Моделирование Контактных Поверхностей в Комплексе Max-3 с Использованием Смешанных Ячеек и Маркеров

Н.Н. Анучина,* В.И. Волков,* В.А. Гордейчук,* Н.С. Еськов,* О.М. Козырев*

* Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский НИИ технической физики им. акад. Е.И. Забабахина, Снежинск, Росиия
e-mail: v.a.gordeychuk@vniitf.ru, o.m.kozyrev@vniitf.ru

В работе дано краткое описание реализованного в комплексе MAX-3 (Anuchina и др., 2004, Volkov и др., 2000) метода представления контактной границы с помощью нерегулярной треугольной сетки маркеров.

Приводятся постановка и результаты сравнительных тестовых 2D и 3D расчетов для двух способов описания границ раздела веществ: концентрациями и маркерами.

Алгоритмы метода маркеров определяют положение контактных поверхностей на эйлеровой сетке и влияют на расчет конвективных потоков.

Результаты расчетов показали, что предлагаемый метод представления контактной границы маркерами позволяет более точно передавать положение контактной границы и дает меньшую погрешность по сравнению с методом концентраций.

Численный Метод

Комплекс программ MAX-3 предназначен для расчета нестационарных пространственно трехмерных задач газовой динамики с большими деформациями контактных границ.

Расчетная область задачи представляется набором счетных областей (ярусов). Каждая счетная область является топологическим параллелепипедом, грани которого могут быть контактными границами или внешними границами задачи. В каждом ярусе используется своя произвольная регулярная разностная сетка (рис.1.a), состоящая из выпуклых шестигранников (рис.1.b). Координаты и скорости отнесены к узлам, термодинамические величины к ячейкам разностной сетки. Разностная схема метода основана на расщеплении вычислительного алгоритма на лагранжев и эйлеров этапы.

В численном методе, реализованном в комплексе программ MAX-3, контактные границы могут описываться координатными поверхностями сетки области численного интегрирования или с помощью треугольной сетки маркеров и смешанных ячеек либо только смешанными ячейками.

Для детального изучения эволюции границы раздела используется следующая технология проведения расчета:

- при небольших искажениях контактной границы она описывается как лагранжевая координатная поверхность сетки;
- при значительных деформациях границы осуществляется переход на описание контактной поверхности с помощью смешанных ячеек и лагранжевой треугольной сетки маркеров, не связанной с подвижной эйлеровой сеткой области численного интегрирования;
- для описания турбулизованных течений, когда контактные границы разрушаются, и образуется зона смеси веществ, происходит переход на метод концентраций.

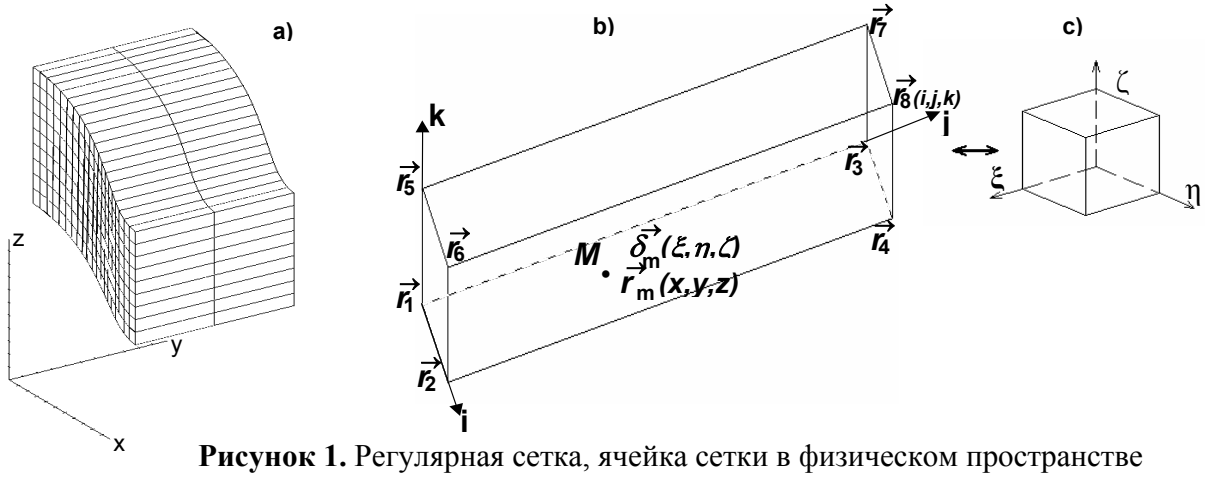


Рисунок 1. Регулярная сетка, ячейка сетки в физическом пространстве (x,y,z), единичный куб в параметрическом пространстве (ξ,η,ζ).

Алгоритмы представления поверхности раздела лагранжевой треугольной сеткой маркеров

Для расчета сильных деформаций границ раздела веществ в методе MAX-3 используется треугольная сетка маркеров. Маркеры определяют положение контактной границы в любой момент времени. Границы раздела веществ могут произвольным образом пересекать эйлерову сетку. При этом образуются смешанные ячейки, содержащие несколько различных веществ. Для расчета смеси используются условия гидродинамического равновесия компонент и непрерывность вектора скорости на контактной границе. Конвективные потоки в окрестности смешанных ячеек рассчитываются с учетом направления течения среды и состава веществ в ячейках. Для определения состава веществ в ячейках используется маркеры. Алгоритмы расчета сильно деформированных контактных поверхностей с помощью треугольной сетки маркеров можно разделить на две группы:

- геометрические алгоритмы, обеспечивающие построение начальной треугольной сетки маркеров и поддерживающие ее оптимальность в процессе эволюции контактной поверхности;
- алгоритмы обработки смешанных ячеек:
  - на лагранжевом этапе расчет давления в смешанных ячейках,
  - на эйлеровом этапе расчет конвективных потоков на гранях смешанных ячеек с учетом перемещения маркеров.

Геометрические алгоритмы представления поверхности раздела как лагранжевой треугольной сетки

Контактная граница представляет собой двумерную поверхность в трехмерном пространстве. Для описания поверхности используется треугольная сетка. Каждый узел этой сетки – маркер, движение которого определяется полем скорости среды.

Маркер характеризуется порядковым номером m, индексами ячейки (k_m, j_m, i_m), в которой он находится, своими декартовыми координатами $\vec{r}_m(x,y,z)$ и вектором $\vec{\delta}_m(\xi,\eta,\zeta)$, где (ξ,η,ζ) - локальные лагранжевы координаты маркера относительно ячейки, которой он принадлежит.

Связь между $\vec{r}_m(x,y,z)$ и $\vec{\delta}_m(\xi,\eta,\zeta)$ задается трилинейным отображением единичного куба (рис.1.c) в трехмерное физическое пространство, образом которого является ячейка (рис.1.b), содержащая рассматриваемый маркер:

$$\vec{r}_m(x,y,z) = (1-\xi)(1-\eta)(1-\zeta)\bullet\vec{r}_1 + \xi(1-\eta)(1-\zeta)\bullet\vec{r}_2 + (1-\xi)\eta(1-\zeta)\bullet\vec{r}_3 + \xi\eta(1-\zeta)\bullet\vec{r}_4 +$$

$$(1-\xi)(1-\eta)\zeta\bullet\vec{r}_5 + \xi(1-\eta)\zeta\bullet\vec{r}_6 + (1-\xi)\eta\zeta\bullet\vec{r}_7 + \xi\eta\zeta\bullet\vec{r}_8 \;\Rightarrow\; \vec{\delta}_{\mathbf{m}}(\xi,\eta,\zeta); \qquad [1]$$

$$\text{где}: \quad 0 \le \xi \le 1, \quad 0 \le \eta \le 1, \quad 0 \le \zeta \le 1$$

На лагранжевом этапе локальные лагранжевы координаты маркера не меняются. После лагранжева этапа координаты $\vec{\delta}_m(\xi,\eta,\zeta)$ преобразуются в эйлеровы координаты $\vec{r}_m(x,y,z)$. На эйлеровом этапе после построения новой сетки определяется положение маркеров относительно ячеек новой сетки, и находятся новые значения локальных лагранжевых координат, которые в общем случае не совпадают со старыми.

Ребра треугольников определяют связи между маркерами на контактной поверхности, что задает топологию сетки.

Требования к треугольной сетке маркеров:

- два соседних маркера должны быть либо в одной ячейке сетки области численного интегрирования, либо в соседних;
- сетка должна покрывать всю контактную поверхность непересекающимися треугольниками;
- сетка должна быть симметрична при соответствующей симметрии задачи (плоской, цилиндрической и сферической);
- сетка должна быть близка к равномерной.

Требуемое качество сетки поддерживается за счет:

- добавления новых маркеров;
- применения алгоритма корректировки сетки маркеров.

Построение начальной треугольной сетки маркеров

Предполагается, что изначально контактная граница совпадает с координатной поверхностью сетки и представлена регулярной сеткой, составленной из пространственных

четырехугольников. При замене описания контактной границы с помощью координатной поверхности на треугольную сетку маркеров маркеры ставятся в узлы регулярной четырехугольной сетки и геометрические центры пространственных четырехугольников. Рис.2 демонстрирует принцип построения начальной треугольной сетки маркеров с использованием уже имеющегося регулярного представления контактной границы.

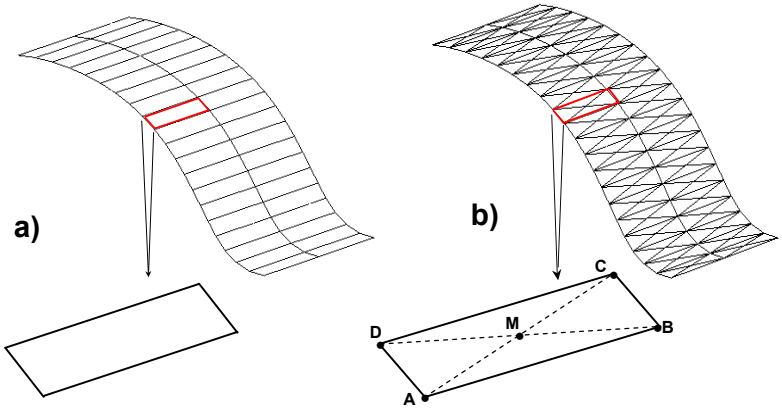


Рисунок 2. Координатная поверхность регулярной сетки:
a. до инициализации сеткой маркеров;
b. после инициализации сеткой маркеров.

Добавление маркеров

Механизм добавления одного маркера показан на рис.3. Ребро AB разбивается на два отрезка одинаковой длины (AM, MB) и из полученной таким образом дополнительной точки M строятся новые ребра к противоположным вершинам всех примыкающих треугольников. В общем случае таких треугольника два: ABC и ABD.

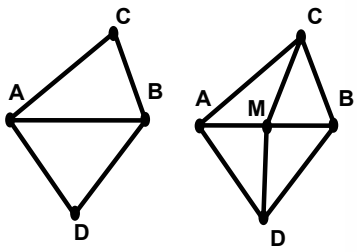


Рисунок 3. Добавление одного маркера M.

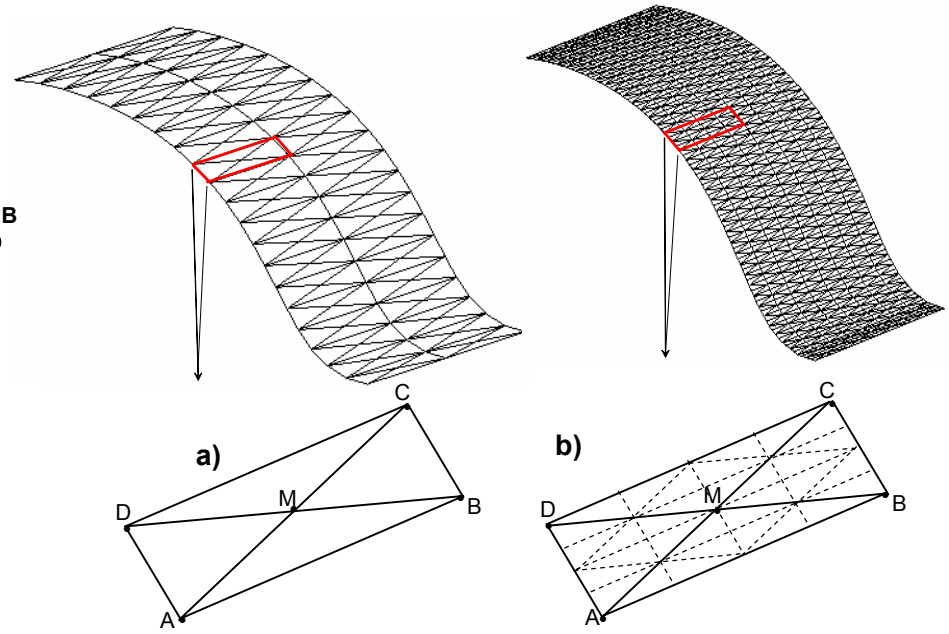


Рисунок 4. Добавление маркеров:
a. фрагмент до добавления; b. фрагмент после добавления.

Пример добавления маркеров приведен на рис.4. Добавление произведено по критерию: расстояние между двумя точками в лагранжевых переменных должно быть меньше 0.5.

Такая простая формулировка алгоритма добавления маркеров не обеспечивает сохранение симметрии численного решения при моделировании соответствующего симметричного течения. Поэтому исходный алгоритм был дополнен специальными процедурами сортировки ребер сетки, что позволило выполнить требования сохранения симметрии численного решения.

На рис.5 представлена проекция контактной поверхности на плоскость XZ с полем плотности и треугольной сеткой маркеров для плоской двумерной задачи, в которой решение не зависит от Z. Линия AB разделяет два слоя ячеек по направлению Z. Так как задача двумерна, то относительно линии AB расположение маркеров должно быть симметрично. На рис.5.a, 5.b демонстрируются результаты расчета с применением алгоритма добавления маркеров, сохраняющего симметрию численного решения, на рис.5.c, 5.d – с применением алгоритма в исходной формулировке.

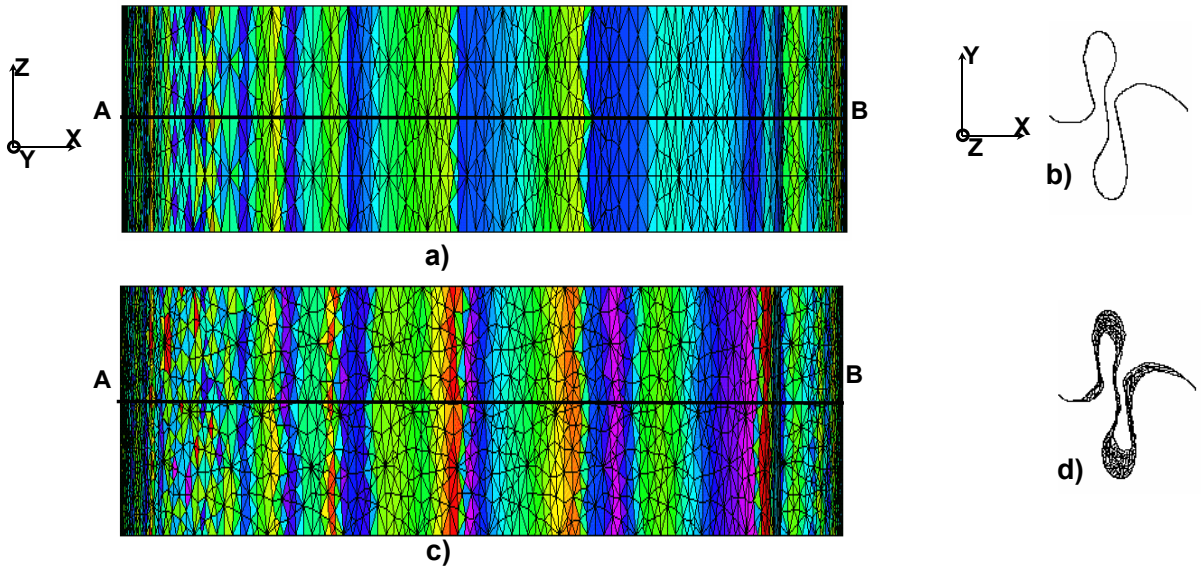


Рисунок 5. Сохранение симметрии в двумерном расчете Вид контактной границы в 2D расчете сверху (a, c - Y=const) и сбоку (b, d - Z=const):
a), b) - требование симметрии выполнено; c), d) - требование симметрии не выполнено

Алгоритм корректировки сетки маркеров

В процессе вычислений треугольная сетка может стать неравномерной. В этом случае проводится перестройка сетки маркеров. Алгоритм перестройки является локальным и

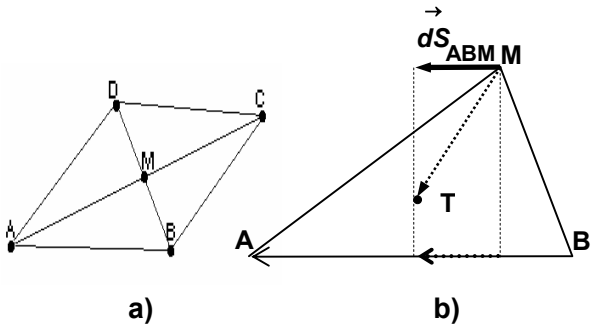


Рисунок 6. Изменение положения маркера M:
a. некоторый фрагмент сетки маркеров;
b. вектор перемещения $d\vec{S}_{ABM}$ маркера M для треугольника ABM.

реализует смещение маркеров в касательной плоскости к поверхности раздела с целью выравнивания расстояний между соседними маркерами.

На рис.6 показано, как находится вектор перемещения для маркера M. На рис.7 изображена контактная поверхность, моделируемая треугольной сеткой маркеров, полученная в результате расчета без использования перестройки сетки, и с применением перестройки. Во втором случае маркеров примерно в 2.5 раза меньше, чем во втором.

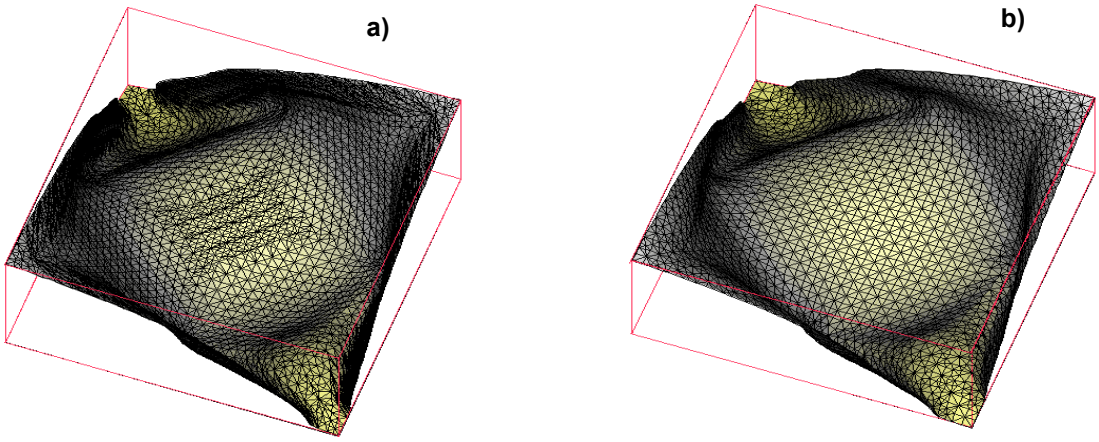


Рисунок 7. 3D-вид контактной поверхности, представленной нерегулярной треугольной сеткой маркеров, которая получена: a) без алгоритма корректировки (маркеров около 6500); b) с алгоритмом корректировки (маркеров около 2500).

Алгоритмы обработки смешанных ячеек

Топология треугольной сетки маркеров, заданной на контактной поверхности, определяет на ней направление нормали, которое делает поверхность ориентированной и выделяет по отношению к нормали левую и правую части пространства. Каждая поверхность является границей раздела конкретного набора веществ. Направление нормали позволяет определить, с какой стороны от поверхности находится то или иное вещество.

Для каждой смешанной ячейки определен состав веществ. Каждое вещество i в смешанной ячейке характеризуется объемной концентрацией σ_i, массой M_i, удельной внутренней энергией e_i.

Расчет давления в смешанных ячейках на лагранжевом этапе

Для смешанной ячейки определение общего давления и внутренних энергий веществ смеси проводится с использованием односкоростной модели многокомпонентной среды и условий совместного деформирования компонент.

Пусть в ячейке находится N веществ. Для каждого вещества i известны масса M_i, удельная внутренняя энергия e_i, доля объема σ_i, занимаемая веществом в объеме ячейки V, и задано уравнение состояния вещества $p_i = f_i(\rho_i, e_i)$, где $\rho_i = M_i/(\sigma_i \cdot V)$ - плотность вещества i в ячейке.

Чтобы провести расчет всех величин для смешанной ячейки на лагранжевом этапе, нужно определить давление. При расчете давления используется одно из следующих предположений:

- все компоненты смеси сжимаются одинаково;
- все вещества имеют одинаковое давление.

В расчетах по явной разностной схеме при использовании первого предположения и из условия аддитивности для полных внутренних энергий компонент следует, что:

$$p = \sum_i \sigma_i \cdot p_i . \qquad [2]$$

При применении второго предположения давление p и σ_i определяются из следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} & p_1 = p_2 = \ldots p_N , \\ & \sum_i \sigma_i = 1, \\ & p_i = f_i(M_i / (\sigma_i \cdot V), e_i), \end{aligned} \qquad [3]$$

решение которой находится итерационным методом.

При расчете лагранжева этапа по неявной разностной схеме рассмотренные выше соотношения для определения давления в смешанных ячейках включены в итерационный процесс, реализующий неявную схему.

Расчет конвективных потоков на гранях смешанных ячеек с учетом перемещения маркеров

Состав веществ в ячейках на очередной момент времени определяется на основе анализа положения маркеров относительно новой эйлеровой сетки.

Каждый маркер, попавший в ячейку новой сетки, дополняет ее состав веществами, которые разделяет маркерная поверхность. Если все маркеры вышли из ячейки, то в ней, возможно, останется только одно вещество. В случае, когда среди ее соседей есть ячейки, содержащие одно вещество, то в ячейке останется то вещество, которое содержится в соседней с ней ячейке из ближайшего окружения. Для анализа привлекаются только те ячейки, которые имеют общую грань с рассматриваемой ячейкой. Если ячейка не содержала

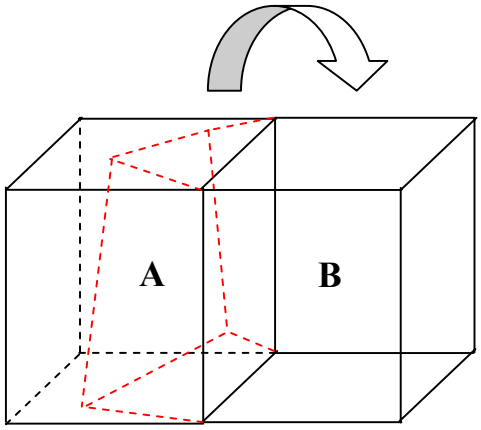


Рисунок 8. Calculation of flows between the cells A and B.

маркеров, и в нее не вошли маркеры, то состав веществ не меняется.

Конвективные потоки рассчитываются только между ячейками, имеющими общую грань. Таким образом, для ячейки необходимо определить потоки через шесть граней

Для каждой ячейки A определяется изменение δV_α (рис.8) ее объема, вызванное перемещением грани α, в результате перестройки сетки. В случае, приведенном на рис.9, поток направлен из ячейки A в ячейку B. Наиболее удобным для реализации является следующий порядок расчета потоков: для каждой ячейки A определяются только потоки, выходящие из нее.

Сначала определяются вещества, участвующие в потоках, и изменения их объемов. Для ячеек A и B известны новые и старые составы веществ. Рассчитываются потоки только тех веществ из ячейки A в ячейку B, которые содержались в ячейке A, и будут содержаться в ячейке B.

Для каждого вещества i, вытекающего из ячейки A через грань α, нужно определить изменение объема $\delta V_{i\alpha}$, так чтобы $\sum_i \delta V_{i\alpha} = \delta V_\alpha$. Для вещества i сначала определяются предварительные значения $\delta \tilde{V}_{i\alpha}$ его объема:

$$\delta \tilde{V}_{i\alpha} = 0.5\left(\frac{\sigma_{iA}}{\sum_{i'} \sigma_{i'A}} + \frac{\sigma_{iB}}{\sum_{i'} \sigma_{i'B}}\right)\delta V_\alpha. \qquad [4]$$

Здесь σ_{iA} и σ_{iB} – объемные концентрации вещества i в ячейках A и B, полученные на лагранжевом этапе, суммирование проводится по всем веществам, вытекающим из ячейки A в ячейку B через грань α.

После вычисления предварительных значений $\delta \tilde{V}_{i\alpha}$ для всех веществ, вытекающих через все грани смешанной ячейки A, иногда могут возникать ситуации, когда рассчитанное значение объема какого-то вытекающего вещества превышает его объем в ячейке A или когда этого объема недостаточно, чтобы полностью «вынести» какое-то вещество из ячейки, хотя данная компонента не должна содержаться в ней на очередной момент времени. Поэтому проводится корректировка $\delta \tilde{V}_{i\alpha}$, после которой получаются окончательные значения $\delta V_{i\alpha}$. Корректировка проводится с помощью перераспределения объемов вытекающих компонент.

После корректировки объемов веществ, вытекающих из ячейки A, проводится расчет конвективных потоков массы, полной энергии и импульса по каждой компоненте отдельно.

Расчет конвективных потоков на гранях смешанных ячеек методом концентраций

Для описания турбулизованных течений, когда контактные границы разрушаются, и образуется зона смеси веществ, реализован метод концентраций. В этом случае алгоритмы определения $\delta V_{i\alpha}$ существенно упрощаются и сводятся к следующему.

Первоначально из ячейки A в ячейку B вытекают только те вещества, которые одновременно содержатся в ячейках A и B на текущий момент времени. Когда рассчитанный через все грани объем вытекающего вещества превышает его объем в смешанной ячейке A, тогда проводится корректировка полученных ранее предварительных

объемов этого вещества за счет объемов других веществ, вытекающих из ячейки. Если последнее не приводит к цели, то привлекаются оставшиеся компоненты смешанной ячейки.

Результаты Тестовых Расчетов

С целью сравнения двух алгоритмов представления контактных границ: алгоритма, основанного на методе концентраций и алгоритма, основанного на методе маркеров (т.е. на методе описания границ раздела с помощью нерегулярной сетки маркеров, движение которых согласовано с расчетом конвективных потоков) был сделан ряд расчетов разноплановых задач.

Рассматриваются два типа тестовых задач:

(1) «перенос объемов веществ в заданном поле скорости»;

(2) «поступательное движение среды с постоянной скоростью».

Все тестовые задачи имеют точное аналитическое решение.

Перенос объемов веществ в заданном поле скорости

В расчетах с использованием эйлеровых методов контактная граница, если она не является координатной поверхностью, при своем движении пересекает разностную сетку. При этом образуются смешанные ячейки, т.е. ячейки, содержащие несколько веществ. Точность таких методов зависит от алгоритмов вычисления конвективных потоков через границы смешанных ячеек.

Интересные модельные задачи для сравнения различных численных методов этого класса предложены в (Rider и Kothe, 1998) для двух пространственных переменных. Задачи обобщаются на случай трех пространственных переменных.

Эти задачи были рассчитаны по комплексу МАХ-3 для сравнения реализованных в комплексе алгоритмов описания контактных границ с большими деформациями – с использованием маркеров и только с помощью концентраций.

Модельная задача в 2D случае

Рассматривается движение точек квадрата $0 \le x, y \le 1$ со скоростью $\vec{\upsilon}(u,v)$:

$$u = -\left[\sin(\pi x)\right]^2 \sin(2\pi y)\cos(\pi t/T)$$
$$v = \left[\sin(\pi y)\right]^2 \sin(2\pi x)\cos(\pi t/T) \qquad [5]$$

Видно, что на границах квадрата $u = v = 0$ и движение периодическое с периодом T. При $t = T$ все точки возвращаются в свое первоначальное положение. Если выделить в момент $t = 0$ совокупность точек, лежащих на какой-либо кривой, и следить за их движением, то в процессе движения кривая сильно деформируется. На рис.9 приведено изменение формы окружности при движении. Деформации тем сильнее, чем больше *T*. Например, при $T = 8$ окружность в процессе движения принимает вид спирали.

Для расчетов по комплексу МАХ-3 постановка этой задачи была следующей. В квадрате $0 < x, y < 1$ с жесткими стенками рассматривалось движение со скоростью $\vec{\upsilon}(u,v)$, приведенной выше, однородной несжимаемой жидкости $(div\vec{\upsilon} = 0)$. Параметры жидкости

$p = 0$, $\rho = 1$. В жидкости выделялась область, граница которой – окружность радиуса 0.15 с центром в точке $(0.75;0.75)$. Полагалось, что окружность – контактная граница, разделяющая

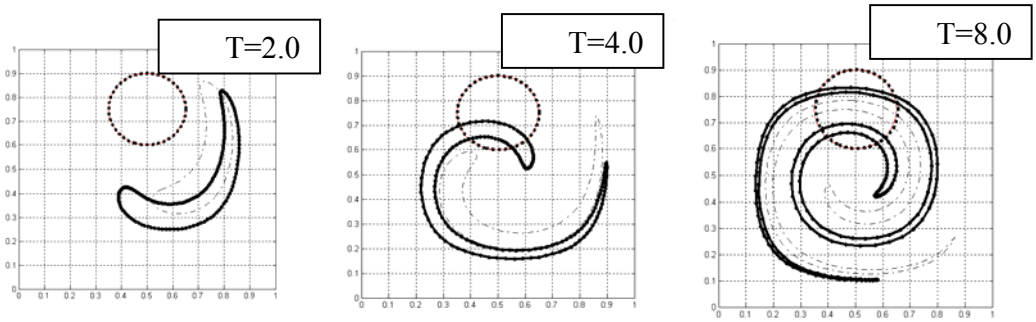
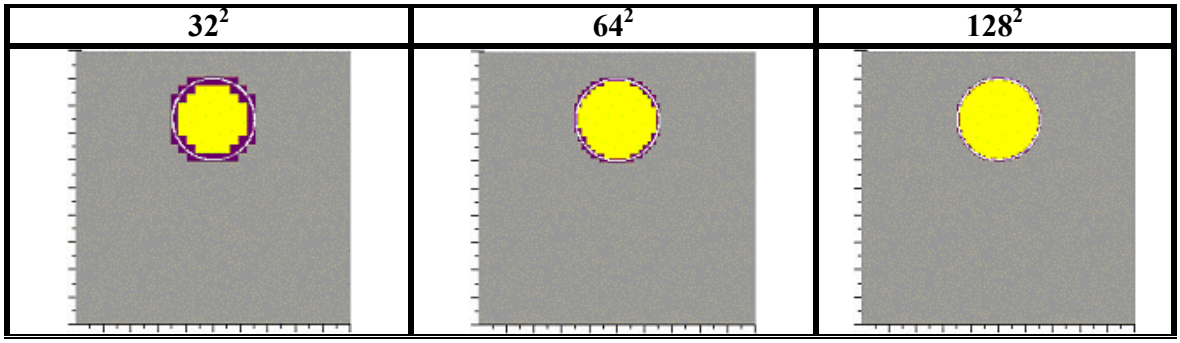


Рисунок 9. Изменение «формы» окружности для T=2, 4, 8:
- t=0, t=T; - t=0.25T, t=0.75T; - t=0.5T .

два вещества.

Расчеты по MAX-3 были проведены в неподвижной квадратной сетке с разным числом точек $(32^2, 64^2, 128^2)$ для $T = 2$ и $T = 8$ (рис.10). Специфика данной задачи такова, что через границы смешанных ячеек необходимо рассчитывать только потоки массы.

На рис.11-12 приведены результаты расчетов, полученных по методу маркеров - “ММ”, использующему маркерные линии для описания контактных границ, и по методу концентраций - “МК”. Показаны смешанные ячейки, возникающие в процессе расчета, а также деформации окружности, полученные из точного решения. В расчетах “ММ” они совпадают с деформациями маркерных линий.



- вещество №1; - вещество №2; - смешанные ячейки; - «точное» решение

Рисунок10. Начальное распределение для разного числа счетных точек 32^2, 64^2, 128^2

Для рассматриваемых тестовых задач вычислялся порядок сходимости (см. табл.1, 2). Сначала оценивалась относительная погрешность вычисления объемной концентрации второго вещества (рис.16) по формуле $E^{L_1} = \frac{1}{V_2^{exact}} \sum_{grid,k=fix} V_{i,j,k} \left| \sigma_{2i,j,k}^{\text{computed}} - \sigma_{2i,j,k}^{\text{exact}} \right|$, где $\sigma_{2i,j,k}^{\text{exact}}$, $\sigma_{2i,j,k}^{\text{computed}}$ - доли объема второго вещества в ячейке с индексами (i, j, k) на начальный и конечный моменты времени, а $V_{i,j,k}$ - объем этой ячейки. Порядок сходимости α вычислялся по значениям погрешности $E_1^{L_1}$, $E_2^{L_1}$ на двух разных сетках с шагом по пространству h_1, h_2 следующим образом.

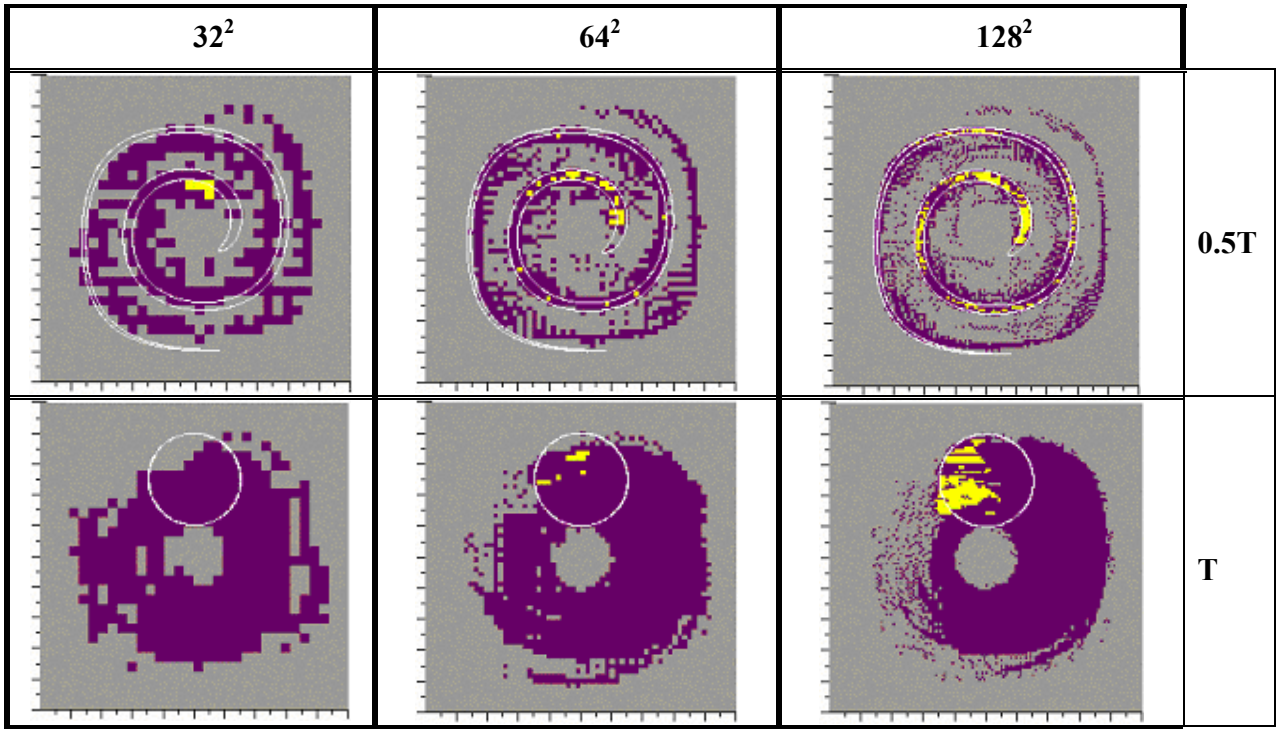


Рис.11. Результаты расчетов «МК» при $T = 8$ с числом счетных точек 32^2, 64^2, 128^2 на моменты $t = 0.5$T, $t =$ T. ■- вещество №1; ■ - вещество №2; ■ - смешанные ячейки; □ - «точное» решение.

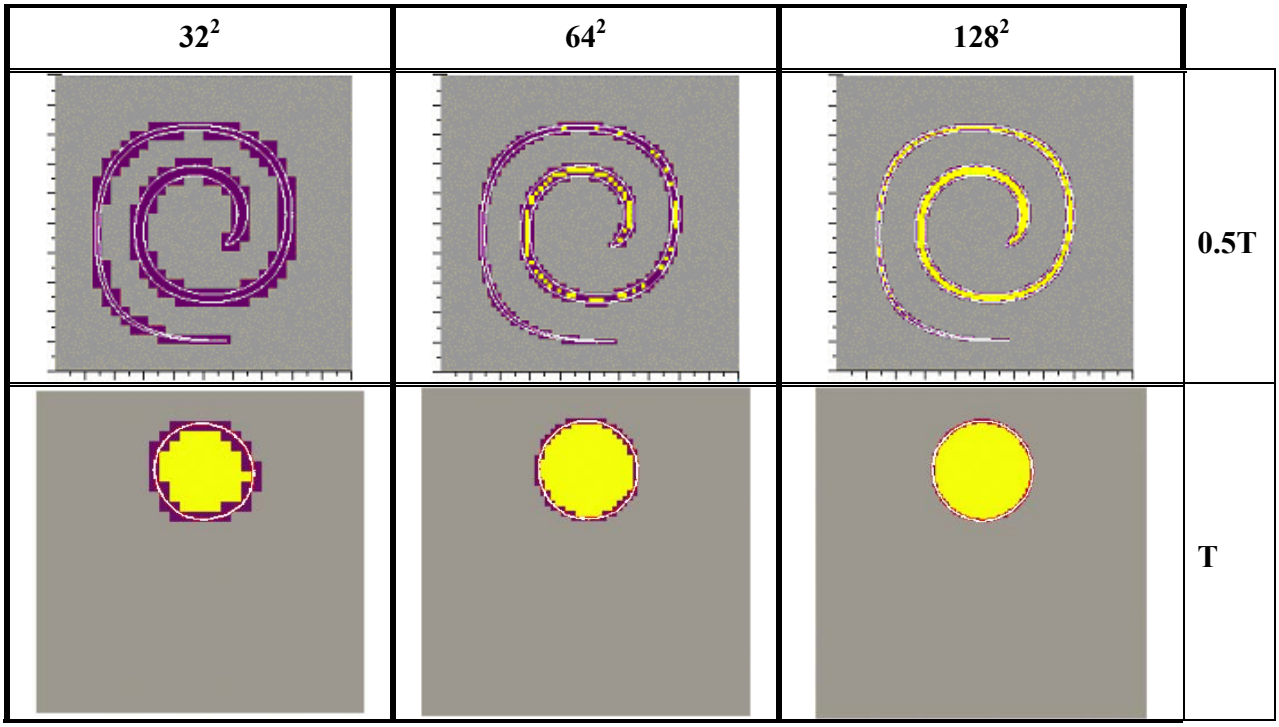


Рис.12. Результаты расчетов «ММ» при $T = 8$ с числом счетных точек 32^2, 64^2, 128^2 на моменты $t = 0.5$T, $t =$ T. ■- вещество №1; ■ - вещество №2; ■ - смешанные ячейки; □ - «точное» решение.

Поскольку $E_1^{L_1} = \mathbb{C}h_1^{\alpha}$ и $E_2^{L_1} = \mathbb{C}h_2^{\alpha}$, где $\mathbb{C}$ - некоторая константа, то $\alpha = \log(E_1^{L_1}/E_2^{L_1})/\log(h_1/h_2)$. Оценивалась относительная ошибка расчетного значения объема вещества №2:

$\Delta V_2 = (V_2^{\text{computed}} - V_2^{\text{exact}})/V_2^{\text{exact}}$, где V_2^{exact} и V_2^{computed} - полный начальный и конечный объем второго вещества соответственно.

Табл. 1. Относительная погрешность вычисления объемной концентрации второго вещества, порядок сходимости и погрешность расчетного значения объема второго вещества при расчетах с $T = 2$ по методу концентраций (МК) и методу маркеров (ММ)

Сетка	Погрешность E^{L_1}		Порядок α		Ошибка ΔV_2	
	МК	ММ	МК	ММ	МК	ММ
32^2	0.15572	0.03339			3.532533e-004	-1.101678e-002
			0.9641	1.2247		
64^2	0.07982	0.00789			1.834880e-004	-3.460807e-003
			0.8479	1.5159		
128^2	0.04435	0.00185			9.011707e-005	-1.229808e-003

Табл.2. Относительная погрешность вычисления объемной концентрации второго вещества, порядок сходимости и погрешность расчетного значения объема второго вещества при расчетах с $T = 8$ по методу концентраций (МК) и методу маркеров (ММ)

Сетка	Погрешность E^{L_1}		Порядок α		Ошибка ΔV_2	
	МК	ММ	МК	ММ	МК	ММ
32^2	1.1372	0.08308			2.561617e-003	-1.832234e-002
			0.6025	0.9577		
64^2	0.7490	0.04278			7.663488e-004	-5.355104e-003
			0.3715	0.9785		
128^2	0.57897	0.02171			4.112564e-004	-1.048725e-003

Модельная задача в 3D случае

В кубе $0 \le x, y, z \le 1$ с жесткими стенками находится несжимаемая однородная жидкость с параметрами $p = 0,\ \rho = 1.$ Сфера радиуса 0.15 с центром в точке $(0.75; 0.75; 0.75)$ полагается контактной границей, разделяющей два вещества: вещество №2 внутри сферы и №1 – вне.

Задается движение жидкости со скоростью $\vec{\upsilon}(u, v, w)$:

$$u = [\sin(\pi x)]^2 \sin(2\pi y)\cos(\pi t/T)$$
$$v = [\sin(\pi y)]^2 \sin(2\pi x)\cos(\pi t/T) \qquad [6]$$
$$w = -2[\sin(\pi z)]^2 \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\cos(\pi t/T), \text{ т.е. } div\vec{\upsilon} = 0.$$

Сравнительные расчеты по комплексу MAX-3 были проведены в неподвижной эйлеровой сетке с числом ячеек 32^3 для $T = 2$ и $T = 8$.

Начальное распределение вещества сферы и результаты расчетов приведены на рис.13-15.

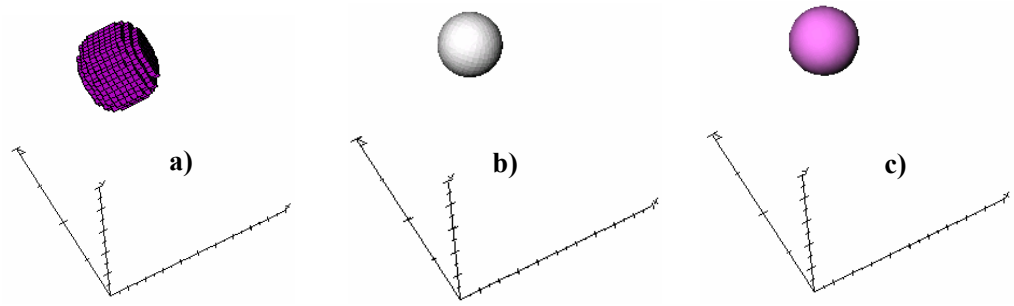


Рисунок13. Начальное распределение вещества сферы: a) - смешанные ячейки; b) – маркерная поверхность; c) – изоповерхность с объемной концентрацией второго вещества $\sigma = 0.23$

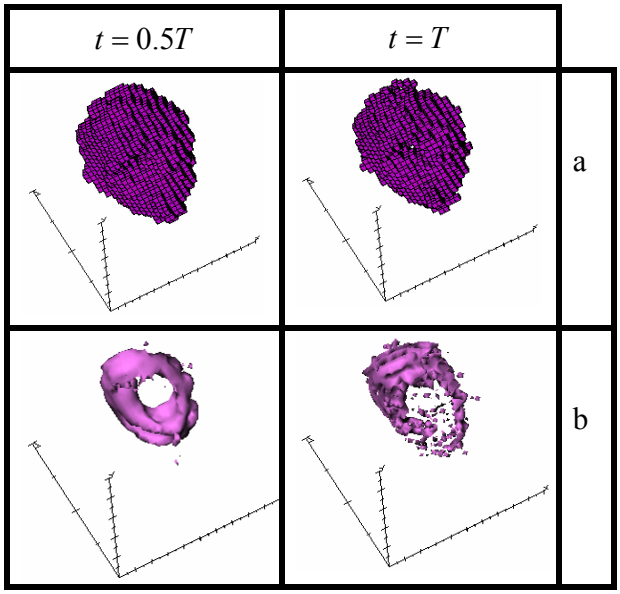


Рис.14. Результаты расчетов «МК» при $T = 8$: a) смешанные ячейки; b) вид поверхностей, где объемная концентрация вещества $\sigma = 0.23$

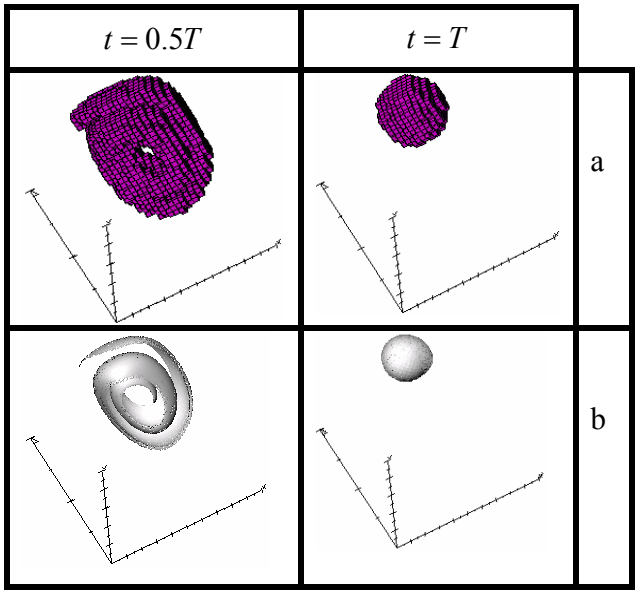


Рис.15. Результаты расчетов «МК» при $T = 8$: a) мешанные ячейки; b) маркерная поверхность

Результаты сравнительных расчетов показывают, что в методе с описанием контактных границ маркерными поверхностями счетная диффузия заметно меньше. В расчетах с использованием метода концентраций весьма сложной проблемой является восстановление положения контактной поверхности по полю концентраций. В описанных расчетах эта задача облегчается тем, что известны точные решения. В результате различных проб, сделанных при обработке результатов трехмерных расчетов (“МК”), при $T = 2$ получилось неплохое согласие с точным решением, если под расчетной контактной границей понимать

изоповерхность с объемной концентрацией второго вещества $\sigma = 0.23$. Для $T = 8$, где деформации сильнее, при такой обработке результаты получаются заметно хуже.

Для рассматриваемых расчетов, так же как в 2D тестах, оценивались относительные погрешности вычисления объемной концентрации вещества сферы $E^{L_1} = \frac{1}{V_2^{exact}} \sum_{grid} V_{i,j,k} \left| \sigma_{2i,j,k}^{\text{computed}} - \sigma_{2i,j,k}^{\text{exact}} \right|$ и относительная ошибка в расчетном значении объема сферы $\Delta V_2 = (V_2^{\text{computed}} - V_2^{\text{exact}}) / V_2^{\text{exact}}$ см. табл.3).

Table 3. Погрешности при расчете сферического жидкостного тела, помещенного в обращаемое по времени течение с периодом T на момент времени $t = T$ для расчетов по методу концентраций (МС) и методу маркеров (ММ)

Задача		Погрешность E^{L_1}	Ошибка ΔV_2
$T = 2$	МК	0.37922237	+8.629715e-004
	ММ	0.12949270	-2.562035e-002
$T = 8$	МК	1.40545132	+6.825963e-003
	ММ	0.26338374	-8.044026e-002

Однако следует заметить, что есть задачи, для которых метод концентраций дает приемлемые результаты. Наиболее же целесообразно при решении задач с сильными деформациями контактных границ использовать совокупность разных алгоритмов их описания. Такая возможность, как описано ранее, реализована в комплексе МАХ-3. При исследовании, например, развития неустойчивости на границе раздела веществ используется следующая технология: контактная граница описывается координатной поверхностью при небольших деформациях, при значительных – маркерной поверхностью, а при разрушении границы раздела и перемешивании веществ – только концентрациями.

Поступательное движение среды с постоянной скоростью

Модельная задача в 2D случае

В квадратной области $0 < x < 400$, $0 < y < 400$ находятся два вещества, имеющие одинаковые давления $p_1 = p_2 = 0$, но разные плотности - $\rho_1 = 1, \rho_2 = 10$.

Начальная геометрия второго вещества – квадрат 40x40 с началом в точке $(80,80)$.

Рассматривалось движение веществ с постоянной скоростью: для первого расчета $\vec{u}_0 = (1,0)$ - движение вдоль линий сетки до момента t = 200; для второго расчета $\vec{u}_0 = (0.7071, 0.7071)$ - движение под углом к линиям сетки (вдоль главной диагонали) до момента t $\approx$ 212.132.

На одних границах счетной области задавался приток первого вещества со скоростью $\vec{u}_0$, через другие происходил отток. Расчеты проводились в неподвижной эйлеровой сетке $h_x = h_y = 5$. Контактная граница описывалась маркерами. УРС: P = 0. Шаг по времени ≈ 0.1, т.е. $|\vec{u}| \bullet \tau / h \approx 0.02$, где $\vec{u}$ - скорость, τ - шаг по времени, h - линейный размер ячейки сетки.

Проведены два расчета в той же постановке, но с изменением начальной геометрии второго вещества – окружность R=25 с центром в точке $(100,100)$.

Для рассматриваемых расчетов оценивались относительные погрешности вычисления объемной концентрации второго вещества $E^{L_1} = \frac{1}{V_2^{exact}} \sum_{grid,k=fix} V_{i,j,k} \left| \sigma_{2i,j,k}^{\text{computed}} - \sigma_{2i,j,k}^{\text{exact}} \right|$, где $\sigma_{2i,j,k}^{\text{exact}}$, $\sigma_{2i,j,k}^{\text{computed}}$ - доли объема второго вещества в ячейке с индексами *(i, j, k)* на начальный и конечный моменты времени, $V_{i,j,k}$ - объем этой ячейки, и относительная ошибка величины объема этого вещества $\Delta V_2 = (V_2^{\text{computed}} - V_2^{\text{exact}}) / V_2^{\text{exact}}$, где V_2^{exact} и V_2^{computed} - полный начальный и конечный объем второго вещества соответственно.

Сравнительные результаты приводятся в табл.4 и на рис.22 для расчетов по методу концентраций (МК) и методу маркеров (ММ):

A) - движение «квадрата» вдоль линий сетки;

B) - движение «окружности» вдоль линий сетки;

C) - движение «квадрата» под углом к линиям сетки;

D) - движение «окружности» под углом к линиям сетки.

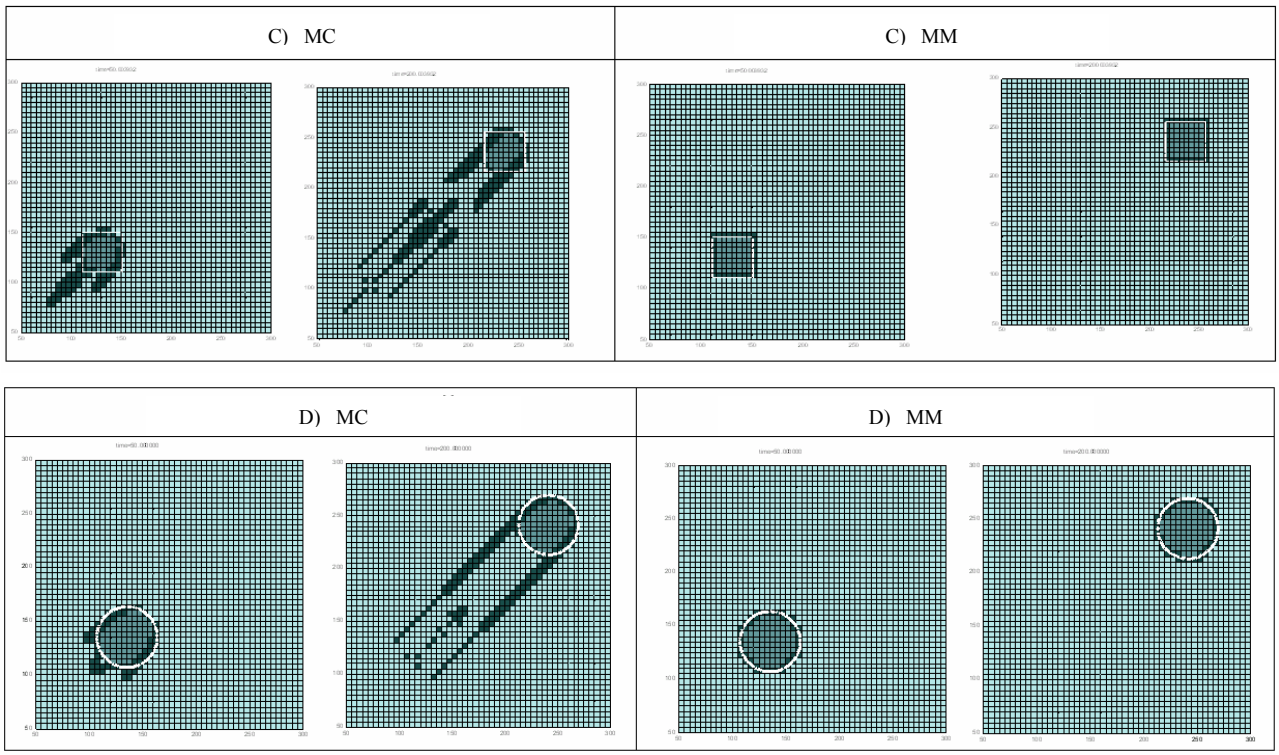


Рис.16. Поступательное движение в 2D случае. Положение веществ, смешанных ячеек (темный цвет) и сетки маркеров (белая линия) на момент времени t=50 и на конечный момент времени.

Табл.4. Погрешности E^{L_1} и ΔV_2 на конечный момент

Задача		Погрешность E^{L_1}	Ошибка ΔV_2
A)	MC	0.04845338	0
	MM	1.2500e-008	0
B)	MC	0.09840140	-3.700217e-006
	MM	0.03411712	-1.705050e-006
C)	MC	0.32989223	0
	MM	0.01542336	-0.00468230341
D)	MC	0.13162436	0
	MM	0.03880181	-0.02768624309

Модельная задача в 3D случае

В кубе $0 < x, y, z < 2$ находятся два вещества, имеющие одинаковые давления $p_1 = p_2 = 0$, но разные плотности - $\rho_1 = 1,\ \rho_2 = 10$. Начальная геометрия второго вещества – сфера с радиусом 0.15 и с центром в точке $(0.25, 0.25, 0.25)$. Рассматривалось движение веществ с постоянной скоростью: для первого расчета $\vec{u}_0 = (1, 0, 0)$ - движение вдоль линий сетки до момента t=1; для второго расчета $\vec{u}_0 = (0.5775, 0.5775, 0.5775)$ - движение под углом к линиям сетки (вдоль главной диагонали) до момента t=2.5.

На одних границах куба задавался приток первого вещества со скоростью $\vec{u}_0$, через другие происходил отток.

Расчеты проводились в неподвижной кубической сетке с числом ячеек $64 \times 64 \times 64$. Контактная граница описывалась маркерной поверхностью.

Проведены два трехмерных расчета в той же постановке, но со следующими изменениями: размеры области интегрирования $350 < x, y, z < 350$; начальная геометрия второго вещества – куб $40 \le x, y, z \le 40$; конечный момент времени для первого расчета - t=200, для второго расчета - t=300.

Расчеты проводились в неподвижной эйлеровой сетке с числом ячеек $70 \times 70 \times 70$ и с описанием контактной границы маркерной поверхностью.

Результат расчета с движением вдоль главной диагонали приведен на рис.17.

Для рассматриваемых расчетов оценивались относительные погрешности вычисления объемной концентрации второго вещества $E^{L_1} = \frac{1}{V_2^{exact}} \sum_{grid} V_{i,j,k} \left| \sigma_{2i,j,k}^{\text{computed}} - \sigma_{2i,j,k}^{\text{exact}} \right|$, где $\sigma_{2i,j,k}^{\text{exact}}$, $\sigma_{2i,j,k}^{\text{computed}}$ - доли объема второго вещества в ячейке с индексами *(i, j, k)* на начальный и конечный моменты времени, $V_{i,j,k}$ - объем этой ячейки, и относительная ошибка величины объема этого вещества $\Delta V_2 = (V_2^{\text{computed}} - V_2^{\text{exact}}) / V_2^{\text{exact}}$, где V_2^{exact} и V_2^{computed} - полный начальный и конечный объем второго вещества соответственно.

Результаты оценок приводятся в табл.5 для расчетов по методу концентраций (МК) и методу маркеров (ММ):

A) - движение «куба» вдоль линий сетки;

B) - движение «сферы» вдоль линий сетки;

C) - движение «куба» под углом к линиям сетки;

D) - движение «сферы» под углом к линиям сетки.

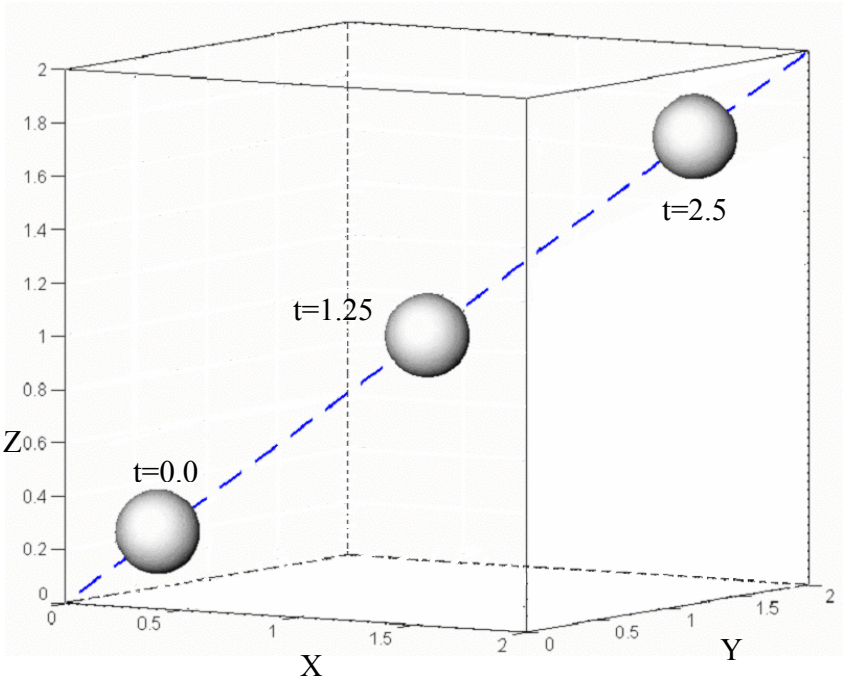


Рисунок 17. Положение границы раздела (представлена сеткой маркеров) на разные моменты времени для задачи с движением сферы вдоль главной диагонали в 3D случае.

Табл.5. Погрешности E^{L_1} и ΔV_2 на конечный момент времени

Задача		Погрешность E^{L_1}	Ошибка ΔV_2
A)	МС	0.04587	0
	ММ	1.7278e-005	0
B)	МС	0.15116	0
	ММ	0.12405	0
C)	МС	0.65902	0
	ММ	0.04358	-0.01365
D)	МС	0.90081	0
	ММ	0.11380	-0.026589

Заключение

Как показали расчеты, предлагаемый метод маркеров хотя и обладает некоторыми недостатками (увеличивает время расчета на 1÷20%.), однако дает ряд существенных преимуществ по сравнению с методом концентраций.

Метод маркеров почти точно передает форму и положение контактной границы.

Дает меньшую погрешность в распределении доли объем веществ и улучшает показатель сходимости примерно в 1.5 раза.

Литература

Anuchina N.N., Volkov V.J., Gordeychuk V.A., Es'kov N.S., Ilytina O.S., Kozurev O.M. Numerical simulation of Rayleigh-Taylor and Richtmyer-Meshkov instability using MAX-3 code. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 168 (2004), pp. 11-20.

Volkov V.I., Gordeychuk V.A., Es'kov N.S., Kozyrev O.M. Numerical simulation by the MAH-3 code of the interfaces using an unstructured mesh of markers. *Laser and Particle Beams*,18 (2000), pp.197

W.J. Rider, D.B. Kothe, Reconstructing volume tracking, *J. Comput. Phys*. 141 (1998) 112-152.