

УДК 519.6

Методика РАМЗЕС-КП для расчета пространственных движений многокомпонентных теплопроводных сред в эйлерово- лагранжевых координатах

Представлено описание методики РАМЗЕС-КП, предназначенной для расчета пространственных движений многокомпонентных теплопроводных сред в эйлерово-лагранжевых координатах на параллельных вычислительных системах с распределенной памятью.

**А. Н. Быков, В. А. Веселов,
Б. Л. Воронин, А. М. Ерофеев**

Введение

В основе методики РАМЗЕС-КП лежат следующие принципы:

- использование уравнений газовой динамики и уравнения теплопроводности, записанных как в декартовой, так и в криволинейной системах координат, в эйлерово-лагранжевых переменных;
- использование неявной конечно-разностной аппроксимации по времени как уравнения теплопроводности, так и уравнений газовой динамики;
- расщепление по физическим процессам;
- разбиение геометрии задачи на фрагменты, в каждом из которых строится своя, наиболее подходящая сетка;
- для решения полученной системы многомерных конечно-разностных уравнений используется расщепление по направлениям и разработанный авторами прямой метод решения подсистем конечно-разностных уравнений на сетках блочно-матричного типа – метод сквозных прогонок;
- использование метода концентраций и метода Янгса для восстановления контактных границ при расчетах потоков веществ из смешанных ячеек.

Характерной чертой методики также является использование параллельных вычислений на всех этапах (подготовка, счет и анализ результатов) прохождения задачи на многопроцессорной ЭВМ с распределенной памятью.

Основные уравнения и метод их решения

В методике РАМЗЕС-КП решается следующая система уравнений газовой динамики для многокомпонентной среды :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_i}{dt} &= -\rho_i \operatorname{div} \bar{U}, \quad i = 1, \dots, N; \\ \frac{d\bar{U}}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \operatorname{grad} P; \\ \frac{d\varepsilon_i}{dt} &= -\frac{P_i}{\rho_i} \operatorname{div} \bar{U}, \quad i = 1, \dots, N; \\ P_i &= P_i(\rho_i, \varepsilon_i), \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь N – количество веществ в смеси. Для замыкания системы уравнений необходимо привлечь дополнительные предположения о веществах в смеси:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{i=1}^N \rho_i \xi_i; \\ \frac{d\xi_i}{dt} &= 0, \quad i = 1, \dots, N; \\ P &= \sum_{i=1}^N P_i(\rho_i, \varepsilon_i) \xi_i. \end{aligned} \quad (2)$$

Если предполагать равенство давлений компонентов, то необходимо изменить объемные концентрации и давления в соответствии с условием равенства давлений компонентов:

$$P = P_i(\rho_i(\xi_i), \varepsilon_i(\xi_i)). \quad (3)$$

Для многокомпонентной среды система уравнений теплопроводности решается в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon}{dt} &= \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\chi \operatorname{grad} T); \\ \varepsilon_i &= \varepsilon_i(\rho_i, T), \quad i = 1, \dots, N; \\ \chi_i &= \chi_i(\rho_i, T), \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (4)$$

Для замыкания системы необходимо привлечь дополнительные предположения о веществах в смеси:

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \eta_i; \quad (5)$$

$$\chi = \frac{\prod_{i=1}^N \Lambda_i}{\sum_{i=1}^N \left(\xi_i \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \Lambda_j \right)} \sum_{i=1}^N \Phi_i \xi_i. \quad (6)$$

Здесь $\frac{d}{dt}$ – полная производная по времени; ρ – плотность ячейки; ρ_i – плотность компонентов в

смешанной ячейке; P – давление ячейки; $\vec{U} = \vec{U}(u, v, w)$ – вектор массовой скорости; ε – удельная внутренняя энергия; ε_i – удельная внутренняя энергия компонентов в смешанной ячейке; T – температура ячейки; χ – коэффициент теплопроводности ячейки; $\chi_i = \Lambda_i \cdot \text{Ш}_i$ – коэффициент теплопроводности компонентов в смешанной ячейке; ξ_i – объемная концентрация компонентов в смешанной ячейке; η_i – массовая концентрация компонентов в смешанной ячейке; $\Phi_i = \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial T}$.

Конкретный вид дифференциальных операторов div и grad зависит от системы координат, в которой осуществляется разложение вектора массовой скорости.

В методике РАЗЕС-КП используется криволинейная система координат (r, S, φ) , включающая как частный случай сферическую, цилиндрическую и тороидальную системы координат.

Связь между декартовыми координатами и криволинейными координатами задается соотношениями

$$\begin{aligned} X &= (r \sin \theta(S) + R_0(S)) \cos \varphi; \\ Y &= (r \sin \theta(S) + R_0(S)) \sin \varphi; \\ Z &= r \cos \theta(S) + Z_0(S). \end{aligned} \quad (7)$$

Координаты S и φ – эйлеровы, а координата r – исходно лагранжева, но автоматически, по некоторым критериям, может происходить локальный отказ от лагранжевости независимо от исполнителя расчета, т. е. радиальная координата r – подвижная, причем закон ее движения может варьироваться в широких пределах от лагранжева до эйлерова.

Дискретизация задачи имеет двухуровневый характер: в зависимости от сложности задачи вся геометрия может быть разбита на фрагменты, каждый из которых описывается в своей наиболее подходящей системе координат (r, S, φ) , которая задается с помощью опорной линии.

Расчетная криволинейная сетка образована пересечением поверхностей $S = \text{const}$, $\varphi = \text{const}$ и $r = \text{const}$, где семейство $r = \text{const}$ обычно включает границы раздела физических областей. Причем семейство $\varphi = \text{const}$ едино для всех фрагментов задачи, а $S = \text{const}$ свое в каждом фрагменте. Таким образом, расчетная сетка состоит из криволинейных ячеек с гранями $S = \text{const}$, $\varphi = \text{const}$ и $r = \text{const}$, а структурно сетка имеет блочно-матричный вид, каждый блок этой матрицы соответствует одному из фрагментов задачи. Пространственная конечно-разностная аппроксимация дифференциальных операторов осуществляется на таких сетках блочно-матричного типа с учетом центрирования термодинамических $(\rho, T, \varepsilon, P)$ величин в центре ячейки и кинематических (\vec{r}, \vec{U}) величин на гранях ячейки.

По времени используется неявная конечно-разностная аппроксимация как уравнения теплопроводности, так и уравнений газовой динамики.

Для решения получающейся системы многомерных конечно-разностных уравнений применяется метод расщепления по направлениям, который сводит решение общей системы линейных алгебраических уравнений к последовательному решению подсистем таких уравнений вдоль каждого пространственного направления. Так как расчетные сетки вдоль каждого направления не являются чисто лагранжевыми (вдоль направлений S и φ они эйлеровы, а вдоль направления r – подвижные), то решение сводится к двум этапам – лагранжеву и эйлерову.

Для лагранжева этапа структура матрицы этих подсистем уравнений либо трехдиагональная, либо близка к трехдиагональной. Решение этих подсистем уравнений находится методом прогонки.

Эйлеров этап реализован в программах интерполяции сетки по радиусу путем наложения сеток (до и после интерполяции), а при расчете нелагранжева движения сетки вдоль радиального направления и эйлеровых направлений S и φ используется донорная схема аппроксимации потоков первого порядка. Для подсчета потоков компонентов смеси из смешанных ячеек используется метод Янгса [2].

Параллельные вычисления

Характерной чертой методики является использование параллельных вычислений на всех этапах (подготовка, счет и анализ результатов) прохождения задачи на многопроцессорной ЭВМ с распределенной памятью.

Для задач газовой динамики и теплопроводности представляется наиболее естественным использовать принцип геометрического параллелизма при декомпозиции области решения задачи по процессорам. В методике реализована возможность разбиения задачи на счетные области с последующей декомпозицией каждой счетной области на параллелепипеды в индексном пространстве. Таким образом, обмен информацией между процессорами происходит как между областями, так и внутри областей. Были разработаны три основных типа передачи сообщений между процессорами, используемые как в газодинамике, так и в теплопроводности – параллельно-конвейерный метод, обмен гранями, обмен между областями.

При разработке методов распараллеливания использовалась неперестраиваемая в пределах временного шага декомпозиция матрицы данных на подматрицы. Наряду с достоинствами, например локальностью большинства обменов, этот метод имеет и трудности, связанные с организацией параллельного выполнения большого количества рекуррентных формул прогонки на линейке процессоров. Для преодоления этой проблемы была разработана своя версия параллельно-конвейерного метода. Основная идея алгоритма состоит в том, что каждый процессор, рассчитав прогоночные коэффициенты для i -го канала и передав их следующему в линейке процессору, переходит к обработке других каналов. По мере прихода обратной прогонки процессор прерывает работу по расчету прямой прогонки и вычисляет решение для i -го канала. Для оптимизации коммуникационной работы передача прогоночных коэффициентов между процессорами происходит после обработки порции каналов. Число каналов в одной порции переменное (от 1 до общего числа каналов) и автоматически меняется от шага к шагу по критерию минимизации времени счета шага. Если арифметическую и коммуникационную работы выполняют различные устройства, то возможно совмещение арифметической и коммуникационной работ во времени. Разработанные методы распараллеливания позволили использовать современные многопроцессорные ЭВМ с приемлемой эффективностью (50–60 % при времени выполнения шага порядка нескольких секунд, при более длительном времени шага эффективность повышается до 60–80 %).

Современные направления развития методики

При проведении счета задач в параллельном режиме ярко проявилась проблема авостности методики. Если в однопроцессорном режиме мы получали авост один раз в сутки, то в параллельном режиме при счете на нескольких десятках процессорах это время превращается в минуты. Были проанализированы причины авостности и выбраны два основных направления развития методики для повышения ее безавостности – комбинированные сетки и локальный отказ от лагран-

жесткости при счете на эйлерово-лагранжевых сетках. Опишем кратко работы по каждому из этих направлений.

Для решения задач газовой динамики могут использоваться подвижные (лагранжевы) или неподвижные (эйлеровы) регулярные расчетные сетки.

Использование лагранжевой аппроксимации, даже в расчетах одного направления двумерной разностной сетки, делает расчеты экономичными по числу необходимых узлов сетки и объему вычислений, результаты расчетов обладают высокой точностью, контактные границы раздела веществ отслеживаются автоматически. Но при использовании подвижных сеток возможны переклесты ячеек, приводящие к аварийным остановам, а при расчетах сильных вихревых течений может нарушаться требование односвязности области, рассчитываемой на регулярной сетке.

Эйлеровы расчетные сетки свободны от недостатков, связанных с подвижностью сеток, но имеют ряд особенностей. Главная особенность – необходимость отслеживания контактных границ веществ, не связанных с сеткой. Кроме того, при использовании лагранжевой сетки рассматриваемая область всегда аппроксимируется тем же самым количеством узлов сетки и, таким образом, начальная точность аппроксимации является таковой и в полном расчете. В случае эйлеровых сеток точность аппроксимации зависит от шага сетки по пространству, для получения результатов с хорошей точностью число ячеек должно быть достаточно большим (в разы превышать число ячеек лагранжевой сетки).

Ясно, что для многих задач не подходят идеально ни чисто лагранжев, ни чисто эйлеров метод расчета, а наилучшим способом расчета может оказаться некоторая комбинация аппроксимаций в переменных Эйлера и Лагранжа.

Опыт показывает, что в большинстве задач область счета можно разделить на подобласти, так чтобы для больших интервалов времени каждая подобласть наилучшим образом аппроксимировалась подвижной или неподвижной сеткой. Идея использовать сочетание аппроксимаций в переменных Эйлера и Лагранжа была предложена В. Ф. Нохом в 1964 г. [3]. Мы используем ортогональные прямоугольные эйлеровы сетки и подвижные регулярные эйлерово-лагранжевы сетки. Счет с применением таких сеток мы называем счетом на комбинированных сетках. Неподвижные ортогональные цилиндрические сетки используются в тех частях задачи, где в силу геометрии и (или) нерегулярного характера газодинамических течений сложно построить и поддерживать в процессе численного решения задачи регулярную подвижную расчетную сетку, либо в тех частях задачи, где подвижные сетки имеют особенность, например, центр.

Алгоритмы счета на комбинированных сетках рассмотрим на примере задачи о сильном взрыве [4]. В начальный момент времени в области радиусом 1 задана плотность 100, удельная внутренняя энергия 1000, вне сферы радиуса 1 плотность равна 1, удельная внутренняя энергия 0,001. Уравнение состояния в каждой области – идеальный газ. Под действием градиента давления в среде формируется расходящаяся ударная волна. Внутреннюю область будем аппроксимировать подвижной лагранжевой сферической сеткой, внешнюю область – неподвижной цилиндрической эйлеровой сеткой (рис. 1).

При старте задачи для каждой ячейки эйлеровой сетки пересчетом находится объем лагранжева вещества (вещества с лагранжевой сетки). Ячейки эйлеровой сетки распределяются по группам (см. рис. 2 и цветную вкладку):

1. Счетная ячейка (светло-голубой цвет). Полностью заполнена эйлеровым веществом.
2. Приграничная счетная ячейка (синий цвет). Также полностью заполнена эйлеровым веществом, является соседней с граничной ячейкой.
3. Граничная ячейка (коричневый цвет). Смешанная ячейка, содержащая два вещества, или полностью заполненная эйлеровым веществом, граничащая с чистой ячейкой, заполненной лагранжевым веществом.

4. Приграничная несчетная ячейка (красный цвет). Полностью заполнена лагранжевым веществом, является соседней с граничной ячейкой.

5. Несчетная ячейка (зеленый цвет). Полностью заполнена лагранжевым веществом, в расчетах не участвует.

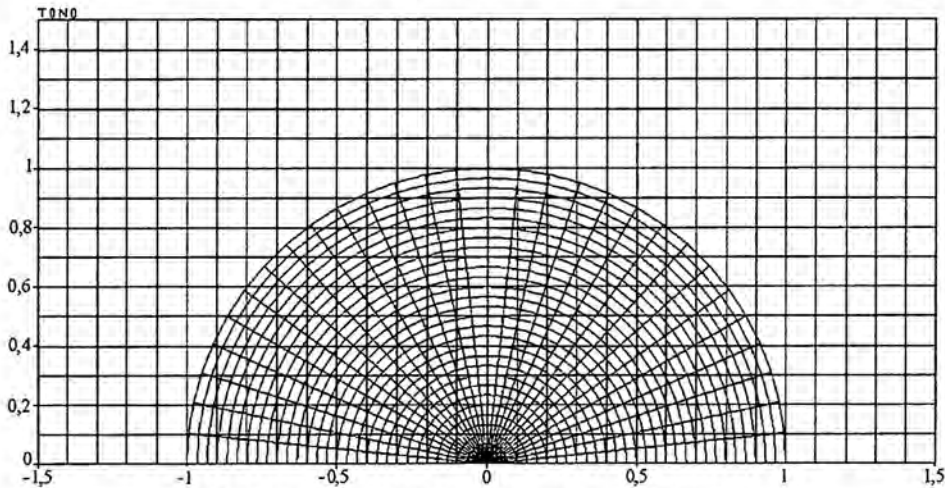


Рис. 1. Расчетная сетка на начальный момент времени

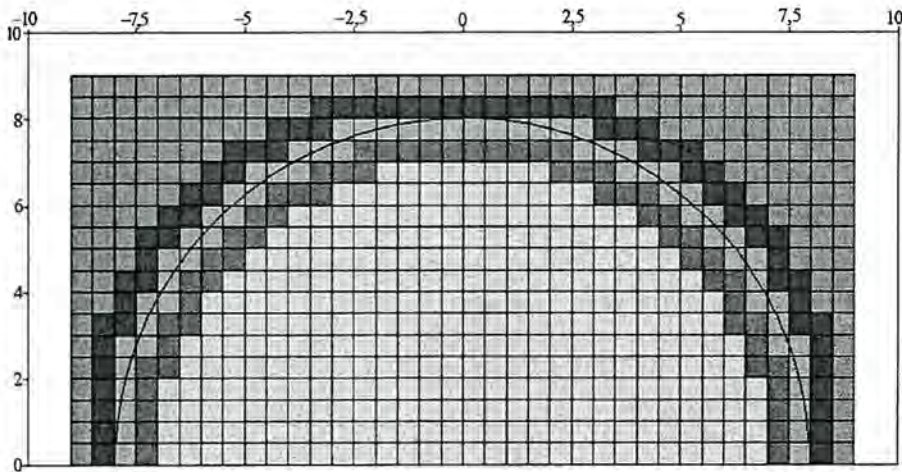


Рис. 2. Распределение ячеек эйлеровой сетки по группам

Таким образом, подвижная граница на эйлеровом фрагменте описывается непрерывным слоем граничных ячеек (возможно касание через угол ячеек), окруженным слоями приграничных счетных и несчетных ячеек (здесь касания возможны только через грани ячеек).

Это распределение рассчитывается один раз при старте пересчетом по всем ячейкам эйлеровой сетки. В процессе счета пересчеты проводятся только по граничным и приграничным ячейкам, ячейки могут переходить из одного типа в другой, при этом дополнительно происходит поддержание слоистой структуры слоев (непрерывный слой граничных ячеек окружен слоями счетных и несчетных ячеек).

Было разработано два варианта алгоритмов взаимодействия фрагментов.

В первом варианте передача давлений и скоростей из лагранжева фрагмента на эйлеров фрагмент осуществляется наложением сеток с помощью пересчета растровым методом, причем проецируемая на эйлеров фрагмент подвижная граница лагранжева фрагмента является контактной границей раздела веществ. Перетекание веществ через эту границу невозможно. Пересчет осуществляется для граничных и приграничных ячеек эйлерова фрагмента. При расчетах объема лагранжева вещества в ячейке эйлеровой сетки пересчитываются также и все другие необходимые компоненты: плотность, энергия, температура, давление и две составляющие импульса. По пересчитанным компонентам импульса лагранжева вещества проводится коррекция составляющих скоростей на эйлеровой сетке. Это делается в начале каждого временного шага. После этого проводится расчет процесса газодинамики стандартной программой.

В первом варианте на границу лагранжева фрагмента навязывается давление из эйлерова фрагмента. Делается это следующим образом. Лагранжева граница представлена в виде ломаной линии, на каждый отрезок этой линии необходимо навязать давление. Ищутся пересечения отрезков ломаной со всеми граничными ячейками эйлеровой сетки. Вклад ячейки определяется длиной отрезка пересечения, и далее искомое давление находится усреднением. Например, для отрезка AB на рис. 3 $P = \frac{P_1AC + P_2CD + P_3DE + P_4EB}{AB}$. В качестве давлений ячейки берется материальное давление эйлеровой компоненты.

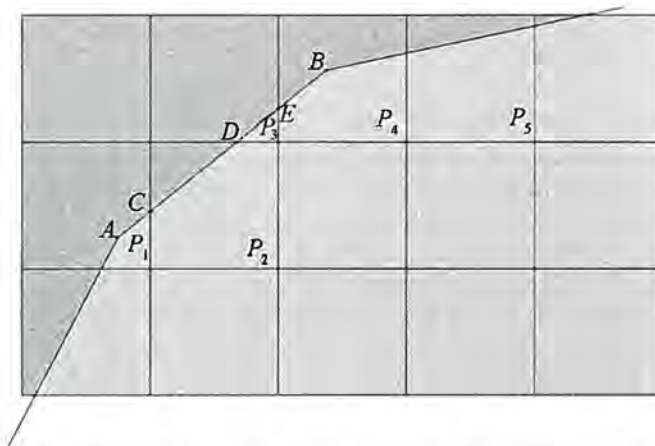


Рис. 3. Нахождение давлений, навязываемых на лагранжев фрагмент

Во втором варианте была предложена модифицированная схема передачи граничных условий, когда в лагранжевом фрагменте присутствует слой фиктивных ячеек, сеточные величины в которых рассчитываются пересчетом с эйлеровой сетки. Был предложен и опробован следующий алгоритм:

- в эйлерово-лагранжевом фрагменте добавляется фиктивная область, перекрывающая счетные ячейки эйлеровой сетки;
- на границу этой фиктивной области навязывается скорость, получаемая интерполяцией по ячейкам эйлерова фрагмента;
- схема передачи давлений и скоростей на эйлеров фрагмент остается без изменений.

В настоящее время проводится работа над дальнейшим совершенствованием алгоритмов взаимодействия подвижных и неподвижных фрагментов комбинированных сеток.

Другим перспективным направлением работ по повышению безаварийности методики является автоматический локальный отказ от лагранжевости при счете на эйлерово-лагранжевых сет-

ках. Исходно в методике РАМЗЕС-КП радиальное направление являлось чисто лагранжевым, что приводило к сильным искажениям расчетной сетки в задачах с большими деформациями границ раздела физических областей. Поэтому для улучшения безавстности методики были разработаны и программно реализованы алгоритмы локального отказа от лагранжевости радиального семейства расчетной сетки. Использование этих алгоритмов позволяет поддерживать сетку задачи в приемлемом для счета состоянии с помощью соблюдения критериев качества сетки. Кроме этого, если авостная ситуация все же возникает, происходит повторный пересчет временного шага с уменьшением его величины.

Использование этих алгоритмов значительно повысило безавстность программы (в некоторых случаях до проведения расчета за один заход), не ухудшив при этом точности. Такая безавстная технология сделала реальным проведение двумерных расчетов некоторых задач на сходимость.

Заключение

Представлено описание методики РАМЗЕС-КП для расчета движений многокомпонентных теплопроводных сред в эйлерово-лагранжевых координатах на параллельных вычислительных системах с распределенной памятью. Также представлены современные направления развития данной методики.

Список литературы

1. Софронов И. Д., Воронин Б. Л., Быков А. Н. и др. Методика и комплексы программ РАМЗЕС, РАМЗЕС-КП // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 4.
2. Воронин Б. Л., Быков А. Н., Веселов Р. А. Реализация метода Янгса отслеживания контактных границ в трехмерном случае на ортогональных сетках // Там же. Вып. 3.
3. Нох В. Ф. СЭЛ – совместный эйлерово-лагранжев метод для расчета нестационарных двумерных задач. Academic Press, New York and London, 1964.
4. Седов Л. И. Механика сплошной среды. М.: Наука, 1973. Т. I, II.

RAMZES-CP Technique for Solving of Spatial Multicomponent Heat Conduction Flows in Eulerian-Lagrangian Coordinates

A. N. Bykov, V. A. Veselov, B. L. Voronin, A. M. Erofeev

The paper discusses technique RAMZES-KP designed for computing spatial multi-component heat-conducting flows in Eulerian-Lagrangian coordinates on parallel distributed-memory computer systems.