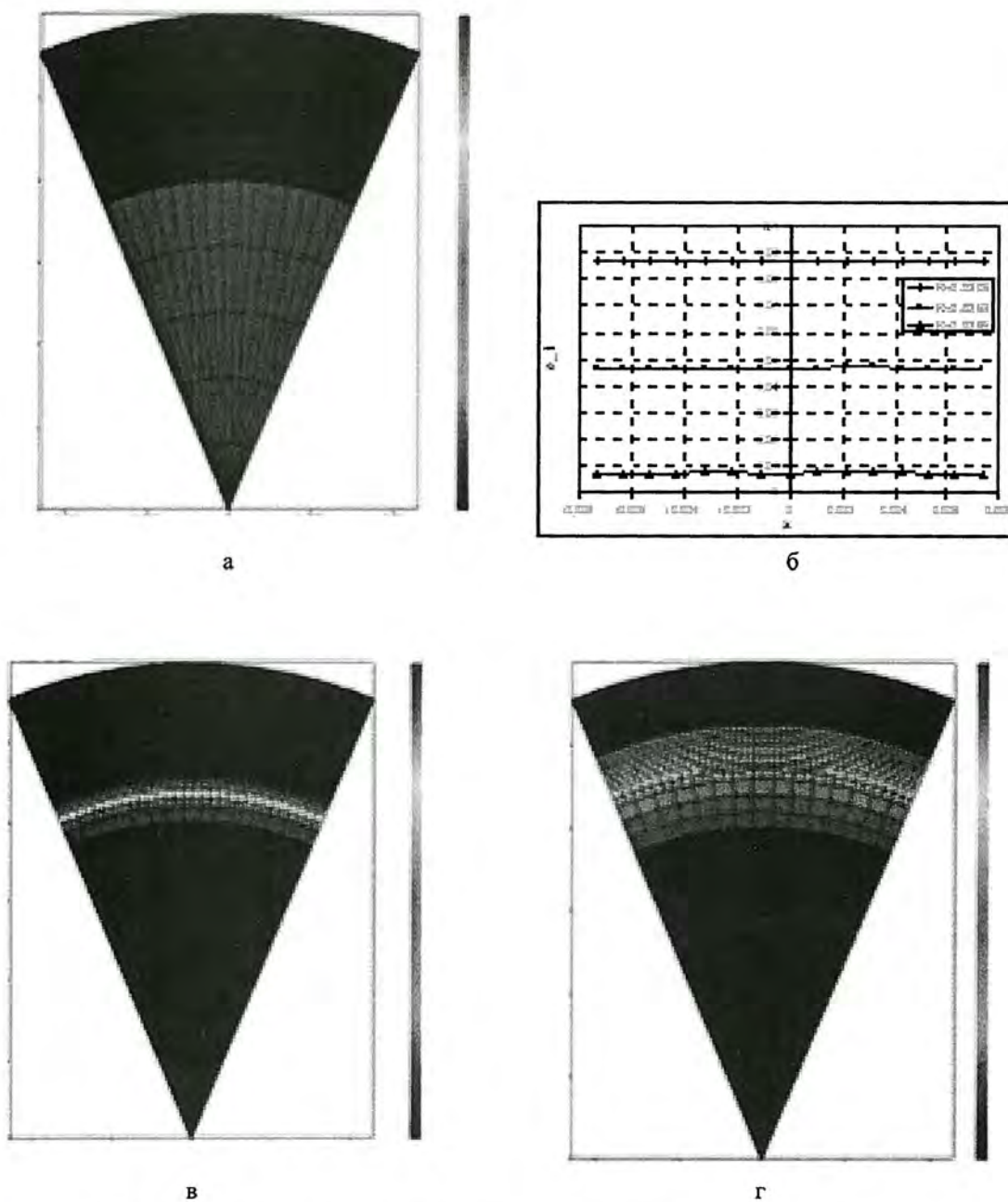


Рис. 7. Распространение сферически-симметричной тепловой волны

Особенности распараллеливания в методике ТРЭК

В используемом нами подходе к построению параллельной программы ключевой момент – это нерегулярное поточечное распараллеливание, в котором элементарной неделимой единицей работы являются вычисления величин, определенных в одной счетной точке. На одном процессоре производятся вычисления для совершенно произвольного множества точек.

Набор счетных точек и порядок вычислений определяются специальными управляющими списками. Счетная программа всегда организуется как цикл по управляющему списку точек. Реализация цикла предусматривает возможность прерывания вычислений для выполнения межпроцессорных передач, при этом с одного процессора на другой передается информация с одного слоя ячеек. Внутри цикла программируются вычисления для одной счетной точки с произвольным номером. Номер точки подается из управляющего списка номеров точек. Организация программы допускает динамическое изменение управляющих списков на каждом процессоре. Такой подход позволяет: произвольно менять распределение точек по процессорам; производить вычисления с точностью до счета одной точки и "вклеивать" обмены между счетом точек; разделить программирование счетного модуля на программу, управляющую порядком счета и обменов, и программу вычисления для одной счетной точки по заданному номеру.

Задача 6. Замеры эффективности распараллеливания газодинамики. Во всей расчетной области ($0 < X < 10,5$; $0 < Y < 10,5$; $0 < Z < 10,5$) содержится идеальный газ ($\rho_1 = 1$, $e_1 = 0$, $u_1 = 0$, $\gamma = 1,4$), в области ($0 < X < 1$; $0 < Y < 1$; $0 < Z < 1$) задается энергия $e_2 = 1$. Во всех расчетах количество ячеек на процессоре не менялось и составляло $105 \cdot 105 \cdot 105$ ячеек.

Таким образом, на задаче газовой динамики эффективность параллельных вычислений составляет порядка 0,8 в режиме умножения задачи.

Задача 7. Замеры эффективности распараллеливания теплопроводности. Рассматриваются линейная и нелинейные задачи о распространении пространственной тепловой волны. Во всех расчетах количество ячеек на процессор составляло $105 \cdot 105 \cdot 105$ ячеек.

На задаче теплопроводности эффективность параллельных вычислений составила не ниже 0,85 в режиме умножения нелинейной задачи и не ниже 0,8 – линейной задачи.

Более полные сведения о способах распараллеливания методики ТРЭК содержатся в [11].

Заключение

В работе представлены некоторые нововведения в методики ЭГАК и ТРЭК, направленные на повышение точности и эффективности расчетов. Приводятся результаты некоторых тестовых расчетов, дающих представление о возможностях указанных методик при моделировании течений многокомпонентных сред с большими деформациями.

Список литературы

1. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Шанин А. А. Метод расчета двумерных осесимметричных газодинамических течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых переменных // ДАН СССР. 1984. Т. 278, # 4. С. 829–833.

2. Жарова Г. В., Янилкин Ю. В. Комплекс программ ЭГАК. Алгоритм выравнивания давлений веществ в смешанных ячейках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 3. С. 77–82.
3. Бондаренко Ю. А., Янилкин Ю. В. Расчет термодинамических параметров смешанных ячеек в газовой динамике // Там же. 2000. Вып. 4. С. 12–25.
4. Гончаров Е. А., Янилкин Ю. В. Новый метод расчета термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 3. С. 16–30.
5. Бахрах С. М., Глаголева Ю. П., Самигулин М. С., Фролов В. Д., Яненко Н. Н., Янилкин Ю. В. Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций // ДАН СССР. 1981. Т. 257, № 3. С. 566–569.
6. Янилкин Ю. В. Численное моделирование двумерных течений многокомпонентной среды с учетом некоторых мелкомасштабных процессов // Физическая мезомеханика. 1999. Т. 2, № 5. С. 27–48.
7. Янилкин Ю. В., Колобянин В. Ю., Чистякова И. Н., Егужова М. Ю. Применение метода РРМ в расчетах по методикам ЭГАК и ТРЭК // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 4. С. 69–79.
8. Бондаренко Ю. А., Шагалиева А. Р., Янилкин Ю. В. Метод расчета теплопроводности с учетом теплообмена между веществами внутри смешанных ячеек // Там же. 2000. Вып. 4. С. 26–34.
9. Жуков В. Т. Разностные схемы локальных итераций для параболических уравнений. Препринт № 183. Москва: ИПМ АН СССР, 1986.
10. Локуциевский В. О., Локуциевский О. В. Применение чебышевских параметров для численного решения некоторых эволюционных задач. Препринт № 99. Москва: ИПМ АН СССР, 1984.
11. Беляев С. П. Метод мелкозернистого распараллеливания с динамической балансировкой на примере задачи газовой динамики и вычислительные эксперименты на параллельной системе // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 1. С. 45–49.

**Eulerian Numerical Techniques EGAK and TREK
for Simulation of Multidimensional Multimaterial Flows**

Yu. V. Yanilkin, S. P. Belyaev, Yu. A. Bondarenko, E. S. Gavrilova,
E. A. Goncharov, A. D. Gorbenko, A. V. Gorodnichev, E. V. Gubkov,
A. R. Guzhova, L. I. Degtyarenko, G. V. Zharova, V. Yu. Kolobyanin,
V. N. Sofronov, A. L. Stadnik, N. A. Khovrin, O. N. Chernysheva,
I. N. Chistyakova, V. N. Shemyakov

The paper presents overview of main algorithms underlying Lagrangian-Eulerian techniques EGAK and TREK for simulation of 2D and 3D multimaterial flows with large deformations, including the turbulent mixing phase. Some results of computations are presented that give an estimate of the technique accuracy and efficiency.