



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 48 за 2017 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Гасилов В.А., Круковский А.Ю.,
Цыгвинцев И.П.

Устойчивый алгоритм
согласования потоков
импульса и кинетической
энергии при перестройке
сетки

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Гасилов В.А., Круковский А.Ю., Цыгвинцев И.П. Устойчивый алгоритм согласования потоков импульса и кинетической энергии при перестройке сетки // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 48. 11 с. doi:[10.20948/prepr-2017-48](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-48)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-48>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

В.А.Гасилов, А.Ю.Круковский, И.П.Цыгвинцев

**Устойчивый алгоритм согласования
поточков импульса и кинетической
энергии при перестройке сетки**

Москва — 2017

Гасилов В.А., Круковский А.Ю., Цыгвинцев И.П.

Устойчивый алгоритм согласования потоков импульса и кинетической энергии при перестройке сетки

В работе описывается численный метод решения нелинейной системы уравнений, используемой в методике согласования потоков массы и импульса при перестройке сетки. Аналитически показана и продемонстрирована на модельном примере квадратичная сходимость алгоритма по балансу кинетической энергии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №16-11-10174.

Gasilov V.A., Krukovskiy A.Yu., Tsygvintsev I.P.

Stable algorithm for matching the fluxes of momentum and kinetic energy during remeshing

The paper describes a numerical method for solving a non-linear system of equations used in the technique of matching the fluxes of mass and momentum in the remeshing procedure. The quadratic convergence of the algorithm on the kinetic energy balance is analytically shown and demonstrated on the model example.

The study was supported by RSF grant No. 16-11-10174.

Оглавление

Введение	3
Алгоритм	5
Модельная задача	7
Список литературы.....	11

Введение

Одним из классических подходов к расчёту широкого класса одномерных газодинамических задач является использование полностью консервативных конечно-разностных схем в лагранжевых переменных [1]. Второй порядок точности по шагу сетки в подобных схемах достигается путём аппроксимации скоростей в узлах, а термодинамических характеристик вещества — в ячейках.

Однако при обобщении этой методики на задачи высшей размерности возникают проблемы, связанные с ухудшением качества разностной сетки. Ячейки теряют выпуклость, возникают самопересечения, отрицательные объёмы и тому подобные дефекты сетки. Решением здесь является использование процедуры коррекции сетки (remeshing) [2], при которой производится пересчёт всех величин на новую сетку. В простейшем случае на каждом шаге газодинамического расчёта сетка просто возвращается в своё изначальное положение — расчёт осуществляется в "эйлеровом" режиме.

При этом нетривиальная задача — при перестройке сетки обеспечить сохранение не только массы, энергии и импульса, но и соотношений между внутренней и кинетической энергиями плазмы, а также между отдельными компонентами кинетической энергии. Для решения такой задачи необходима процедура согласования потоков импульса со значениями скоростей и потоками массы, обеспечивающая сохранение кинетической энергии. В предыдущих публикациях [3], [4] нами уже формулировалась соответствующая методика. Напомним вкратце основные идеи, заложенные в её основу.

Предположим, что мы тем или иным способом до перестройки сетки аппроксимировали массу M_i^0 в те же элементы, в которых определена скорость v_i^0 (то есть в ячейки сетки или в приузловые объёмы), и рассчитали потоки массы φ_{ij} из j -го элемента в i -й. Один из способов аппроксимации потоков массы между приузловыми объёмами подробно рассматривался в [4] и [5]. В данной работе мы на этом вопросе не останавливаемся.

Масса i -го элемента после перестройки сетки составит

$$M_i = M_i^0 + \sum_j \varphi_{ij}.$$

Через неизвестные потоки импульса f_{ij} скорость после перестройки сетки v_i выражается следующим образом:

$$M_i v_i = M_i^0 v_i^0 + \sum_j f_{ij}.$$

Законы сохранения массы и импульса требуют выполнения равенств $\varphi_{ij} = -\varphi_{ji}$, $f_{ij} = -f_{ji}$ для всех потоков массы и импульса. Выразим изменение кинетической энергии в i -м элементе через значения скоростей и потоков:

$$\begin{aligned}\delta(E_{kin})_i &= \frac{M_i v_i^2}{2} - \frac{M_i^0 (v_i^0)^2}{2} = \frac{1}{2} (M_i v_i v_i - M_i v_i v_i^0 + M_i v_i v_i^0 - M_i^0 v_i^0 v_i + M_i^0 v_i^0 v_i - M_i^0 v_i^0 v_i^0) = \\ &= 0.5 \left[(v_i + v_i^0) \delta(Mv)_i - v_i v_i^0 \delta M_i \right] = 0.5 \cdot \sum_j \left[(v_i + v_i^0) f_{ij} - v_i v_i^0 \varphi_{ij} \right] = \sum_j F_{ij}.\end{aligned}$$

Достаточным условием сохранения кинетической энергии является отсутствие её дисбаланса для каждой грани:

$$F_{ij} = -F_{ji}.$$

Это условие эквивалентно следующей связи между потоками массы и импульса:

$$\begin{aligned}(v_i + v_i^0) f_{ij} - v_i v_i^0 \varphi_{ij} &= -(v_j + v_j^0) f_{ji} + v_j v_j^0 \varphi_{ji}, \\ (v_i + v_i^0 - v_j - v_j^0) f_{ij} &= (v_i v_i^0 - v_j v_j^0) \varphi_{ij}.\end{aligned}$$

В результате для определения значений скоростей после перестройки сетки получаем следующую нелинейную систему уравнений:

$$\begin{aligned}M_i v_i &= M_i^0 v_i^0 + \sum_j f_{ij}, \\ f_{ij} &= \varphi_{ij} \frac{v_i v_i^0 - v_j v_j^0}{v_i + v_i^0 - v_j - v_j^0}.\end{aligned}\tag{1}$$

Для решения этой системы ранее использовались простые итерации. Этот алгоритм имеет ряд недостатков. Несмотря на то что условие устойчивости итераций в линейном приближении достаточно мягкое [5], на практике сходимости итераций по балансу кинетической энергии до машинной точности почти никогда не наблюдается. Более того, в отдельных случаях алгоритм приводит к нефизическому "шашечному" распределению скоростей. Это можно исправить, ограничивая область применения методики с помощью различных критериев, однако устойчивая работа алгоритма всё равно не гарантируется: требуется периодически анализировать результаты расчёта и по необходимости регулировать параметры, в частности шаг по времени. Очевидно, что подобный подход сильно затрудняет проведение широкомасштабного вычислительного эксперимента.

В настоящей работе описывается устойчивый алгоритм решения соответствующих уравнений, точно сохраняющий импульс и позволяющий достичь любой заданной точности по сохранению кинетической энергии. Основная его идея основывается на том, что поток массы между элементами сетки всегда можно сделать малым по сравнению с массами самих элементов, разбив процедуру перестройки сетки на ряд этапов. Таким образом, задача имеет малый параметр, и возможна её линеаризация с использованием аппарата теории возмущений.

Алгоритм

Предположим, что потоки массы во всех элементах сетки малы по сравнению с массами самих элементов:

$$\varepsilon = \max_i \sum_j \frac{|\varphi_{ij}|}{M_i^0} \ll 1.$$

Построим теорию возмущений по параметру ε . В нулевом порядке

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{M_i}\right)^{(0)} &= \frac{1}{M_i^0} (1 + O(\varepsilon)), \\ (f_{ij})^{(0)} &= M_i^0 \cdot O(\varepsilon), \\ v_i^{(0)} &= v_i^0 + v_i^0 \cdot O(\varepsilon). \end{aligned}$$

В первом порядке:

$$\begin{aligned} (f_{ij})^{(1)} &= \varphi_{ij} \frac{v_i^{(0)} v_i^0 - v_j^{(0)} v_j^0}{v_i^{(0)} + v_i^0 - v_j^{(0)} - v_j^0} + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^2) = \varphi_{ij} \frac{v_i^0 + v_j^0}{2} + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^2), \\ v_i^{(1)} &= v_i^0 + \delta v_i^{(1)} + v_i^0 \cdot O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

В явном виде приращения скоростей $\delta v_i^{(1)}$ мы здесь не выписываем. Во втором порядке теории возмущений поток импульса равен

$$\begin{aligned} (f_{ij})^{(2)} &= \varphi_{ij} \frac{v_i^{(1)} v_i^0 - v_j^{(1)} v_j^0}{v_i^{(1)} + v_i^0 - v_j^{(1)} - v_j^0} + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^3) = \varphi_{ij} \frac{v_i^0 v_i^0 - v_j^0 v_j^0 + v_i^0 \delta v_i^{(1)} - v_j^0 \delta v_j^{(1)}}{2(v_i^0 - v_j^0) + \delta v_i^{(1)} - \delta v_j^{(1)}} + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^3) = \\ &= \varphi_{ij} \left(\frac{v_i^0 + v_j^0}{2} + \frac{v_i^0 \delta v_i^{(1)} - v_j^0 \delta v_j^{(1)}}{2(v_i^0 - v_j^0)} - \frac{(v_i^0 v_i^0 - v_j^0 v_j^0)(\delta v_i^{(1)} - \delta v_j^{(1)})}{4(v_i^0 - v_j^0)^2} \right) + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^3) = \\ &= \varphi_{ij} \left(\frac{v_i^0 + v_j^0}{2} + \frac{v_i^0 \delta v_i^{(1)} - v_j^0 \delta v_j^{(1)}}{2(v_i^0 - v_j^0)} - \frac{(v_i^0 + v_j^0)(\delta v_i^{(1)} - \delta v_j^{(1)})}{4(v_i^0 - v_j^0)} \right) + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^3) = \\ &= \varphi_{ij} \left(\frac{v_i^0 + v_j^0}{2} + \frac{2v_i^0 \delta v_i^{(1)} - 2v_j^0 \delta v_j^{(1)} - v_i^0 \delta v_i^{(1)} + v_j^0 \delta v_j^{(1)} - v_j^0 \delta v_i^{(1)} + v_i^0 \delta v_j^{(1)}}{4(v_i^0 - v_j^0)} \right) + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^3) = \\ &= \varphi_{ij} \left(\frac{v_i^0 + v_j^0}{2} + \frac{v_i^0 \delta v_i^{(1)} - v_j^0 \delta v_j^{(1)} - v_j^0 \delta v_i^{(1)} + v_i^0 \delta v_j^{(1)}}{4(v_i^0 - v_j^0)} \right) + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^3) = \\ &= \varphi_{ij} \left(\frac{v_i^0 + v_j^0}{2} + \frac{\delta v_i^{(1)} + \delta v_j^{(1)}}{4} \right) + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^3) = \varphi_{ij} \frac{v_i^0 + v_j^0 + v_i^{(1)} + v_j^{(1)}}{4} + M_i^0 \cdot O(\varepsilon^3). \end{aligned}$$

Таким образом, система уравнений (2), имеющая вид

$$\begin{aligned} M_i v_i &= M_i^0 v_i^0 + \sum_j f_{ij}, \\ f_{ij} &= \varphi_{ij} \frac{v_i + v_i^0 + v_j + v_j^0}{4}, \end{aligned} \quad (2)$$

отличается от системы (1) на величину третьего порядка малости по ε . Продемонстрируем это, вычислив дисбаланс кинетической энергии на грани для системы (2):

$$\begin{aligned} F_{ij} + F_{ji} &= 0.5 \left[(v_i + v_i^0) f_{ij} - v_i v_i^0 \varphi_{ij} + (v_j + v_j^0) f_{ji} - v_j v_j^0 \varphi_{ji} \right] = \\ &= 0.5 \left[f_{ij} (v_i + v_i^0 - v_j - v_j^0) - \varphi_{ij} (v_i v_i^0 - v_j v_j^0) \right] = \frac{\varphi_{ij}}{8} \left[(v_i + v_i^0)^2 - (v_j + v_j^0)^2 - 4(v_i v_i^0 - v_j v_j^0) \right] = \\ &= \frac{\varphi_{ij}}{8} \left[(v_i - v_i^0)^2 - (v_j - v_j^0)^2 \right] = \frac{1}{8} \left[\varphi_{ij} (v_i^0 \cdot O(\varepsilon))^2 + \varphi_{ji} (v_j^0 \cdot O(\varepsilon))^2 \right] = \left[(E_{kin}^0)_i + (E_{kin}^0)_j \right] \cdot O(\varepsilon^3). \end{aligned}$$

Как и ожидалось, он имеет третий порядок малости по ε , а значит, и интегральный дисбаланс $\delta E_{kin} \sim E_{kin}^0 \cdot O(\varepsilon^3)$.

Система (2), аналогично системе (1), записана в потоковой форме и строго сохраняет импульс. При этом система уравнений (2) линейная и может быть представлена в виде

$$\sum_j A_{ij} v_j = F_i,$$

где

$$\begin{aligned} F_i &= M_i^0 v_i^0 + \sum_j \varphi_{ij} \frac{v_i^0 + v_j^0}{4}, \\ A_{ij} &= (i \neq j) = -\frac{\varphi_{ij}}{4}, \\ A_{ii} &= M_i - \frac{1}{4} \sum_j \varphi_{ij} = \frac{3}{4} M_i + \frac{1}{4} M_i^0. \end{aligned}$$

Оценим диагональное преобладание матрицы A :

$$|A_{ii}| - \sum_j |A_{ij}| > \frac{M_i^0}{4} - \frac{M_i^0}{4} \sum_j \frac{|\varphi_{ij}|}{M_i^0} = \frac{M_i^0}{4} \left(1 - \sum_j \frac{|\varphi_{ij}|}{M_i^0} \right) \geq \frac{M_i^0}{4} (1 - \varepsilon).$$

Таким образом, условие $\varepsilon < 1$ — достаточное условие диагонального преобладания матрицы A . Что делать, когда условие $\varepsilon < 1$ не выполняется и как добиться лучшего выполнения закона сохранения энергии, в идеале — до машинной точности?

Решением является разбиение всей процедуры пересчёта скоростей на N шагов, на каждом из которых потоки массы в N раз меньше, чем исходные. Дисбаланс кинетической энергии на каждом шаге $\delta E_{kin}^n \sim E_{kin}^{n-1} \cdot O(\varepsilon^3 / N^3)$, а в целом в результате процедуры $\delta E_{kin} \sim E_{kin}^0 \cdot O(\varepsilon^3 / N^2)$, то есть сходимость по числу шагов имеет квадратичный характер. Сходимость по числу операций быстрее, так как чем больше N , тем лучше обусловленность матрицы A . Соответствующая пошаговая схема имеет вид

$$\begin{aligned} M_i^n v_i^n &= M_i^{n-1} v_i^{n-1} + \sum_j f_{ij}^n, \\ f_{ij}^n &= \frac{\varphi_{ij}}{N} \frac{v_i^n + v_i^{n-1} + v_j^n + v_j^{n-1}}{4}, \\ M_i^n &= M_i^{n-1} + \sum_j \frac{\varphi_{ij}}{N}. \end{aligned} \quad (3)$$

При этом на первом шаге $v_i^{1-1} = v_i^0$, $M_i^{1-1} = M_i^0$, а после N -го получаем $v_i = v_i^N$. Для решения системы (3) на n -м шаге в качестве начального приближения используются значения скорости, полученные на $(n-1)$ -м шаге. Так как правильный выбор N гарантирует диагональное преобладание матрицы A^n , решение может осуществляться простыми итерациями Якоби.

Рассмотрим подробнее вопрос постановки граничных условий. Простейшим является граничное условие отражения при аппроксимации скоростей в ячейках. В этом случае поток массы через отражающую границу отсутствует и дополнительная модификация матрицы и правой части не требуется: соответствующие вклады и так равны нулю.

В случае условия отражения при аппроксимации скоростей в узлах, как и в случае разбиения расчётной области на домены, модификация системы (3) также не требуется, но после каждой итерации необходимо обновлять значения скорости в отражённых или обменных узлах, применяя соответствующие граничные условия или процедуру обменов информацией между доменами.

В случае свободного выхода вещества целесообразно аппроксимировать поток импульса явно: $f_{ij} = \varphi_{ij} v_i^0$, $f_{ij}^n = \varphi_{ij} v_i^0 / N$. При этом поток кинетической энергии через соответствующую грань равен $\delta E_{ij} = \varphi_{ij} (v_i^0)^2 / 2$, а элементы матрицы и правой части F^n системы уравнений (3) модифицируются следующим образом: $A_{ij}^n \rightarrow 0$, $A_{ii}^n \rightarrow A_{ii}^n + \frac{\varphi_{ij}}{4N}$, $F_i^n \rightarrow F_i^n + \frac{\varphi_{ij} v_i^0}{N} - \frac{\varphi_{ij} (v_i^{n-1} + v_j^{n-1})}{4N}$.

Модельная задача

Продемонстрируем ряд качеств предлагаемого метода на примере аналитически заданного распределения масс, потоков и скоростей. В качестве такого распределения воспользуемся решением задачи о сильном точечном

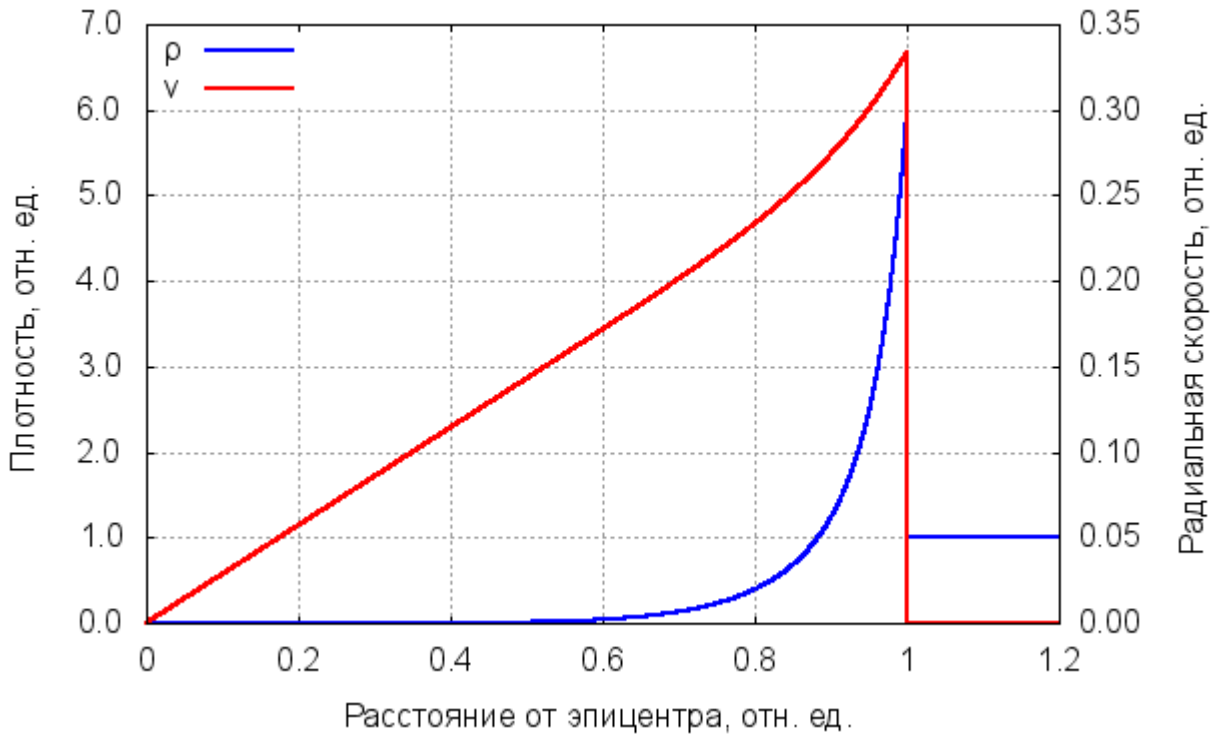


Рис. 1. Радиальные распределения плотности и скорости.

взрыве [6]. Положим показатель адиабаты $\gamma = 7/5$ и выберем энергию взрыва так, чтобы на момент $t = 1$ расстояние до фронта ударной волны составляло $R = 1$. Радиальные распределения плотности $\rho(r)$ и скорости $v(r)$ на момент $t = 1$ представлены на рис. 1.

Зададим в области $[0; 1.01] \times [0; 1.01] \times [0; 1.01]$ равномерную кубическую сетку с шагом h . Аппроксимируем массы, отнесённые в ячейки, и потоки массы через грани за время Δt с первым порядком точности по h и Δt :

$$\mathbf{v}_i^0 = v(r_i) \frac{\mathbf{r}_i}{r_i},$$

$$M_i = \rho(r_i) h^3,$$

$$\varphi_{ij} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} (\rho \mathbf{v}^0)_{i,j}^* h^2 \Delta t.$$

Здесь \mathbf{r}_i — радиус-вектор центра ячейки, $r_i = |\mathbf{r}_i|$, $(\rho \mathbf{v}^0)_{i,j}^*$ — значение $\rho \mathbf{v}^0$ в той из ячеек i, j , которая теряет массу в результате данного перетока (аппроксимация против потока). Потоки между ячейками, не имеющими общей грани, полагаются равными нулю. Поток массы через грани расчётной области отсутствует. Максимальное значение $\sum_j \frac{|\varphi_{ij}|}{M_i^0}$ достигается в первой ячейке за фронтом ударной волны в направлении $(1, 1, 1)$ и равно (с точностью $O(h)$)

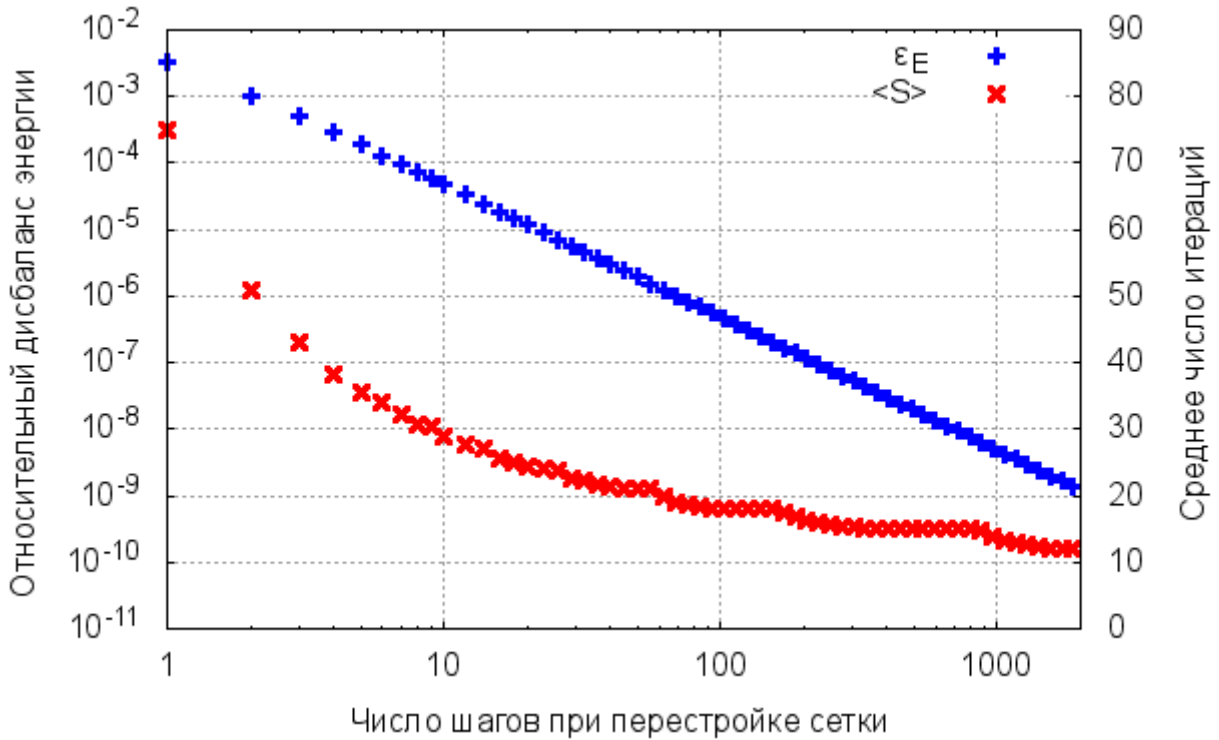


Рис. 2. Относительная погрешность кинетической энергии как функция числа шагов N .

$$\varepsilon = \max_i \sum_j \frac{|\varphi_{ij}|}{M_i^0} = \frac{\gamma+1}{\gamma-1} \frac{1}{h^3} \cdot \frac{3}{\sqrt{3}} \frac{2}{\gamma+1} \frac{2R}{5t} h^2 \Delta t = 2\sqrt{3} \frac{\Delta t}{h}.$$

Здесь мы воспользовались тем, что сжатие за волной составляет $\frac{\gamma+1}{\gamma-1} = 6$, а

скорость вещества за фронтом ударной волны $\frac{2}{\gamma+1} \frac{2R}{5t} = \frac{1}{3}$.

Зафиксируем далее $h=0.01$ и $\Delta t=0.01$. Таким образом, $\varepsilon = 2\sqrt{3} > 1$, и достаточное условие сходимости итераций при $N=1$ не выполняется. Тем не менее простые итерации Якоби сходятся. В качестве критерия прекращения итераций при решении системы (2) здесь и далее используется ограничение на изменение скорости между s -й и $(s+1)$ -й итерациями:

$$\max_i |v_i^{s+1} - v_i^s| < 10^{-15}.$$

На рис. 2 представлены относительная погрешность кинетической энергии и среднее число итераций на шаге как функции общего числа шагов N . Как видно из него, квадратичная сходимость наблюдается уже начиная с $N=1$. Это позволяет оценить требуемое число шагов до достижения желаемой точности. В данном случае до достижения машинной точности потребовалось бы порядка $3 \cdot 10^5$ шагов, что неприемлемо. Среднее число итераций — $\langle S \rangle \sim N^{-\alpha}$,

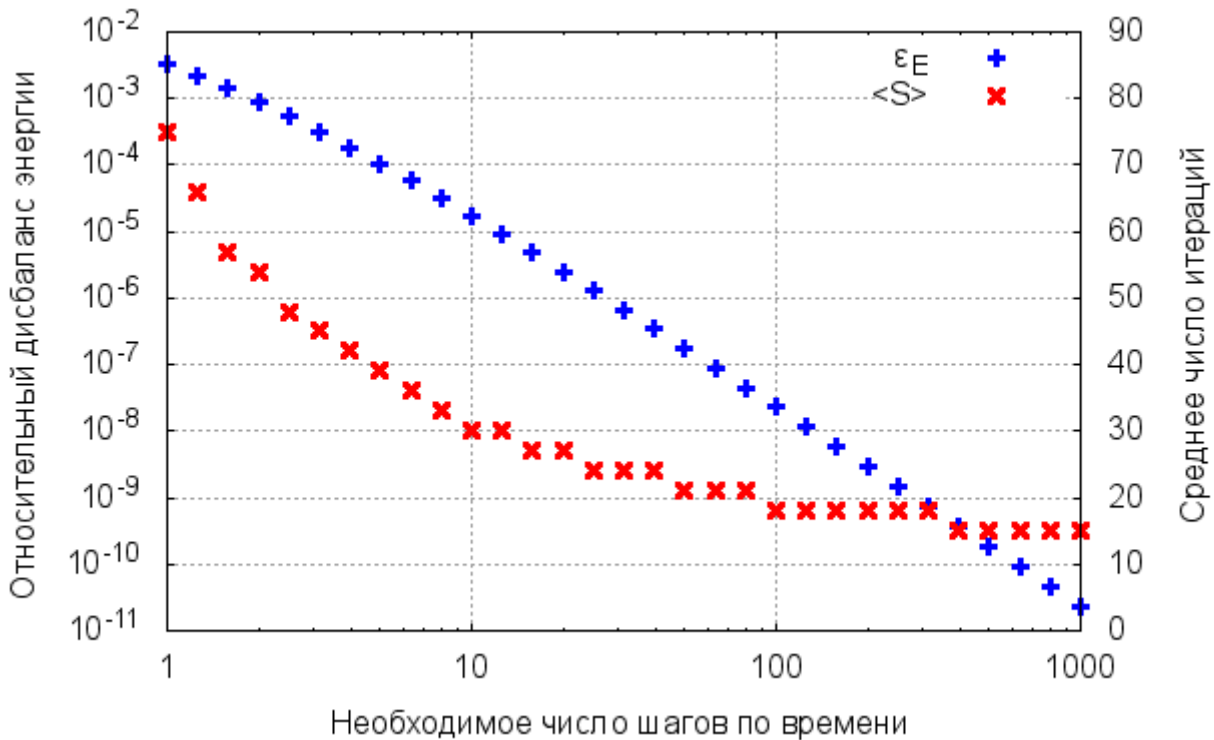


Рис. 3. Относительная погрешность кинетической энергии как функция необходимого числа шагов по времени $0.01/\Delta t$.

где α меняется от 0.5 на малых N до 0.25 на больших N . Общее число итераций $\sum S \sim N^{1-\alpha}$, то есть с ростом N вычислительные затраты растут.

Оценим целесообразность уменьшения шага по времени. Зафиксируем значение $N=1$ и рассмотрим зависимость относительной погрешности кинетической энергии от шага по времени (рис. 3).

Из графиков 2 и 3 следует $\langle S \rangle \sim (\epsilon/N)^\alpha$, где $0.25 < \alpha < 0.5$. Общее число итераций за перестройку $\sum S \sim \epsilon^\alpha N^{1-\alpha}$. Поскольку при фиксированной точности $N \sim \epsilon^{3/2} \sim \Delta t^{3/2}$, число итераций $\sum S \sim \Delta t^{3/2-\alpha/2}$. Общее же число итераций, требуемых на прохождение фиксированного времени, $\sum \sum S \sim \Delta t^{(1-\alpha)/2}$. Эта зависимость нарушается, когда среднее число итераций на шаге или число шагов становится сравнимым с единицей. Но до тех пор чем меньше шаг по времени, тем меньше будут относительные затраты вычислительных ресурсов на работу алгоритма при фиксированной погрешности на шаге. В практических расчётах целесообразно уменьшать шаг по времени, когда затраты на работу алгоритма перестройки скоростей становятся сравнимыми с остальными затратами.

Если ставить требование ограничения общей погрешности расчёта, необходимо согласовывать допустимую погрешность на шаге с величиной шага по времени. Проще всего это сделать, положив $N \sim \epsilon$. В качестве начального

значения N удобно использовать $N = 1 + \text{int}(10\varepsilon)$ с увеличением коэффициента пропорциональности в случае роста погрешности.

Список литературы

1. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные методы решения задач газовой динамики. Москва: Наука, 1992.
2. Гасилов В. А., Захаров С. В., Круковский А. Ю., Оточин А. А. Расчёт двумерных нестационарных магнитогидродинамических течений // Отчёт ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР (ДСП). 1990. Т. 317.
3. Гасилов В. А. и др. Неявная двухслойная лагранжево-эйлерова разностная схема газовой динамики на основе согласованных аппроксимаций уравнений балансов массы и импульса // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2015. № 38. URL: <http://keldysh.ru/papers/2015/preprint.asp?id=2015-38>.
4. Гасилов В. А., Круковский А. Ю., Повещенко Ю. А., Цыгвинцев И. П. Неявная эйлерово-лагранжева разностная схема трёхмерной газовой динамики на основе согласованных аппроксимаций уравнений балансов массы и импульса // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2016. № 5. URL: http://keldysh.ru/papers/2016/prep2016_05.pdf.
5. Цыгвинцев И.П. Трёхмерное моделирование коротковолнового источника излучения на основе лазерной плазмы // дис. ... к.ф.-м.н. ИПМ, Москва, 2016, URL: http://keldysh.ru/council/3/D00202403/tsygvintsev_diss.pdf.
6. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Москва: Наука, 1966.