РФЯЦ ВНИИТФ

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ технической физики
им. акад. Е.И.Забабахина, Снежинск, Россия

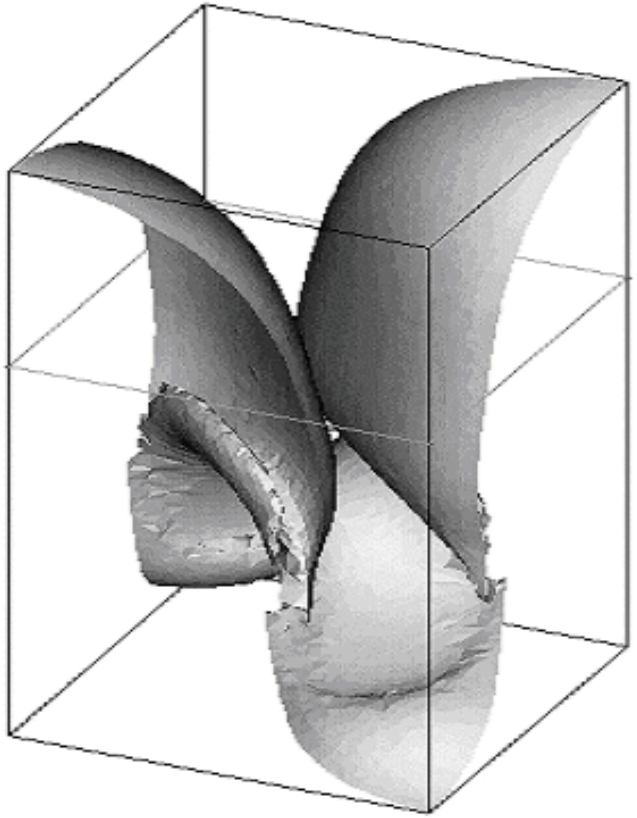
МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТАКТНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ В КОМПЛЕКСЕ МАХ-3 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СМЕШАННЫХ ЯЧЕЕК И МАРКЕРОВ

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

Комплекс программ МАХ-3 [1, 2] предназначен для расчета нестационарных пространственно трехмерных задач газовой динамики с большими деформациями.

Расчетная область задачи представляется набором счетных областей (ярусов).

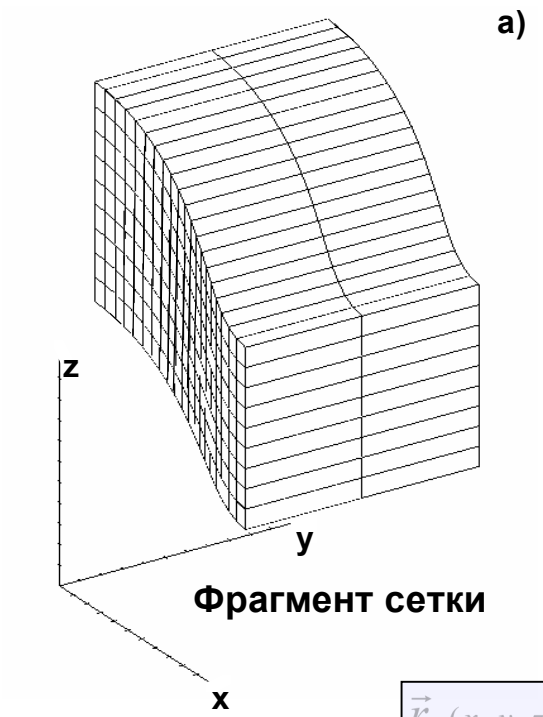
В каждом ярусе используется своя произвольная регулярная разностная сетка.



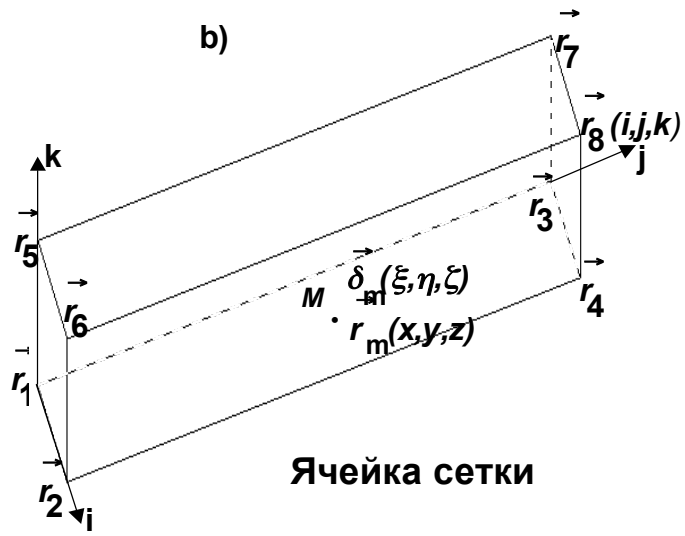
1. Анучина Н.Н., Волков В.И., Гордейчук В.А., Еськов Н.С., Илютина О.С., Козырев О.М. Метод и комплекс программ МАХ-3 численного моделирования трехмерных задач газовой динамики. Тезисы докладов. 12 Всероссийская конференция “Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики”, Новороссийск, 1998.

2. Anuchina N.N., Es’kov N.S., Gordeichuck V.A., Ilyutina O.S., Kozyrev O.M., Volkov V.I. Three-Dimensional Numerical Simulation of Rayleigh-Taylor Instability by MAH-3 Code. In Proc. of 6th International Workshop on The Physics of Compressible Turbulent Mixing, Institut Universitaire des Systemes Thermiques Industriels, Marseille,18-21 June 1997, France, pp 24-28.

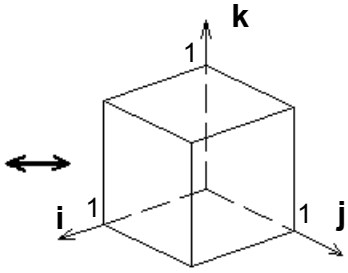
Регулярная сетка



Фрагмент сетки



Ячейка сетки



Отношение между $\vec{r}_m(x,y,z)$ и (ξ,η,ζ):

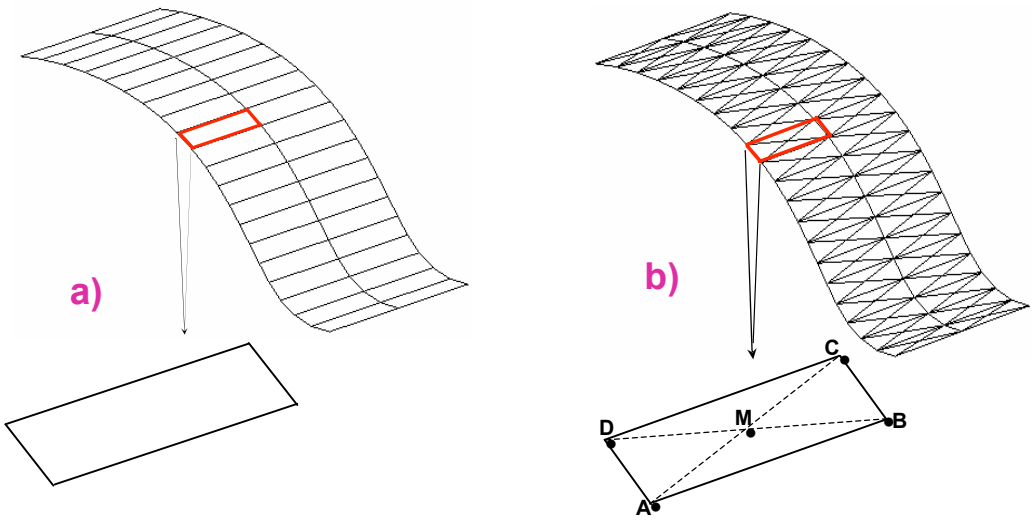
$$\vec{r}_m(x,y,z) = (1-\xi)(1-\eta)(1-\zeta)\,\vec{r}_1 + \xi(1-\eta)(1-\zeta)\,\vec{r}_2 + (1-\xi)\eta(1-\zeta)\,\vec{r}_3 + \xi\eta(1-\zeta)\,\vec{r}_4 +$$

$$(1-\xi)(1-\eta)\zeta\,\vec{r}_5 + \xi(1-\eta)\zeta\,\vec{r}_6 + (1-\xi)\eta\zeta\,\vec{r}_7 + \xi\eta\zeta\,\vec{r}_8 \quad \Rightarrow \quad \vec{\delta}_m(\xi,\eta,\zeta);$$

ãäå : $0 \le \xi \le 1, \quad 0 \le \eta \le 1, \quad 0 \le \zeta \le 1$

Для детального изучения эволюции границы раздела в программе МАХ-3 реализована возможность задания контактной поверхности с помощью нерегулярной треугольной сетки, которая не зависит от разностной сетки области численного интегрирования.

Инициализация треугольной сетки маркеров



Координатная поверхность регулярной сетки:

a) до инициализации сеткой маркеров;

b) после инициализации сеткой маркеров.

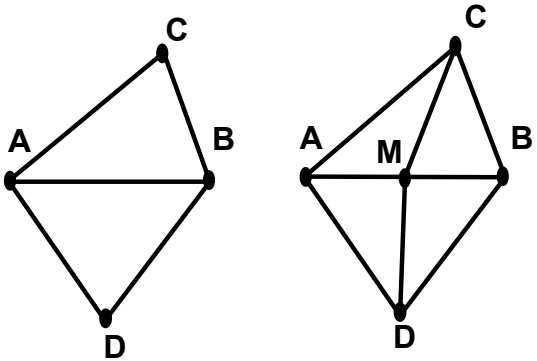
Каждый узел этой сетки (вершина треугольника) – маркер, движение которого определяется полем скорости сплошной среды.

Ребра треугольников определяют связи между маркерами на контактной поверхности.

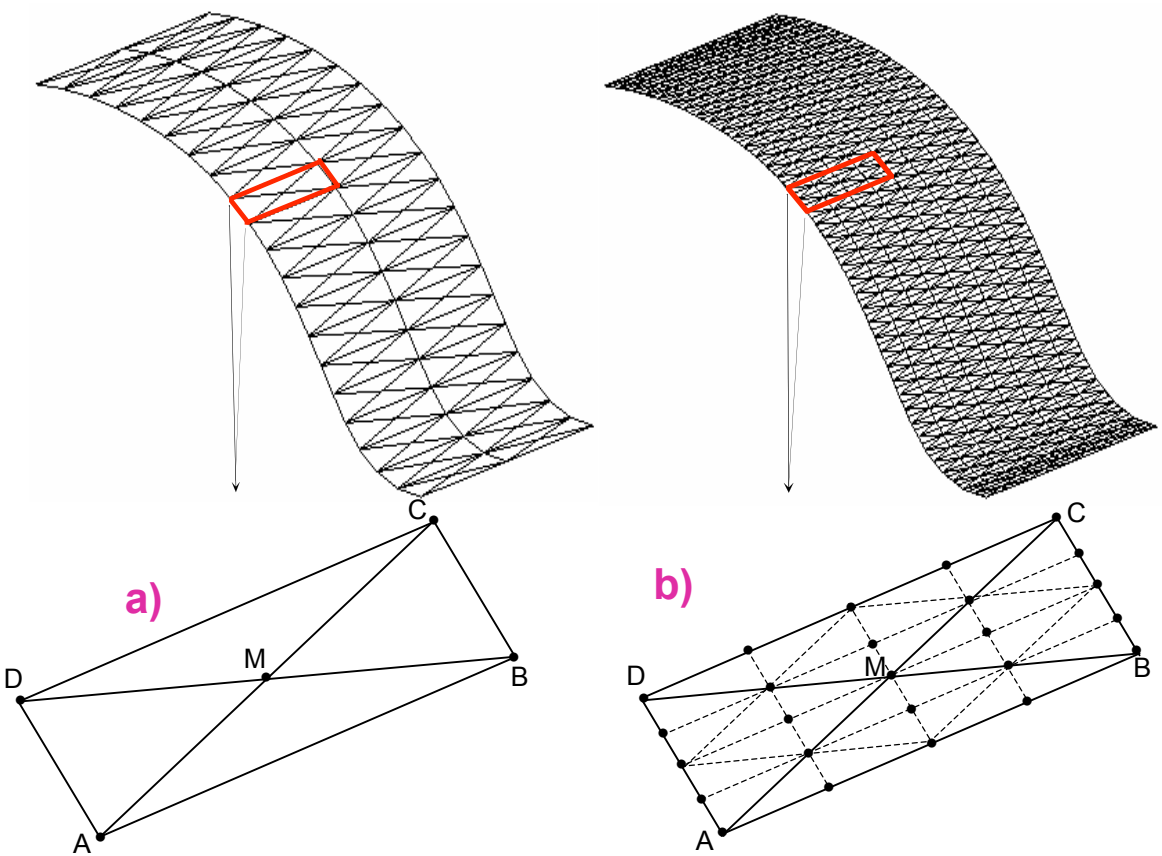
Требуемое качество сетки поддерживается за счет:

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

Добавление маркера

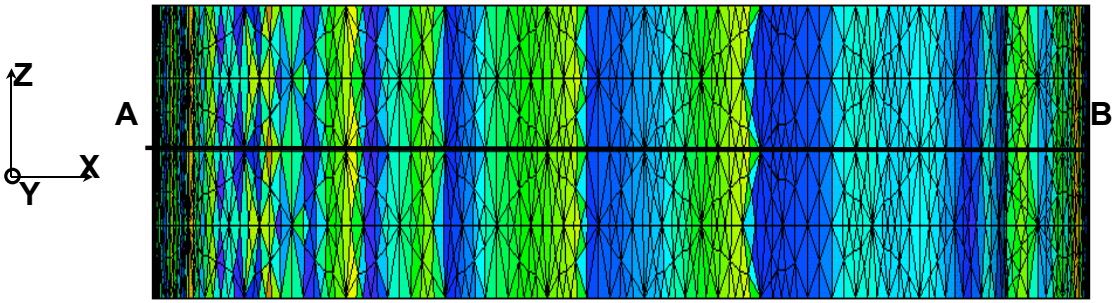


Добавление нового маркера M

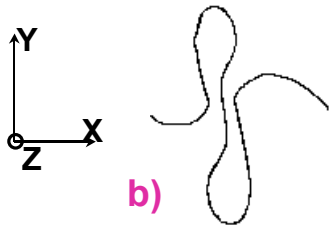


Треугольная сетка маркеров:
a) фрагмент до добавления;
b) фрагмент после добавления.

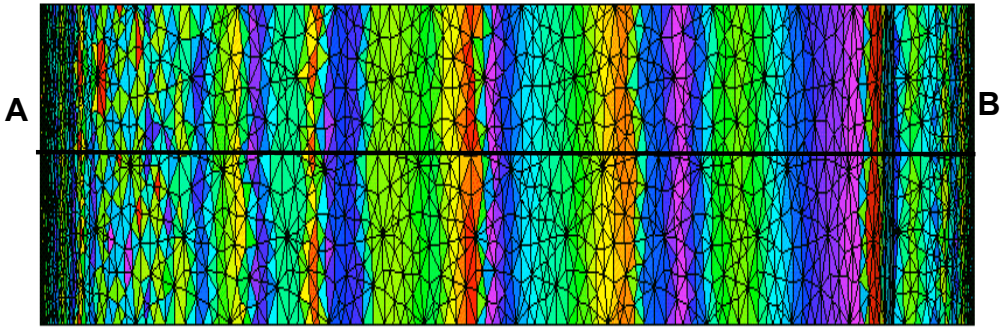
Сохранение симметрии



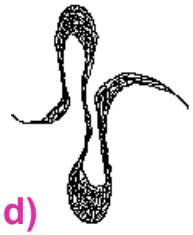
a)



b)



c)

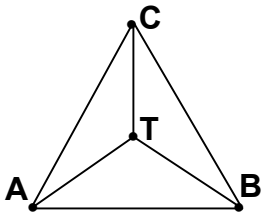


d)

Вид контактной границы в 2D расчете сверху (a), c) - Y=const) и сбоку (b), d) - Z=const) :

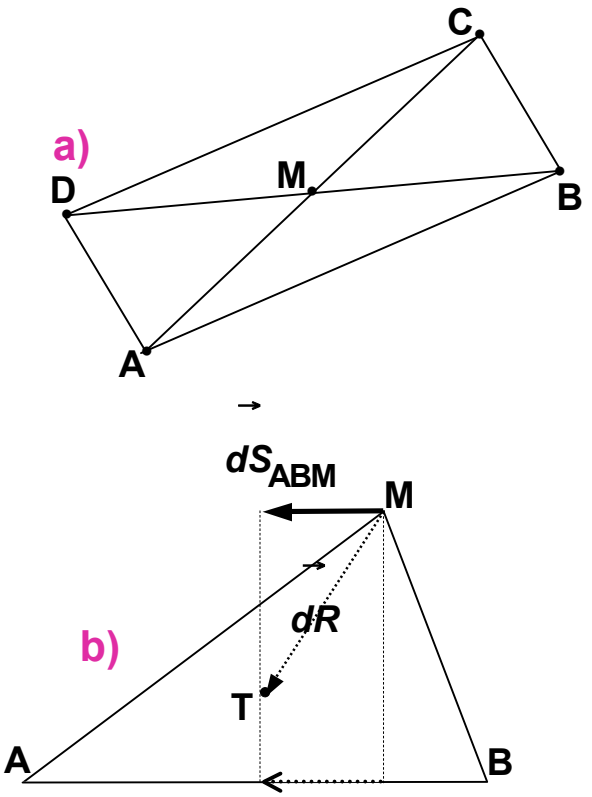
a), b) требование симметрии <u>выполнено</u>;

c), d) требование симметрии <u>не выполнено</u>.



Модификация алгоритма добавления в случае одинаковых ребер – добавление нового узла в «центр» треугольника

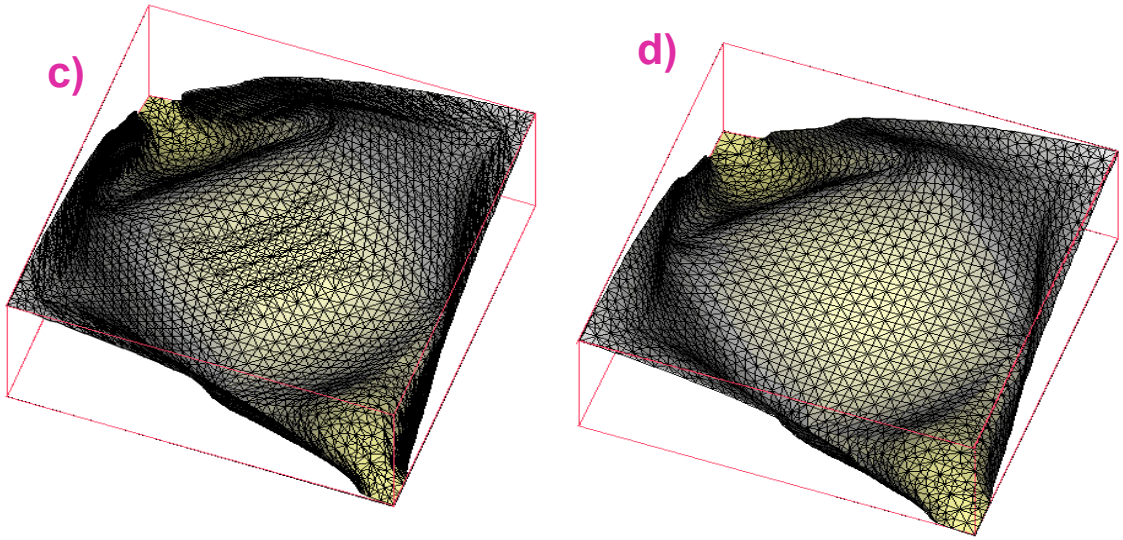
Алгоритм корректировки сетки маркеров



Изменение положения маркера M:

a) некоторый фрагмент сетки маркеров;

b) вектор перемещения $d\vec{S}_{ABM}$ маркера M для треугольника ABM.



3D-вид контактной поверхности, представленной нерегулярной треугольной сеткой маркеров, которая получена:

c) без алгоритма корректировки (маркеров около 6500);

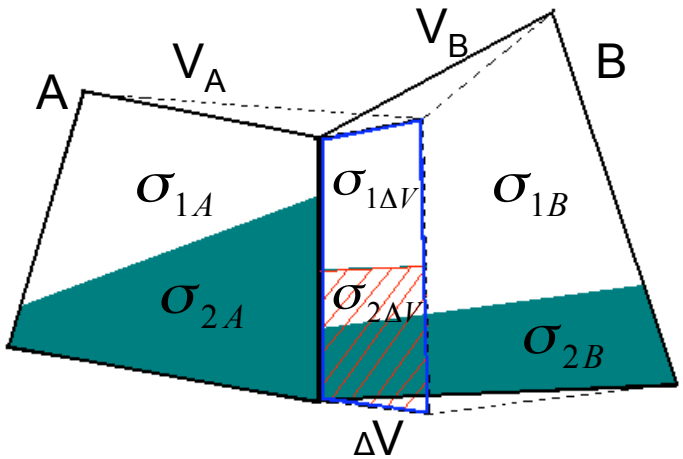
d) с алгоритмом корректировки (маркеров около 2500).

Одно из основных требований - два соседних маркера должны быть либо в одной ячейке сетки области численного интегрирования, либо в соседних.

Для каждого маркера, кроме координат, хранится информация о принадлежности ячейке разностной сетки и о составе веществ, находящихся по разные стороны контактной поверхности, которой принадлежит этот маркер.

Этого достаточно, чтобы **по маркерной информации** определить **новый состав веществ** на следующий счетный шаг в каждой ячейке яруса **до расчета конвективных потоков**.

По составу веществ в каждой ячейке разностной сетки для нового счетного шага можно сделать необходимые корректировки конвективных потоков веществ - **метод маркеров и концентраций**.



Пример потока веществ 1, 2 для ячеек A, B

«- -» - сетка после лагранжева этапа;
«---» - «новая» сетка

$$V_A' = V_A + \Delta V$$
$$V_B' = V_B - \Delta V$$

$$\sigma_{1\Delta V}\ ? \qquad \sigma_{2\Delta V}\ ?$$

метод концентраций:

Если $\sigma_{1A} = 1$, $\sigma_{2A} = 0$: $\sigma_{1\Delta V} = 1$, $\sigma_{2\Delta V} = 0$.

...

Если $\sigma_{1A} > 0$, $\sigma_{2A} > 0$, $\sigma_{1B} > 0$, $\sigma_{2B} > 0$:

$\sigma_{1\Delta V} = ½(\sigma_{1A} + \sigma_{1B})$; $\sigma_{2\Delta V} = ½(\sigma_{2A} + \sigma_{2B})$.

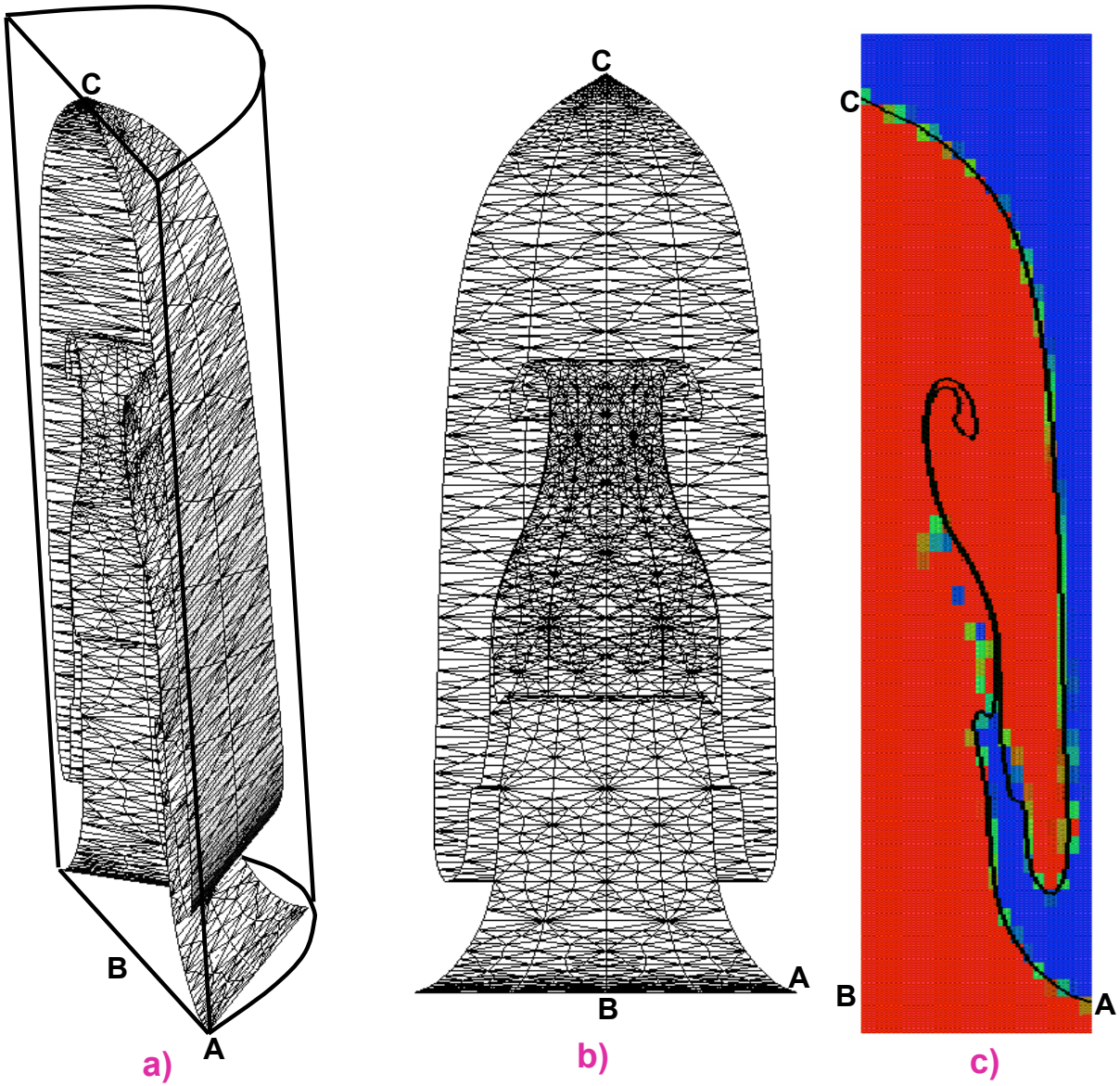
метод маркеров и концентраций:

Если вещества 1 нет в новом составе для B, но есть для A, тогда: $\sigma_{1\Delta V} = 1$, $\sigma_{2\Delta V} = 0$.

...

Если вещества 1, 2 присутствуют в новом составе для B, то как для метода концентраций.

Неустойчивость Релея-Тейлора в двухмерном цилиндрическом случае : развитие регулярного возмущения (ρ_2/ρ_1=10) и положение контактной поверхности, представленной сеткой маркеров

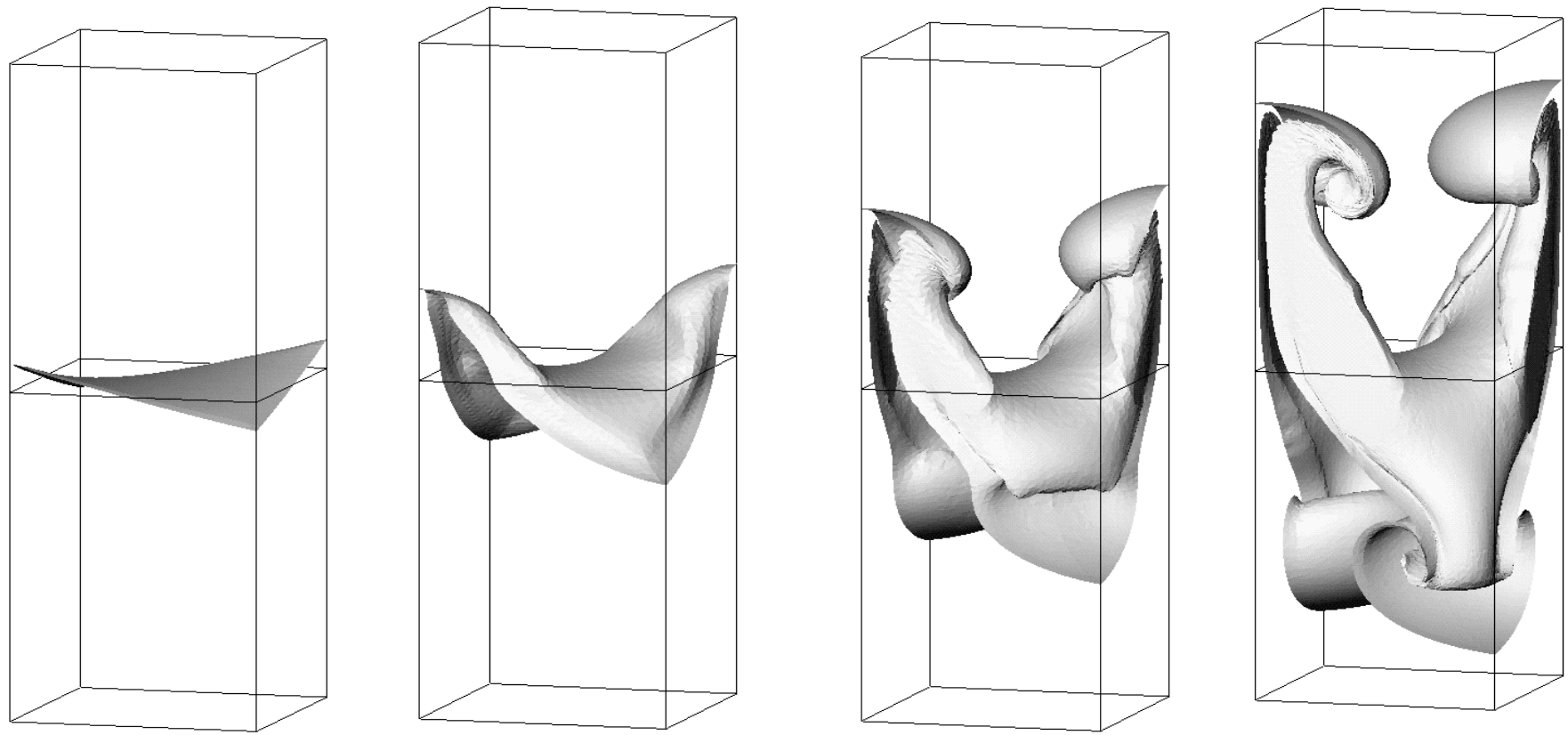


a) 3D-вид неструктурированной треугольной сетки маркеров, которая представляет 2D поверхность раздела;

b) Проекция сетки маркеров на плоскость ABC: демонстрация сохранения цилиндрической симметрии;

c) Поле плотности и контур сетки маркеров на плоскости ABC. Видно соответствие между положением маркеров и смешанными ячейками.

Неустойчивость Релея-Тейлора в трехмерном случае: развитие регулярного возмущения (ρ2 /ρ1=1.1) и положение контактной поверхности, представленной сеткой маркеров



time=1.2 time=1.7 time=2.2 time=2.7

Рассматриваются тестовые задачи:

1. «**перенос объемов веществ в заданном поле скорости**» - очень простые и эффективные двух и трехмерные тесты для отладки потоков веществ на неподвижной эйлеровой сетке. Физические процессы отсутствуют, поскольку скорость любой точки системы на любой момент определена аналитически как функция, зависящая только от координат и времени;

2. «**поступательное движение среды с постоянной скоростью**» - двух и трехмерные тесты для проверки переноса веществ на неподвижной эйлеровой сетке, как вдоль линий сетки, так и под заданным углом. Одно вещество фон, другое имеет определенную форму: квадрат или круг для 2D случая (в сечении по третьему направлению); куб или сфера для 3D случая. Тесты такого типы используются для проверки способности численного метода сохранять форму контактной поверхности;

Все тестовые задачи имеют точное аналитическое решение.

Цель расчетов:

1. сравнение двух алгоритмов представления контактных границ:
   - алгоритма, основанного на методе концентраций;
   - алгоритма, основанного на методе маркеров (т.е. на методе описания границ раздела с помощью нерегулярной сетки маркеров, движение которых согласовано с расчетом конвективных потоков);
2. демонстрация возможностей метода маркеров и концентраций.

Перенос объемов веществ

W.J.Rider, D.B.Kothe. Reconstructing volume tracking. (Перевод с англ.: В.Н.Уваров, М.Г.Шишкина. Метод объемного отслеживания движения границ, Отчет ВНИИТФ, 2001, ПС.01.8041/4)

Начальные данные и условия 2D расчетов:

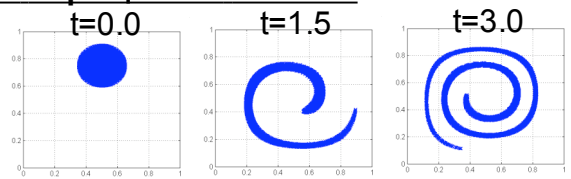
- **Область – куб 1x1x1, покрытый параллелепипедной сеткой. Для разных вариантов число ячеек сетки было: 1) 32x32x2; 2) 64x64x2; 3) 128x128x2.**
- **Шаг по времени: 1) 0.004; 2) 0.002; 3) 0.001**
- **В этот единичный куб (вещество №1) помещен цилиндр (вещество №2). Образующая цилиндра вдоль Z-оси - окружность радиуса 0.15 с центром в точке (0.5, 0.75).**
  Распределение веществ на сетке задавалось с помощью концентраций.
- **Рассматривается деформация этого цилиндра в заданном поле скоростей. Компоненты вектора скорости задаются :**

$$u = -\left(\sin(\pi x)\right)^2 \sin(2\pi y)$$
$$v = \left(\sin(\pi y)\right)^2 \sin(2\pi x)$$
$$w = 0$$

или

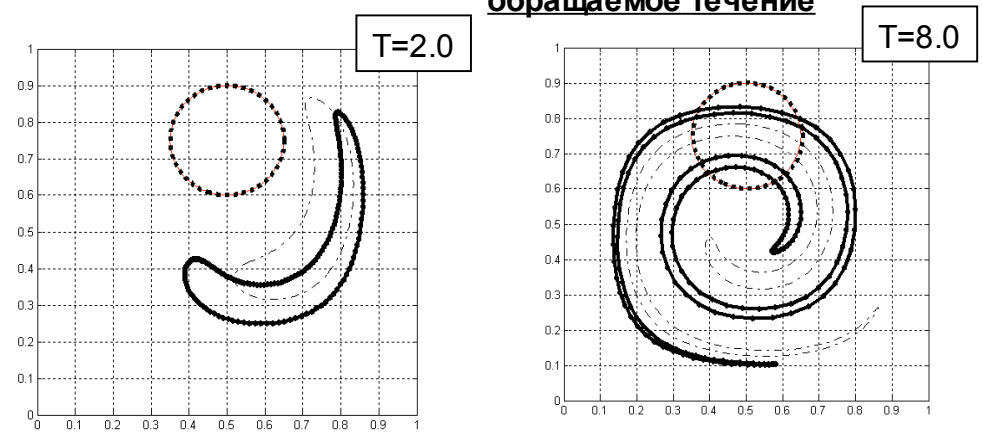
$$u = -\sin^2(\pi x)\sin(2\pi y)\cos(\pi t / T)$$
$$v = \sin^2(\pi y)\sin(2\pi x)\cos(\pi t / T)$$
$$w = 0$$

<u>Стационарное поле скоростей - не обращаемое течение</u>

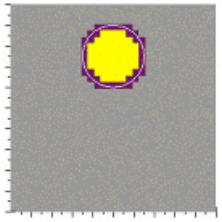
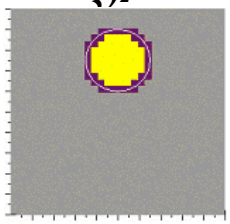
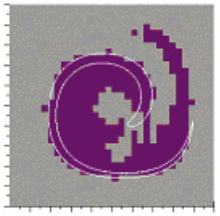
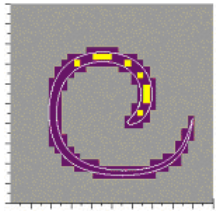
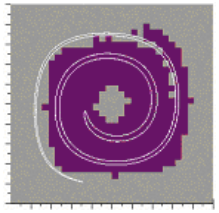
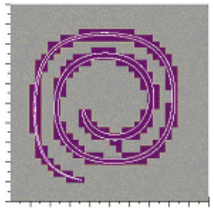


Точное решение (маркированные частицы) - течение не обращается во времени

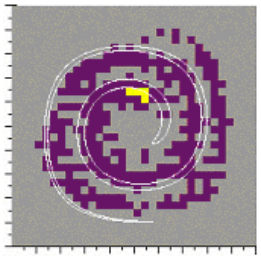
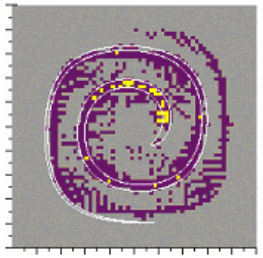
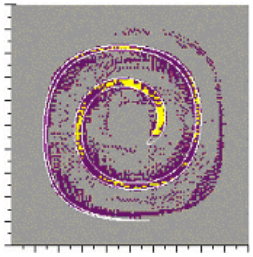
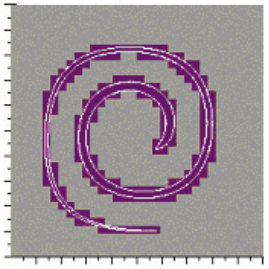
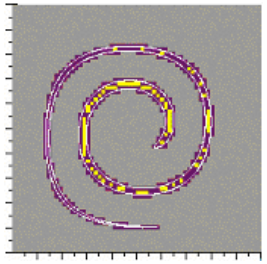
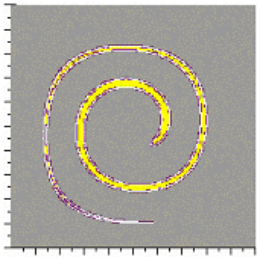
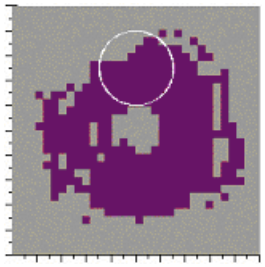
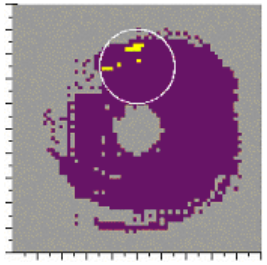
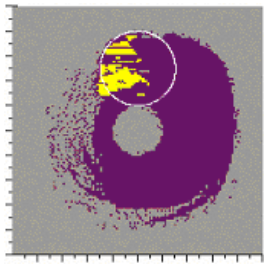
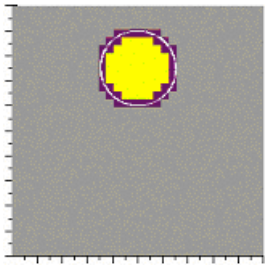
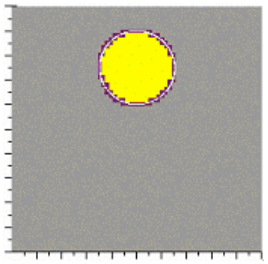
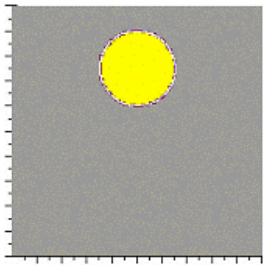
<u>обращаемое течение</u>



Точное решение (течение обращается во времени) на моменты t=0.25T и t=0.75T (пунктир); на момент t=0.5T (жирно)

	МК- **mesh 32^2**	ММ - **mesh 32^2**
t=0.0		
t=1.5		
t=3.0		

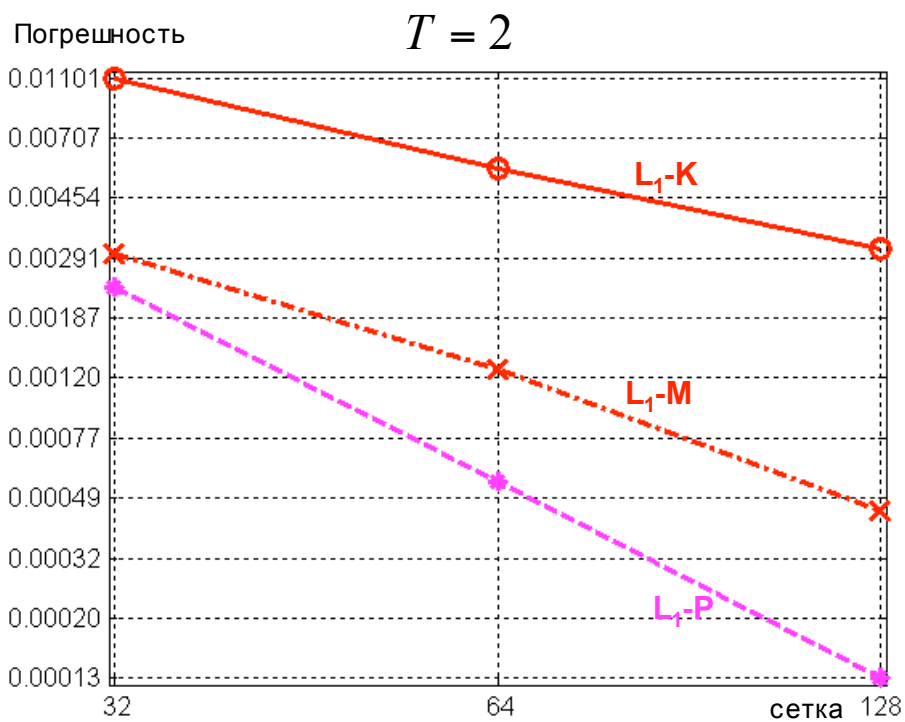
Расположение веществ и поверхности раздела (белая маркерная линия): для t=0.0, t=1.5, t=3.0 в <u>постоянном поле</u> скорости. «МК» - метод концентраций; «ММ» - метод маркеров

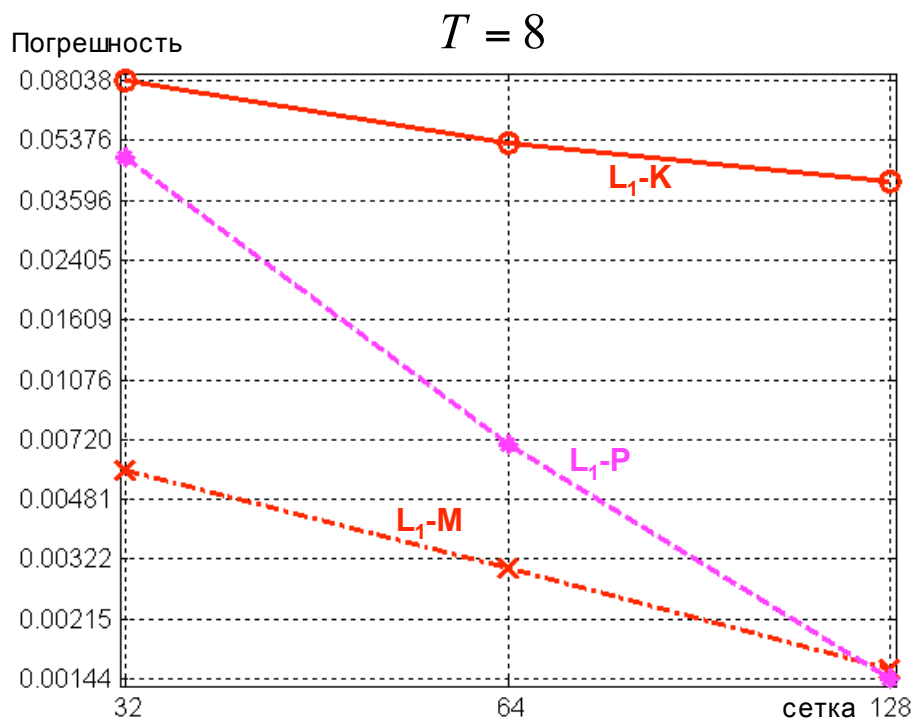
	mesh 32^2	**mesh 64^2**	**mesh 128^2**
МК t=4.0			
ММ t=4.0			
МК t=8.0			
ММ t=8.0			

Расположение веществ и поверхности раздела (белая маркерная линия) для t=4.0 и t=8.0 <u>в обращаемом поле скорости с периодом T=8.0</u> на разных расчетных сетках: «МК» - метод концентраций; «ММ» - метод маркеров

Погрешности при 2D расчетах цилиндра, помещенного в обращаемое по времени течение с периодом *T (расчеты на сходимость)*

$$E^{L_1} = \sum_{grid,k=fix} V_{i,j,k} \left| \sigma_{2i,j,k}^{\text{computed}} - \sigma_{2i,j,k}^{\text{exact}} \right|$$





Порядок сходимости в L_1 :
методом концентраций ~0.8; методом маркеров ~1.2

Ï óñò ü $q_1 = h_1^{\alpha}$ *è* $q_2 = h_2^{\alpha}$,
ò î ãäà $\alpha = \log(q_1/q_2)/\log(h_1/h_2)$,
ãäå q *– ï î ãðåø í î ñò ü,* h *– ø àã ñåò êè*

Начальные данные и условия 3D расчетов:

- **Область – куб 1x1x1, покрытый параллелепипедной сеткой. Число ячеек сетки - 32x32x32.**

- **В этот единичный куб (вещество №1) помещено сферическое жидкостное тело (вещество №2). Радиус сферы - 0.15, центр - в точке (0.5, 0.75, 0.75). Распределение веществ на прямоугольной сетке задавалось с помощью концентраций.**

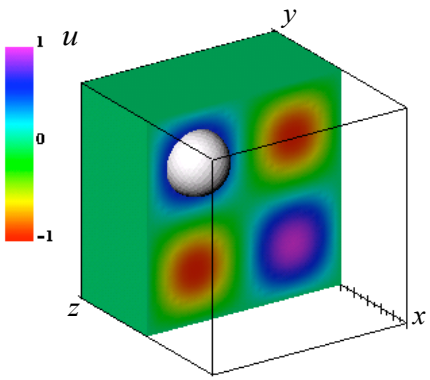
- **Шаг по времени был постоянным: 0.004**

- **Рассматривается деформация этого тела в заданном поле скоростей. Компоненты вектора скорости задаются :**

$$u = \left(\sin(\pi x)\right)^2 \sin(2\pi y)\sin(2\pi z)\cos(\pi t/T)$$

$$v = \left(\sin(\pi y)\right)^2 \sin(2\pi x)\sin(2\pi z)\cos(\pi t/T)$$

$$w = -2\left(\sin(\pi z)\right)^2 \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\cos(\pi t/T).$$



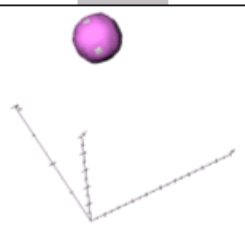
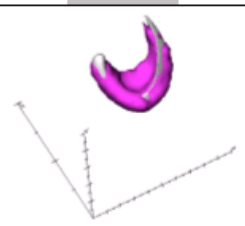
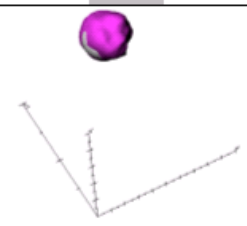
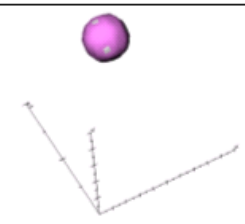
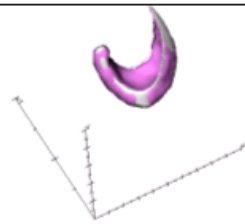
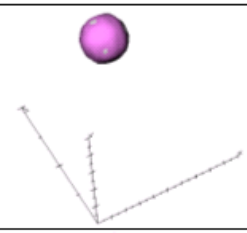
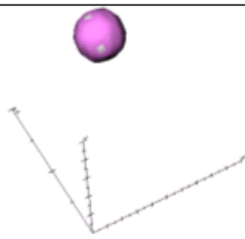
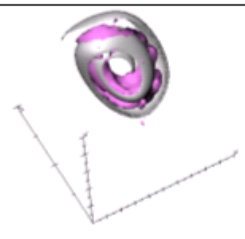
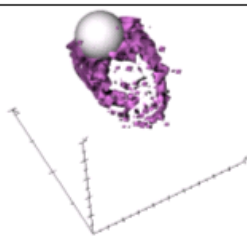
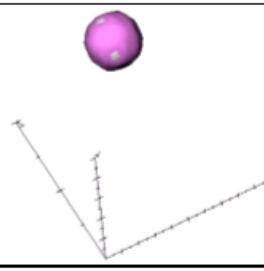
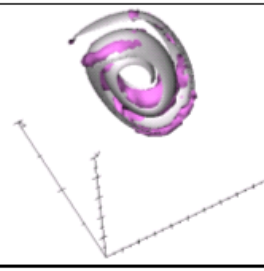
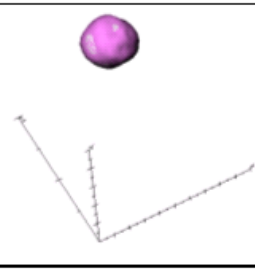
Распределение компоненты скорости вдоль среза x=0.5 и положение сферы на начальный момент времени

1. Выполнено условие «несжимаемости»:

$$\partial u/\partial x + \partial v/\partial y + \partial w/\partial z = 0$$

2. На границах системы нет движения, так как компоненты вектора скорости равны нулю

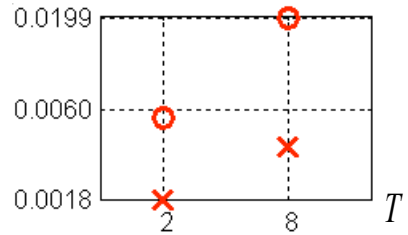
3. Система возвращается к начальному состоянию при $t = T$

Задача	$t = 0.0$	$t = 0.5T$	$t = T$
$T = 2$, МК, $\sigma = 0.23$			
$T = 2$, ММ, $\sigma = 0.23$			
$T = 8$, МК, $\sigma = 0.23$			
$T = 8$, ММ, $\sigma = 0.23$			

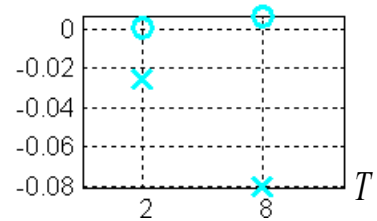
Расположение изоповерхности (оттенки темно-красного цвета), полученной для $\sigma = 0.23$, и поверхности раздела (представлена маркерной поверхностью - оттенки серого цвета) на разные моменты времени для сферы, помещенной и в обращаемое по времени течение с периодом T на расчетах: МК - методом концентраций; ММ - методом маркеров

Погрешности в 3D расчетах на *t*=*T*. Течение обращаемое по времени с периодом *T*:
O - метод концентраций;
X - метод маркеров

Погрешность L_1

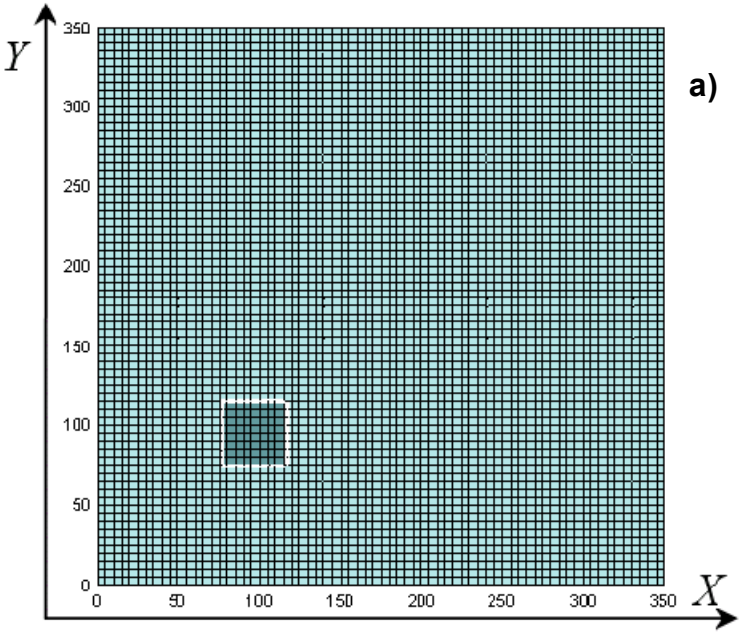


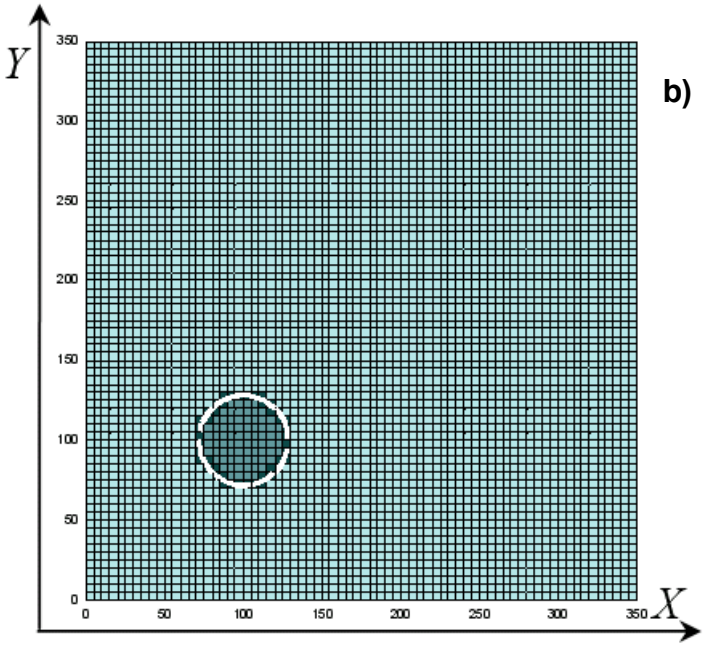
$$\Delta V_2 = (V_2^{\text{computed}} - V_2^{\text{exact}}) / V_2^{\text{exact}}$$



Поступательное движение среды с постоянной скоростью

В тестах рассматривается движение двух несжимаемых, невязких, нетеплопроводных веществ с постоянной скоростью относительно неподвижной эйлеровой сетки





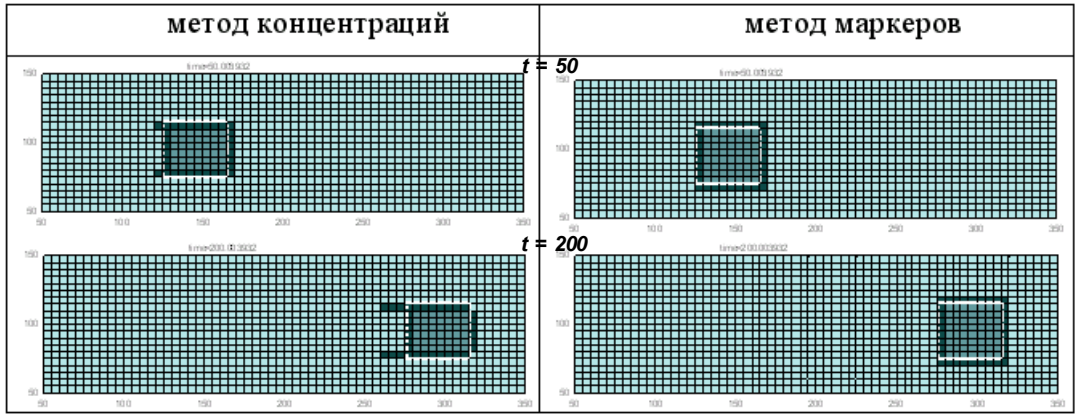
Начальная геометрия и расположение веществ:

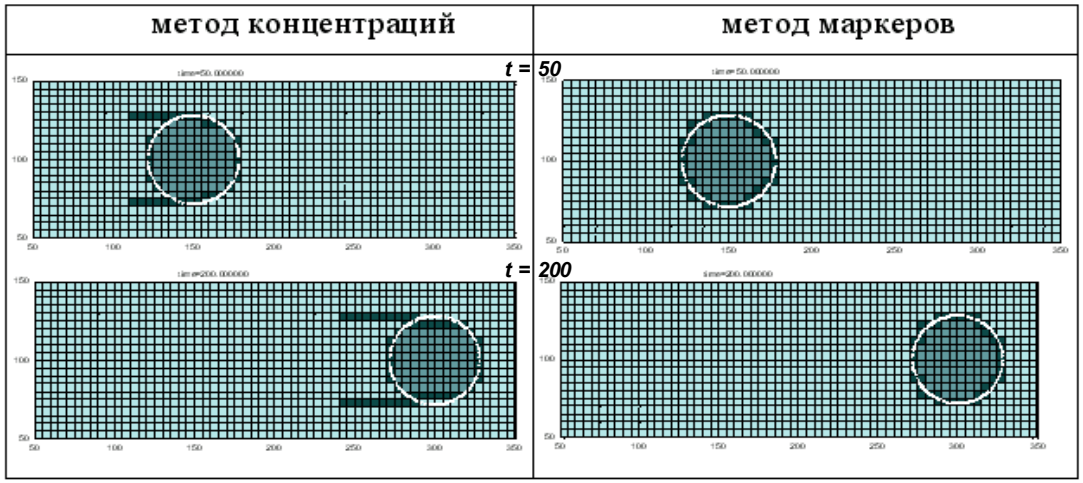
a) для квадрата или куба; b) для круга или сферы.

Сетка маркеров отмечена белым цветом

Начальные данные и условия 2D расчетов:

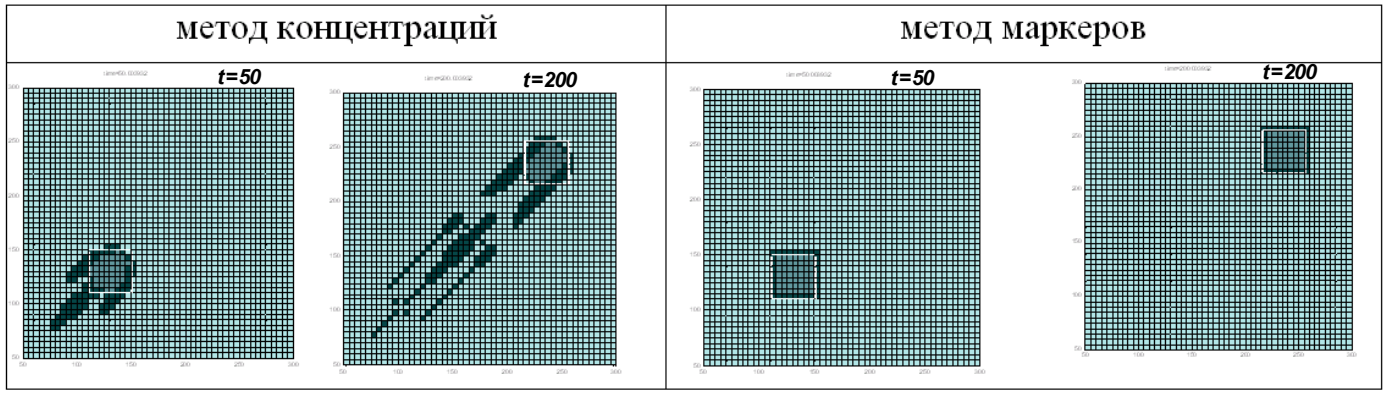
- **Область – параллелепипед 350x350x15, покрытый кубической сеткой.**
- **Число ячеек сетки - 70x70x3.**
- **Второе вещество цилиндр, образующая: 1) квадрат - 40x40; 2) круг – R=25.**
- **На границах вдоль оси *X* задавалось свободное течение, другие границы – жесткие стенки.**
- **Перепада плотностей нет.**
- **Начальная скорость веществ: [1, 0, 0].**
- **Шаг по времени: 0.1, т.е.** $|\vec{u}|\,\tau/h \approx 0.01$
- **УРС: P = 0.**

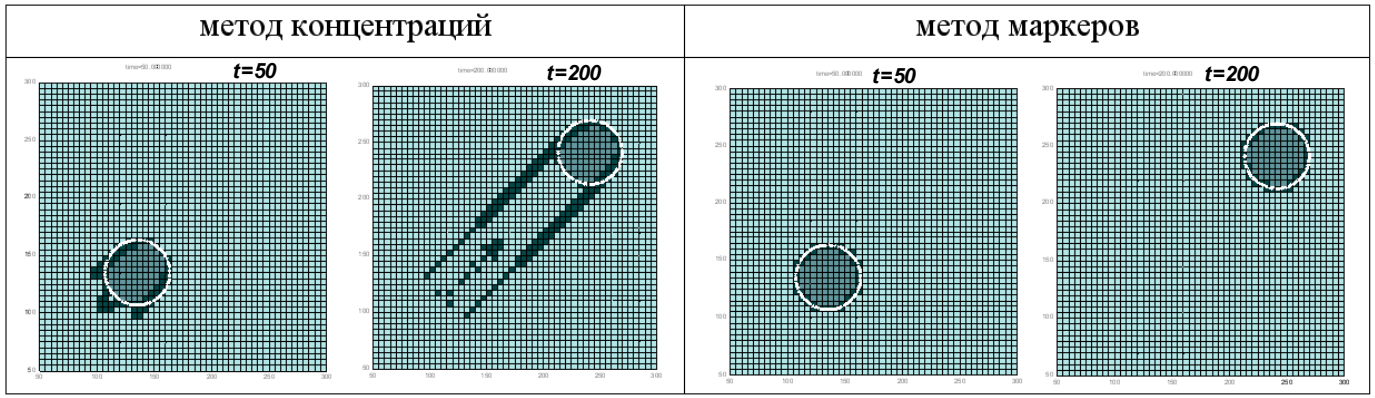




Начальные данные и условия 2D расчетов:

- **Область – параллелепипед 350x350x15, покрытый кубической сеткой.**
- **Число ячеек сетки - 70x70x3.**
- **Второе вещество цилиндр, образующая: 1) квадрат - 40x40; 2) круг – R=25.**
- **На границах вдоль осей *X* и Y задавалось свободное течение, другие границы – жесткие стенки.**
- **Перепада плотностей нет.**
- **Начальная скорость веществ:** $[\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2, 0]$
- **Шаг по времени: 0.1, т.е.** $|\vec{u}|\,\tau/h \approx 0.01$
- **УРС:** P **= 0.**

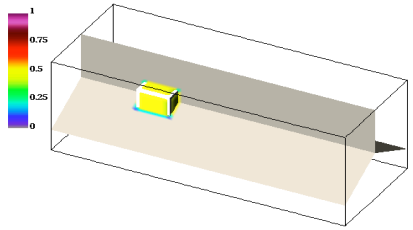
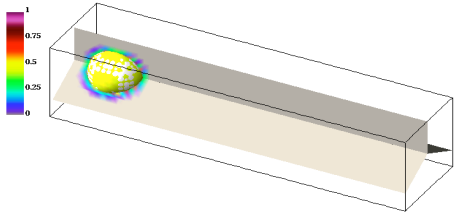
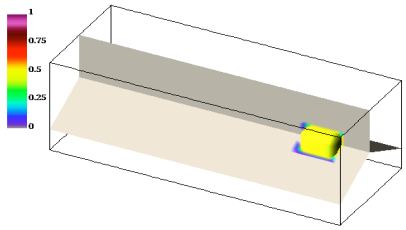
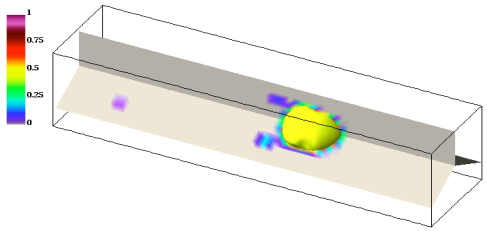
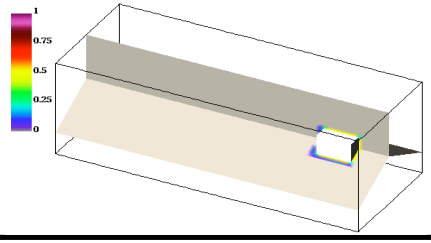
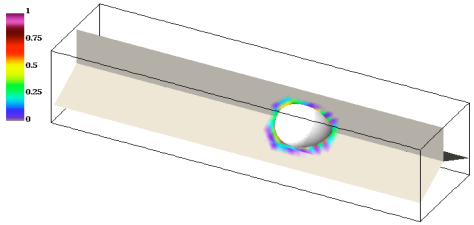




Начальные данные и условия 3D расчетов:

- **Область – параллелепипед, покрытый кубической сеткой, размером: 1) 350x140x140; 2) 2x0.5x0.5.**
- **Число ячеек сетки: 1) 70x28x28; 2) 64x16x16.**
- **Второе вещество: 1) куб размером 40x40x40 (8x8x8 ячеек);**
  2) сфера с радиусом 0.15 и с центром в точке (0.25, 0.25, 0.25).
- **На границах вдоль оси *X* задавалось свободное течение, другие границы – жесткие стенки.**
- **Перепад плотностей: 1/10.**
- **Начальная скорость веществ: [1, 0, 0].**
- **Шаг по времени: 1) 0.001÷0.1 , т.е** $|\vec{u}|\,\tau/h \approx 0.0001 \div 0.01$ **2) 0.0001÷0.0045, т.е** $|\vec{u}|\,\tau/h \approx 0.002 \div 0.08$
- **УРС: P = 0.**

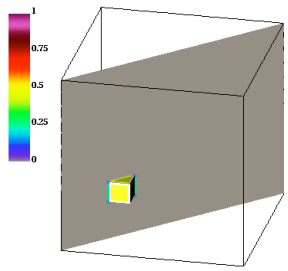
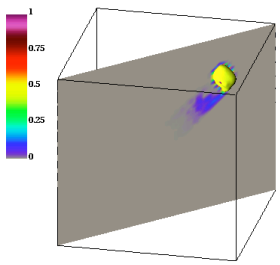
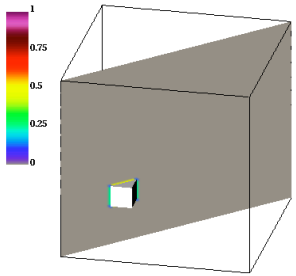
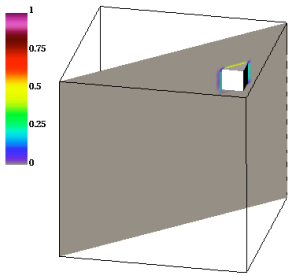
Распределение доли объема вещества куба и сферы при течении вдоль линий сетки на трех срезах счетной области. Положение границы раздела: белым цветом представлена сетка маркеров, желтым – изоповерхность по $\sigma = 0.43$

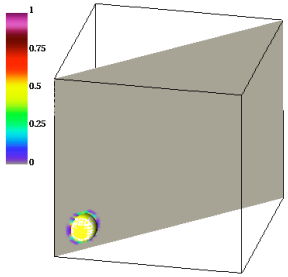
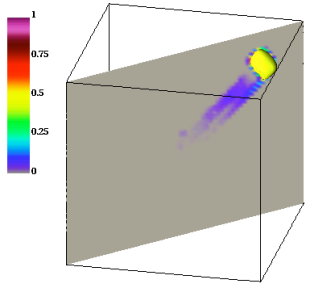
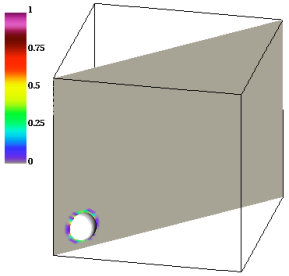
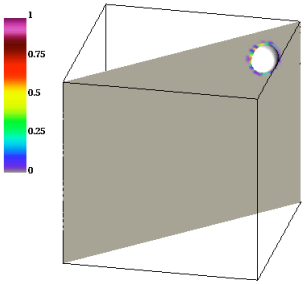
Задача	прямолинейное движение куба вдоль линий сетки	прямолинейное движение сферы вдоль линий сетки
МК, ММ	 $t = 0$	 $t = 0$
МК	 $t = 200$	 $t = 1$
ММ	 $t = 200$	 $t = 1$

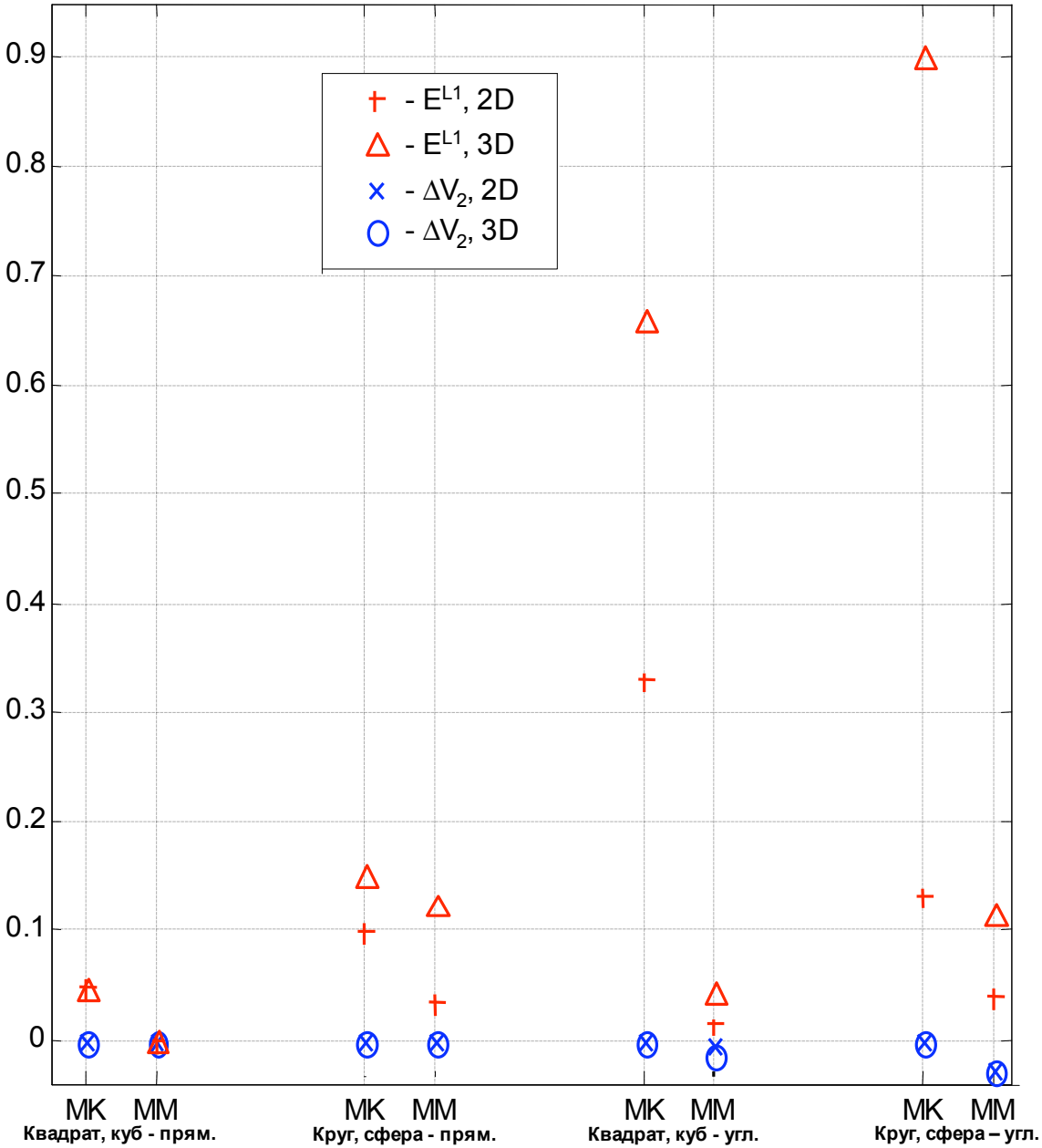
Начальные данные и условия 3D расчетов:

- Область – параллелепипед, покрытый кубической сеткой, размером: 1) 350x350x350; 2) 2x2x2.
- Число ячеек сетки: 1) 70x70x70; 2) 64x64x64.
- второе вещество:
  1) куб размером 40x40x40 (8x8x8 ячеек);
  2) сфера с радиусом 0.15 и с центром в точке (0.25, 0.25, 0.25).
- На границах задавалось свободное течение.
- Перепад плотностей: 1/10.
- Начальная скорость веществ: [0.57735, 0.57735, 0.57735].
- Шаг по времени: 1) 0.001÷0.1, т.е $|\vec{u}|\,\tau/h \approx 0.0001 \div 0.01$ 2) 0.0001÷0.0045, т.е. $|\vec{u}|\,\tau/h \approx 0.002 \div 0.08$
- УРС: P = 0.

Распределение доли объема вещества куба и сферы на диагональном срезе счетной области (течение под углом к линиям сетки). Положение границы раздела: белым цветом представлена сетка маркеров, желтым – изоповерхность по $\sigma = 0.43$

	$t = 0$	$t = 300$
МК		
ММ		

	$t = 0.0$	$t = 2.5$
МК		
ММ		



Погрешность

$$E^{L_1} = \frac{1}{V_2^{exact}} \sum_{grid} V_{i,j,k} \left| \sigma_{2i,j,k}^{\text{computed}} - \sigma_{2i,j,k}^{\text{exact}} \right|$$

Объем

$$\Delta V_2 = (V_2^{\text{computed}} - V_2^{\text{exact}}) / V_2^{\text{exact}}$$

Заключение

—Метод маркеров использует больше ресурсов вычислителя. Расчетное время возрастает (до 20%).

+ Метод маркеров более точно передает форму и положение контактной границы.

+ Метод маркеров дает меньшую погрешность в распределении доли объем веществ.

= Оба метода согласуются и дают хорошие результаты