

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ им. А.Ю. ИШЛИНСКОГО
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

О.А. Бессонов

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ
НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В ОБЛАСТЯХ
РЕГУЛЯРНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Препринт № 1021

Москва, 2012 г.

АННОТАЦИЯ

Представлен численный метод, предназначенный для исследования конвективных взаимодействий и тепломассопереноса в областях регулярной геометрии. Подробно рассмотрена схема решения уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска для несжимаемой вязкой жидкости. Дано описание метода распараллеливания. Приведены примеры применения разработанного вычислительного кода.

ABSTRACT

Numerical method for investigation of convective interactions and heat/mass transfer in regular domains is presented. Solution procedure for Navier-Stokes equations in Boussinesq approximation is considered in details. Parallelization of the numerical algorithm is described. Examples of application of the presented method are given.

ISBN 978-5-91741-050-0

055(02)2 © Институт проблем механики Российской академии наук, 2012 г.

Введение

Численное моделирование нестационарных пространственных течений в замкнутых областях предъявляет высокие требования к эффективности и точности используемых вычислительных методов. Например, для реалистичного расчета течения в расплаве в установке роста кристаллов при значениях числа Грасгофа до $O(10^8)$ необходимо использовать подробные сетки с числом узлов порядка миллиона и выше и проводить продолжительное интегрирование по времени с числом шагов порядка сотен тысяч. С ростом производительности вычислительной техники и переходом к прямому моделированию турбулентных течений эти требования будут возрастать и далее.

Для расчета течений несжимаемой жидкости требуется решение нестационарных уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска, включающее в себя на каждом временном шаге интегрирование уравнений переноса для компонент скорости и скалярных переменных, а также точное решения уравнения Пуассона для давления. Такой подход с раздельным решением уравнений является наиболее экономичным и эффективным. Дополнительно эффективность численного метода может быть значительно повышена, если задачу решать в области регулярной геометрии (цилиндре или прямоугольном параллелепипеде). В этом случае для решения уравнения Пуассона можно применять эффективные прямые методы, которые на порядок быстрее итерационных. Использование ортогональных разнесенных сеток и консервативных разностных схем позволяет обеспечить гарантированную точность дискретизации и разрешения мелких пространственных структур. Кроме того, для областей регулярной геометрии облегчается оптимизация вычислительного кода и его распараллеливание, а также отладка и верификация.

В препринте описывается вычислительный код, используемый на протяжении 15 лет для фундаментального исследования конвективных взаимодействий в задачах роста кристаллов и для изучения процессов в условиях микрогравитации, а также в некоторых других задачах. В процессе своего развития код подвергался непрерывной модификации и ус-

вершенствованием. По результатам расчетов с использованием настоящего кода выпущено более 15 публикаций. Работа по развитию вычислительного кода и численному моделированию проводилась в рамках проектов РФФИ и Президиума РАН, бюджетных тем НИР Лаборатории вычислительной техники Института проблем механики, а также международного сотрудничества.

Основное рассмотрение в препринте дается для областей цилиндрической геометрии. Реализация для прямоугольных областей в основном идентична цилиндрической, при этом в ней отсутствуют некоторые элементы, относящиеся к специфике полярной системы координат.

В первой части преприна представляется математическая модель и описывается численный метод с указанием параметров расчета и граничных условий. Затем дается описание схем пространственной дискретизации с учетом специфики полярной системы координат. Также рассматривается оригинальная монотонная адаптивная схема с ограничителем потока, обеспечивающая отсутствие нефизических осцилляций при моделировании течений с высоким числом Прандтля, и приводится анализ погрешностей различных схем дискретизации для неравномерной сетки.

Во второй части представляется общая процедура решения, основанная на методе проекций, и описывается метод интегрирования по времени. Производится сравнение различных схем сопряжения явного метода Рунге-Кутта и неявного метода переменных направлений. Отдельно рассматривается метод решения уравнения Пуассона для давления и приводится сравнение с вариантами метода, использовавшимися ранее.

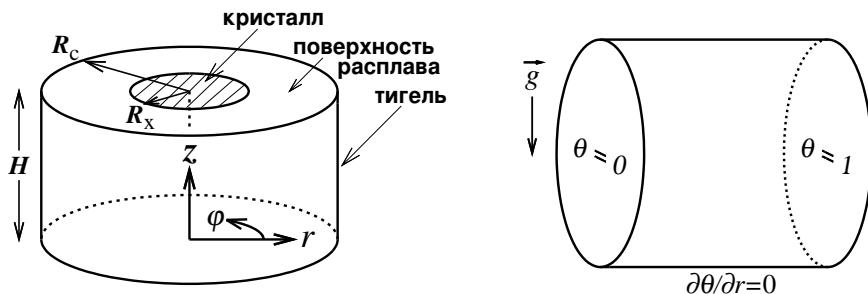
В заключительной части дается описание распараллеливания алгоритма для вычислительных систем с общей памятью, приводятся количественные характеристики метода и примеры его применения, и формулируется концепция прецизионного вычислительного кода. Также в конце преприна перечисляются новые и оригинальные приемы и методы, которые ранее в работах по расчетам течений несжимаемой вязкой жидкости не встречались.

Препринт подготовлен при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках грантов № 12-08-00034 и № 12-01-00398.

1 Математическая модель и параметры задачи

Рассмотрение численного метода будет производиться для области цилиндрической геометрии. На фиг. 1 показаны примеры расчетных областей, в которых проводилось моделирование. Слева на рисунке показана установка гидродинамической модели выращивания кристаллов по методу Чохральского, которая представляет из себя цилиндрический тигель радиуса R_c , заполненный расплавом до высоты H . В центре к поверхности расплава примыкает диск радиуса R_x , имитирующий торец выращиваемого кристалла. Открытая поверхность расплава предполагается плоской, на ней может учитываться зависимость поверхностного натяжения от температуры, а также теплообмен с окружающей средой. На диске, боковой поверхности и дне тигля ставятся различные граничные условия для температуры. Для данного типа расчетной области изучались особенности течений расплава, конвективных взаимодействий и теплообмена [1, 2, 3, 4].

Справа на фиг. 1 показана расчетная область с теплоизолированной цилиндрической границей и изотермическими торцами (нагретым и охлаждаемым, соответственно). В поле силы тяжести, направленном перпендикулярно оси цилиндра, возникает циркуляционное конвективное течение. Течения такого типа изучались в математической модели конвективного датчика "Дакон" для орбитальной станции "Мир" [5, 6], а также в постановке бенчмарка (модельного теста) для сравнения вычислительных кодов в цилиндрической геометрии [7] и других задачах [8].



Фиг. 1. Примеры расчетных областей цилиндрической геометрии

Численное моделирование основано на решении пространственных нестационарных уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска для

ненесжимаемой вязкой жидкости в переменных скорость \vec{V} , давление p , температура θ , концентрация C :

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{V} \vec{V}) = -\vec{\nabla} p + \nabla^2 \vec{V} - \frac{\text{Ra}}{\text{Pr}} \vec{g} \theta - \frac{\text{Ra}_c}{\text{Sc}} \vec{g} C \quad (1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{V} \theta) = \frac{1}{\text{Pr}} \nabla^2 \theta \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{V} C) = \frac{1}{\text{Sc}} \nabla^2 C \quad (4)$$

Здесь Ra – число Рэлея, Pr – число Прандтля, Ra_c – диффузионное число Рэлея для концентрации, Sc – число Шмидта, \vec{g} – вектор силы тяжести. Приведен безразмерный вид уравнений, в котором масштаб скорости определяется по вязкости ν как $V_0 = \nu/H$, где H – масштаб длины. При использовании другого масштаба скорости в уравнениях (1), (3) и (4) перед диффузионными членами появится дополнительный множитель $1/\text{Re}$, где Re – число Рейнольдса. Также возможен расчет задачи в размерном виде.

Уравнения для температуры (3) и концентрации (4) могут опускаться по отдельности либо одновременно. Схемы решения для этих уравнений реализованы различным образом: уравнение (3) предназначено для моделирования процессов с низкими или средними значениями числа Прандтля ($\text{Pr} \leq 1$ или $\text{Pr} \ll 1$), а (4) – для процессов с высокими значениями Pr и Sc ($\text{Pr} > 1$ или $\text{Pr} \gg 1$). Таким образом, их можно рассматривать просто как уравнения переноса скаляра с высокой и низкой диффузией, соответственно. Например, для моделирования конвективных процессов и теплопереноса в жидкости с большим значением Pr используется уравнение для второй скалярной переменной (4), а уравнение (3) опускается.

В свою очередь, при отключении обоих уравнений скалярного переноса возможен расчет в заданном поле температуры. Например, можно заранее рассчитать поле температуры для $\text{Pr} = 0$. Для этого нужно установить $\text{Ra} = 0$ и для произвольного $\text{Pr} \neq 0$ решать уравнения (1) – (3) до установления, а затем заменить Ra/Pr на Gr (число Грасгофа) и решать уравнения (1) и (2) в вычисленном поле температуры.

Расчет производится в полярной цилиндрической системе координат

(φ, z, r) : $0 < \varphi < 2\pi$, $0 < z < H$, $0 < r < R$. Геометрическими параметрами задачи являются длина области H и ее радиус R . Для конфигурации метода Чохральского также задается радиус кристалла R_x . Кроме того, могут быть заданы скорости вращения области (тигля) и кристалла. Вектор силы тяжести может быть ориентирован в любом направлении.

К физическим параметрам задачи относятся число Прандтля Pr , число Рэлея Ra (либо число Грасгофа $\text{Gr} = \text{Ra}/\text{Pr}$), аналогичные параметры для второй скалярной переменной Sc и Ra_c , а также число Рейнольдса Re в случае, если используется обезразмеривание по заданной скорости V_0 . Другие физические параметры задаются как граничные условия для свободной поверхности расплава.

Параметры расчетной сетки имеют следующие ограничения: число узлов сетки в азимутальном направлении φ должно быть равным степени двойки; в радиальном направлении r шаг сетки постоянный; в осевом направлении z шаг сетки может быть переменным. Число узлов сетки в направлении φ может быть установлено равным единице – это соответствует осесимметричному режиму расчета.

Выбор временного шага производится эмпирически, с учетом соблюдения конвективного условия Куранта для всех пространственных направлений r , z , φ (для азимутального направления φ следует принимать во внимание малое расстояние между узлами сетки вблизи оси цилиндра), а также явных условий для диффузии в направлениях r , z . Вязкая и концентрационная (для второй скалярной переменной) диффузия в направлении φ , а также тепловая диффузия (для первой скалярной переменной) во всех направлениях трактуются неявно и не накладывают ограничения на временной шаг. Также возможно задание неявной трактовки вязкой и концентрационной (для второй скалярной переменной) диффузии в направлении z для обеспечения возможности сильного сгущения сетки.

Границные условия реализованы в соответствии со спецификой моделирования течений в установке роста кристаллов Чохральского, а также некоторых других задач. Имеются 4 зоны, в которых могут устанавливаться различающиеся (и однородные в пределах зоны) граничные условия. При вертикальном позиционирования цилиндра это нижняя граница,

боковая цилиндрическая поверхность, внутренняя часть верхней границы $r < R_x$ (кристалл) и ее внешняя часть $R_x < r < R$ (поверхность расплава).

На нижней, боковой и внешней верхней границах могут быть установлены температурные и концентрационные граничные условия Дирихле с заданным профилем, либо условия Неймана с заданным константным градиентом на нижней границе и с нулевым градиентом на других. На внешней верхней границе дополнительно может быть задана линейная зависимость градиента от температуры (концентрации) для моделирования конвективного или радиационного обмена с окружающей средой $\partial\theta/\partial z = -Bi\theta + \text{const}$, где Bi – число Био. На внутренней верхней границе (твердой поверхности кристалла) задаются температурные и концентрационные условия Дирихле.

На внешней верхней границе задаются условия прилипания (твердая граница) либо скольжения (свободная поверхность). На свободной поверхности также могут быть заданы термокапиллярные граничные условия для скорости:

$$\frac{\partial V_r}{\partial z} = -Mn \frac{\partial \theta}{\partial r}, \quad \frac{\partial V_\varphi}{\partial z} = -Mn \frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial \varphi}, \quad V_z = 0$$

Здесь $Mn = \sigma_T \Delta \theta R / (\rho \nu^2)$ – число Марангона, $\sigma_T = -\partial \sigma / \partial \theta$ – температурный коэффициент поверхностного натяжения, ρ – плотность, ν – кинематическая вязкость. Аналогичные условия могут быть заданы и для зависимости скорости от второй скалярной переменной (концентрации).

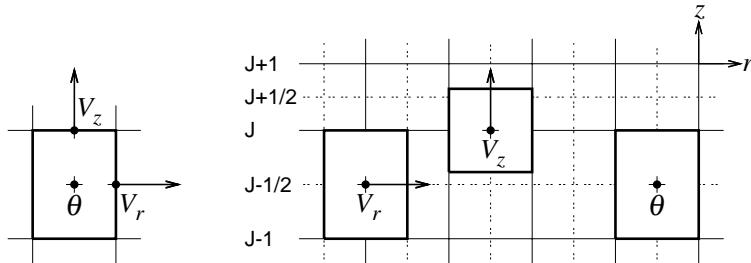
2 Схемы пространственной дискретизации

Для решения уравнений (1) – (4) используется метод конечных объемов. Применены разнесенные сетки с переменным шагом в осевом направлении z , что позволяет при необходимости делать сгущения у торцевых границ для разрешения тонких пограничных слоев.

Использование разнесенных сеток является естественным и эффективным способом консервативной дискретизации уравнений (1) – (4) с соблюдением законов сохранения импульса, массы и скалярного поля (температуры, концентрации) на дискретном уровне. Также разнесенные сетки

обеспечивают высокую точность дискретизации в погранслоях и позволяют использовать достаточно компактные шаблоны интерполяции и дискретизации для всех членов уравнений.

На фиг. 2 показано взаимное расположение вычислительных ячеек (контрольных объемов) для различных переменных в сечении (r, z) . Скалярные переменные (давление, температура, концентрация) располагаются в центрах основных вычислительных ячеек. Компоненты скорости размещаются в центрах соответствующих граней основных ячеек, и вокруг них формируются сдвинутые ячейки. Значения компонент скорости всегда находятся в центрах сдвинутых ячеек. По направлениям, где используется переменный шаг сетки, края сдвинутых ячеек могут не проходить через центры основных ячеек (см. V_z на фиг. 2). Значения на этих краях вычисляются с помощью интерполяций, что гарантирует соблюдение требуемой точности дискретизации.



Фиг. 2. Взаимное расположение контрольных объемов для различных переменных на разнесенных сетках

Все пространственные дискретизации производятся со вторым порядком точности. В рамках метода конечных объемов производные вычисляются через разности значений величин, определенных на границах соответствующих вычислительных ячеек непосредственно либо с помощью интерполяций. Эти значения представляют из себя численные потоки. Например, численный поток для диффузационного члена $\partial^2 C / \partial z^2$ вычисляется как аппроксимация производной $\partial C / \partial z$ на границе вычислительной ячейки, то есть как разность значений C в центрах смежных ячеек, деленная на расстояние между ними. Аналогично, поток для конвективного члена $\partial (V_z C) / \partial z$ вычисляется через аппроксимации произведения $(V_z C)$ на границе ячейки, при этом скорость V_z уже определена на этой границе,

и требуется интерполировать только значение переносимой величины C .

Поскольку поток через "верхнюю" грань вычислительной ячейки для консервативного подхода совпадает с потоком через "нижнюю" грань следующей ячейки, можно вычислять эти потоки только один раз, что позволяет существенно снизить вычислительные затраты для сложных дискретизаций.

Границные условия считаются также через аппроксимации численных потоков. Для вычисления потоков на границе при необходимости используются трехточечные интерполяции производных, что гарантирует соблюдение второго порядка точности.

Величины, не являющиеся производными (например, некоторые члены уравнений в полярной системе координат) вычисляются через линейные интерполяции.

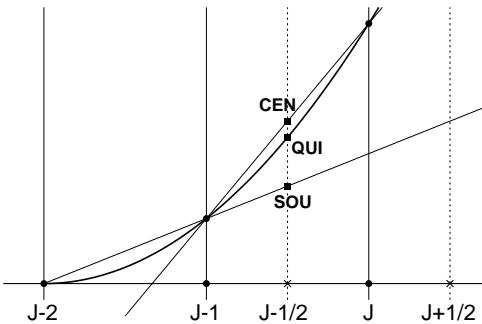
2.1 Дискретизация конвективных членов уравнений переноса

Аппроксимация численных потоков для конвективных членов имеет свою специфику, связанную с нефизическими осцилляциями. Такие осцилляции могут происходить в областях резкого изменения градиента переносимой величины в условиях слабой диффузии, то есть при высоких значениях числа Пекле (Рейнольдса). Помимо снижения точности расчета, осцилляции могут приводить к выходу значений величины за пределы физических норм (например, температурного диапазона).

На ранних этапах развития вычислительных методов для борьбы с нефизическими осцилляциями использовались схемы направленных разностей первого порядка, а также гибридные схемы на их основе. В этих схемах для определения значения на границе вычислительной ячейки используется кусочно-константная интерполяция против потока либо комбинация константной и линейной интерполяции (в случае гибридной схемы). Помимо низкой точности, подобные схемы имеют фундаментальный недостаток – они вносят в решаемое уравнение переноса ошибочный диффузионный член, значение которого может в десятки и сотни раз превосходить величину диффузионного члена уравнения (для высоких чисел Пекле) и,

как следствие, сильно искажать картину течения и подавлять мелкие пространственные структуры [9].

Рассмотрим две основные схемы второго порядка точности – с центральными разностями (CEN) и с направленными разностями против потока (SOU). Способы аппроксимации переносимой скалярной величины C для уравнения (4) показаны на фиг. 3. Значение на левой границе вычислительной ячейки J для схемы CEN аппроксимируется интерполяцией $C_{J-1/2} = (C_{J-1} + C_J)/2$, а для схемы SOU – экстраполяцией $C_{J-1/2} = C_{J-1} + (C_J - C_{J-2})/2$ (для направления потока жидкости слева направо). В данном примере сетка полагается равномерной.



Фиг. 3. Иллюстрация различных схем аппроксимации конвективных потоков

Обе схемы второго порядка обладают недостатками, связанными с появлением осцилляций, ростом экстремумов и наличием фазовой ошибки. Для преодоления этих недостатков была предложена схема с квадратичной интерполяцией против потока QUICK [9, 10]. Иллюстрация схемы также показана на фиг. 3 (далее по тексту используется сокращенное обозначение QUI). Рассмотрения через ряды Тейлора и простые тесты показывают, что схема QUI не порождает фазовую ошибку, а нефизические осцилляции в сравнении со схемами CEN и SOU снижаются в несколько раз. Кроме того, схема QUI обеспечивает более высокую точность дискретизации (особенно для неравномерных сеток) и для одномерного переноса имеет третий порядок точности.

Схему QUI удобно представлять через общую формулу для схем второго порядка $\alpha C_{\text{SOU}} + (1 - \alpha)C_{\text{CEN}}$, то есть как взвешенную сумму двух основных схем с коэффициентом $\alpha = 1/4$. Отметим, что для дискретизации члена, описывающего перенос компоненты скорости в поле этой же

компоненты (например, $\partial(V_z^2)/\partial z$) необходимо использовать коэффициент $\alpha = 1/2$. Схема QUI также используется как основа для построения неосцилирующих конвективных схем с ограничителями (см. раздел 2.4).

2.2 Дискретизация в полярной системе координат

Уравнение Навье-Стокса в приближении Буссинеска в цилиндрической полярной системе координат имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_r}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r V_r^2) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} (V_\varphi V_r) + \frac{\partial}{\partial z} (V_z V_r) - \frac{1}{r} V_\varphi^2 = \\ - \frac{\partial p}{\partial r} + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial V_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V_r}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 V_r}{\partial z^2} - \frac{V_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi} \right] - \frac{\text{Ra}}{\text{Pr}} g_r \theta \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_\varphi}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r V_r V_\varphi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} (V_\varphi^2) + \frac{\partial}{\partial z} (V_z V_\varphi) + \frac{1}{r} V_r V_\varphi = \\ - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial V_\varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V_\varphi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 V_\varphi}{\partial z^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial V_r}{\partial \varphi} - \frac{V_\varphi}{r^2} \right] - \frac{\text{Ra}}{\text{Pr}} g_\varphi \theta \quad (6) \end{aligned}$$

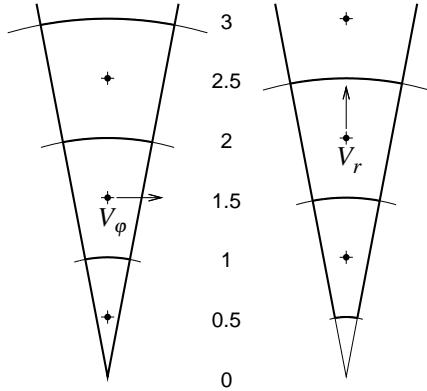
$$\begin{aligned} \frac{\partial V_z}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r V_r V_z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} (V_\varphi V_z) + \frac{\partial}{\partial z} (V_z^2) = \\ - \frac{\partial p}{\partial z} + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial V_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V_z}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} \right] - \frac{\text{Ra}}{\text{Pr}} g_z \theta \quad (7) \end{aligned}$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(r V_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial V_z}{\partial z} = 0 \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r V_r \theta) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} (V_\varphi \theta) + \frac{\partial}{\partial z} (V_z \theta) = \\ \frac{1}{\text{Pr}} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \right] \quad (9) \end{aligned}$$

Здесь приведен безразмерный вид уравнений, в котором масштаб скорости определяется по вязкости. При использовании другого масштаба перед диффузионными членами (помещены в квадратные скобки) появится дополнительный множитель $1/\text{Re}$. Уравнение для второй скалярной переменной идентично уравнению (9).

На фиг. 4 показано взаимное расположение вычислительных ячеек (контрольных объемов) для компонент скорости V_φ и V_r в сечении (φ, r) . Расположение переменных V_z , θ и p схематически совпадает в этом сечении с расположением V_φ .



Фиг. 4. Контрольные объемы для компонент скорости около оси цилиндра

Вычислительные ячейки для V_r сдвинуты в направлении r , поэтому нижняя граница первой ячейки отстоит от оси цилиндра на половину шага сетки, и значение V_r на оси не определено. Для аппроксимации V_r на нижней границе первой ячейки используются значения в данной ячейке и в ячейке, противоположной ей относительно оси (т.е. повернутой относительно нее на 180°), через интерполяцию.

Ячейки для остальных переменных начинаются от оси цилиндра. Первая ячейка имеет треугольную форму, поэтому ее нижняя грань имеет нулевую площадь, и численные потоки через эту грань не вычисляются. Значения этих переменных на оси также не определены. Для многоточечных интерполяций по направлению r может использоваться значение в противоположной ячейке (поворнутой на 180°).

Дискретизация членов уравнений (5) – (9) во всех вычислительных ячейках, кроме примыкающих к оси, не вызывает трудностей и производится простым интегрированием по контрольному объему. Для членов, являющихся пространственными производными, результат интегрирования представляет из себя алгебраическую сумму численных потоков через соответствующие грани. В ячейках, примыкающих к оси цилиндра, сложности с интегрированием возникают только у членов, содержащих множи-

тель $1/r^2$. К ним относятся члены со второй производной по φ в уравнениях (7) и (9), а также три члена в диффузионной части уравнения (6).

Рассмотрим интеграл по контрольному объему для члена из уравнения (9) (интегрирование по направлению z опустим):

$$\int_{-\frac{\Delta\varphi}{2} r_k}^{\frac{\Delta\varphi}{2} r_{k+1}} \int \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \varphi^2} \right) r dr d\varphi = \int_{-\frac{\Delta\varphi}{2} r_k}^{\frac{\Delta\varphi}{2} r_{k+1}} \int \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \right) dr d\varphi \quad (10)$$

Для вычисления этого интеграла необходимо сделать предположение по зависимости производной $\partial \theta / \partial \varphi$ от координаты r (либо по зависимости θ от r). Выразим производную по φ через производную по декартовой переменной x , где $x = r\varphi$:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \varphi} = r \frac{\partial \theta}{\partial x}$$

Рассмотрим два варианта зависимости $\partial \theta / \partial x$ от координаты r :

$$\text{не зависит от } r: \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{k+\frac{1}{2}} \quad \text{отсюда} \quad \frac{\partial \theta}{\partial \varphi} = \frac{r}{r_{k+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \Big|_{k+\frac{1}{2}} \quad (11)$$

$$\text{зависит линейно от } r: \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{r}{r_{k+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{k+\frac{1}{2}} \quad \text{отсюда} \quad \frac{\partial \theta}{\partial \varphi} = \frac{r^2}{r_{k+\frac{1}{2}}^2} \frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \Big|_{k+\frac{1}{2}} \quad (12)$$

Подставив выражения (11) и (12) в (10), получаем формулы для интегралов:

$$\int_{-\frac{\Delta\varphi}{2} r_k}^{\frac{\Delta\varphi}{2} r_{k+1}} \int \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{r}{r_{k+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \Big|_{k+\frac{1}{2}} \right) dr d\varphi = \frac{r_{k+1} - r_k}{r_{k+\frac{1}{2}}} \int_{-\frac{\Delta\varphi}{2}}^{\frac{\Delta\varphi}{2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \Big|_{k+\frac{1}{2}} \right) d\varphi \quad (13)$$

$$\int_{-\frac{\Delta\varphi}{2} r_k}^{\frac{\Delta\varphi}{2} r_{k+1}} \int \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{r^2}{r_{k+\frac{1}{2}}^2} \frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \Big|_{k+\frac{1}{2}} \right) dr d\varphi = \frac{r_{k+1}^2 - r_k^2}{2r_{k+\frac{1}{2}}^2} \int_{-\frac{\Delta\varphi}{2}}^{\frac{\Delta\varphi}{2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \Big|_{k+\frac{1}{2}} \right) d\varphi \quad (14)$$

Легко видеть, что результаты в формулах (13) и (14) совпадают, так как здесь $r_{k+\frac{1}{2}} = (r_{k+1} + r_k)/2$. Любая линейная интерполяция производной $\partial \theta / \partial x$ по r может быть выражена как нормированная линейная комбинация выражений (11) и (12). Таким образом, применение естественных для

метода конечных объемов линейных интерполяций в декартовых координатах позволяет вычислить члены с множителем $1/r^2$ в уравнениях (7) и (9) с требуемой точностью – в том числе и для вычислительных ячеек, примыкающей к оси цилиндра (для $k = 0$).

Перейдем к рассмотрению членов уравнения (6), содержащих множитель $1/r^2$. Перегруппируем эти члены и представим в следующем виде:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V_\varphi}{\partial \varphi^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial V_r}{\partial \varphi} - \frac{V_\varphi}{r^2} = \frac{1}{r^2} \left[\left(\frac{\partial V_r}{\partial \varphi} - V_\varphi \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(V_r + \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi} \right) \right] \quad (15)$$

Рассмотрим два типа течения в сечении (φ, r) в окрестности оси цилиндра – круговое вокруг оси, и параллельное, проходящее через ось. Компоненты скорости в пределе $r \rightarrow 0$ могут быть представлены как $V_r = 0$, $V_\varphi = cr$ в первом случае, и $V_r = V \cos \varphi$, $V_\varphi = -V \sin \varphi$ во втором (c – константа, V – модуль скорости). Соответственно, выражения в круглых скобках в формуле (15) для обоих случаев будут при $r \rightarrow 0$ стремиться к нулю:

$$\frac{\partial V_r}{\partial \varphi} - V_\varphi \rightarrow 0, \quad V_r + \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi} \rightarrow 0 \quad (16)$$

Рассмотрим интеграл по контрольному объему для первого выражения с множителем $1/r^2$ (интегрирование по направлению z опустим):

$$\int_{-\frac{\Delta \varphi}{2}}^{\frac{\Delta \varphi}{2}} \int_0^{r_1} \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial V_r}{\partial \varphi} - V_\varphi \right) r dr d\varphi = \int_{-\frac{\Delta \varphi}{2}}^{\frac{\Delta \varphi}{2}} \int_0^{r_1} \frac{1}{r} f(r, \varphi) dr d\varphi, \quad f(r, \varphi) = \frac{\partial V_r}{\partial \varphi} - V_\varphi \quad (17)$$

Для вычисления этого интеграла необходимо сделать предположение по зависимости $f(r, \varphi)$ от координаты r вблизи оси цилиндра. Рассмотрим два варианта зависимости – линейную и квадратичную:

$$\int_{-\frac{\Delta \varphi}{2}}^{\frac{\Delta \varphi}{2}} \int_0^{r_1} \frac{1}{r} \left(\frac{r}{r_{\frac{1}{2}}} f(r_{\frac{1}{2}}, \varphi) \right) dr d\varphi = \frac{r_1}{r_{\frac{1}{2}}} \int_{-\frac{\Delta \varphi}{2}}^{\frac{\Delta \varphi}{2}} f(r_{\frac{1}{2}}, \varphi) d\varphi \quad (18)$$

$$\int_{-\frac{\Delta \varphi}{2}}^{\frac{\Delta \varphi}{2}} \int_0^{r_1} \frac{1}{r} \left(\frac{r^2}{r_{\frac{1}{2}}^2} f(r_{\frac{1}{2}}, \varphi) \right) dr d\varphi = \frac{r_1^2}{2r_{\frac{1}{2}}^2} \int_{-\frac{\Delta \varphi}{2}}^{\frac{\Delta \varphi}{2}} f(r_{\frac{1}{2}}, \varphi) d\varphi \quad (19)$$

Легко видеть, что результаты в формулах (18) и (19) совпадают, так как здесь $r_{\frac{1}{2}} = r_1/2$. Для второй группы членов из формулы (15) интеграл может быть вычислен аналогично. Таким образом, применение естественных предположений по зависимости от координаты r выражений из (16), стремящихся к нулю при $r \rightarrow 0$, позволяет вычислить члены с множителем $1/r^2$ в уравнении (6) для вычислительных ячеек, примыкающей к оси цилиндра.

2.3 Улучшенная конвективная дискретизация у оси цилиндра

При моделировании существенно неосесимметричных течений для соблюдения конвективного условия Куранта ($CFL = 1$) приходится снижать временный шаг из-за малого расстояния между узлами сетки вблизи оси цилиндра. Для того, чтобы смягчить требования к временному шагу, была разработана схема с повышенным порогом устойчивости в азимутальном направлении ($CFL = 2$) за счет использования расширенного шаблона дискретизации.

Идея схемы состоит в том, что для аппроксимации переносимой величины $C_{I-1/2}$ на границе вычислительной ячейки I вместо значений C_{I-1} и C_I используются значения на шаблоне, увеличенном в два раза. Эти значения получены усреднением: $C'_{I-3/2} = (C_{I-2} + C_{I-1})/2$, $C'_{I+1/2} = (C_I + C_{I+1})/2$. Для схемы с квадратичной интерполяцией против потока дополнительно требуется значение $C'_{I-7/2} = (C_{I-4} + C_{I-3})/2$ (для направления потока жидкости слева направо).

Данная схема реализована для переноса в азимутальном направлении φ переменных V_φ , V_z , θ и C в вычислительных ячейках, примыкающих к оси цилиндра. Центры таких ячеек отстоят от оси на расстоянии $h_r/2$, и, соответственно, шаг сетки в направлении φ равен $\pi h_r/N$ (здесь h_r – шаг сетки в радиальном направлении, N – число узлов по азимуту). Применение улучшенной схемы позволяет эффективно удвоить этот шаг. В свою очередь, центр ближайшей к оси вычислительной ячейки для переменной V_r отстоит от нее на h_r , и шаг сетки по φ вдвое больше, чем у других переменных. Поэтому для V_r нет необходимости в применении новой схемы.

Другая модификация относится к переносу компоненты скорости V_φ в направлении φ . Если поток жидкости пересекает ось цилиндра, то значение V_φ в прилегающих к оси вычислительных ячейках в этом месте меняет знак. Например, если поток пересекает ось под нулевым углом ($\varphi = 0$), то распределение $V_\varphi(\varphi)$ имеет форму синусоиды. В этом случае применение квадратичной интерполяции против потока QUIL приводит к тому, что численные потоки на границах соседних ячеек вычисляются по разным интерполяционным формулам. В результате возрастают ошибки дискретизации.

Этот недостаток можно преодолеть, если использовать симметричную интерполяционную схему $V_{I-1/2} = (V_{I-1} + V_I)/2 + (V_{I-1} - V_{I-2} + V_I - V_{I+1})/16$. Схема имеет четвертый порядок точности дискретизации (для одномерного переноса) и хорошо воспроизводит синусоидальное распределение интерполируемой переменной в ближайших к оси вычислительных ячейках. Из-за малого шага сетки в этих ячейках возрастает влияние диффузационного члена уравнения, и нефизические осцилляции не возникают, поэтому нет необходимости в применении направленных разностей.

Симметричная интерполяционная формула применена для переноса V_φ по φ совместно с описанной выше схемой с повышенным порогом устойчивости ($CFL = 2$).

2.4 Схема с ограничителем потока для высоких чисел Pr

При моделировании течений с очень низкой диффузией и высокими значениями числа Пекле конвективная разностная схема QUICK не обеспечивает полного подавления нефизических осцилляций. Для таких режимов течения необходимо использовать монотонные неосциллирующие схемы с ограничителем (FCT, Flux corrected transport), разработанные для задач газовой динамики [11, 12]. В силу специфики таких задач, схемы с ограничителем строятся в первую очередь для моделирования невязких течений. Для применения схем FCT в течениях несжимаемой жидкости целесообразно учитывать наличие диффузационного члена соответствующего уравнения переноса.

Рассмотрим основные разностные схемы второго порядка точности CEN, SOU и QUI (см. раздел 2.1) в сравнении с монотонной схемой направленных разностей первого порядка (FOU) на примере одномерного переноса скалярной величины C в поле скорости V . Представим численный поток на левой границе вычислительной ячейки J , равный $F = VC_{J-1/2}$, как сумму конвективного потока монотонной схемы первого порядка $F_{FOU} = VC_{J-1}$ и антидиффузионного потока F_{anti} :

$$\begin{aligned} F_{CEN} &= VC_{J-1} + V \frac{C_J - C_{J-1}}{2} \\ F_{SOU} &= VC_{J-1} + V \frac{C_{J-1} - C_{J-2}}{2} \\ F_{QUI} &= VC_{J-1} + V \frac{3C_J - 2C_{J-1} - C_{J-2}}{8} \end{aligned}$$

Этот антидиффузионный член является потенциальным источником появления нефизических осцилляций при конвективном переносе. Если численный поток для диффузионного члена превосходит антидиффузионный поток, осцилляции не происходят. Пороговый критерий возникновения осцилляций определяется через условие $|F_{anti}| = |F_{diff}|$, или, для схемы с центральными разностями (CEN)

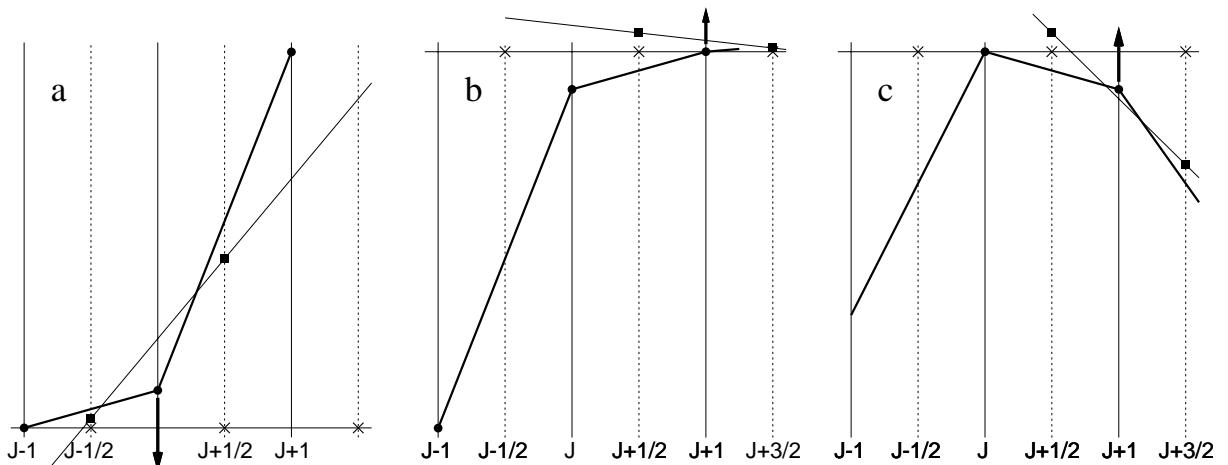
$$V \frac{C_J - C_{J-1}}{2} = \frac{1}{Pe} \frac{C_J - C_{J-1}}{h}$$

Здесь h – шаг сетки, $Pe = Re$ для импульса либо $RePr$ для скалярной величины (при определении масштаба скорости по вязкости $Re = 1$). Таким образом, пороговый критерий для схемы CEN, выраженный через сеточное число Пекле $Pe_{grid} = Pe V h$, выглядит как $Pe_{grid} = 2$. Отметим, что $Pe V$ является безразмерной характеристикой скорости при сопоставлении конвективных и диффузионных эффектов. Эту величину называют числом Пекле в широком контексте.

На практике при моделировании течений, имеющий стационарный либо умеренно нестационарный характер, типичное предельное число Pe_{grid} составляет $20 - 30$ для схемы CEN и $50 - 100$ для QUI. Для шага сетки $h = 1/100$ это соответствует предельным значениям скорости $Pe V = 2000 - 3000$ и $5000 - 10000$. Для существенно нестационарных течений с

быстрым переносом фронта температуры (концентрации) [4] предельные значения сеточного числа Пекле будут значительно ниже, что ограничит применимость классических схем дискретизации конвективных членов.

Рассмотрим для примера монотонно возрастающее распределение скалярной величины, переносимой полем скорости слева направо ($V > 0$). В случае резкого увеличения градиента этой величины конвективная производная, вычисленная для ячейки J на основе разности конвективных потоков между границами $J+1/2$ и $J-1/2$, может оказаться слишком большой, и новое значение в точке J после выполнения временного шага окажется меньше значения в предыдущей ячейке $J-1$ (фиг. 5, а). Таким образом, нарушится монотонность распределения, то есть появится осцилляция. Такой эффект характерен для схемы с центральными разностями (CEN).



Фиг. 5. Иллюстрация нефизических осцилляций при резком изменении градиента. Квадратами показаны аппроксимации на границах ячеек по схеме QUI, проходящими через квадраты линиями – конвективные производные, стрелками – изменения значений после выполнения временного шага. Горизонтальная линия (ось абсцисс) является ограничителем изменения значения для избежания осцилляции

Аналогично, в случае резкого уменьшения градиента переносимой величины значение на границе $J+1/2$, полученное в результате интерполяции (экстраполяции), может превысить значение в точке $J+1$, что приведет к вычислению отрицательной конвективной производной для следующей ячейки. Как следствие, значение в точке $J+1$ после выполнения временного шага может оказаться больше значений в последующих ячейках, что также

нарушит монотонность (фиг. 5, b). Это характерно для схемы с направленными разностями второго порядка (SOU).

Похожий эффект имеет место в случае экстремума (перемены знака градиента с положительного на отрицательный). Здесь отрицательная конвективная производная может появиться для обеих схем (CEN и SOU), что приведет к нефизическому росту значения экстремума (фиг. 5, c). Кроме того, появляется фазовая ошибка: скорость перемещения экстремума для схемы CEN окажется ниже, а для схемы SOU – выше, чем скорость потока.

Для схемы с квадратичной интерполяцией против потока (QUI) проявляются эффекты и при росте, и при уменьшении градиента, но амплитуды осцилляций оказываются в несколько раз ниже. Кроме того, ослабляется эффект роста экстремума и исчезает фазовая ошибка. В результате повышается предельное число Пекле, при котором диффузия подавляет эти осцилляции.

Избежать нефизических эффектов можно, если ограничить антидиффузионный поток таким образом, чтобы изменение переносимой величины после выполнения временного шага не вышло за требуемые пределы (показаны на фиг. 5 горизонтальными линиями). Формально это ограничение соответствует полному или частичному переключению на схему первого порядка против потока (FOU). Однако такое переключение происходит строго избирательно, при изменении знака градиента либо его увеличении (уменьшении) в определенное число раз. Следует отметить, что, несмотря на диффузионные свойства, схема FOU идеально переносит произвольное распределение функции при $CFL = 1$. Поэтому избирательное применение схемы FCT не приводит к появлению ошибок, связанных со схемной диффузией.

В качестве основы для построения ограничителя была взята схема SMART [13]. Она представляет из себя модификацию схемы с квадратичной интерполяцией против потока (QUI). Рассмотрим работу ограничителя SMART на примере вычисления переносимой величины на границе вычислительной ячейки $C_{j+1/2}$ с использованием вспомогательной функ-

ции $\Psi(r)$, где r – отношение соседних градиентов:

$$C_{J+1/2} = C_J + \frac{1}{2}\Psi(r)(C_{J+1} - C_J) , \quad r = \frac{C_J - C_{J-1}}{C_{J+1} - C_J}$$

Выведем функцию $\Psi(r)$ для исходной схемы QUI без ограничителя:

$$C_{J+1/2} = C_J + \frac{3}{8}(C_{J+1} - C_J) + \frac{1}{8}(C_J - C_{J-1}) , \quad \Psi_{QUI}(r) = \frac{3}{4} + \frac{1}{4}r \quad (20)$$

Схема SMART при $1/5 < r < 5$, когда нет резкого изменения градиентов, работает как QUI. Когда изменение градиентов выходит за указанные пределы, функция $\Psi(r)$ подвергается ограничению по следующему алгоритму:

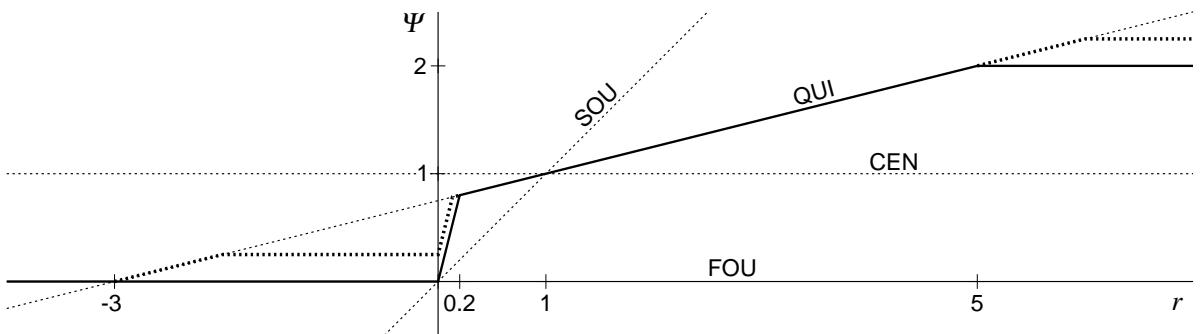
$$0 < r < \frac{1}{5} \text{ (резкое увеличение): } \Psi(r) = 4r , \quad C_{J+1/2} = C_J + 2(C_J - C_{J-1}) \quad (21)$$

$$r > 5 \text{ (резкое уменьшение): } \Psi(r) = 2 , \quad C_{J+1/2} = C_{J+1} \quad (22)$$

$$r < 0 \text{ (смена знака): } \Psi(r) = 0 , \quad C_{J+1/2} = C_J \quad (23)$$

Эти три случая соответствуют вариантам а, б и с на фиг. 5. Алгоритм работы ограничителя SMART продемонстрирован в виде нормализованной диаграммы [12] на фиг. 6 (сплошная линия). На рисунке для сравнения также показаны графики функции $\Psi(r)$ для других конвективных схем: $\Psi_{CEN}(r) = 1$, $\Psi_{SOU}(r) = r$, $\Psi_{FOU}(r) = 0$.

Применение конвективных разностных схем с ограничителем позволяет эффективно подавлять нефизические осцилляции при сохранении



Фиг. 6. Диаграмма, иллюстрирующая работу ограничителя. Сплошной линией показано действие стандартного ограничителя SMART, толстым пунктиром – гибридного ограничителя, учитывающего влияние диффузии

второго порядка точности дискретизации. Однако такие схемы искажают профиль переносимой величины, что выражается в клиппинге – срезании верхушки переносимого экстремума со снижением его амплитуды, а также некоторых других эффектах.

Подобные эффекты неизбежны при моделировании невязких течений, однако при наличии диффузии ведут к неоправданному снижению точности, так как в этом случае антидиффузионный поток частично или полностью компенсируется численным потоком диффузионного члена. Поэтому для таких течений целесообразно применять ограничитель к алгебраической сумме конвективного и диффузионного потоков:

$$F_{J+1/2} = V \left(C_J + \frac{3}{8}(C_{J+1} - C_J) + \frac{1}{8}(C_J - C_{J-1}) \right) - \frac{1}{Pe} \frac{C_{J+1} - C_J}{h}$$

Переписав это выражение с использованием вспомогательной функции $\Psi(r)$ и сеточного числа Пекле $Pe_{grid} = PeVh$, получим следующий вид:

$$\Psi(r) = \frac{3}{4} + \frac{1}{4}r - \frac{2}{Pe_{grid}} \quad (24)$$

Используя выражение (24) вместо (20) в алгоритме (21) – (23), получим гибридный ограничитель, учитывающий компенсирующее влияние диффузионного члена. Алгоритм работы нового ограничителя проиллюстрирован на фиг. 6, где толстой пунктирной линией показано ограничение для функции конвективного потока $\Psi_{QUI}(r) = \frac{3}{4} + \frac{1}{4}r$.

Из рисунка видно, что для очень высоких значений сеточного числа Пекле алгоритм будет подобен схеме SMART. В свою очередь, при значениях $Pe_{grid} = 2\frac{2}{3}$ и ниже ограничитель в окрестности $r = 0$ перестает работать, и алгоритм станет близок к схеме QUI. Отличия от QUI будут проявляться только при очень больших (по модулю) значениях параметра r , что соответствует резкому снижению градиента. Однако такое поведение переносимой величины нереалистично, так как при малых значениях Pe_{grid} ему препятствует сглаживающее влияние сильной диффузии.

Представленная схема реализована для уравнения переноса второй скалярной величины (4), где предполагается высокое значение числа Прандтля (Шмидта) $Pr > 1$ или $Pr \gg 1$. Для повышения числовой эффективив-

ности в алгоритме вместо условных выражений используется модульная арифметика.

Новая схема тестировалась в широком диапазоне значений Pr (Sc). При $\text{Pr} = 1$, $\text{Pe}V \approx O(10^3)$ результаты тестирования с высокой точностью совпали с результатами для обычной схемы QUI. В свою очередь, при моделировании концентрационной конвекции с очень низкой диффузией $\text{Sc} = 10^3$, $\text{Pe}V \approx O(10^6)$ схема продемонстрировала полное отсутствие нефизических осцилляций. Также схема использовалась при проведении параметрических исследований по изучению конвективных взаимодействий [3, 4], где было получено хорошее совпадение с результатами эксперимента для течения с быстрым переносом фронта температурного распределения при большом Pr .

Таким образом, новая конвективно-диффузионная разностная схема при высоких значениях числа Пекле близка к обычной схеме SMART, а при умеренных – к схеме QUI без ограничителя. Адаптивный алгоритм схемы включает ограничитель только в тех областях, где скорость движения жидкости превышает пороговое значение, для которого диффузия перестает подавлять осцилляции конвективной дискретизации. При дальнейшем повышении скорости вклад ограничителя возрастает и достигает полного значения, когда скорость (и связанное с ней число Пекле) стремится к бесконечности. Благодаря свойству адаптивности схема имеет высокую точность в основной области течения и подавляет осцилляции в областях резкого изменения градиентов.

2.5 Особенности дискретизации для неравномерной сетки

При моделировании сложных течений необходимо хорошее пространственное разрешение тонких пограничных слоев и мелких структур. В областях цилиндрической геометрии критическими являются зоны вблизи торцевых границ, поэтому в продольном направлении z сетка должны быть сделана неоднородной. При этом для достижения высокой эффективности численного метода желательно сохранить достаточно компактные шаблоны дискретизации. Последнее особенно важно для того, чтобы иметь возмож-

ность решать уравнение Пуассона для давления быстрым прямым методом.

Однако компактные шаблоны не позволяют производить вычисления с гарантированным вторым порядком точности для произвольной неоднородной сетки. Это относится, в частности, к аппроксимациям диффузионных потоков и градиентов давления, где используются двухточечные дискретизации. В свою очередь, при вычислении конвективных потоков потери точности не возникает в связи с использованием трехточечных дискретизаций по схеме QUI.

Проведем анализ погрешностей для используемых схем дискретизации. Если сравнить вторую производную, аппроксимированную для диффузионного члена через разницу численных потоков на границах вычислительной ячейки как $(C_{J+1} - C_J)/h_{J+1/2}$ и $(C_J - C_{J-1})/h_{J-1/2}$, со значением, вычисленным по интерполяционной формуле по трем точкам, то получим следующее выражение для относительной погрешности:

$$\frac{1}{4} \frac{h_{J-1} - 2h_J + h_{J+1}}{h_J}$$

Таким образом, погрешность в данном случае зависит только от второй производной шага сетки, то есть от плавности изменения этого шага. При этом она не зависит непосредственно от шага, то есть имеет по отношению к нему нулевой порядок.

Аналогично, сравнив градиент давления, аппроксимированный через разницу значений в соседних ячейках, с его трехточечной интерполяцией, получим выражение для оценки погрешности:

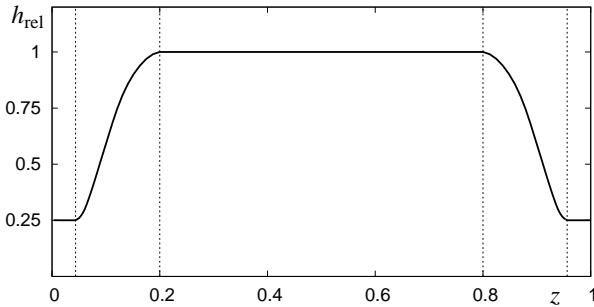
$$\frac{1}{4} \frac{h_{J+1} - h_J}{h_J} \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} h_J$$

Здесь погрешность зависит от первой производной шага сетки, то есть от его скорости изменения, а также от второй производной давления, и имеет по отношению к шагу первый порядок.

Полученные выражения показывают, что для достижения приемлемой точности дискретизации, сопоставимой с полученной на равномерной сетке, необходимо избегать быстрых и резких (неплавных) изменений шага

в областях с большими изменениями градиентов аппроксимируемых величин. В частности, в пристеночных областях с граничными слоями сетка должна быть сгущенная и локально равномерная. На определенном отдалении от стенок, за пределами погранслоев, шаг сетки может плавно меняться от своего минимального значения к стандартному (максимальному). Наконец, в основной зоне течения шаг может иметь постоянное стандартное значение.

На фиг. 7 показан профиль шага сетки (по отношению к максимальному) в направлении z для одного из вариантов расчета. На графике можно видеть зоны сгущения у границ $z = 0$ и $z = 1$, где шаг равен $1/4$ от стандартного значения, зоны плавного изменения шага, и основную зону с полным шагом $h = h_{\max}$. Число узлов сетки по направлению z равно 120, максимальный шаг – $1/80$, минимальный – $1/320$.



Фиг. 7. Пример зависимости шага сетки от координаты z

Представленный профиль обеспечивает относительную точность дискретизации диффузионных членов не хуже $1/200$ для зоны с самой резкой сменой шага (в начале его роста от минимальной величины), что, с учетом вынесения этой зоны за пределы погранслоев, сопоставимо с точностью других дискретизаций. Для дискретизации градиента давления множитель, определяющий погрешность, не превышает значения $\frac{1}{40}h$ для зоны с самой высокой скоростью роста шага, что близко ко второму порядку точности. При необходимости можно использовать профили с более плавной переменой шага за счет некоторого увеличения числа узлов сетки в рассматриваемом направлении.

3 Общая процедура решения и метод проекций

Наиболее эффективным способом расчета нестационарных течений с высокой временной точностью является раздельное решение уравнений (1) – (4) с использованием метода проекций. В основе этого метода лежит связывание уравнений переноса импульса (1) и неразрывности (2) с помощью вспомогательного уравнения Пуассона для давления. Уравнение Пуассона является самой ресурсоемкой частью алгоритма, поэтому на каждом временном шаге оно должно решаться только один раз, а сопряжение уравнений переноса и их интегрирование по времени должны быть организованы по экономичной схеме при условии достижения второго порядка точности.

3.1 Метод проекций для решения уравнения неразрывности

Исторически метод проекций (в англоязычной литературе – Fractional step method) рассматривался как прием для вычисления промежуточного поля скорости без учета уравнения неразрывности с последующим вычислением поля давления и коррекцией скорости для приведения ее к соленоидальному виду. Рассмотрим этот метод в более строгой операторной форме [14].

Распишем уравнение переноса импульса (1) в дискретном виде для момента времени $n + \frac{1}{2}$, что соответствует центральной точке на интервале выполнения временного шага $n + 1$:

$$\frac{\vec{V}^{(n+1)} - \vec{V}^{(n)}}{\Delta t} + L\vec{V}^{(n+1)} + H\vec{V}^{(n)} = -Gp^{(n+\frac{1}{2})} + s \quad (25)$$

Здесь L и H – операторы конвективно-диффузационной дискретизации скорости для нового и старого временных шагов, G – дискретный оператор градиента, s – прочие члены. Перепишем уравнение в следующем виде:

$$(I + \Delta t L)\vec{V}^{(n+1)} + \Delta t G(p^{(n+\frac{1}{2})} - p^{(n-\frac{1}{2})}) = \vec{V}^{(n)} + \Delta t (-Gp^{(n-\frac{1}{2})} - H\vec{V}^{(n)} + s)$$

Подставив q вместо $p^{(n+\frac{1}{2})} - p^{(n-\frac{1}{2})}$ и $r^{(n)}$ вместо правой части и добавив дискретный вид уравнения неразрывности (2), получим систему урав-

нений

$$(I + \Delta t L) \vec{V}^{(n+1)} + \Delta t G q = r^{(n)}$$

$$D \vec{V}^{(n+1)} = 0$$

Здесь D – дискретный оператор дивергенции, согласованный с оператором градиента G . Теперь запишем эту систему уравнений в матричном виде:

$$\begin{vmatrix} I + \Delta t L & \Delta t G \\ D & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \vec{V}^{(n+1)} \\ q \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} r^{(n)} \\ 0 \end{vmatrix}$$

Представим матрицу из левой части уравнения в виде приближенного разложения на два сомножителя и запишем вместе с ошибочным членом разложения:

$$\begin{vmatrix} I + \Delta t L & 0 \\ D & -\Delta t D G \end{vmatrix} \begin{vmatrix} I & \Delta t G \\ 0 & I \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \vec{V}^{(n+1)} \\ q \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} r^{(n)} \\ 0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \Delta t^2 L G q \\ 0 \end{vmatrix} \quad (26)$$

Легко видеть, что ошибочный член есть только в уравнении переноса импульса, и он имеет третий порядок по времени, так как $q \approx \frac{\partial p}{\partial t} \Delta t$. Это соответствует второму порядку точности для уравнения (25). В свою очередь, дискретное уравнение неразрывности для значения скорости на временном шаге $n+1$ не имеет ошибочного члена и решается точно. Теперь решим в два этапа разложенное уравнение (26):

$$\begin{vmatrix} I + \Delta t L & 0 \\ D & -\Delta t D G \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \vec{V}^{(*)} \\ q \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} r^{(n)} \\ 0 \end{vmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} I & \Delta t G \\ 0 & I \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \vec{V}^{(n+1)} \\ q \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \vec{V}^{(*)} \\ q \end{vmatrix}$$

В результате получим окончательную запись алгоритма метода проекций, в которой сначала вычисляется промежуточное (несоленоидальное) поле скорости для нового временного шага $\vec{V}^{(*)}$ с использованием значения давления с предыдущего шага, потом решается уравнение Пуассона для величины q (изменения давления) и производится коррекция поля скоро-

сти с приведением его к соленоидальному виду:

$$\begin{aligned}(I + \Delta t L) \vec{V}^{(*)} &= \vec{V}^{(n)} + \Delta t \left(-G p^{(n-\frac{1}{2})} - H \vec{V}^{(n)} + s \right) \\ DGq &= \frac{1}{\Delta t} D \vec{V}^{(*)} \\ \vec{V}^{(n+1)} &= \vec{V}^{(*)} - \Delta t Gq \\ p^{(n+\frac{1}{2})} &= p^{(n-\frac{1}{2})} + q\end{aligned}$$

При использовании других схем дискретизации по времени вместо центральной разности $\frac{\vec{V}^{(n+1)} - \vec{V}^{(n)}}{\Delta t}$ алгоритм останется таким же, только перед членами Δt может появиться небольшой коэффициент.

Таким образом, метод проекций в изложенном виде обеспечивает второй порядок точности по времени для скорости и при этом гарантирует соблюдение уравнения неразрывности с точностью, определяемой методом решения уравнения Пуассона.

3.2 Общая процедура решения исходной системы уравнений

Метод проекций обеспечивает связывание уравнений переноса импульса (1) и неразрывности (2) со вторым порядком точности по времени. При этом решение уравнения (1) производится частично неявным методом, с такой же точностью. Теперь с ними необходимо аналогично связать уравнения переноса скалярных величин (3) и (4), также обеспечив второй порядок точности как для связывания, так и для решения.

Эффективное решение этой проблемы заключается в определении скалярных переменных на середине временного шага. Например, при решении дискретного уравнения переноса импульса (25) необходимо использовать значение температуры $\theta^{(n+\frac{1}{2})}$ (или концентрации $C^{(n+\frac{1}{2})}$). Если бы эта величина была определена, как и скорость, на целом шаге, значение на момент времени $n + \frac{1}{2}$ пришлось бы вычислять с помощью экстраполяции с предыдущих временных шагов $n - 1$ и n , так как значение $\theta^{(n+1)}$, необходимое для интерполяции, к этому моменту еще не вычислено.

Таким образом, общая процедура решения для одного временного шага состоит из двух этапов. Сначала решается уравнение (25) с исполь-

зованием метода проекций и вычисляется скорость $\vec{V}^{(n+1)}$. Затем решается уравнение переноса скалярной величины в новом поле скорости и вычисляется значение $\theta^{(n+\frac{3}{2})}$ (и/или $C^{(n+\frac{3}{2})}$). При этом уравнение для скаляра записывается для момента времени $n + 1$, что соответствует центральной точке на интервале выполнения временного шага $n + \frac{3}{2}$:

$$\frac{\theta^{(n+\frac{3}{2})} - \theta^{(n+\frac{1}{2})}}{\Delta t} = f\left(\theta^{(n+\frac{3}{2})}, \theta^{(n+\frac{1}{2})}, \vec{V}^{(n+1)}\right)$$

Такое разнесение на половину шага по времени обеспечивает неявное связывание уравнений (1) и (2) со скалярными уравнениями (3) и (4) без применения экстраполяций с предыдущих шагов, что позволяет гарантировать точность и устойчивость интегрирования по времени.

4 Метод интегрирования по времени

Для интегрирования по времени используется частично неявная схема. Неявно трактуются критические части алгоритма – диффузионные члены уравнений (1), (3) и (4) в азимутальном направлении φ , а также диффузионные члены уравнения переноса первой скалярной переменной (3) в остальных направлениях и, дополнительно, диффузионные члены остальных уравнений в продольном направлении z . Выбор критических членов обусловлен в первую очередь спецификой полярной системы координат с малым шагом сетки по азимуту у оси цилиндра, а также необходимостью моделировать течения с низким числом Прандтля и с тонкими погранслоями у торцевых границ.

В свою очередь, конвективные члены трактуются явно, так как их нелинейный характер не позволяет организовать достаточно экономичную и точную неявную схему. Дополнительная сложность связана с наличием перекрестных членов полярной системы координат. Для смягчения требования к временному шагу используется схема дискретизации у оси цилиндра с повышенным порогом устойчивости в азимутальном направлении (см. раздел 2.3).

Комбинированный подход с избирательным использованием неявной

схемы позволяет существенно снизить вычислительные затраты, а также упростить реализацию алгоритма распараллеливания. При этом вынужденное уменьшение временного шага в связи использованием явной схемы для конвективных членов ведет к повышению точности интегрирования по времени, в результате чего отпадает необходимость использовать схемы более высокого порядка точности.

4.1 Сопряжение явной и неявной схем интегрирования

Рассмотрим общий вид уравнения переноса в дискретном виде:

$$\frac{C^{(n+1)} - C^{(n)}}{\Delta t} + LC^{(n+1)} + HC^{(n)} = 0 \quad (27)$$

Здесь L и H – операторы конвективно-диффузационной дискретизации для нового и старого временных шагов. Перепишем уравнение в следующем виде:

$$C^{(n+1)} = C^{(n)} - \Delta t LC^{(n+1)} - \Delta t HC^{(n)} \quad (28)$$

Рассмотрим по отдельности явную и неявную схемы интегрирования по времени второго порядка точности, а также различные варианты их сопряжения. Явная двухшаговая схема Рунге-Кутта (RK2) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} C^{(*)} &= C^{(n)} - \Delta t HC^{(n)} \\ C^{(n+1)} &= C^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} HC^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} HC^{(*)} \end{aligned}$$

Здесь сначала вычисляется промежуточное значение для нового шага по времени $C^{(*)}$, имеющее первый порядок точности. Затем по методу трапеций вычисляется окончательное значение $C^{(n+1)}$. Неявный оператор L для этой схемы отсутствует.

Неявная схема Кранка-Николсона (C-N) также использует метод трапеций:

$$C^{(n+1)} = C^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} LC^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} LC^{(n+1)}$$

Перепишем схему Кранка-Николсона следующим образом:

$$\begin{aligned} C^{(*)} &= C^{(n)} - \Delta t LC^{(n)} \\ \left(I + \frac{\Delta t}{2} L \right) \left(C^{(n+1)} - C^{(n)} \right) &= \left(C^{(*)} - C^{(n)} \right) \end{aligned} \quad (29)$$

Такой вид будет удобен для рассмотрения метода переменных направлений, а также для сопряжения с методом Рунге-Кутта. Отметим, что первый шаг переписанного алгоритма С-Н вычисляет промежуточное значение $C^{(*)}$ с первым порядком точности и совпадает с первым шагом RK2, а второй шаг представляет из себя неявную коррекцию этого значения с повышением точности до второго порядка.

Вернемся теперь к рассмотрению полного явно-неявного уравнения (28) и произведем объединение схем алгоритмов RK2 и С-Н:

$$C^{(*)} = C^{(n)} - \Delta t LC^{(n)} - \Delta t HC^{(n)} \quad (30)$$

$$C^{(n+1)} = C^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} LC^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} LC^{(n+1)} - \frac{\Delta t}{2} HC^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} HC^{(*)} \quad (31)$$

Перепишем второй шаг алгоритма следующим образом:

$$\begin{aligned} C^{(**)} &= C^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} LC^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} LC^{(*)} - \frac{\Delta t}{2} HC^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} HC^{(*)} \\ \left(I + \frac{\Delta t}{2} L \right) \left(C^{(n+1)} - C^{(*)} \right) &= \left(C^{(**)} - C^{(*)} \right) \end{aligned} \quad (32)$$

В результате алгоритм стал состоять из трех шагов – двух шагов RK2, вычисляющих промежуточное значение $C^{(**)}$ по явной схеме со вторым порядком точности, и последующей неявной коррекции этого значения.

Представленный алгоритм очень удобен для реализации, так как позволяет унифицировать вычисление шагов RK2 и избежать дублирования кода. Он используется для решения уравнений переноса импульса (1) и второй скалярной переменной (4) с применением неявной схемы для диффузионных членов по направлению φ . Однако для неявной схемы метода переменных направлений данный алгоритм не подходит, так как значение $C^{(**)}$ в этом случае будет вычислено с нарушением условия устойчивости более чем по одному направлению и неявная коррекция не сработает.

Это ограничение можно преодолеть, если производить неявную коррекцию метода переменных направлений непосредственно после вычисления промежуточного значения $C^{(*)}$, и только после этого выполнять второй шаг RK2 для повышения точности явных членов до второго порядка. Новый алгоритм имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} C^{(*)} &= C^{(n)} - \Delta t LC^{(n)} - \Delta t HC^{(n)} \\ \left(I + \frac{\Delta t}{2} L \right) \left(C^{(**)} - C^{(n)} \right) &= \left(C^{(*)} - C^{(n)} \right) \\ C^{(n+1)} &= C^{(**)} - \frac{\Delta t}{2} H \left(C^{(**)} - C^{(n)} \right) \end{aligned} \quad (33)$$

Формулу для вычисления $C^{(n+1)}$ можно представить в виде одного выражения:

$$C^{(n+1)} = C^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} LC^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} LC^{(**)} - \frac{\Delta t}{2} HC^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} HC^{(**)} \quad (34)$$

Здесь промежуточное значение для нового шага по времени $C^{(**)}$ вычислено с применением неявной коррекции для соответствующих членов, но имеет только первый порядок точности. Последний (третий) шаг алгоритма производит явную коррекцию по аналогии с неявной коррекцией на втором шаге. В результате формула (34) имеет симметричный вид по отношению к явным и неявным членам. Несмотря на то, что, в отличие от формулы (31), неявный дискретный оператор L применяется не к окончательному значению, а к промежуточному, правило трапеции соблюдается, и результат имеет также второй порядок точности.

Алгоритм (33) используется для решения уравнения переноса первой скалярной переменной (3), а также (опционально) для неявной трактовки диффузионных членов остальных уравнений в направлении z .

Отметим, что интегрирование по времени уравнения переноса импульса производится в векторном виде. Сначала выполняется первый (явный) шаг алгоритма (30) для всех трех компонент скорости, а затем осуществляется явно-неявная коррекция, повышающая точность до второго порядка. Таким образом обеспечивается связывание уравнений (5) – (7).

4.2 Метод переменных направлений

Использование неявной схемы в нескольких пространственных направлениях приводит к появлению линейной системы с матрицей, содержащей 5 или 7 диагоналей (в зависимости от числа размерностей) и имеющей разреженную структуру. Непосредственное решение такой системы требует очень больших вычислительных затрат. Метод переменных направлений предназначен для расщепления исходной сложной матрицы на 2 или 3 простых трехдиагональных сомножителя при сохранении второго порядка точности решения.

Рассмотрим метод переменных направлений для двумерного случая на примере неявной коррекции в методе Кранка-Николсона. Представим оператор дискретизации L в виде суммы двух одномерных операторов и запишем приблизительное разложение на два сомножителя вместе с ошибочным членом разложения:

$$\left(I + \frac{\Delta t}{2} L_{(x)} + \frac{\Delta t}{2} L_{(y)} \right) = \left(I + \frac{\Delta t}{2} L_{(x)} \right) \left(I + \frac{\Delta t}{2} L_{(y)} \right) - \frac{\Delta t^2}{4} L_{(x)} L_{(y)}$$

Ошибкачный член имеет второй порядок по времени, что соответствует всего лишь первому порядку точности для уравнения (27). Недостающий порядок можно получить, если использовать запись схемы С-Н по формуле (29). В этом случае ошибочный член будет равен

$$\frac{\Delta t^2}{4} L_{(x)} L_{(y)} \left(C^{(n+1)} - C^{(n)} \right) \approx \frac{\Delta t^3}{4} L_{(x)} L_{(y)} \frac{\partial C}{\partial t}$$

Таким образом достигается второй порядок точности по времени для уравнения (27). Выражение для трехмерного случая выглядит аналогично.

Представленный метод переменных направлений используется в уравнении переноса первой скалярной переменной (3) при проведении многомерной неявной коррекции по формуле (33) путем последовательного применения одномерных операторов.

4.3 Неявная трактовка перекрестных диффузионных членов

Диффузионные члены уравнений для компонент скорости V_r (5) и V_φ (6) в азимутальном направлении φ содержат взаимно перекрестные члены.

Поэтому неявную коррекцию по формуле (32) для V_r и V_φ нужно производить совместно, а не по отдельности. Выпишем эти члены с использованием матричного дифференциального оператора:

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{r^2} & -\frac{2}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{2}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} & \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{r^2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} V_r \\ V_\varphi \end{vmatrix}$$

Обозначим элементы соответствующего дискретного оператора как $L = \begin{vmatrix} L_1 & A_1 \\ A_2 & L_2 \end{vmatrix}$ и представим матричный оператор $(I + \frac{\Delta t}{2}L)$ в виде приближенного разложения вместе с ошибочным членом:

$$\begin{vmatrix} I + \frac{\Delta t}{2}L_1 & \frac{\Delta t}{2}A_1 \\ \frac{\Delta t}{2}A_2 & I + \frac{\Delta t}{2}L_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} I + \frac{\Delta t}{2}L_1 & 0 \\ \frac{\Delta t}{2}A_2 & I \end{vmatrix} \begin{vmatrix} I & \frac{\Delta t}{2}(I + \frac{\Delta t}{2}L_1)^{-1}A_1 \\ 0 & I + \frac{\Delta t}{2}L_2 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & O(\Delta t^2) \end{vmatrix}$$

Теперь решим в два этапа разложенное матричное уравнение, соответствующее формуле (32), и получим следующую запись алгоритма для неявной коррекции перекрестных членов с использованием аналогичной нотации:

$$\begin{aligned} \left(I + \frac{\Delta t}{2}L_1 \right) \left(V_r^{(***)} - V_r^{(*)} \right) &= \left(V_r^{(**)} - V_r^{(*)} \right) \\ \left(I + \frac{\Delta t}{2}L_2 \right) \left(V_\varphi^{(n+1)} - V_\varphi^{(*)} \right) &= \left(V_\varphi^{(**)} - V_\varphi^{(*)} \right) - \frac{\Delta t}{2}A_2 \left(V_r^{(***)} - V_r^{(*)} \right) \\ \left(I + \frac{\Delta t}{2}L_1 \right) \left(V_r^{(n+1)} - V_r^{(***)} \right) &= -\frac{\Delta t}{2}A_1 \left(V_\varphi^{(n+1)} - V_\varphi^{(*)} \right) \end{aligned}$$

Здесь к двум основным шагам алгоритма для неявной коррекции V_r и V_φ добавился третий, обеспечивающий неявное связывание уравнений (5) и (6) через перекрестные члены. Отметим, что погрешность разложения матричного уравнения, записанного по аналогии с формулой (32), имеет третий порядок, что соответствует второму порядку точности для исходных уравнений.

Применение описанного метода позволило существенно повысить порог устойчивости схемы интегрирования по времени и снять ограничения на временной шаг, связанные с диффузионными членами и обусловленные малыми расстояниями между узлами сетки вблизи оси цилиндра.

4.4 Псевдостационарный режим

Рассмотренный метод интегрирования по времени обеспечивает реалистичное моделирование со вторым порядком точности. Однако в ряде случаев требуется ускоренное достижение стационарного режима либо получение псевдостационарного течения [3].

Для расчета псевдостационарного режима применена специальная схема интегрирования по времени. Суть данного подхода состоит в использовании разных коэффициентов во временных членах $\partial/\partial t$ уравнений переноса импульса (1) и скалярной переменной (3). Уравнение для скаляра модифицируется таким образом, чтобы в нем процесс переноса развивался намного быстрее, чем в уравнении для импульса. Благодаря такому искажению развития течения в определенных случаях удается добиться форсированного приведения результата моделирования к стационарному виду. Полученный результат будет являться корректным решением системы уравнений (1) – (3) с исключенными из них временнымми членами $\partial/\partial t$.

Модифицированное уравнение переноса скаляра (температуры) имеет вид

$$\frac{1}{C_F} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{V} \theta) = \frac{1}{Pr} \nabla^2 \theta$$

Коэффициент C_F характеризует ускорение процесса переноса тепла в сравнении с переносом импульса. В расчетах [3] использовалось значение $C_F = 4$, позволившее привести изначально колебательное течение к стационарному состоянию. Следует отметить, что, устремив значение коэффициента C_F к бесконечности, можно получить стационарную схему интегрирования по времени для данного уравнения.

В англоязычной литературе представленная схема интегрирования по времени известна под названием "False transient method".

4.5 Контроль шага интегрирования по времени

В представленном методе интегрирования по времени предполагается, что временной шаг на протяжении сеанса моделирования остается постоянным. Это ограничение вызвано тем, что реализация переменного шага по-

требовала бы усложнения схемы интегрирования для строгого обеспечения второго порядка точности, а также введения неочевидных и небезопасных (с точки зрения точности и устойчивости расчета) методов адаптивной подстройки шага. Однако пользователь может принудительно менять шаг в процессе счета либо при повторном старте задачи с контрольной точки в предположении, что влияние одноразовых изменений шага на точность будет незначительным.

Контроль временного шага по результатам моделирования представляет из себя сложную задачу, так как локальные нарушения условия устойчивости по критерию CFL и прочим ограничениям могут породить нефизические эффекты, при этом не приводя к разрушению расчета. Отслеживание локального числа CFL также затруднено в связи с многомерностью метода и особенностями сочетания явных и неявных схем для цилиндрической системы координат.

Удобным способом контроля является отслеживание нормы (максимума модуля по всей области) дивергенции скорости сразу после вычисление промежуточного (несоленоидального) поля, то есть непосредственно перед выполнением коррекции скорости по градиенту давления в методе проекций. В случаях, когда пороги устойчивости не нарушаются, эта величина определяется лишь динамикой моделируемого процесса и значением шага по времени. В случае превышения порога норма дивергенции скорости резко возрастает, что позволяет отследить нарушения в расчете. Другими способами эти нарушения обнаружить трудно, так как схема метода проекций немедленно возвращает дивергенцию в нулевое значение, и остаются только косвенные (нефизические) нарушения, которые могут проявиться намного позже.

Описанный способ контроля успешно использовался при проведении параметрических исследований [3, 4]. Данный способ позволяет проводить первоначальную настройку и оперативную адаптацию временного шага при гарантированном обеспечении точности интегрирования по времени.

5 Метод решения уравнения Пуассона

Решение уравнения Пуассона для давления является самой ресурсоемкой частью вычислительного алгоритма. Это связано с тем, что матрица линейной системы дискретизированного уравнения характеризуется отсутствием строгого диагонального преобладания и имеет разреженную структуру. При этом, в отличие от матрицы дискретизации уравнения переноса, к ней не может быть применен метод переменных направлений. Плохая обусловленность матрицы уравнения Пуассона связана с особенностями соответствующего ей физического механизма – переноса информации в несжимаемой жидкости через давление с бесконечной скоростью.

С другой стороны, многомерный оператор Лапласа в уравнении Пуассона обладает свойством сепарабельности, которое заключается в том, что на ортогональных сетках его можно представить как сумму одномерных операторов, и при этом каждая составляющая будет зависеть только от своей координаты: $L(i, j) = L_{xx}(i) + L_{yy}(j)$ (для двумерного случая). Благодаря этому для решения уравнения Пуассона в областях регулярной геометрии при наложении определенных ограничений на граничные условия может быть разработан быстрый прямой метод, относящийся к классу методов разделения переменных.

Рассмотрим дискретный вид уравнения Пуассона для двумерной задачи:

$$L_{xx}(i)q(i, j) + L_{yy}(j)q(i, j) = f(i, j) \quad (35)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде разложения по базису собственных функций одномерного оператора L_{xx} :

$$q(i, j) = \sum_m \tilde{q}_m(j)\varphi_m(i) \quad (36)$$

$$f(i, j) = \sum_m \tilde{f}_m(j)\varphi_m(i) \quad (37)$$

Здесь $\varphi_m(i)$ – собственные функции оператора, $\tilde{q}_m(j)$ – искомые коэффициенты разложения неизвестной $q(i, j)$, $\tilde{f}_m(j)$ – коэффициенты разложения правой части уравнения. Пределы суммирования по m не показаны,

так как они зависят от типа дискретизации. Каждая собственная функция $\varphi_m(i)$ имеет связанное с ней собственное значение λ_m :

$$L_{xx}(i)\varphi_m(i) = \lambda_m\varphi_m(i) \quad (38)$$

Подставим (36) – (38) в уравнение (35) и получим, с учетом взаимной ортогональности собственных функций, семейство независимых одномерных уравнений:

$$\lambda_m \tilde{q}_m(j) + L_{yy}(j)\tilde{q}_m(j) = \tilde{f}_m(j) \quad (39)$$

Таким образом, алгоритм метода разделения переменных сводится к трем этапам: разложению функции в правой части уравнения $f(i, j)$ в ряд $\tilde{f}_m(j)$, решению независимых одномерных уравнений (39) и суммированию ряда $\tilde{q}_m(j)$ для вычисления искомой функции $q(i, j)$. При этом каждое из уравнений (39) имеет простую трехдиагональную матрицу и решается методом прогонки.

Данный алгоритм широко известен под названием метода Фурье. В этом методе разложение в ряд и суммирование ряда производятся с помощью Быстрого преобразования Фурье (БПФ). Однако его применимость ограничена специальным видом сетки по пространственному направлению, соответствующему оператору L_{xx} : сетка должна быть равномерной, число узлов должно быть равно степени двойки (либо произведению небольших простых чисел), и к граничным условиям предъявляются определенные требования. В свою очередь, метод Фурье очень экономичен, так как число арифметических операций в БПФ, приходящихся на один узел сетки, имеет логарифмическую зависимость от размерности задачи в соответствующем направлении.

В более общем случае разложение и суммирование производятся непосредственно, с использованием процедуры перемножения матриц. При этом вычислительные затраты на один узел сетки имеют линейную зависимость от соответствующей размерности задачи. С другой стороны, в этом случае алгоритм не накладывает ограничений на равномерность сетки и число узлов.

В описываемом численном методе для решения уравнения Пуассона в областях цилиндрической геометрии используется сочетание обоих ва-

риантов. Для азимутального направления φ применяется метод Фурье с использованием БПФ, а для осевого направления z – общий вид метода с перемножением матриц. После двух этапов разложения решаются независимые системы с трехдиагональными матрицами в радиальном направлении r , а затем производится суммирование рядов в обратной последовательности (сначала по z , потом по φ).

Представленный метод позволяет снять требования по сетке в направлении z и обеспечить сгущения у торцевых границ, необходимые для моделирования процессов в тонких погранслоях. При этом формально он является очень дорогим: на один узел сетки приходится $O(N)$ арифметических операций, в то время как метод Фурье требует всего $O(\log(N))$, а использовавшийся ранее метод рассечения области [15] – $O(\sqrt{N})$ операций. Однако на практике новый метод оказывается вполне конкурентоспособным по производительности с остальными, так как процедуры перемножения матриц в современных процессорах выполняются очень быстро – для этого существуют оптимизированные подпрограммы в библиотеках BLAS-3, позволяющие достигать 80% от пиковой производительности. В следующих поколениях процессоров перемножение матриц будет производиться еще быстрее, что позволит снизить стоимость метода. С другой стороны, схемы адресации памяти в альтернативных методах являются неоптимальными для современных процессоров и существенно снижают скорость вычислений.

В результате новый метод решения уравнения Пуассона работает всего в 1.5 раза медленнее, чем метод Фурье, при этом не имея ограничений по сетке в направлении z . Ранее использовался метод рассечения области [15], который тоже не имеет ограничений по сетке. Этот метод основан на разбиении двумерной области на узкие полосы, разделенные сепараторами, с перенумерацией узлов сетки таким образом, чтобы результирующая матрица линейной системы имела меньшую ширину ленты. В результате применение сложной схемы разложения матрицы позволяет снизить формальную вычислительную стоимость алгоритма до $O(\sqrt{N})$ операций на один узел сетки. Однако новый метод, несмотря на вычислительную сложность $O(N)$, оказался несколько быстрее метода рассечения области.

Кроме того, он обладает хорошим потенциалом распараллеливания.

Следует отметить, что представленный метод решения уравнения Пуассона (как и другие быстрые прямые методы) имеет на порядок более высокую скорость работы, чем итерационные на основе преобусловленного метода сопряженных градиентов [16]. Например, при использовании настоящего метода суммарные затраты на решение уравнения Пуассона вместе с процедурами коррекции скорости и давления составляют всего 20-25% от общего времени решения задачи. Более конкурентоспособными из итерационных методов являются многосеточные (мультигрид), хотя и они в несколько раз медленнее прямых методов. Применение многосеточных методов станет необходимым при переходе на неортогональные расчетные сетки.

6 Оптимизация и распараллеливание алгоритма

Описанный в предыдущих разделах численный метод основан на эффективной схеме решения с применением оптимального сочетания явных и неявных процедур интегрирования по времени и использованием быстрого прямого метода решения уравнения Пуассона. Все этапы алгоритма расчета запрограммированы с учетом характеристик и ограничений современных микропроцессоров. Благодаря этому достигнута высокая вычислительная эффективность метода, что позволяет использовать его для реалистичного моделирования на подробных сетках пространственных нестационарных течений в переходных и турбулентных режимах.

Однако с переходом к более высокому пространственному и временному разрешению для прямого моделирования турбулентности требуется существенное ускорение метода. Для примера, расчет задачи с размером сетки 10^6 узлов и 1 млн шагов интегрирования по времени занял в 2004 году более 10 суток на одноядерном процессоре [2]. С тех пор производительность процессорного ядра выросла всего в 2-3 раза, что недостаточно для удовлетворения возросших потребностей. Таким образом, для дальнейшего увеличения скорости счета необходимо распараллеливание алгоритма для современных многоядерных процессоров и вычислитель-

ных систем с общей памятью.

Ранее параллельный счет был возможен только на системах с распределенной памятью (клUSTERах). Как правило, такие системы устанавливаются в немногочисленных вычислительных центрах коллективного пользования или крупных лабораториях, и доступ к ним ограничен. Распараллеливание для этих систем может производиться только в рамках модели с распределенной памятью с использованием библиотеки MPI, что требует значительной переделки существующих задач. Кроме того, многие алгоритмы не могут быть эффективно распараллелены в этой модели.

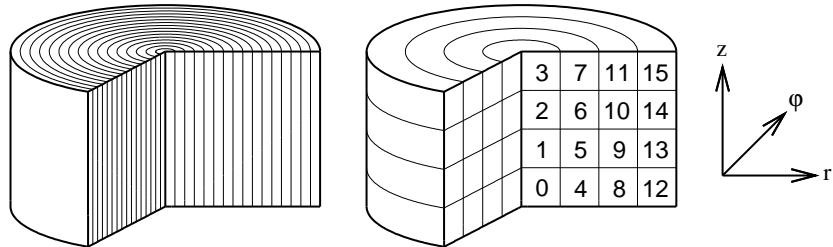
В настоящее время получили массовое распространение многоядерные процессоры. Типичный современный процессор имеет от 4 до 8 вычислительных ядер и представляет из себя высокопроизводительную систему с общей памятью. Небольшой двухпроцессорный сервер (или узел кластера), построенный на таких процессорах, может содержать от 8 до 16 ядер. В связи с широкой доступностью многоядерных систем критерии и методы распараллеливания должны быть пересмотрены. Раньше распараллеливание было лишь опцией, когда опытный программист мог запустить задачу на дорогостоящей удаленной вычислительной системе и получить выигрыш в скорости счета. Сейчас программист обязан провести распараллеливание задачи для своего настольного компьютера или доступного сервера – иначе он не сможет эффективно и рационально использовать вычислительный потенциал многоядерной системы.

В результате благодаря распараллеливанию современный недорогой 4-ядерный процессор может иметь на порядок более высокую производительность, чем одноядерный процессор предыдущих поколений. При этом использование OpenMP [17], стандартного параллельного расширения языков программирования Fortran и C, во многих случаях позволяет адаптировать существующие программы без серьезных переделок.

6.1 Метод распараллеливания

Для распараллеливания алгоритма используется языковое расширение OpenMP. В рамках этого расширения наиболее естественным является раз-

бение расчетной области в одном пространственном направлении, соответствующем последнему индексу в адресации массивов в языке Fortran (фиг. 8, слева). Разбиение, как правило, производится автоматически, при использовании директивы `!$OMP DO` перед каждым циклом, который должен быть распараллелен. Такое разбиение является эффективным способом разделения трехмерных массивов на подмассивы с учетом иерархической организации памяти в современных вычислительных системах [18].



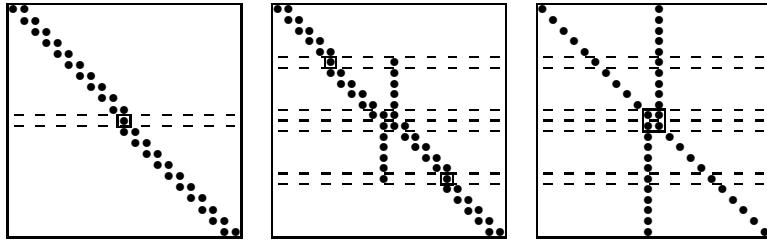
Фиг. 8. Разбиение расчетной области для распараллеливания

Однако подобное разбиение может быть применено только к тем частям алгоритма, которые не содержат зависимостей между итерациями самого внешнего цикла, соответствующего пространственному направлению r . К ним относятся все явные шаги алгоритма, а также шаги с неявной трактовкой в направлениях φ и z . В свою очередь, неявность по r порождает зависимость между итерациями, так как требует решения трехдиагональных линейных систем в этом направлении.

Алгоритм решения уравнения Пуассона также содержит части обоих типов – как без зависимостей между итерациями (FFT по направлению φ и суммирование рядов по z), так и с зависимостями (трехдиагональные прогонки по r).

Наиболее сложным для распараллеливания является решение трехдиагональных систем в направлении r . Стандартный метод исключения Гаусса для этого использовать нельзя, так как каждая из линейных систем распределена между несколькими подобластями, обрабатываемыми в разных процессорных ядрах. Поэтому для параллельного решения таких систем применен специальный метод, известный как "Two-way parallel partition method" [19, 20]. При распараллеливании на два потока этот ме-

тод выглядит как встречная прогонка (фиг. 9, слева), а для четырех потоков – как ее иерархическое обобщение (фиг. 9, в центре и справа). В последнем случае требуется дополнительный (третий) проход алгоритма для исключения элементов столбца матрицы, заполненного на первых двух проходах.



Фиг. 9. Иллюстрация метода распараллеливания трехдиагональной линейной системы на 2 и на 4 потока

Представленный метод позволяет производить одновременную обработку частей матрицы в разных процессорных ядрах. При этом каждому исключаемому элементу, изображенном на фиг. 9, соответствует плоскость (φ, z) , и вычисления ведутся в натуральном порядке (сначала по φ , далее по z и по r), как и в остальных частях алгоритма. По завершении каждого прохода производится синхронизация средствами OpenMP и вычисляются элементы, расположенные на границах между подобластями.

Описанная схема распараллеливания решения трехдиагональной системы может быть расширена до 8 потоков и более. Однако в этом случае вычислительная сложность алгоритма значительно возрастет, так как будет происходить заполнение дополнительных столбцов матрицы и увеличится количество проходов. Более оптимальным решением является двумерное разбиение области для этого алгоритма (фиг. 8, справа), когда в направлении r область разбивается не более чем на 4 части, а в направлении z производится дополнительное разбиение.

Таким образом, реализован комбинированный метод распараллеливания с автоматическим одномерным разбиением области для основной части алгоритма и двумерным разбиением в сочетании со специальной схемой решения трехдиагональных систем для неявного метода переменных направлений и для решения уравнения Пуассона. Метод продемонстриро-

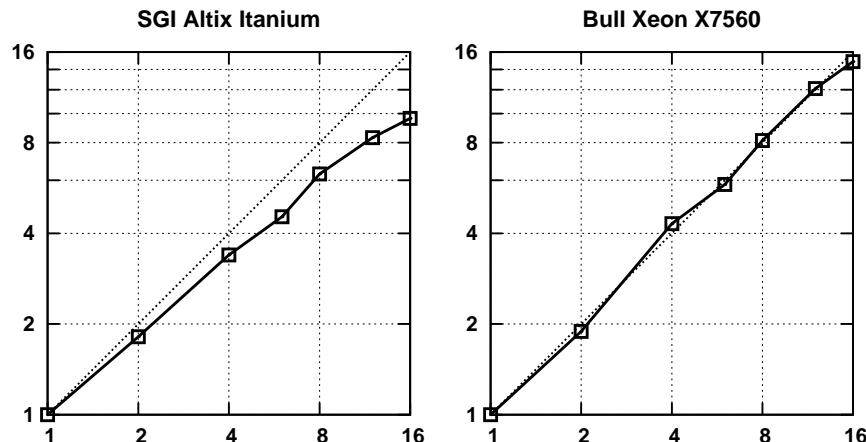
вал высокую эффективность при проведении расчетов на вычислительных системах, содержащих до 32 процессорных ядер [21].

6.2 Анализ эффективности распараллеливания

Разработанный метод распараллеливания тестировался на нескольких многоядерных компьютерах, включая недорогие настольные системы с 4-ядерными процессорами Intel Core i7-9xx, двухпроцессорные узлы кластера и крупные многопроцессорные серверы, имеющие до 32 вычислительных ядер [21]. Для тестирования использовался один из вариантов расчета течения расплава в модели метода Чохральского [3] с размером сетки $128 \times 100 \times 120$.

На фиг. 10 показана зависимость ускорения счета от числа потоков задачи для двух самых крупных вычислительных систем – SGI Altix 350 и Bull S6030. Система Altix построена на одноядерных процессорах Intel Itanium поколения 2004 г. и собрана из двухпроцессорных узлов со своей локальной памятью по принципам архитектуры с неоднородной памятью (NUMA, Non-Uniform Memory Architecture). Подобная организация накладывает определенные ограничения на метод распараллеливания [18, 21]. Несмотря на эти ограничения, система Altix продемонстрировала неплохую эффективность распараллеливания при использовании до 24 процессоров.

Более современная вычислительная система Bull S6030, построенная



Фиг. 10. Эффективность распараллеливания для двух многоядерных систем

на четырех 8-ядерных процессорах Intel Xeon X7560, также организована по принципам NUMA. Однако благодаря быстрым межпроцессорным соединениям и многоуровневой подсистеме памяти с высокой пропускной способностью эта система демонстрирует практически линейное масштабировании задачи при числе потоков от 1 до 16, и достаточно высокую эффективность на 24 и 32 потоках.

При использовании настольных компьютеров с 4-ядерными процессорами Intel Core i7-9xx достигается ускорение счета в 3.5 раза, что является хорошим результатом в связи с ограниченной пропускной способностью подсистемы памяти. Компьютеры такого типа вместе с системой Altix использовались для проведения массовых расчетов в рамках параметрического исследования по изучению конвективных взаимодействий [4].

6.3 Качественные характеристики метода

Вычислительная сложность используемого метода оценивалась на варианте расчета в модели метода Чохральского с размером сетки $128 \times 100 \times 120$. Моделировались конвективные взаимодействия в жидкости с высоким числом Прандтля, в связи с чем использовалась дорогостоящая схема конвективной дискретизации с ограничителем, а также неявная трактовка диффузионных членов в осевом направлении z (для других вариантов расчетов вычислительные затраты были бы несколько ниже).

На процессоре Intel Core i7-920 с тактовой частотой 2.66 ГГц время выполнения одного временного шага составило 0.618 с в последовательном режиме и 0.177 с при распараллеливании на 4 потока. Это соответствует 0.40 мкс и 0.115 мкс в пересчете на узел сетки. Таким образом, моделирование продолжительностью в 1 млн временных шагов занимает в параллельном режиме приблизительно 49 часов.

Для примера, на одноядерном процессоре предыдущего поколения (2004 г.) AMD Athlon64 с частотой 2 ГГц продолжительность подобного сеанса моделирования составила бы 480 часов, или 20 суток. Такое сравнение наглядно демонстрирует эффект от применения распараллеливания для современных микропроцессоров.

Можно также оценить эффективность выполнения алгоритма в вычислительных ядрах процессора. Число арифметических операций, приходящихся на один узел сетки, приблизительно равно 1500. Из них 400 относятся к перемножению матриц для суммирования рядов в методе решения уравнения Пуассона. Такие операции выполняются очень быстро благодаря использованию специальных библиотек, оптимизированных для современных микропроцессоров. Арифметическая производительность при выполнении одного потока составляет, таким образом, 3.75 GFLOPS (миллиардов операций с плавающей точкой в секунду), или 35% от пиковой производительности процессорного ядра. Это довольно высокий показатель – обычно вычислительные алгоритмы достигают не более 20% для этого поколения процессоров. При исполнении в 4 потока производительность составляет 13 GFLOPS, или 30% от пиковой.

Приведенные результаты характеризуют оценку продолжительности сеансов моделирования с учетом размеров сеток, а также пределы применимости метода на вычислительных системах нынешнего и будущих поколений.

7 Примеры применения численного метода

Первая версия представленного вычислительного кода была создана в 1997 г. и имела некоторые ограничения по сравнению с нынешней. В частности, в ней не были реализованы переменный шаг сетки и неосциллирующая конвективная схема с ограничителем, отсутствовало распараллеливание. Начальные применения программы включали в себя тестирование по бенчмарку Вилера для сравнения с другими цилиндрическими кодами, исследование конвективных взаимодействий в расплаве арсенида галлия в модели Чохральского [1], моделирование датчика конвекции "Дакон" для орбитальной станции "Мир" [5, 6], изучение течений в цилиндрических каналах и зазорах, заполненных пористым веществом [8]. Два последних применения потребовали создания специальных версий кода для учета, соответственно, переноса тепла в цилиндрической стенке полости и свойств пористой среды в соответствии с уравнением Дарси.

В дальнейшем было проведено распараллеливание кода для вычислительных систем с распределенной памятью. Для повышения эффективности распараллеливания был разработан метод решения уравнения Пуассона на основе сочетания циклической редукции и БПФ (FACR – Fourier Analysis with Cyclic Reduction). Распараллеленный код активно использовался для исследования производительности вычислительных систем, содержащих до 16 процессоров [22, 23].

На следующем этапе была проведена масштабная переработка кода с введением неравномерных сеток, схем с ограничителями, двойной диффузии и прочих усовершенствований. Переменный шаг сетки потребовал применения метода рассечения области [15] для решения уравнения Пуассона. Одновременно был создан трехмерный код для областей прямоугольной геометрии, который использовался для изучения принудительных течений в установке роста водорастворимых кристаллов с очень низкой концентрационной диффузией ($Sc = 1000$) и в некоторых других задачах.

Расчетная программа для цилиндрической геометрии была представлена на международный конкурс тестов (бенчмарков) производительности вычислительных систем SPEC CPU 2006, успешно прошла квалификационные испытания и вышла в 4-й тур конкурса. В процессе испытаний программа тестировалась на множество вычислительных систем, продемонстрировав хорошую переносимость и полное соответствие стандартам языка Fortran.

Появление многоядерных процессоров вместе с ростом вычислительных потребностей привело к необходимости распараллеливания, а также реализации нового метода решения уравнения Пуассона. Благодаря этим изменениям пределы применимости кода были существенно повышенены. Ниже описываются наиболее важные примеры применения численного метода в последние годы.

Бенчмарк для сравнения цилиндрических кодов

Для оценки точности и адекватности вычислительных кодов используются бенчмарки – специальные постановки задач с идеализированными гео-

метрическими и физическими параметрами. Необходимость в бенчмарках возникает в первую очередь потому, что постановки экспериментальные тестов, как правило, не позволяют строго выдержать температурные и прочие граничные условия. Обычно по результатам эксперимента имеется лишь приблизительная информация о его параметрах. Поэтому точное воспроизведение характеристик физического эксперимента в расчете невозможно.

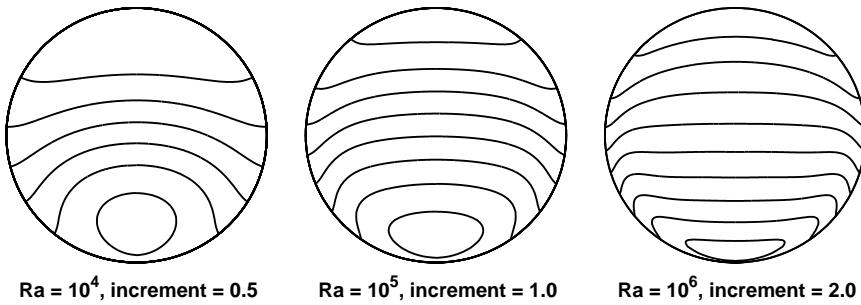
Исторически бенчмарки в первую очередь формулировались для прямоугольной геометрии. Большую известность получил двумерный тест Де Валь Девиса [24], в котором моделируется свободноконвективное течение в поле силы тяжести в квадратной полости с изотермическими вертикальными границами (нагретой и охлаждаемой) и теплоизолированными горизонтальными. С развитием пространственных расчетов появился трехмерный вариант этого теста для кубической полости [25].

Расчет течений в областях цилиндрической геометрии является более трудной задачей в связи со сложностью дискретизаций около оси цилиндра. Для сравнения цилиндрических кодов была сформулирована постановка модельного теста [7], аналогичная задаче для куба. Расчетная область теста представляет из себя горизонтально ориентированный цилиндр единичной длины и диаметра (фиг. 1, справа). Торцевые границы – изотермические (охлаждаемая и нагретая), цилиндрическая теплоизолирована. Полость заполнена воздухом ($Pr = 0.71$), сила тяжести направлена вертикально вниз. Тестирование проводится при трех значениях числа Рэлея – 10^4 , 10^5 и 10^6 .

В табл. 1 показаны основные результаты расчетов [7]. Приведены характеристики теплообмена и конвективного течения. Также показаны координаты максимумов профилей локального числа Нуссельта и компонент скорости (здесь ось x направлена вертикально, ось y – горизонтально, перпендикулярно оси цилиндра). На фиг. 11 показаны изолинии локального числа Нуссельта на нагретой торцевой границе ($z = 1$). Приведенные в таблице и на рисунке результаты могут рассматриваться как референсные для проведения сравнений с другими кодами.

Таблица 1. Результаты бенчмарка для различных режимов течения

Ra	10^4	10^5	10^6
сетка (φ, z, r)	$128 \times 82 \times 32$	$128 \times 82 \times 32$	$128 \times 114 \times 45$
шаг сетки по z	$1/128 \div 1/64$	$1/128 \div 1/64$	$1/180 \div 1/90$
$Nu_{\text{overall}}(z = 1)$	2.0096	4.4391	8.9050
$Nu_{\text{local max}}(z = 1, y = 0)$	3.7070	8.4995	18.9273
координата x ($Nu_{\text{local max}}$)	-0.341	-0.403	-0.460
$V_x \max(x = 0, y = 0)$	22.84	84.17	285.77
координата z ($V_x \max$)	0.890	0.939	0.964
$V_z \max(z = 0.5, y = 0)$	25.23	66.11	141.55
координата x ($V_z \max$)	-0.315	-0.348	-0.372



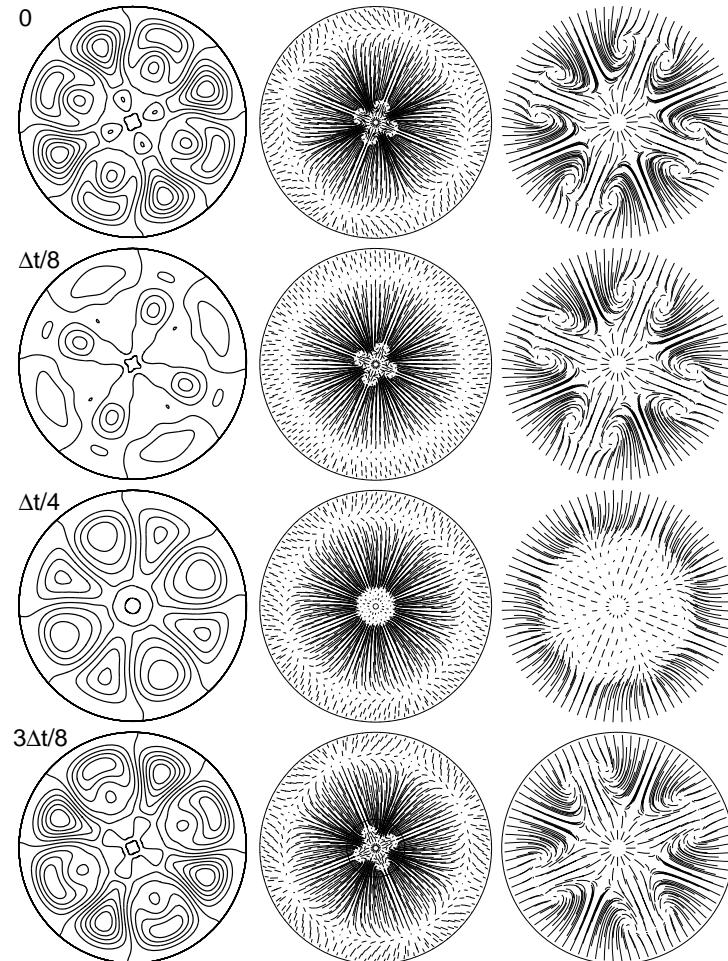
Фиг. 11. Изолинии локального числа Нуссельта на нагретой границе

Моделирование термокапиллярных течений

Другим примером применения рассматриваемого численного метода является моделирование термокапиллярной конвекции для установки гидродинамической модели Чохральского (фиг. 1, слева) в отсутствие силы тяжести [2]. Целью исследования являлось определение критических значений числа Марангони, при которых течение становится колебательным. Моделирование проводилось с двумя типами граничных условий на свободной поверхности расплава – изотермическими с линейным профилем температуры, и адиабатическими. Для обоих случаев изучались характеристики сверхкритического колебательного режима.

Особый интерес в данном исследовании представляют картины течения в разные фазы периода колебаний и в разных сечениях по вертикаль-

ной координате z , а также пространственные траектории движения частиц жидкости и их перестройка. На фиг. 12 оказан пример перестройки изотерм и траекторий в одном из сечений для сверхкритического режима с линейным профилем температуры на поверхности расплава.



Фиг. 12. Картина течения в плоскости $z = 0.96$ для колебательного режима $Mn = 5 \cdot 10^4$ в последовательные моменты времени. Показаны изолинии отклонения температуры от осредненных значений, траектории движения в плоскости сечения и те же траектории в центральной части, ограниченной радиусом $r = 0.25$ (в увеличенном виде)

Результаты исследования позволили глубже понять механизмы возникновения колебаний при потере устойчивости стационарного течения и изучить особенности неосимметричного колебательного режима, а также определить влияние температурных граничных условий на значение критического числа Марангони, при котором теряется устойчивость, и на структуру трехмерного течения.

Параметрическое исследование конвективных взаимодействий при различных числах Прандтля

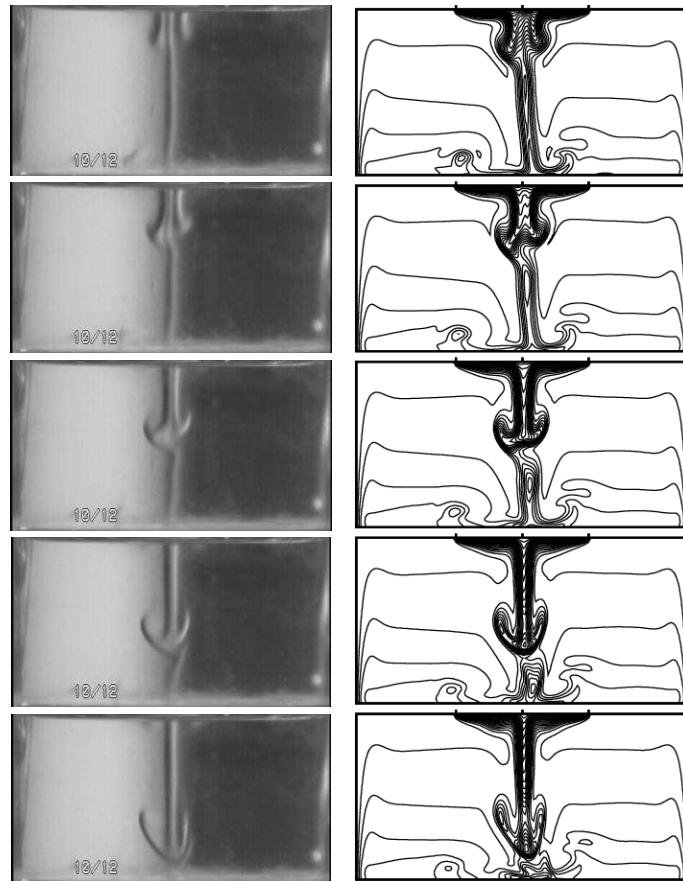
Данное исследование также проводилось для конфигурации гидродинамической модели метода Чохральского (фиг. 1, слева) с двумя типами граничных условий на поверхности расплава (линейным профилем и адиабатическими). Изучалась натуральная тепловая конвекция в поле силы тяжести для широкого диапазона чисел Прандтля (от 0.01 до 30). Для каждого из значений Pr и в осесимметричном, и пространственном режимах определялось число Грасгофа, при котором происходит потеря устойчивости течения. Для ключевых значений числа Pr также исследовались характеристики течения в стационарном (предкритическом) и колебательном режимах. На основе полученных результатов была построена карта режимов, представляющая из себя графики зависимостей критического числа Грасгофа Gr_c от числа Прандтля с выделением зон стабилизации (максимума Gr_c) и смены опасных мод, когда потеря устойчивости происходит при меньше значении Gr , чем нарушение осевой симметрии.

Всего в рамках параметрического исследования было получено и обработано 100 режимов течения, по два режима на каждое найденное критическое число (предкритический и сверхкритический). С учетом последовательных приближений при поиске критических чисел, а также уточняющих вычислений было проведено около 400 сеансов счета. Продолжительность одного сеанса варьировалась от нескольких минут до нескольких часов в осесимметричной модели, и от десятков минут до десятков часов в пространственной, при использовании от 4 до 16 потоков на параллельных вычислительных системах.

Наибольший интерес из полученных результатов представляют новые данные по неустойчивости типа Рэлея-Бенара, проявляющейся в неосесимметричных течениях при больших Pr . Эта неустойчивость характеризуется образованием термиков, периодически отпадающих от границы кристалла и расплава и формирующих колебательный режим течения.

Такие явления характеризуются высокой динамикой нестационарного процесса, когда скорость движения головки термика достигает полови-

ны максимальной скорости движения жидкости в вертикальном направлении. Подобная динамика накладывает высокие требования к дискретизации конвективных членов уравнения переноса температуры при больших числах Прандтля. Используемая схема с адаптивным ограничителем позволяет избежать нефизических осцилляций при сохранении высокой точности дискретизации.



Фиг. 13. Сравнение результатов эксперимента [26] (слева) с расчетом (справа) при больших Pr . Показаны картины течения в последовательные моменты времени

На фиг. 13 показаны результаты расчета в варианте с теплоизолированной поверхностью при $\text{Pr} = 6.5$, $\text{Gr} = 10^6$ в сравнении с экспериментальными данными [26]. Можно видеть, что картины течения в экспериментальном и расчетном режимах очень хорошо совпадают. При этом по результатам расчета точно воспроизводится динамика развития термика и его неосесимметрична структура. По сведениям авторов, подобные результаты расчетов ранее в литературе не встречались и получены впервые.

Это сравнение показывает, что представленный численный метод позволяет моделировать сложные трехмерные динамичные течения с высокой реалистичностью.

8 Концепция прецизионного вычислительного кода

Представленный выше анализ численных приемов и схем, а также результаты тестирования и применения разработанного метода расчета течений позволяют сформулировать концепцию прецизионного вычислительного кода. Эта концепция подразумевает сбалансированность всех элементов расчетной схемы с точки зрения точности, адекватности и вычислительных затрат. При этом не предполагается использование схем дискретизации и интегрирования по времени с точностью выше второго порядка, методов совместного решения систем уравнений и прочих дорогостоящих усложнений, поскольку при полномасштабном совместном применении они многократно увеличивают вычислительные затраты без адекватного улучшения качества расчета, а при применении по отдельности – не достигают ожидаемого эффекта из-за несогласованности с остальными частями алгоритма.

Можно отметить следующий набор элементов и признаков численного метода, относящихся к прецизионному подходу:

- консервативные разностные схемы на основе метода конечных объемов с разнесенными сетками, обеспечивающие баланс тепловых (концентрационных) потоков с машинной точностью;
- пространственные дискретизации второго порядка точности, в том числе для граничных условий;
- аккуратная и надежная дискретизация у оси цилиндра на базе интерполяций в декартовой системе координат, позволяющая моделировать существенно неосесимметричные течения;
- неосциллирующие (монотонные) конвективные дискретизации второго порядка точности без искусственной диффузии для переноса

скалярной переменной с высоким числом Прандтля (вплоть до бесконечности);

- подробные сетки переменного шага с очень плавным профилем, подбором переменной части профиля вне областей с большими изменениями градиентов (на некотором удалении от границ) и, как следствие, с хорошим и точным разрешением погранслоев и пространственных структур;
- экономичная раздельная схема решения уравнений с использованием метода проекций;
- интегрирование по времени с гарантированной точностью 2-го порядка по времени, неявное связывание уравнений переноса импульса и скалярных переменных;
- избирательное применение неявных схем интегрирования и других приемов для увеличения временного шага;
- контроль локальных характеристик устойчивости схемы интегрирования по времени для избежания схемных осцилляций и других нефизических эффектов;
- решение уравнения Пуассона с машинной точностью для обеспечения точного выполнения уравнения неразрывности;
- оптимизация и распараллеливание алгоритма для обеспечения высокой численной эффективности.

Также можно выделить несколько пунктов, характеризующих новые и оригинальные приемы и методы, которые ранее в работах по расчетам течений несжимаемой вязкой жидкости не встречались:

- аккуратная дискретизация у оси цилиндра на базе декартовых интерполяций;
- конвективная схема с повышенным порогом устойчивости $CFL = 2$ у оси цилиндра;

- адаптивная монотонная конвективно-диффузионная схема для больших чисел Pr ;
- неявное связывание уравнений переноса импульса и скалярной переменной через половину временного шага;
- экономичный метод интегрирования по времени, объединяющий схемы Кранка-Николсона и Рунге-Кутта второго порядка с однократным решением уравнения Пуассона на временнóм шаге;
- применение метода разделения переменных с разложением по базису собственных функций для решения уравнения Пуассона на неоднородной сетке.

9 Заключение

В препринте представлен вычислительный код, предназначенный для исследования конвективных взаимодействий и тепломассопереноса в областях регулярной геометрии. Разработанный прямой метод решения обеспечивает высокую вычислительную эффективность алгоритма и позволяет моделировать на подробных сетках пространственные нестационарные течения в переходных и турбулентных режимах. В коде реализованы новые и оригинальные идеи, повышающие точность и устойчивость численного метода. Вычислительный код успешно использовался на протяжении длительного периода для моделирования течений расплавов и растворов в установках роста кристаллов, изучения процессов в условиях микрогравитации и в других задачах. В настоящее время продолжается активное использование высокопроизводительного параллельного варианта кода.

Список литературы

- [1] *Polezhaev V., Bessonov O., Nikitin N., Nikitin S.* Convective interaction and instabilities in GaAs Czochralski model // J. Crystal Growth, 2001, Vol. 230, P. 40–47.
- [2] *Бессонов О.А., Полежаев В.И.* Моделирование трехмерных надкритических термокапиллярных течений в методе Чохральского // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Естеств. науки, 2004, Спецвыпуск. Математика и механика сплошной среды, С. 60–67.
- [3] *Бессонов О.А., Полежаев В.И.* Нестационарные неосесимметричные течения в гидродинамической модели метода Чохральского при больших числах Прандтля // Изв. РАН. МЖГ, 2011, № 5, С. 16–32.
- [4] *Бессонов О.А., Полежаев В.И.* Неустойчивости тепловой гравитационной конвекции и теплообмен в модели метода Чохральского при различных числах Прандтля // Изв. РАН. МЖГ, 2013, № 1, С. 26–40.
- [5] *Бессонов О.А., Полежаев В.И.* Математическое моделирование конвекции в датчике “Дакон” в условиях реального космического полета // Космические Исследования, 2001, № 2, С. 170–178.
- [6] *Putin G., Babushkin I., Bogatyrev G. et al.* On the measurement of low-frequency microaccelerations on board an orbital station by the convection sensor “Dacon” // Advances in Space Research, 2003, Vol. 32, P. 199–204.
- [7] *Bessonov O., Brailovskaya V., Feoktistova L., Zilberberg V.* Numerical simulation of 2D and 3D convection in water-soluble crystal growth processes // International Conference “Advanced Problems in Thermal Convection”, Proceedings, Perm, 2004, P. 325–330.
- [8] *Бессонов О.А., Брайловская В.А.* Пространственная модель тепловой конвекции в зазоре между горизонтальными коаксиальными цилиндрами с анизотропным пористым заполнением // Изв. РАН. МЖГ, 2001, № 1, С. 145–155.

- [9] *Freitas C.J., Street R.L., Findikakis A.N., Koseff J.R.* Numerical simulation of three-dimensional flow in a cavity // Int. J. Num. Meth. Fl., 1985, Vol. 5, P. 561–575.
- [10] *Perng C.Y., Street R.L.* Three-dimensional unsteady flow simulations: Alternative strategies for a volume-averaged calculations // Int. J. Num. Meth. Fl., 1989, Vol. 9, P. 341–362.
- [11] *Boris J.P., Book D.L.* Flux-corrected transport. I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works // J. Comput. Phys., 1973, Vol. 11, P. 38–69.
- [12] *Sweby P.K.* High resolution schemes using flux-limiters for hyperbolic conservation laws // SIAM J. Num. Anal., 1984, Vol. 21, P. 995–1011.
- [13] *Gaskell P.H., Lau A.K.C.* Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm // Int. J. Num. Meth. Fl., 1988, Vol. 8, P. 617–641.
- [14] *Perot J.B.* An analysis of the Fractional step method // J. Comput. Phys., 1993, Vol. 108, P. 51–58.
- [15] *George A., Tang W.P., Wu Y.D.* Multilevel one-way dissection factorization // SIAM J. Matrix Anal. Appl., 2000, Vol. 22, P. 752–771.
- [16] *Accary G., Bessonov O., Fougère D. et al.* Efficient parallelization of the preconditioned Conjugate gradient method // Lecture Notes in Computer Science, 2009, Vol. 5698, P. 60–72.
- [17] *Dagum L., Menon R.* OpenMP: An industry-standard API for shared-memory programming // IEEE Computational Science and Engineering, 1998, Vol. 5, P. 46–55.
- [18] *Accary G., Bessonov O., Fougère D. et al.* Optimized parallel approach for 3D modelling of forest fire behaviour // Lecture Notes in Computer Science, 2007, Vol. 4671, P. 96–102.

- [19] *Walshaw C., Farr S.J.* A two-way parallel partition method for solving tridiagonal systems // University of Leeds, U.K., School of Computer Studies Research Report Series, 1993, Report 93.25.
- [20] *Bessonov O., Brailovskaya V., Polezhaev V., Roux B.* Parallelization of the solution of 3D Navier-Stokes equations for fluid flow in a cavity with moving covers // Lecture Notes in Computer Science, 1995, Vol. 964, P. 385–399.
- [21] *Bessonov O.* OpenMP parallelization of a CFD code for multicore computers: analysis and comparison // Lecture Notes in Computer Science, 2011, Vol. 6873, P. 13–22.
- [22] *Bessonov O., Fougère D., Roux B.* Parallel simulation of 3D incompressible flows and performance comparison for several MPP and cluster platforms // Lecture Notes in Computer Science, 2001, Vol. 2127, P. 401–409.
- [23] *Бессонов О.А.* Параллельное моделирование нестационарных течений несжимаемой жидкости в областях цилиндрической геометрии // Вестник Нижегородского университета. Сер. Математическое моделирование и оптимальное управление, 2005, Вып. 1 (28), С. 39–46.
- [24] *De Vahl Davis G.* Natural convection of air in a square cavity: A benchmark numerical solution // Int. J. Num. Meth. Fl., 1983, Vol. 3, P. 249–264.
- [25] *Бессонов О.А., Брайловская В.А., Никитин С.А., Полежаев В.И.* Тест для численных решений трёхмерной задачи о естественной конвекции в кубической полости // Математическое Моделирование, 1999, № 12, С. 52–58.
- [26] *Teitel M., Schwabe D., Gelfgat A.Yu.* Experimental and computational study of flow instabilities in a model of Czochralski growth // J. Crystal Growth, 2008, Vol. 310, P. 1343–1348.

Содержание

Введение	3
1 Математическая модель и параметры задачи	5
2 Схемы пространственной дискретизации	8
2.1 Дискретизация конвективных членов уравнений переноса	10
2.2 Дискретизация в полярной системе координат	12
2.3 Улучшенная конвективная дискретизация у оси цилиндра	16
2.4 Схема с ограничителем потока для высоких чисел Pr	17
2.5 Особенности дискретизации для неравномерной сетки	23
3 Общая процедура решения и метод проекций	26
3.1 Метод проекций для решения уравнения неразрывности	26
3.2 Общая процедура решения исходной системы уравнений	28
4 Метод интегрирования по времени	29
4.1 Сопряжение явной и неявной схем интегрирования	30
4.2 Метод переменных направлений	33
4.3 Неявная трактовка перекрестных диффузационных членов	34
4.4 Псевдостационарный режим	35
4.5 Контроль шага интегрирования по времени	36
5 Метод решения уравнения Пуассона	37
6 Оптимизация и распараллеливание алгоритма	40
6.1 Метод распараллеливания	42
6.2 Анализ эффективности распараллеливания	44
6.3 Количественные характеристики метода	45
7 Примеры применения численного метода	46
8 Концепция прецизионного вычислительного кода	52
9 Заключение	55

Бессонов Олег Аркадьевич

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ НЕСЖИМАЕМОЙ
ЖИДКОСТИ В ОБЛАСТЯХ РЕГУЛЯРНОЙ ГЕОМЕТРИИ

ISBN 978-5-91741-050-0



9 785917 410500

Подписано к печати 22.10.2012 Заказ № 22-2012 Тираж – 40 экз.

Отпечатано на ризографе

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского

Российской академии наук

119526, Москва, пр-т Вернадского 101, к.1