

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

Российский Федеральный Ядерный Центр, Саров

В работе 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 ударноволновых течений многокомпонентной сплошной среды приобретает все больший вес из-за присущих им по сравнению с лагранжевыми методами преимуществ, среди которых наиболее важными являются их безавостность, 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.

1. Аппроксимация уравнений лагранжевой газодинамики для случая многокомпонентной среды из-за появления так называемых смешанных ячеек, содержащих два и более компонентов.
2. Относительно меньшая (по сравнению с лагранжевыми методами) точность, обусловленная необходимостью решения уравнения адвекции и появляющейся в связи с этим схемной вязкостью.
3. Определение положения контактных границ и расчета их движения по неподвижной счетной сетке.
4. Проблемы моделирования различных физических процессов: горения и детонации ВВ, теплопроводности, упругопластики и др.
5. Необходимость использования не однородной сетки.
6. 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 мы 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 ρ_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 – объём; β - объемная концентрация; $i=1, \dots, J$ – номер компонента.

Исходная система дифференциальных уравнений многокомпонентной газодинамики имеет следующий вид:

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

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \text{div}\bar{u}_i \quad [2]$$

$$\frac{d\beta_i}{dt} = \beta_i (\text{div}\bar{u}_i - \text{div}\bar{u}) \quad [3]$$

$$\frac{de_i}{dt} = -\frac{P_i + q_i}{\rho_i} \text{div}\bar{u}_i \quad [4]$$

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

Уравнения 1-5 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 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 (Бахрах и др., 1984)

$$\text{div} \bar{u}_i = \text{div} \bar{u} \quad [6]$$

Метод, основанный на этом предположении, будем называть **методом 1**.

Применяется также **метод 2**, основанный на предположении о равенстве давлений компонентов с учётом 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 (Жарова и Янилкин, 1992).

Нами используется также **метод 3**, предложенный в работе Бондаренко и Янилкина, 2000 и основанный на предположении об одинаковом приращении давлений компонентов. 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, по другому,

$$\rho_i c_i^2 \text{div} \bar{u}_i = \rho_k c_k^2 \text{div} \bar{u}_k \quad [8]$$

Учитывая также (из условия аддитивности объемов компонентов), что $\sum \beta_i \text{div} \bar{u}_i = \text{div} \bar{u}$, получаем замкнутую систему уравнений для нахождения $\text{div} \bar{u}_i$. Решение этой системы уравнений дает

$$\text{div} \bar{u}_i^n = \text{div} \bar{u} \frac{1}{\sum_k \frac{\beta_k^n}{\rho_k^n (c_k^n)^2}} \cdot \frac{1}{\rho_i^n (c_i^n)^2} = \xi_i \text{div} \bar{u} \quad [9]$$

В работе Гончарова и Янилкина, 2004 метод 3 был модифицирован алгоритмом выравнивания давлений компонентов (**метод 3P**), что значительно увеличило его точность.

Представление о сравнительной точности указанных методов дает следующая задача.

Задача 1. Прохождение ударной волны по смеси двух газов

Рассматривается следующая задача. В области $0 < x < 100$ имеется смесь двух газов, находящихся в полностью перемешанном и равновесном состоянии ($P=0, u=0$). Первый газ имеет плотность $\rho=1$, показатель адиабаты $\gamma=3$, второй – $\rho=1, \gamma=1.2$. На левой границе задана постоянная скорость $u=2$. По смеси газов идет УВ, на которой должны достигаться максимальные сжатия для каждого газа в отдельности, то есть $\rho=2$ для первого газа и $\rho=11$ – для второго при условии отсутствия адиабатического обмена энергиями между газами. При этом давления компонентов должны быть одинаковыми. Вся область разбивалась равномерно на 100 ячеек. Расчеты проводились в лагранжевой постановке.

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 рисунке 5 приводятся аналогичные профили плотностей компонентов.

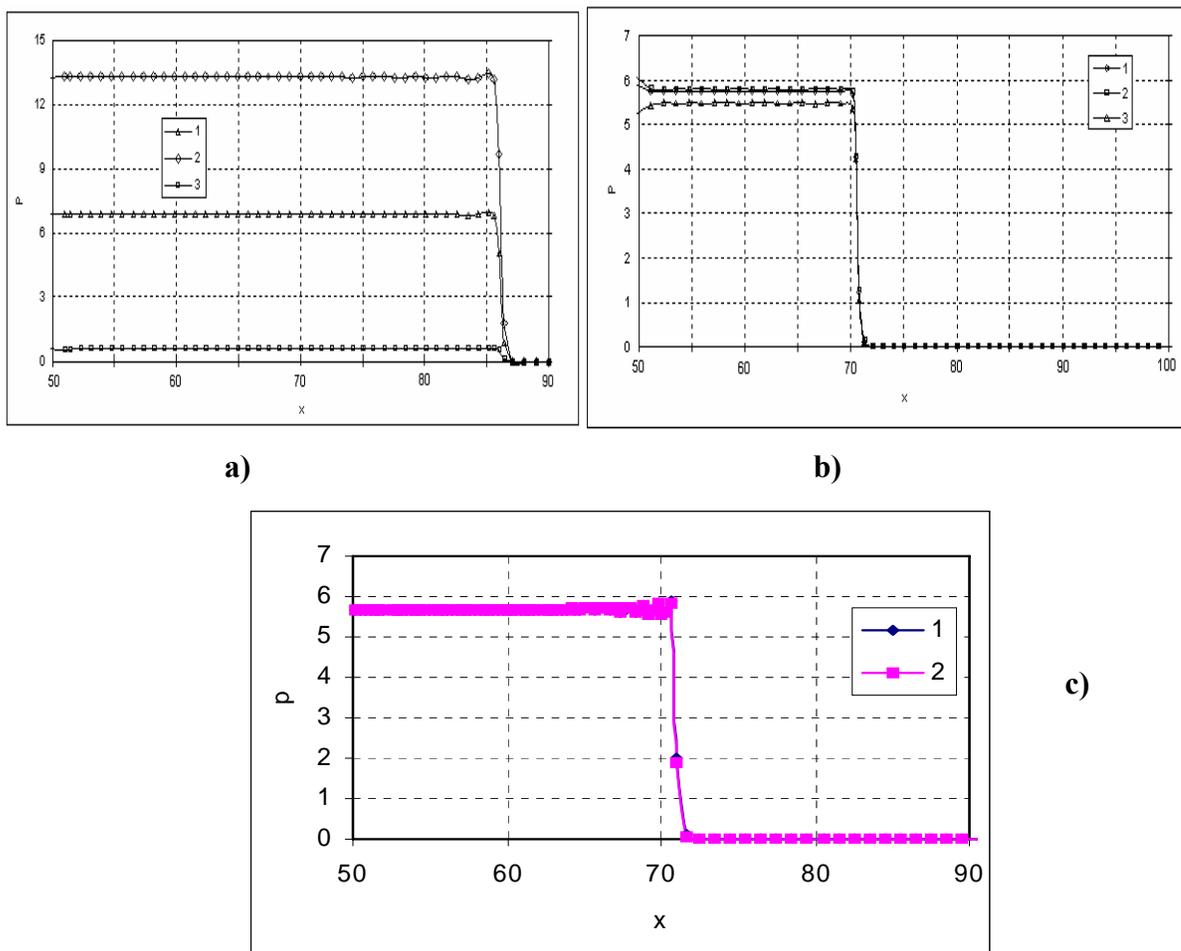


Рисунок 1. Профили давления в задаче 1, $t=25$, а)-метод 1, б) - метод 3, в) - метод 3P; 1 – среднее давление; 2 – давление компонента 1; 3 – давление компонента 2.

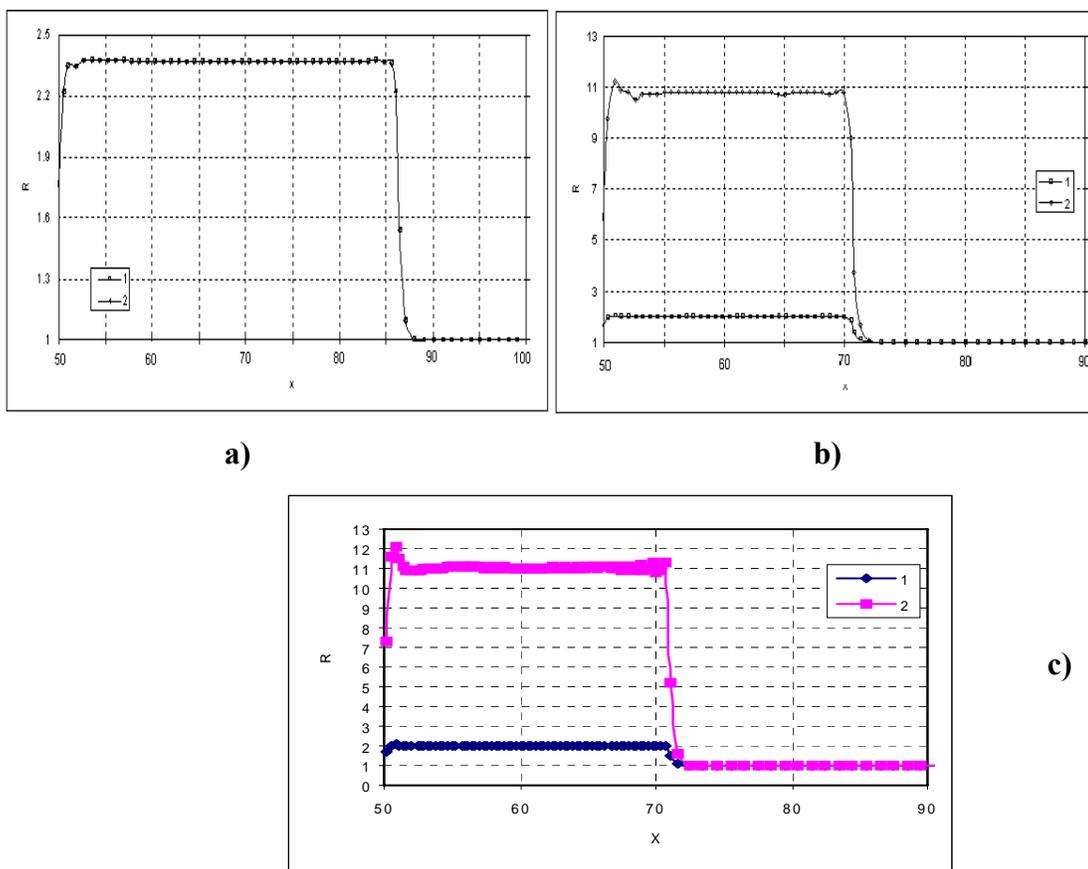


Рисунок 2. Профили плотности в задаче 1, $t=25$, а)-метод 1, б) - метод 3, в) - метод 3Р; – плотность компонента 1; 2 – плотность компонента 2.

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 (Бондаренко и Янилкин, 2000), использующим предположение о равенстве давлений компонентов.

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 3Р по сравнению с методом 1 значительно более точные. Полученные в расчётах по этим методам сжатия за фронтом УВ близки к ожидаемым. В то же время видно, что из этих трех методов следует отдать предпочтение методу 3Р (плотности за фронтом практически совпадают с ожидаемыми).

Таким образом, приведенные расчетные данные показывают, что по точности метод 3Р несколько лучше метода 3 и имеет несомненные преимущества по сравнению с методом 1.

Аппроксимация уравнения адвекции

Особенности применения методов СМ, ДМ и РРМ.

Одним из наиболее успешно применяемых методов, позволяющих повысить точность решения уравнения адвекции для многокомпонентного случая, является метод концентраций (метод СМ), предложенный в работе Бахраха и др., 1981. 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 Янилкина, 1999), а остановимся лишь на некоторых проблемах, которые возникают при его использовании совместно с методами ДМ и РРМ.

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

$$\Delta V_i = \Delta V \cdot \beta_{\Delta V}^i \quad [10]$$

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 ДМ, метод СМ и метод РРМ в зависимости от ситуации. В случае, когда в донорной ячейке по полю концентраций удается восстановить положение контактной границы, используется метод СМ, в противном случае используется метод РРМ. Фактически метод РРМ 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

$$\Delta M_i = \Delta V_i \cdot \rho_i^* \quad [11]$$

где ρ_i^* - значение плотности в потоке, определяемое либо донорным методом, либо методом РРМ. Если для расчета потока объема использовался метод СМ, то для плотности применяется метод ДМ, в противном случае применяется метод РРМ.

Для вычисления потоков энергии и других величин, определенных на единицу массы компонента, используется аналогичный подход, только в формуле [11] 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 работах Кучеровой и др., 2003; Янилкина, 2004. Здесь же рассмотрим некоторые особенности использования метода РРМ в методике ТРЭК, возникающие в связи с

Yanilkin, Yu. V. et al.

распараллеливанием. Дело в том, что этот метод при вычислениях потока через любую сторону требует информации о состоянии в 5 ячейках, в методике ТРЭК с одного процессора на другой передается информация лишь с одного слоя приграничных ячеек. В силу этого появляются ситуации, когда стандартный метод РРМ не может быть использован в первоначальном виде и требуются некоторые изменения алгоритма.

Случай 1. Рассмотрим рисунок 3, на котором ячейки 1, 2 и 3 находятся на процессоре 1, а ячейки 4 и 5 – на процессоре 2. Необходимо посчитать методом РРМ поток, направленный справа налево через общую сторону ячеек 2 и 3 на процессоре 1. Для данного случая для метода РРМ требуются все показанные на рисунке 3 ячейки.

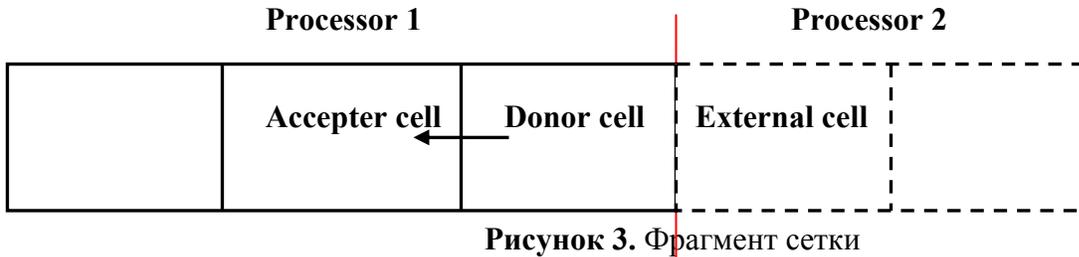


Рисунок 3. Фрагмент сетки

Как видно из рисунка 3, только 3 из 5 требующихся ячеек находятся на процессоре 1. Кроме этого с процессора 2 нам известно состояние ячейки 4, а информации о ячейке под номером 5 нет. Для использования стандартных алгоритмов метода РРМ состояние ячейки 5 копируется из приграничной (в нашем случае из ячейки 4) и теперь для работы метода РРМ есть все необходимые данные.

Случай 2 представлен на рисунке 4. Необходимо посчитать методом РРМ поток через общую сторону ячеек 3 и 4. В данном случае расчет потока может быть выполнен как на процессоре 1, так и на процессоре 2. Таким образом, один и тот же поток через сторону ячеек 3 и 4 будет рассчитываться различно (смотри случай 1) в зависимости от того, на каком процессоре считается. Поэтому, чтобы не было неоднозначности, в данной ситуации всегда используется метод DM.

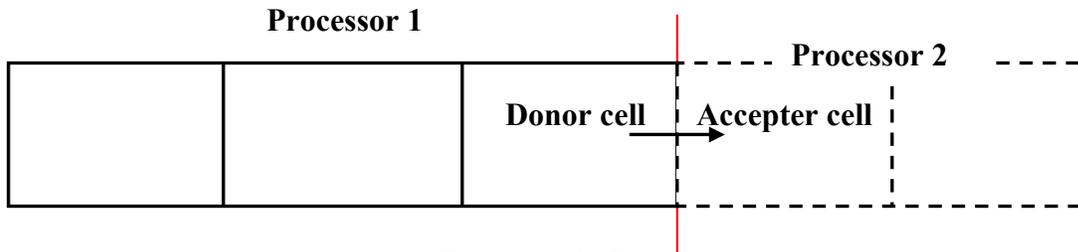
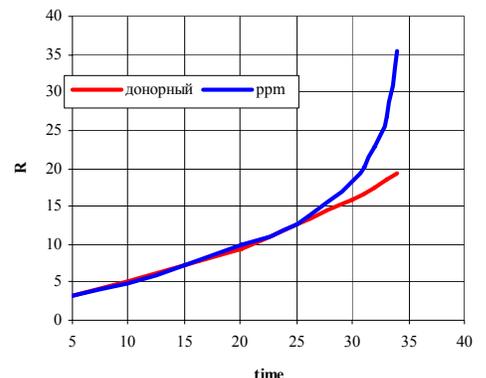


Рисунок 4. Фрагмент сетки

Расчеты показали, что эти и некоторые другие исключения незначительно сказываются на результатах расчетов в многопроцессорном режиме. Ниже использованы указанные методы.

Задача 2. Взрыв в экспоненциальной атмосфере.

В экспоненциальной атмосфере $\rho = \rho_0 \exp(-x)$, $\rho_0 = 1$ области радиусом $R=0.75$ и центром $y=0$ содержится вещество Yanilkin, Yu.V. et al.



энергией $e = \frac{E}{4/3 \pi R_0^3 \rho}$ ($E = 1$). 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 рисунке 5 в виде внутренней энергии атмосферы и на рисунке 6 в виде X-t диаграммы фронта ударной волны в направлении вверх. Из рисунка 6 видно, что метод DM дает качественно неверный результат, который не улучшается с уменьшением размеров ячеек. Метод PPM позволяет получить приемлемый по точности результат.

Рисунок 5. Внутренняя энергия атмосферы, $t=34$, а) метод DM, б) метод PPM.

Рисунок 6. 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 **б)** же метод, основанный на предположении о наличии в смешанных ячейках теплосмеси **б)** на 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.

Решение уравнения теплопроводности для средних энергий (этап 1).

Рассматривается уравнение теплопроводности

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \text{div}(\chi \cdot \text{grad}T) \quad [12]$$

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 – на ее сторонах (гранях). Уравнение 12 аппроксимируется неявной разностной схемой

$$\frac{e^{n+1} - e^n}{\tau} = \left(\frac{\text{div}(\chi \cdot \text{grad}T)}{\rho} \right)^{n+1} \quad [13]$$

Для решения системы конечно-разностных уравнений 13 может использоваться любая разностная схема. Метод решения в 2D случае описан в работе Бондаренко и др., 2000. В 3D случае используется метод локальных итераций, предложенный Локуциевским и Локуциевским, 1984 и модифицированный Жуковым, 1986. 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.

Расчет теплообмена между компонентами (этап 2).

После работы первого этапа известны средние потоки тепла через стороны (границ) ячейки. На втором этапе в смешанных ячейках эти потоки распределяются между компонентами, затем осуществляется теплообмен между веществами через контактную границу между компонентами. Для случая двух веществ в одной ячейке этот процесс описывается следующей системой разностных уравнений:

$$\begin{cases} M_1 \frac{e_1^{n+1} - e_1^n}{\tau} = S_{12} \chi_{12} \frac{T_2^{n+1} - T_1^{n+1}}{L_{12}} + \sum_{j=1}^6 Q_{1,j} \\ M_2 \frac{e_2^{n+1} - e_2^n}{\tau} = -S_{12} \chi_{12} \frac{T_2^{n+1} - T_1^{n+1}}{L_{12}} + \sum_{j=1}^6 Q_{2,j} \end{cases} \quad [14]$$

Здесь: M_i - массы компонентов; e_i - удельные внутренние энергии компонентов; χ_{12} - средний коэффициент теплопроводности для теплообмена между компонентами. S_{12} - площадь контакта между компонентами (то есть, площадь сечения); L_{12} - расстояние между центрами объемов, занятых компонентами; $Q_{i,j}$ - тепловой поток i -го компонента через j -ю грань.

Для наглядности на рисунке 7 нарисована смешанная ячейка в двумерном разрезе с проведенной контактной границей и показаны входящие в формулу [14] величины.

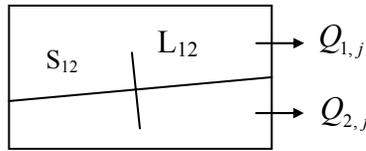


Рисунок 7. Двумерный разрез смешанной ячейки.

В наших методиках положение контактных границ в смешанной ячейке восстанавливается по полю концентраций. Алгоритмы определения границ и указанных выше величин приведены в работах Бондаренко и др., 2000. Отметим, что в 2D случае граница аппроксимируется отрезком прямой, а в 3D случае – плоскостью. Распределение потоков тепла через грани ячеек между компонентами осуществляется по формуле

$$Q_i = S q \frac{S_i \chi_i}{\sum_{k=1}^2 S_k \chi_k}, \quad i = 1, 2 \quad [15]$$

то есть, пропорционально коэффициентам теплопроводности и площадям. В формуле 15 q – вычисленный на первом этапе средний поток тепла на единицу площади, входящий через грань ячейки; S - площадь грани; S_i - часть площади грани, занятая i -м компонентом; χ_i - коэффициент теплопроводности i -го компонента, относящийся к грани.

Система уравнений 14 решается итерационно методом Ньютона. В результате находятся новые температуры и новые внутренние энергии компонентов.

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 рисунке 8.

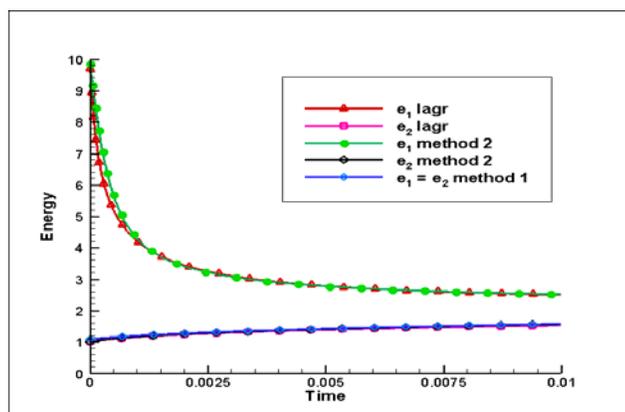


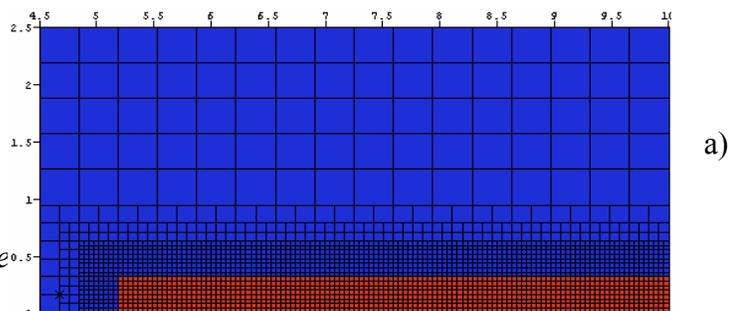
Рисунок 8. График зависимости удельной внутренней энергии компонентов от времени внутри смешанной ячейки, для лагранжевого расчета приведены энергии двух соседних ячеек.

Использование адаптивно-встраивающейся дробной сетки.

Для повышения точности и уменьшения времени счета 2D расчетов в методике ЭГАК используется адаптивно-встраивающаяся 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. Ниже приводятся 2 примера использования дробной сетки.

Задача 4. Удар цилиндра по жесткой стенке.

Начальная геометрия задачи и начальная счетная сетка показаны на рисунке 9а. В расчете использовалось дробление сетки до 2-го уровня в области, занятой цилиндром. Расчет проводился в упругопластическом приближении, результаты расчетов показаны на рисунке 9б и 9с. Коэффициент ускорения расчета при использовании дробной сетки составил ~6.5.



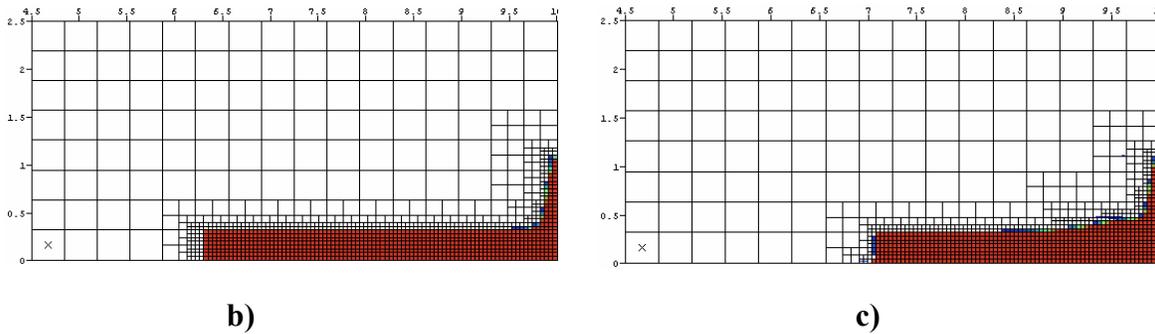
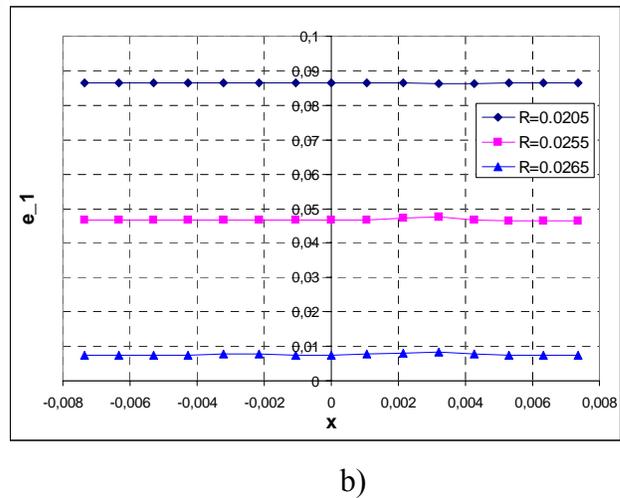
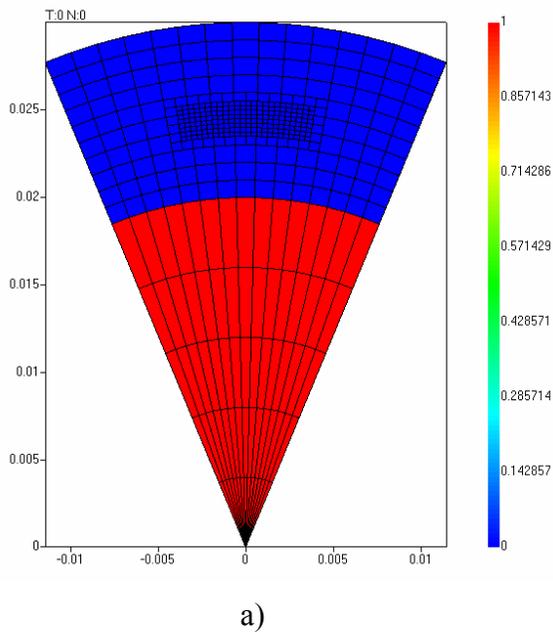


Рисунок 9. Удар цилиндра по жесткой стенке

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 рисунке 10а. 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 рисунке 10с-d в виде растровой картины энергии одного из веществ и счетной сетки на два момента времени.



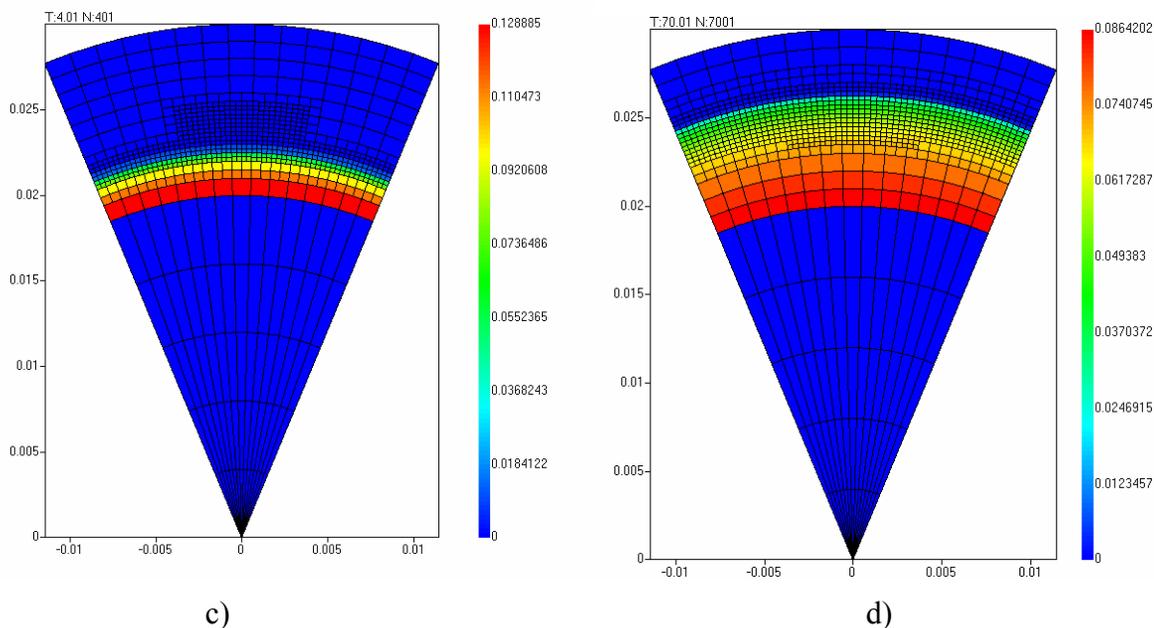


Рисунок 10. Распространение сферически симметричной тепловой волны

На рисунке 10b представлены графики зависимости энергии в 1-ом веществе вдоль координаты x для 3-х 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, расположенным 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.

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. На рисунке 11 показан пример разбиения задачи по процессорам для 2D разреза.

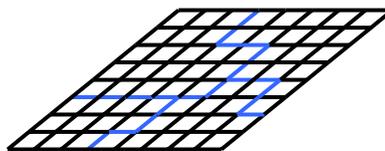


Рисунок 11. Пример разбиения задачи по процессорам

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:

1. произвольно менять распределение точек по процессорам;
2. производить вычисления с точностью до счета одной точки и "вклеивать" обмены между счетом точек;
3. 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 1 ($0 < X < 10.5$, $0 < Y < 10.5$, $0 < Z < 10.5$) содержится идеальный газ ($\rho_1=1$, $e_1=0$, $u_1=0$, $\gamma=1.4$), в области 2 ($0 < X < 1$, $0 < Y < 1$, $0 < Z < 1$) задается энергия $e_2=1$. Во всех расчетах количество ячеек на процессоре не менялось и составляло $105 \times 105 \times 105$ ячеек. Результаты замеров показаны на рисунке 12.

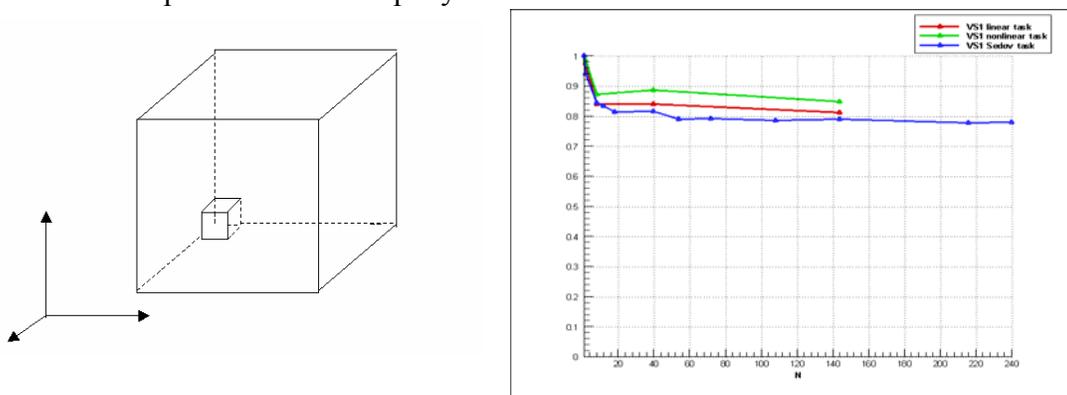


Рисунок 12. Замеры эффективности в задачах 6 и 7.

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. Как и выше, во всех расчетах количество ячеек на процессор составляло $105 \times 105 \times 105$ ячеек. Результаты замеров показаны на рисунке 12.

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 ТРЭЖ содержатся в работе Беляева, 2000.

Заключение

В докладе представлены некоторые нововведения в методики ЭГАК и ТРЭЖ, 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.

References

- 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*, 257, №3, 566-569, (1981).
- Бахрах, С.М., Спиридонов, В.Ф., Шанин, А.А., "Метод расчета двумерных осесимметричных газодинамических течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых переменных," *ДАН СССР*, 276, #4 (1984).
- Беляев, С.П., "Метод мелкозернистого распараллеливания с динамической балансировкой на примере задачи газовой динамики и вычислительные эксперименты на параллельной системе," *ВАНТ, сер. ММФП*, 1, 45-49, (2000).
- Бондаренко, Ю.А., Янилкин, Ю.В., "Расчет термодинамических параметров смешанных ячеек в газовой динамике," *ВАНТ, сер. ММФП*, 4, 12-25, (2000).
- Бондаренко, Ю.А., Шагалиева, А.Р., Янилкин, Ю.В., "Метод расчета теплопроводности с учетом теплообмена между веществами внутри смешанных ячеек," *ВАНТ, сер. ММФП*, 4, 26-34, (2000).
- Гончаров, Е.А., Янилкин, Ю.В., "Новый метод расчета термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках," *ВАНТ, сер. ММФП*, 3, 16-30, (2004).
- Жарова, Г.В., Янилкин, Ю.В., "Комплекс программ ЭГАК. Алгоритм выравнивания давлений веществ в смешанных ячейках," *ВАНТ, сер. ММФП*, 3, (1993).
- Жуков, В.Т., "Разностные схемы локальных итераций для параболических уравнений," Препринт #183, Москва, ИПМ АН СССР (1986).
- Кучерова, П.А., Янилкин, Ю.В., Гончаров, Е.А., "Применение кусочно-параболического метода для решения уравнения адвекции в комплексе ЭГАК," *ВАНТ, сер. ММФП*, 1, 29-35 (2003).
- Локуциевский, В.О., Локуциевский, О.В., "Применение чебышевских параметров для численного решения некоторых эволюционных задач," Препринт #99, Москва, ИПМ АН СССР (1984).
- Woodward, P.R., Colella, Ph., "The Numerical Simulation of Two-Dimensional Fluid Flow with Strong Shocks," *Journal of Computational Physics*. 54, 115-174 (1984).
- Yanilkin, Yu.V., Tarasov, V.I., Stadnik, A.L., Bazhenov, S.V., Bashurov, V.V., Belyaev, S.P., Bondarenko, Yu.A., Bykova, E.A., Gavrilova, E.S., Gorev, V.V., Dibirov, O.A., Ivanova, G.G., Kovalev, N.P., Korol'kova, T.V., Pevnaya, P.I., Sofronov, V.N., Toropova, T.A., Shanin, A.A., "Program System TREK for Numerical Simulation of 3D Multi-component Medium Flows," Proceedings of workshop «New Models and Numerical Codes for Shock Wave Processes in Condensed Media», Oxford, 413-422 (1997).
- Янилкин, Ю.В., "Численное моделирование двумерных течений многокомпонентной среды с учетом некоторых мелкомасштабных процессов," *Физическая мезомеханика*, 2, #5, 27-48, (1999).