

УДК 519.63:621.039

РАЗРАБОТКА ПАКЕТА ПРОГРАММ ДЛЯ ТРЕХМЕРНОГО ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МНОГОФАЗНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ В АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКЕ

С. В. Дьяченко¹

Рассмотрены теоретические и практические аспекты разработки пакета программ для трехмерного численного моделирования многофазных многокомпонентных течений в атомной энергетике. Среди теоретических вопросов особое внимание уделено построению общей модели отношений между массовыми, скоростными, энергетическими, объемно-долевыми и материальными компонентами, задаче поиска равновесного давления фаз гетерогенной системы и проблеме организации сквозного однородного расчета смеси сильносжимаемых и слабосжимаемых фаз в широком диапазоне чисел Маха. Описаны используемые подходы к пре- и постпроцессингу. Приведены предварительные данные по масштабируемости параллельного кода.

Ключевые слова: многофазные течения, многокомпонентные течения, сжимаемые течения, численное моделирование, параллельные вычисления, пакеты программ, атомная энергетика.

1. Введение. Исследования теоретических и прикладных аспектов численного моделирования динамики многофазных многокомпонентных сред в настоящее время активно развиваются как в России, так и за рубежом. В контексте численного моделирования на современных параллельных компьютерных платформах (машины с общей и распределенной памятью, гибридные системы с использованием графических ускорителей и др.) в дополнение к сложным проблемам чисто физического характера возникает большое число новых, не менее сложных вопросов из других областей, таких как прикладная математика, теория численных методов, теория программирования и теория параллельных вычислений.

В целом следует заметить, что, несмотря на имеющиеся реализации некоторых частных, ограниченных многофазных и многокомпонентных моделей в ряде численных кодов, в том числе и коммерческих, рассматриваемая проблемная область отнюдь не обрела статус чисто инженерной (технической) и по-прежнему является сферой интенсивных научных исследований. Свидетельством этому служит огромное число публикаций в престижных международных научных журналах, в которых исследуются те или иные вопросы из области численного моделирования многофазных многокомпонентных течений. Анализ текущего состояния исследований на основе доступных публикаций позволяет сделать уверенный вывод о том, что как минимум в ближайшие годы рассматриваемая проблемная область однозначно сохранит свой научный мультидисциплинарный статус и никак не перейдет в статус чисто инженерной области, не поднимающей никаких существенных вопросов научного характера.

Реализация (как правило, с многочисленными допущениями и упрощениями, не всегда очевидными при первичном ознакомлении) ограниченных, специализированных многофазных многокомпонентных моделей и методов в тех или иных численных кодах, включая коммерческие, ни в коей мере не умаляет актуальность и научный характер проблемной области и не отменяет необходимости в выполнении соответствующих научно-исследовательских работ.

В качестве примера перечислим некоторые конкретные теоретические проблемы численного моделирования нестационарных многофазных течений в задачах атомной энергетике: проблема обеспечения сквозного расчета в гетерогенной среде с существенно различающимися сжимаемостями фаз; проблема плохой обусловленности итоговой системы уравнений; проблема оптимального выбора отношений между массовыми, скоростными, энергетическими и объемно-долевыми компонентами многофазной среды; проблема построения и использования многофазных уравнений состояния; проблема вычисления равновесного давления фаз (сходимость, устойчивость, надежность численного метода) и др.

¹ Физико-энергетический институт им. А. И. Лейпунского, пл. Бондаренко, 1, 249033, Калужская обл., г. Обнинск; ст. науч. сотр., e-mail: dyachenko.serгей@gmail.com

Можно выделить следующие основные подходы к численному моделированию многофазных течений в рамках вычислительной гидродинамики. Во-первых, можно использовать эйлеровы (стационарные) расчетные сетки, не адаптируемые к эволюции во времени границ раздела фаз. При этом схемная численная реконструкция межфазных границ может осуществляться с помощью различных специальных методик [1–5], каждая из которых имеет свои достоинства и недостатки. Характерной проблемой для такого рода методов является повышенное “размывание” межфазных границ за счет схемной диссипации. Альтернативный подход заключается в применении сеток, тем или иным образом адаптированных к межфазным границам [6, 7]. Реализация методов этой группы может быть значительно затруднена в областях со сложной геометрией, особенно если речь идет о трехмерном моделировании. Методы третьей группы основаны на использовании лагранжевых (движущихся вместе со средой) сеток [8–10], но их реализация для сложных геометрий так же может быть нетривиальна. Кроме того, лагранжевы сетки, “вмороженные” в вещество, могут не очень хорошо подходить для решения некоторых задач. Наконец, четвертый известный подход заключается в использовании эйлеровых сеток, но с явным отслеживанием (а не со схемной реконструкцией) межфазных границ [11–13]. При этом эйлерова сетка может, вообще говоря, подвергаться модификациям, но только локальным, в непосредственной близости от межфазных границ (явным образом отслеживаемых с помощью специальных инструментов). Реализация методов этой группы осложнена необходимостью сочетать вычисления на эйлеровой сетке с лагранжевым по своей сути механизмом отслеживания границ между фазами, а также выполнять локальные сеточные модификации. Обзор некоторых современных методов моделирования многофазных течений можно найти, например, в книге [14].

В настоящей статье описаны теоретические и практические аспекты разработки пакета программ для трехмерного численного моделирования многофазных многокомпонентных течений в атомной энергетике, которая активно ведется в настоящее время в Физико-энергетическом институте им. А. И. Лейпунского. Обсуждаемый подход к моделированию относится к первой группе методов по вышеприведенной классификации, т.е. базируется на использовании стационарных эйлеровых сеток (неизменяемых, если не рассматривать возможность проведения динамической адаптации). Перечислим основные особенности развиваемого нами подхода. Во-первых, это ориентация в первую очередь на нестационарные быстротекущие процессы, расчет которых требует учета сжимаемости даже таких слабосжимаемых фаз, как, например, жидкометаллический теплоноситель в расплавленном состоянии (что характерно не для штатных, а для аварийных режимов работы установок). Во-вторых, это максимальное абстрагирование от каких-либо конкретных уравнений состояния фаз и замыкающих соотношений — они рассматриваются как изолированные от ядра численного кода объекты (функциональные зависимости). В-третьих, мы используем достаточно общую модель отношений между массовыми, скоростными, энергетическими и материальными компонентами многофазной системы, что позволяет единообразно описать с помощью указанных отношений различные системы — гетерогенные и гомогенные, одножидкостные, двухжидкостные и многожидкостные, и др. При этом вычислительные алгоритмы и соответствующий программный код записываются в достаточно общем виде, применимом к различным многофазным средам, т.е. устраняется необходимость реализации отдельных ветвей программного кода для отдельных, частных многофазных систем (что ни в коем случае не избавляет от необходимости указания всех требуемых для каждого конкретного случая уравнений состояния фаз и замыкающих соотношений). Заметим также, что мы изначально ориентируемся на плохообусловленный вариант, когда в одном расчете могут присутствовать как фазы с большой сжимаемостью и малой скоростью звука (например, водяной пар), так и почти несжимаемые фазы с высокой акустической скоростью (например, жидкий свинец). Вышеперечисленные свойства развиваемого подхода к численному моделированию многофазных многокомпонентных течений обуславливают хорошую потенциальную применимость разрабатываемого пакета программ к расчетам ряда нестационарных задач атомной энергетике, в первую очередь — по моделированию элементов реакторов и парогенераторов в нештатных режимах работы. Примером актуальной задачи такого рода является расчет истекания пароводяной смеси в расплавленный свинец (жидкометаллический теплоноситель) при аварийном разрыве трубки парогенератора.

2. Дифференциальные модели многофазных многокомпонентных сред в рамках концепции взаимопроникающих континуумов. Дифференциальные модели многофазных многокомпонентных сред строятся в рамках концепции взаимопроникающих континуумов. В концепции взаимопроникающих континуумов предполагается, что все фазы и компоненты, в том числе и дисперсные, моделируются как сплошные среды, каждая из которых формально распределена по всей расчетной области. Таким образом, в каждой

точке расчетной области формально определены все параметры каждой из фаз (континуумов), которые при этом могут быть нулевыми, что соответствует физическому отсутствию вещества фазы (континуума) в рассматриваемой точке пространства. Большим достоинством модели взаимопроникающих континуумов в контексте численного (компьютерного) моделирования является возможность обеспечения сквозного счета во всей расчетной области с привлечением однородных численных схем. В контексте параллельных вычислений дополнительным преимуществом континуальной концепции является значительное упрощение балансировки нагрузки между вычислительными узлами за счет однородности численных схем и предсказуемых затрат вычислительных ресурсов на моделирование каждой из фракций.

Уравнения динамики для гетерогенной среды, состоящей из N вязких сжимаемых фаз с общим равновесным давлением, сформулированные с привлечением схемы расщепления Рахматулина [15], могут быть представлены в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_i + \nabla \rho_i \mathbf{v}_i = \sum_{j=1}^N J_{ji},$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_i \mathbf{v}_i + \nabla^k \rho_i \mathbf{v}_i v_i^k = \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i \mathbf{g}_i + \sum_{j=1}^N \mathbf{P}_{ji}, \quad \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i u_i) = \rho_i A_i + \rho_i Q_i + \sum_{j=1}^N J_{ji} u_{ji} - \nabla \rho_i u_i \mathbf{v}_i,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho_i v_i^2}{2} \right) = \mathbf{v}_i \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i \mathbf{g}_i \mathbf{v}_i - \nabla \left(\frac{\rho_i v_i^2}{2} \mathbf{v}_i \right) + \sum_{j=1}^N \left[\mathbf{R}_{ji} \mathbf{v}_i + J_{ji} \left(\mathbf{v}_{ji} - \frac{\mathbf{v}_i}{2} \right) \mathbf{v}_i \right],$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i E_i) = \nabla (\mathbf{c}_i - \mathbf{g}_i) + \rho_i \mathbf{g}_i \mathbf{v}_i - \nabla \rho_i E_i \mathbf{v}_i + \sum_{j=1}^N \left[W_{ji} + Q_{ji} + J_{ji} \left(u_{ji} + \frac{v_{ji}^2}{2} \right) \right],$$

$$E_i = u_i + \frac{v_i^2}{2}, \quad \sigma_i^{kl} = -\alpha_i P_i \delta^{kl} + \tau_i^{kl}, \quad c_i^k = \sigma_i^{kl} v_i^l, \quad \rho_i Q_i = -\nabla^k q_i^k + \sum_{j=1}^N Q_{ji},$$

$$\begin{aligned} \rho_i A_i &= \underbrace{\nabla^k c_i^k - v_i^l \nabla^k \sigma_i^{kl}}_{\sigma_i^{kl} \nabla^k v_i^l} + \sum_{j=1}^N \left[W_{ji} - R_{ji}^k v_i^k + \frac{1}{2} J_{ji} (\mathbf{v}_{ji} - \mathbf{v}_i)^2 \right] = \\ &= \frac{\alpha_i P_i}{\check{\rho}_i} \frac{d_i \check{\rho}_i}{dt} + \tau_i^{kl} e_i^{kl} + \sum_{j=1}^N \left[\mathbf{F}_{ji} (\mathbf{v}_{ji} - \mathbf{v}_i) + J_{ji} \frac{(\mathbf{v}_{ji} - \mathbf{v}_i)^2}{2} \right], \end{aligned}$$

$$\mathbf{P}_{ji} = -\mathbf{P}_{ij} = \mathbf{R}_{ji} + J_{ji} \mathbf{v}_{ji}, \quad \sum_{j=1}^N \mathbf{R}_{ji} = P \nabla \alpha_i + \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ji}, \quad \mathbf{F}_{ji} = \mathbf{F}_{ji}(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i, \dots) = -\mathbf{F}_{ij}(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j, \dots),$$

$$\sum_{j=1}^N W_{ji} = -P_i \left[\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} - \frac{\alpha_i}{\rho_i} \sum_{j=1}^N J_{ji} \right] + \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ji} \mathbf{v}_i,$$

$$P_1 \left(\check{\rho}_1 = \frac{\rho_1}{\alpha_1}, T_1 \right) = P_2 \left(\check{\rho}_2 = \frac{\rho_2}{\alpha_2}, T_2 \right) = \dots = P_N \left(\check{\rho}_N = \frac{\rho_N}{\alpha_N}, T_N \right) = P, \quad \check{\rho}_i = \frac{\rho_i}{\alpha_i},$$

$$u_i = u_i(\check{\rho}_i, T_i, \dots), \quad P_i = P_i(\check{\rho}_i, T_i, \dots), \quad S_i = S_i(\check{\rho}_i, T_i, \dots), \quad \dots, \quad \mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_{ji}, \quad \mathbf{R}_{ji} = -\mathbf{R}_{ij}.$$

В уравнениях использованы следующие обозначения: ρ_i — макроскопическая (гидродинамическая) плотность i -й фазы; $\check{\rho}_i$ — микроскопическая (истинная) плотность i -й фазы; α_i — объемная доля i -й фазы в смеси; \mathbf{v}_i — скорость i -й фазы; J_{ji} — интенсивность переноса массы из j -й фазы в i -ю фазу в единице объема смеси за единицу времени; σ_i — тензор напряжений для i -й фазы; \mathbf{g}_i — вектор внешних массовых сил для i -й фазы; \mathbf{P}_{ji} — интенсивность переноса импульса из j -й фазы в i -ю фазу в единице объема смеси за единицу времени; u_i — удельная внутренняя энергия i -й фазы; E_i — полная удельная энергия i -й фазы; \mathbf{c}_i — вектор переноса механической энергии за счет работы внешних поверхностных сил для i -й фазы; \mathbf{g}_i — вектор теплового потока для i -й фазы; E_{ji} — интенсивность переноса энергии из j -й фазы в i -ю фазу в единице объема смеси

за единицу времени; \mathbf{v}_{ji} — скорость i -й фазы на границе с j -й фазой после фазового перехода из j -й фазы в i -ю фазу, т.е. скорость массы, претерпевшей соответствующий фазовый переход; u_{ji} — удельная внутренняя энергия i -й фазы на границе с j -й фазой после фазового перехода из j -й фазы в i -ю фазу, т.е. удельная внутренняя энергия массы, претерпевшей соответствующий фазовый переход; \mathbf{R}_{ji} — полная межфазная сила, действующая со стороны j -й фазы на i -ю фазу в единице объема смеси; Q_{ji} — интенсивность передачи тепла от j -й фазы к i -й фазе в единице объема смеси; W_{ji} — работа межфазных сил i -й фазы на межфазной границе с j -й фазой в единице объема смеси; P_i — давление i -й фазы; S_i — энтропия (или иные доступные для прямого вычисления термодинамические функции, определяемые уравнением состояния) i -й фазы; $\boldsymbol{\tau}_i$ — тензор сдвиговых напряжений в i -й фазе; \mathbf{F}_{ji} — связанная со скоростной неравновесностью между фазами компонента межфазной силы, действующей со стороны j -й фазы на i -ю фазу в единице объема смеси.

Первые пять уравнений вышеприведенной системы имеют особый статус и выражают известные физические законы сохранения массы, импульса и энергии (соответственно внутренней, кинетической и полной) каждой фазы смеси в дифференциальной эйлеровой форме (для неподвижной системы координат) с учетом межфазных обменов массой, импульсом и энергией. Основные уравнения дополняются соответствующими замыкающими соотношениями, позволяющими сделать полную систему уравнений замкнутой. Конкретные замыкающие соотношения зависят от решаемой задачи (и степени подробности выбранной для нее физической модели) и могут иметь достаточно сложный вид. Обсуждение конкретных замыкающих соотношений выходит далеко за рамки настоящей работы. Заметим, что полное количество дифференциальных уравнений пропорционально количеству N фаз в системе, однако в уравнениях для каждой фазы i присутствуют суммы по j обменных членов, относящихся к взаимодействию фазы i с остальными фазами j . Таким образом, полное количество отдельных членов в уравнениях пропорционально квадрату N^2 количества фаз в системе.

Сформулируем далее весьма полезную на практике упрощенную базовую расширяемую модель, в которой выключены любые обмены между фазами, а также вязкая диссипация. Упрощенная базовая расширяемая модель представляет собой ценность по следующим причинам. Во-первых, ее можно рассматривать как некоторую отправную точку, содержащую минимально разумное количество членов в уравнениях (т.е. не перегруженную изначально) и впоследствии последовательно расширяемую за счет добавления в уравнения новых членов в соответствии с принципом суммарной аппроксимации. Это позволяет выстроить стратегию постепенного добавления в уравнения новых членов, обеспечивая естественную эволюцию модели в сторону усложнения. Во-вторых, такая модель, не содержащая громоздких выражений, хорошо подходит для иллюстрации на ее примере различных концепций и подходов — например, способов группировки уравнений по компонентам (см. ниже). В-третьих, упрощенная модель полезна при отладке и тестировании моделей и методов, добавляемых в разрабатываемое программное обеспечение (за счет отсека ненужных сущностей, усложняющих анализ).

Уравнения упрощенной базовой расширяемой модели гетерогенной среды имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_i + \nabla \rho_i \mathbf{v}_i &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho_i \mathbf{v}_i + \nabla^k \rho_i \mathbf{v}_i v_i^k &= -\nabla \alpha_i P_i + \rho_i \mathbf{g}_i + P_i \nabla \alpha_i = -\alpha_i \nabla P_i + \rho_i \mathbf{g}_i, \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho_i E_i + \nabla \rho_i E_i \mathbf{v}_i &= -\nabla \alpha_i P_i \mathbf{v}_i - \nabla \mathbf{g}_i + \rho_i \mathbf{g}_i \mathbf{v}_i - P_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^N Q_{ji}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho_i u_i + \nabla \rho_i u_i \mathbf{v}_i &= -P_i \nabla \alpha_i \mathbf{v}_i - \nabla \mathbf{g}_i - P_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^N Q_{ji}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho_i v_i^2}{2} \right) + \nabla \left(\frac{\rho_i v_i^2}{2} \mathbf{v}_i \right) &= -\mathbf{v}_i \nabla \alpha_i P_i + \rho_i \mathbf{g}_i \mathbf{v}_i + \mathbf{v}_i P_i \nabla \alpha_i, \quad \sum_{i=1}^N \alpha_i = 1, \\ P_1 \left(\check{\rho}_1 = \frac{\rho_1}{\alpha_1}, T_1 \right) &= P_2 \left(\check{\rho}_2 = \frac{\rho_2}{\alpha_2}, T_2 \right) = \dots = P_N \left(\check{\rho}_N = \frac{\rho_N}{\alpha_N}, T_N \right) = P. \end{aligned}$$

Модельный теплообменный член в упрощенной постановке можно представить в следующем виде:

$$Q_{ji} = \underbrace{\left(\frac{\partial u_*}{\partial T_*} \right)}_{(C_V)_*(\rho_*, T_*)} \times \frac{T_j - T_i}{(t_{\text{relax}})_{ij}}, \text{ где } C_V \text{ — изохорная теплоемкость, а времена температурной релаксации}$$

и интенсивности обмена теплом между фазами удовлетворяют условиям $(t_{\text{relax}})_{ij} = (t_{\text{relax}})_{ji}$, $Q_{ij} + Q_{ji} = 0$.

При рассмотрении пары фаз с сильно отличающимися теплоемкостями (нередкий случай при расчете парогенераторов ядерных энергетических установок) в качестве символа “*” и соответствующих параметров можно принять фазу с большей теплоемкостью и ее параметры. Например, для пары “свинец–вода” в задаче о межконтурном истечении пароводяной смеси в жидкометаллический свинцовый теплоноситель с учетом большей теплоемкости свинца по сравнению с водой можно в качестве “*” взять свинец: $* \equiv Pb$, $C_{V,*}(\rho_*, T_*) \equiv C_V^{Pb}$.

Для времени температурной релаксации, фигурирующей в вышеприведенном выражении для интенсивности обмена теплом между фазами, справедлива оценка $(t_{\text{relax}})_{ij} \simeq \frac{\lambda_*}{\rho_*(C_P)_*c_*^2}$.

Обращаем особое внимание на то, что во все вышеприведенные формулы для модельного теплообменного члена следует подставлять микроскопическую (истинную) плотность, а не макроскопическую (гидродинамическую) плотность, фигурирующую в уравнениях законов сохранения.

3. Модели отношений между массовыми, скоростными, энергетическими, объемно-долевыми и материальными компонентами. В этом разделе рассматривается вопрос единообразного представления различных конфигураций многофазных многокомпонентных сред, включая гетерогенные и гомогенные, в рамках единой математической модели (и соответствующей компьютерной модели).

Как правило, в литературе рассматриваются частные, крайние случаи многофазных систем в плане как гомогенности/гетерогенности (например, только полностью гетерогенные или полностью гомогенные системы), так и в плане отношений между массовыми, скоростными, энергетическими, объемно-долевыми и материальными компонентами (например, только односкоростная модель или модель, в которой у каждой фазы своя скорость). Такой частный подход может быть оправдан при изложении некоторых конкретных моделей и методов, но мало подходит при конструировании методов и алгоритмов общего вида, а также для реализации в численном коде.

Предлагаемая математическая модель отношений между массовыми, скоростными, энергетическими, объемно-долевыми и материальными компонентами позволяет формулировать методы и алгоритмы в достаточно общем виде. Кроме того, она хорошо подходит для реализации в численном коде, который должен единообразно работать с различными классами многофазных систем, в том числе гибридными, а не только с частными крайними случаями (полностью гетерогенные, полностью гомогенные, односкоростные и т.д.). Некоторые частные элементы развиваемой нами модели использовались в ограниченном объеме при разработке численных кодов. Например, в [16] использовалась идея о распределении большого числа массовых (плотностных) компонент на существенно меньшее число скоростных компонент, для чего применялись манипуляции с индексациями компонент. Развиваемый нами подход, основанный на формальных отношениях, носит принципиально более общий характер по сравнению с [16] и другими подобными работами.

Отображение массовых компонент на объемно-долевые компоненты в многофазной среде (а также обратное к нему отображение объемно-долевых компонент на массовые) обозначим через $R_{\rho\alpha} = R_{\alpha\rho}^{-1}$.

Отображение массовых компонент на скоростные компоненты в многофазной среде (а также обратное к нему отображение скоростных компонент на массовые) обозначим как $R_{\rho w} = R_{w\rho}^{-1}$.

Отображение массовых компонент на энергетические компоненты (подчеркнем, что здесь имеется в виду конкретно внутренняя энергия фаз, а не кинетическая или полная) в многофазной среде (а также обратное к нему отображение энергетических компонент на массовые) обозначим через $R_{\rho\varepsilon} = R_{\varepsilon\rho}^{-1}$.

Отображение массовых компонент на материальные компоненты (т.е. индексы материалов/веществ с соответствующими ссылками на уравнения состояния) в многофазной среде (а также обратное к нему отображение материальных компонент на массовые) обозначим как $R_{\rho M} = R_{M\rho}^{-1}$.

На основе отображений массовых и объемно-долевых компонентов очевидным образом выделяются различимые между собой внутренне гомогенные подсистемы в рамках общей гетерогенной системы, причем количество таких систем произвольно. Набор массовых компонент (индексов) гетерогенной системы, соответствующий некоторой k -й гомогенной подсистеме, определяется так: $(\text{Homo})_k = \{i : R_{\rho\alpha}(i) = k\} = R_{\alpha\rho}(k)$.

Подчеркнем, что любой массовый (плотностной) компонент всегда отображается на строго один объемно-

долевой, строго один скоростной, строго один энергетический и строго один материальный компонент. Обратное в общем случае не верно, хотя может иметь место в частных случаях.

Полезно ввести ряд дополнительных массовых (или плотностных) величин, основанных на перечисленных выше отношениях массовых, объемно-долевых, скоростных, энергетических и материальных компонентов. Общая плотность гомогенной подсистемы, соответствующей некоторому конкретному объемно- долевому компоненту с индексом k , определяется по формуле $\rho_{\alpha k} = \sum_{i: R_{\rho\alpha}(i)=k} \rho_i = \sum_{i \in R_{\alpha\rho}(k)} \rho_i$.

Полностью аналогично определяются общие плотности подсистем многофазной среды, соответствующие некоторым конкретным скоростным, энергетическим и материальным компонентам:

$$\rho_{w_k} = \sum_{i: R_{\rho w}(i)=k} \rho_i = \sum_{i \in R_{w\rho}(k)} \rho_i, \quad \rho_{\varepsilon_k} = \sum_{i: R_{\rho\varepsilon}(i)=k} \rho_i = \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(k)} \rho_i, \quad \rho_{M_k} = \sum_{i: R_{\rho M}(i)=k} \rho_i = \sum_{i \in R_{M\rho}(k)} \rho_i.$$

С помощью вышеприведенного подхода можно конструировать комбинированные величины. Например, формула для общей плотности подсистемы, отображаемой на некоторый конкретный скоростной компонент с индексом k и одновременно с этим — на некоторый конкретный энергетический компонент с индексом m , имеет вид $\rho_{w_k\varepsilon_m} = \sum_{i \in R_{w\rho}(k) \cap R_{\varepsilon\rho}(m)} \rho_i$. Аналогичным образом, формула для подсистемы, соответствующей (в смысле отображений) некоторым конкретным объемно- долевым, скоростным, энергетическим и материальным компонентам (с индексами соответственно a, b, c и d), записывается следующим образом:

$$\rho_{\alpha a w_b \varepsilon_c M_d} = \sum_{i \in R_{\alpha\rho}(a) \cap R_{w\rho}(b) \cap R_{\varepsilon\rho}(c) \cap R_{M\rho}(d)} \rho_i.$$

Предлагаемый подход позволяет единообразно в общем виде рассматривать смешанные гетерогенно-гомогенные системы с произвольными допустимыми соотношениями между массовыми, объемно- долевыми, скоростными, энергетическими и материальными компонентами.

Выделим в рамках общей модели ряд частных случаев, соответствующих определенным подклассам многофазных сред.

1. Допустим, что любой объемно- долевым, скоростной, энергетический или материальный компонент всегда отображается на один и только один массовый (плотностной) компонент:

$$|R_{\alpha\rho}(a)| = |R_{w\rho}(b)| = |R_{\varepsilon\rho}(c)| = |R_{M\rho}(d)| = 1.$$

С учетом упомянутого ранее общего ограничения, заключающегося в том, что любой массовый компонент всегда отображается на строго один объемно- долевым, строго один скоростной, строго один энергетический и строго один материальный компонент, такой случай соответствует полностью гетерогенной системе из N фаз с N скоростями, N объемными долями и т.д.

2. Допустим, что абсолютно все массовые (плотностные) компоненты отображаются в один и тот же объемно- долевым, один и тот же скоростной, один и тот же энергетический и один и тот же материальный компонент: $R_{\rho\alpha}(i) = \text{const}$, $R_{\rho w}(i) = \text{const}$, $R_{\rho\varepsilon}(i) = \text{const}$, $R_{\rho M}(i) = \text{const}$. Этот случай соответствует “раскраске” полностью гомогенной односкоростной среды. Отдельные массовые компоненты можно интерпретировать как “цвета” или маркеры (но в континуальной модели, в отличие от чаще употребляемых дискретных маркеров), позволяющие независимо отслеживать временную эволюцию отдельных фракций (“цветов”). При этом фракции никак не различимы физически, они отличаются только “цветами”, а такая “раскраска” многокомпонентной среды никак не влияет на физические результаты расчета.

3. Допустим, что все массовые (плотностные) компоненты отображаются в один и тот же объемно- долевым компонент: $R_{\rho\alpha}(i) = \text{const}$. Этот случай соответствует полностью гомогенной системе, в которой все фазы разделяют физически один и тот же объем.

В рамках предлагаемой единой общей модели, основанной на ряде формальных отношений, возможны любые комбинации как описанных выше частных случаев (гетерогенность, гомогенность, “раскраска”), так и других подклассов многофазных сред как подсистем общей системы, при этом соотношения между массовыми, объемно- долевыми, скоростными, энергетическими и материальными компонентами могут варьироваться в широких пределах. Вопрос о физической допустимости того или иного конкретного набора отношений между компонентами, т.е. вопрос о корректности конкретной системы, построенной в рамках единой общей модели, находится за рамками рассмотрения настоящей работы.

Иллюстрацию способов группировки уравнений динамики многофазных сред с учетом вышеописанных отношений между компонентами (влияющих, например, на общее количество неизвестных величин в многофазной среде) целесообразно выполнить на примере упрощенной (базовой) расширяемой многофазной модели, приведенной ранее. Во-первых, это позволяет избежать ненужной детализации и загромождения уравнений дополнительными членами. Во-вторых, введение новых членов, т.е. собственно расширение базовой упрощенной системы, не влияет на рассматриваемый подход к группировке уравнений на основе отношений между компонентами. Изложенный ниже метод может применяться и для расширенной новыми членами системы уравнений полностью аналогично его применению для базовой упрощенной системы.

На основе доступных соотношений между компонентами уравнения можно сгруппировать следующим образом (группировка производится отдельно по массовым, скоростным и энергетическим компонентам, при этом для единообразия в качестве индекса компонент любого типа мы используем m):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_i + \nabla \rho_i \mathbf{v}_i &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho_{w_m} \mathbf{v}_m + \nabla^k \rho_{w_m} \mathbf{v}_m v_m^k &= - \sum_{i \in R_{w\rho}(m)} \alpha_i \nabla P_i + \sum_{i \in R_{w\rho}(m)} \rho_i \mathbf{g}_i, \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho_{w_m} + \nabla \rho_{w_m} \mathbf{v}_m = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\varepsilon_m} u_m + \nabla u_m \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \rho_i \mathbf{v}_i &= - \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} P_i \nabla \alpha_i \mathbf{v}_i - \nabla \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \mathbf{g}_i - \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} P_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \sum_{j=1}^N Q_{ji}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_{\varepsilon_m} u_m + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \frac{\rho_i v_i^2}{2} \right] + \nabla \left[u_m \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \rho_i \mathbf{v}_i + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \frac{\rho_i v_i^2}{2} \mathbf{v}_i \right] &= \\ - \nabla \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \alpha_i P_i \mathbf{v}_i - \nabla \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \mathbf{g}_i + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \rho_i \mathbf{g}_i \mathbf{v}_i - \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} P_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \sum_{j=1}^N Q_{ji}, \\ \sum_{i \in R_{\alpha\rho}(m)} P_i (\alpha_m, \rho_i, \dots) &= P_{\alpha_m} = P. \end{aligned}$$

Целесообразно сделать следующее замечание об индексации (нумерации) объемно-долевых, скоростных, энергетических и материальных компонент в вышеприведенных сгруппированных по компонентам уравнениях динамики многофазной среды. В целях обеспечения более компактной и ясной для понимания записи уравнений в них использована укороченная запись индексов, например индекса i . При использовании компактной записи уравнений индекс i для массового (плотностного) компонента соответствует непосредственно массовому компоненту с номером i , в то время как индекс i для объемно-долевых, скоростных, энергетических и материальных компонент соответствует компоненту, на который отображается массовый компонент с номером i . Для вычисления номера (индекса) соответствующего объемно- долевого, скоростного, энергетического или материального компонента следует воспользоваться введенными ранее отношениями R . Очевидно, что номер (индекс) объемно- долевого, скоростного, энергетического или материального компонента, соответствующего массовому компоненту номер i , в общем случае может отличаться от i , поскольку нумерации (индексации) массовых, объемно- долевых, скоростных, энергетических и материальных компонент независимы друг от друга.

Например, в компактной записи уравнений \mathbf{v}_i означает не скоростную компоненту с индексом i , а скоростную компоненту, соответствующую массовому (плотностному) компоненту с индексом i . Индекс этой скоростной компоненты в нумерации скоростных компонент определяется соответствующим отношением и в общем случае не совпадает с i . Приведем правила формального перехода от использованной в настоящем разделе компактной записи уравнений к полностью формальной записи с использованием соответствующих отношений: $\alpha_i \longrightarrow \alpha_{R_{\rho\alpha}(i)}$, $\mathbf{v}_i \longrightarrow \mathbf{v}_{R_{\rho w}(i)}$, $u_i \longrightarrow u_{R_{\rho\varepsilon}(i)}$, $M_i \longrightarrow M_{R_{\rho M}(i)}$.

Компьютерная модель отношений между массовыми, скоростными, энергетическими, объемно- долевыми и материальными компонентами по сути представляет собой описание способов эффективного хранения в компьютерной памяти различных элементов соответствующей математической модели, описанной выше, а также алгоритмов эффективной работы с этими элементами (организация итераций по отношениям и т.п.).

С учетом того ограничения, что любой массовый компонент всегда отображается на строго один объемно-долевой, строго один скоростной, строго один энергетический и строго один материальный компонент, соответствующие прямые отображения могут быть представлены соответствующим набором простых массивов, индексируемых по номеру массового (плотностного) компонента i .

В общем случае любой объемно-долевой, скоростной, энергетический или материальный компонент может отображаться на множество массовых (плотностных) компонентов с произвольным количеством элементов. Для хранения соответствующих отношений (отображений) в линейной оперативной памяти хорошо подходит известная структура IAJA, часто используемая для оптимизированного хранения в памяти разреженных матриц [17]. При таком способе хранения каждому отображению на массовые компоненты соответствуют строки `index` и `value`, являющиеся по сути простыми массивами. Массив `index` определяет смещения записей для отдельных компонентов рассматриваемого типа в массиве `value`. Массив `value` содержит непосредственно множества индексов массовых компонентов, соответствующих тому или иному компоненту рассматриваемого типа и индексируется значениями из массива `index`. Интерпретацию массивов `index` и `value` легко понять из следующего фрагмента псевдокода, вычисляющего общую плотность ρ_{*m} компонента типа “*” с индексом m (т.е. сумму плотностей всех массовых компонентов, отображаемых в компоненту типа “*” с индексом m):

```

a_m = R_{*\rho}.index [m];
b_m = R_{*\rho}.index [m + 1];
\rho_{*m} = 0.;
for (int index = a_m; index < b_m; ++index)
{
    i = R_{*\rho}.value [index];
    \rho_i = \rho[i];
    \rho_{*m} += \rho_i;
}

```

4. Уравнения состояния фаз. Уравнение состояния для той или иной фазы по сути представляет собой полный набор соотношений между термодинамическими параметрами этой фазы [18] (заметим, что при учете фазовых переходов соотношения могут затрагивать параметры не одной, а нескольких фаз, связанных переходными процессами). Именно с помощью уравнений состояния (аналитических, табличных, гибридных и др.) осуществляется необходимый пересчет одних термодинамических параметров в другие в ходе выполнения гидродинамических расчетов.

Заметим, что в предельном случае абсолютно несжимаемого режима течения давление, как известно, теряет термодинамический смысл. Соответственно, исчезает связь давления с термодинамическими параметрами, характерная для сжимаемых сред, а уравнение состояния становится вырожденным. По этому поводу можно сказать следующее. Во-первых, абсолютная несжимаемость среды является абстракцией, применимой к реальным веществам только с некоторой точностью. Во-вторых, даже в случае моделирования такой формально абсолютно несжимаемой среды можно искусственно привести в нее некоторую очень малую степень сжимаемости, восстановив, таким образом, связь давления с термодинамическими параметрами и устранив вырождение уравнения состояния. Таким образом, даже с несжимаемыми средами можно работать так же, как со сжимаемыми и слабосжимаемыми, используя невырожденные уравнения состояния с искусственной малой сжимаемостью. Что касается возможной плохой обусловленности гидродинамического расчета несжимаемых и слабосжимаемых течений с использованием уравнений состояния, то этот вопрос подробнее обсуждается ниже в разделе об организации сквозного однородного расчета в широком диапазоне чисел Маха, и указанная проблема также является решаемой.

В контексте моделирования вязких гетерогенных сжимаемых сред с общим равновесным давлением фаз ключевой проблемой является поиск равновесного давления исходя из известных энергетических параметров (вычисляемых с помощью уравнений сохранения энергии). Задачу можно сформулировать как решение относительно общего давления нелинейного уравнения, получающегося из комбинирования уравнений состояния фаз, соотношений между микроскопическими и макроскопическими плотностями фаз через их объемные доли, а также ограничения на сумму объемных долей фаз. Для решения указанного нелинейного уравнения с требуемой точностью целесообразно использовать соответствующие итерационные методы. В самой общей постановке задача является весьма сложной и, более того, в общем случае для произвольных уравнений состояния фаз (аналитических, табличных, гибридных) без наложения специальных ограничений гарантировать

сходимость численного метода поиска давления и обеспечить требуемую скорость сходимости не представляется возможным. Тем не менее, для целого ряда практически важных частных случаев возможно построить эффективные методы с гарантией быстрой сходимости к решению. Остановимся подробнее на одном из них.

“Жесткое” уравнение состояния (так называемое stiff equation of state, или stiff EOS) [19] является одним из известных аналитических обобщений уравнения состояния идеального газа и достаточно часто используется при численном моделировании как сильносжимаемых, так и слабосжимаемых сред. Известны примеры успешного применения “жесткого” уравнения состояния для газов, жидкостей и даже твердых тел (разумеется, в определенном диапазоне параметров, в первую очередь — давления). В частности, опубликованы результаты об успешном применении этого уравнения состояния для моделирования воды, жидкой ртути [20], воздуха и т.д. Кроме того, известны подходы к его обобщению на случай наличия фазовых переходов между жидкой и газообразной фазами вещества. Возможные способы подбора параметров аналитического уравнения состояния на основе известных физических свойств моделируемых веществ описаны, например, в [20] и [21].

Использование “жесткого” уравнения состояния обеспечивает ряд преимуществ. Во-первых, оно является полностью аналитическим и все термодинамические соотношения для него являются достаточно простыми и так же аналитическими. Соответственно, облегчается отладка моделей и методов, а также анализ результатов расчетов за счет предсказуемости данных уравнения состояния (в отличие, например, от табличных уравнений состояния). Во-вторых, это уравнение является весьма экономичным в плане затрат вычислительных ресурсов при компьютерных расчетах. В-третьих, для гетерогенных фаз, описываемых уравнениями состояния рассматриваемого семейства, могут быть сформулированы эффективные (как в плане скорости сходимости, так и в плане устойчивости) численные методы поиска равновесного давления фаз. Наконец, “жесткое” уравнение состояния является универсальным аналитическим инструментом, успешно применяемым с определенными ограничениями к газам, жидкостям и твердым телам при высоких давлениях.

Для “жесткого” уравнения состояния зависимость давления от плотности и удельной внутренней энергии отдельной фазы может быть записана в следующем виде [19]: $P = (\gamma - 1)\rho(\varepsilon - \varepsilon_*) - \gamma P_\infty$. Здесь P — давление; ρ — микроскопическая (истинная) плотность; ε — удельная внутренняя энергия; γ , ε_* , P_∞ — параметры “жесткого” уравнения состояния для рассматриваемой фазы. Свободная энергия Гельмгольца, удобная для редукции из нее ряда термодинамических соотношений, определяется в форме

$$A(\rho, T) = C_V T \left(1 - \ln \frac{T}{T_0} + (\gamma - 1) \ln \frac{\rho}{\rho_0} \right) - S_0 T + \frac{P_\infty}{\rho} + \varepsilon_*.$$

Нелинейное уравнение относительно давления записывается следующим образом:

$$F(\hat{P}) = f(\hat{P}) - 1 = \sum_{i=1}^N \frac{(\gamma_i - 1)[\rho_i \varepsilon_i - \rho_i(\varepsilon_*)_i]}{\hat{P} + \gamma_i(P_\infty)_i} - 1, \quad F(\hat{P}) = 0.$$

Разрешив это уравнение относительно равновесного давления фаз, можно вычислить объемные доли фаз. По вычисленным объемным долям и известным макроскопическим (гидродинамическим) плотностям можно вычислить микроскопические (истинные) плотности, а также любые требуемые термодинамические функции. Классический метод Ньютона–Рафсона с итерациями вида

$$\hat{P}^{(n+1)} = \hat{P}^{(n)} - \frac{F(\hat{P}^{(n)})}{F'(\hat{P}^{(n)})} = \hat{P}^{(n)} + \frac{1 - f(\hat{P}^{(n)})}{f'(\hat{P}^{(n)})}$$

в общем случае не обеспечивает гарантированной сходимости при любых допустимых начальных значениях равновесного давления (по которому производятся итерации), т.е. при $\hat{P}^{(0)} \in (-\min_i (\gamma_i(P_\infty)_i), +\infty)$.

Проблема отсутствия гарантированной сходимости численного метода для любых корректных начальных значений равновесного давления не позволяет использовать классический метод Ньютона–Рафсона для решения поставленной задачи, так как отсутствие сходимости даже в одной расчетной ячейке может привести к катастрофическим последствиям для всего численного расчета динамики многофазной среды. Для решения указанной проблемы [19] предлагается произвести следующую модификацию базового численного

метода, адаптированную к конкретному рассматриваемому уравнению состояния:

$$\hat{P}^{(n+1)} = \hat{P}^{(n)} + \frac{1 - f(\hat{P}^{(n)})}{f'(\hat{P}^{(n)})} \left[1 - \frac{1 - f(\hat{P}^{(n)}) + |1 - f(\hat{P}^{(n)})|}{2f'(\hat{P}^{(n)}) \left(\hat{P}^{(n)} + \min_i (\gamma_i(P_\infty)_i) \right)} \right]^{-1}.$$

Дополнительный множитель в квадратных скобках служит для стабилизации численного метода решения нелинейного уравнения относительно равновесного давления. При любых допустимых начальных значениях равновесного давления модифицированный метод Ньютона–Рафсона обеспечивает монотонную квадратичную сходимость к решению уравнения. Подобные модификации итерационных численных методов могут быть сформулированы и для других классов уравнений состояния.

5. Сквозной однородный расчет смеси сильносжимаемых и слабосжимаемых фаз в широком диапазоне чисел Маха. Проблема обеспечения сквозного однородного расчета смеси сильносжимаемых и слабосжимаемых фаз в широком диапазоне чисел Маха (вплоть до предельного случая несжимаемого режима течения) является чрезвычайно важной [22–27]. Классические методы решения уравнений динамики сплошных сред, основанные как на расчете давления (pressure based solvers), так и на расчете плотности (density based solvers), применимы только для некоторого диапазона чисел Маха. Для методов на основе расчета давления проблемными являются высокие числа Маха (сжимаемый режим течения), а для методов на основе расчета плотности — наоборот, низкие числа Маха (слабосжимаемый режим течения). Ни один из упомянутых классов методов, таким образом, не является универсальным, одинаково пригодным для расчета как несжимаемого случая, так и течений с большой сжимаемостью. Для расширения применимости любых таких методов (в первую очередь в смысле расширения диапазона чисел Маха, при которых рассматриваемый метод удовлетворительно эффективен и точен) требуется применять специальные методики, которые, в свою очередь, вносят свои проблемы. Универсальных методик такого рода, не имеющих совершенно никаких серьезных недостатков и гарантирующих эффективность и точность сквозного однородного счета при любых степенях сжимаемости потока и любых числах Маха, в настоящее время не существует. Для многофазных многоскоростных сред проблема только усугубляется. Методы на основе расчета плотности, на которых базируется и настоящая работа, при расчете слабосжимаемых режимов течения (т.е. при низких локальных числах Маха) страдают от двух явлений численного характера:

1) сильное уменьшение допустимого (в соответствии с требованиями аппроксимации и устойчивости) шага по времени из-за высоких акустических скоростей, стремящихся к бесконечности по мере приближения к несжимаемому пределу (для несжимаемого режима течения акустические скорости формально являются бесконечно большими);

2) сильный рост паразитной численной диффузии (схемной диссипации) при расчете конвективных потоков, что связано с неограниченным ростом собственных значений соответствующего якобиана в несжимаемом пределе (собственные значения якобиана входят в выражения для расчета конвективных потоков).

Суть метода локального предобусловливания уравнений динамики сплошной среды, используемого нами для обеспечения сквозного однородного счета, заключается в следующем [25–27]. С целью искусственного уменьшения акустических скоростей (являющихся собственными значениями соответствующего якобиана) выполняется искусственная регуляция производной плотности по давлению (при постоянной температуре), для чего требуется выполнить переход от консервативных величин к простым, а затем, применив предобусловливание (модификацию коэффициентов уравнений), — снова вернуться к консервативным величинам. При этом схема сохраняет свойство консервативности.

Процедура предобусловливания искажает (масштабирует) производные по физическому времени t , что не позволяет напрямую применять ее для нестационарных уравнений. В нестационарном случае используется техника “двойного шага по времени” (dual time stepping), решающая указанную проблему. В дополнение к физическому времени t , по которому осуществляются внешние итерации (обычным образом), в схему вносятся искусственное время τ , по которому осуществляются внутренние итерации на установление. Таким образом, на каждой внешней итерации по физическому времени t решается квазистационарная задача на установление по искусственному времени τ , для чего осуществляются внутренние итерации. Поскольку искусственное время не играет никакой физической роли и может масштабироваться произвольно, то процедура предобусловливания применяется именно для внутренних итераций, т.е. при решении задачи на установление по искусственному времени. Для внешних итераций по физическому времени предобусловливание не

применяется. Соответственно, в ходе процедуры преобусловливания искажаются только производные по искусственному времени, что не является существенным (при установлении квазистационара эти производные зануляются), при этом производные по физическому времени остаются корректными, что принципиально при решении нестационарных задач.

Внешние итерации по физическому времени t всегда выполняются для консервативных переменных, так как численная схема должна быть строго консервативной. Внутренние итерации по искусственному времени τ могут осуществляться как по консервативным, так и по простым переменным (при этом схема в целом сохраняет свою консервативность в любом случае). Кроме того, возможны различные варианты аппроксимации производных по времени. С учетом всего вышесказанного, речь идет не об одной схеме, а о целом семействе схем, реализующих те или иные альтернативные варианты.

Процедуру преобусловливания мы выполняем отдельно по фазам, т.е. преобусловливание уравнений динамики отдельной фазы выполняется обособленно от уравнений динамики других фаз (разделенное преобусловливание). Соответственно, ниже приводятся формулы, относящиеся к той или иной конкретной фазе, а соответствующий этой фазе нижний индекс в них для удобства опускается.

Кратко формализуем вышесказанное. Исходная система уравнений $\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{W} \cdot dV + \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \mathbf{H} \cdot dV$ приводится к следующему виду (без использования преобусловливания):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{W} \cdot dV + \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial Q} \frac{\partial}{\partial \tau} \int_V \mathbf{Q} \cdot dV + \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \mathbf{H} \cdot dV.$$

Преобусловливание, заключающееся в заменах $\rho_P \rightarrow \theta$, $\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial Q} \rightarrow \Gamma$ (ρ_P — производная плотности по давлению при постоянной температуре, θ — преобусловливающий параметр, $\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial Q}$ — якобиан перехода от консервативных к простым переменным, Γ — преобусловленная версия якобиана $\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial Q}$ после замены в нем ρ_P на θ), приводит к системе $\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{W} \cdot dV + \Gamma \frac{\partial}{\partial \tau} \int_V \mathbf{Q} \cdot dV + \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \mathbf{H} \cdot dV$. Здесь $\mathbf{W} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E)^T$ — вектор консервативных переменных, $\mathbf{Q} = (P, u, v, w, T)^T$ — вектор простых переменных и $\mathbf{v} = (u, v, w)^T$ — вектор скорости. Обращаем внимание на то, что преобусловливание применяется только к производной по искусственному времени τ , а не к производной по физическому времени t . Воспользовавшись для производной по времени аппроксимацией “назад по времени” (backward difference) специального вида (коэффициенты α_i и β для аппроксимации требуемого порядка можно найти в [28]), получим

$$\left. \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} \right|_{k+1} \approx \frac{1}{\Delta t} \sum_{i=0}^{K-1} \alpha_i \mathbf{W}^{n-i} + \frac{1}{\Delta t} \beta \mathbf{W}^{k+1} = \frac{1}{\Delta t} \sum_{i=0}^{K-1} \alpha_i \mathbf{W}^{n-i} + \frac{1}{\Delta t} \beta \left[\mathbf{W}^k + \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial Q} (\mathbf{Q}^{k+1} - \mathbf{Q}^k) \right].$$

Введем обозначения: $\Delta \mathbf{W}^{k+1} = \mathbf{W}^{k+1} - \mathbf{W}^k$, $\Delta \mathbf{Q}^{k+1} = \mathbf{Q}^{k+1} - \mathbf{Q}^k$, $\mathbf{K}_W = \frac{\Gamma}{\Delta \tau} \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial Q} \right)^{-1} + \frac{\beta}{\Delta t} \mathbf{I}$, $\mathbf{K}_Q = \frac{\Gamma}{\Delta \tau} + \frac{\beta}{\Delta t} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial Q}$. В результате приходим к двум вариантам конечно-объемной расчетной схемы с преобусловливанием, отличающимся между собой способом выполнения внутренних итераций по искусственному времени:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{W}^{k+1} + \mathbf{K}_W^{-1} \frac{1}{V} \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} &= \mathbf{K}_W^{-1} \left[\mathbf{H} + \frac{1}{\Delta t} \left(- \sum_{i=0}^{K-1} \alpha_i \mathbf{W}^{n-i} - \beta \mathbf{W}^k \right) \right], \\ \Delta \mathbf{g}^{k+1} + \mathbf{K}_Q^{-1} \frac{1}{V} \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} &= \mathbf{K}_Q^{-1} \left[\mathbf{H} + \frac{1}{\Delta t} \left(- \sum_{i=0}^{K-1} \alpha_i \mathbf{W}^{n-i} - \beta \mathbf{W}^k \right) \right]. \end{aligned}$$

В приведенных формулах верхними индексами $n, (n-1), (n-2), \dots$ обозначены соответствующие слои по физическому времени t , а верхними индексами $k, (k+1), (k+2), \dots$ — соответствующие слои по искусственному

времени τ . Во время выполнения внутренних итераций по τ все временные слои по t остаются неизменными. При достижении сходимости внутренних итераций по искусственному времени τ последний $(k+1)$ -й временной слой по искусственному времени становится новым $(n+1)$ -м слоем по физическому времени: $\mathbf{W}^{k+1}, \mathbf{Q}^{k+1} \rightarrow \mathbf{W}^{n+1}, \mathbf{Q}^{n+1}$. Осуществляется очередная внешняя итерация по физическому времени и т.д. Поскольку можно пользоваться различными аппроксимациями производной по времени t , каждый из двух вышеприведенных вариантов расчетной схемы порождает семейство схем, отличающихся аппроксимациями производной по t .

Для предобуславливающего параметра θ можно выбрать, например, следующее значение, основанное на термодинамических свойствах рассматриваемой фазы и калибровочной скорости [26]:

$$\theta = \frac{1}{V_{\text{ref}}^2} - \frac{\rho_T}{\rho h_T}, \quad V_{\text{ref}} = \min \left\{ \max \left[|\mathbf{v}|, \frac{\nu}{\Delta x}, \frac{\alpha}{\Delta x}, \sqrt{\frac{\Delta P}{\rho}} \right], c \right\} \leq c, \quad c = \sqrt{\frac{\rho h_T}{d}}.$$

Здесь ν — калибровочный коэффициент вязкости, α — калибровочный коэффициент теплопроводности и c — скорость звука. Член с ν соответствует масштабу (интенсивности) процессов вязкой диссипации и начинает доминировать над другими аргументами функции \max в вышеприведенном выражении при большой вязкости ν . Член с α соответствует масштабу (интенсивности) процессов теплопроводности и начинает доминировать над другими аргументами функции \max в вышеприведенном выражении при большой теплопроводности α . Наконец, член с отношением разницы давлений к плотности доминирует в областях с локальной стагнацией течения, где скорость среды очень низкая, однако калибровочная скорость должна быть существенно выше скорости среды.

Выпишем собственные значения для якобиана по направлению \mathbf{n} для конвективных потоков, т.е. для матрицы

$$\mathbf{\Lambda} = n_x \mathbf{J}_x + n_y \mathbf{J}_y + n_z \mathbf{J}_z = n_x \mathbf{M}^{-1} \frac{\partial(\mathbf{F}_{\text{conv}})_x}{\partial \mathbf{Q}} + n_y \mathbf{M}^{-1} \frac{\partial(\mathbf{F}_{\text{conv}})_y}{\partial \mathbf{Q}} + n_z \mathbf{M}^{-1} \frac{\partial(\mathbf{F}_{\text{conv}})_z}{\partial \mathbf{Q}},$$

где $(\mathbf{F}_{\text{conv}})_{x,y,z}$ — конвективные потоки по x, y, z ; $\mathbf{M} = \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{Q}}$ для исходной (без применения предобуславливания) системы и $\mathbf{M} = \mathbf{\Gamma}$ для предобусловленной системы.

Для системы без использования предобуславливания $\mathbf{M} = \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{Q}}$, а собственные значения имеют вид

$$\lambda_{1,2,3}^{\partial \mathbf{W} / \partial \mathbf{Q}} = n_x u + n_y v + n_z w, \quad \lambda_{4,5}^{\partial \mathbf{W} / \partial \mathbf{Q}} = (n_x u + n_y v + n_z w) \pm \sqrt{\frac{h_T \rho}{d}}.$$

Для предобусловленной системы $\mathbf{M} = \mathbf{\Gamma}$, а собственные значения имеют вид

$$\lambda_{1,2,3}^{\mathbf{\Gamma}} = \lambda_{1,2,3}^{\partial \mathbf{W} / \partial \mathbf{Q}}, \quad \lambda_{4,5}^{\mathbf{\Gamma}} = \frac{(n_x u + n_y v + n_z w)(d + d_\theta)}{2 d_\theta} \pm \sqrt{\frac{(n_x u + n_y v + n_z w)^2 (d - d_\theta)^2}{4 d_\theta^2} + \frac{h_T \rho}{d_\theta}},$$

где $d = \rho \rho_p h_T + \rho_T (1 - \rho h_P)$ и $d_\theta = \rho \theta h_T + \rho_T (1 - \rho h_P)$.

Как можно видеть, первые три собственные значения для системы с предобуславливанием и системы без предобуславливания полностью совпадают, причем независимо от значения параметра θ . Это означает, что процедура предобуславливания не влияет на распространение малых возмущений соответствующего типа. Отличия проявляются в четвертом и пятом собственных значениях, соответствующих распространению акустических колебаний вдоль направления \mathbf{n} . Таким образом, из проведенного анализа видно, что введение предобуславливания в расчет регулирует акустические скорости. Рассмотрим два крайних случая для значений калибровочной скорости V_{ref} :

1) если значение калибровочной скорости равно скорости звука в среде, то значение параметра θ совпадает с замещаемой им производной плотности по давлению и предобуславливание отключается (не изменяет исходную систему); в этом случае все собственные значения исходной и модифицированной систем полностью совпадают;

2) если значение калибровочной скорости стремится к 0, то значение параметра θ стремится к бесконечности; соответственно, стремится к бесконечности и значение d_θ ; в этом случае четвертое и пятое собственные значения для модифицированной системы стремятся к величинам, не превышающим по порядку скорость среды по направлению \mathbf{n} .

Таким образом, можно сделать следующий вывод. Четвертое и пятое собственные значения исходной системы (без предобусловливания) стремятся к бесконечности по мере уменьшения сжимаемости среды и достигают очень высоких значений для слабосжимаемых сред, что приводит к трудностям вычислительного характера при построении численных схем за счет слишком широкого спектра. Четвертое и пятое собственные значения модифицированной системы (с предобусловливанием) остаются ограниченными (не превышающими скорость среды по порядку величины) при сколь угодно малой сжимаемости среды, спектр остается узким, и упомянутые выше трудности вычислительного характера таким образом устраняются. При этом предобусловливание не затрагивает первые три собственные значения, вмешательство в которые не требуется.

6. Программная реализация. Перечислим некоторые технологические аспекты нашего процесса разработки и существенные характеристики разрабатываемого пакета программ для трехмерного численного моделирования многофазных многокомпонентных течений в атомной энергетике.

Пакет представляет собой набор отдельных программ: средств подготовки расчетных данных (препроцессинга), средств обработки расчетных данных (постпроцессинга), различных вспомогательных утилит и самого важного и сложного компонента — параллельного солвера, осуществляющего численный расчет. Все программы собираются непосредственно из исходного кода без использования каких-либо предварительно оттранслированных бинарных модулей и библиотек. Таким образом, любая сборка исходного кода для нашего пакета, на основе которой генерируются все исполняемые файлы, не содержит никаких бинарных, предварительно оттранслированных данных.

В качестве языка разработки используется **C++** стандарта ISO/IEC 14882:2003 [29]. При создании кода активно применяются такие средства, как шаблоны, объектно-ориентированный подход и стандартная библиотека шаблонов STL (Standard Template Library).

В качестве средства организации параллелизма используется **MPI** стандарта 1.3 [30]. Вычислительные эксперименты показывают, что для рассматриваемых нами задач **MPI** демонстрирует достаточно хорошую эффективность для машин как с распределенной, так и с общей памятью. Поэтому на данном этапе разработки мы не планируем привлечение каких-либо специализированных средств организации параллелизма для машин с общей памятью (OpenMP, POSIX Threads и др.) в дополнение к имеющейся **MPI**-реализации: оправданность такой доработки не очевидна.

В качестве веб-системы организации коллективной работы над проектом и управления проектом используется **Redmine** [31]. До нее нами вполне успешно использовалась альтернативная система Trac. Причиной миграции явилась более удачная, на наш взгляд, поддержка в **Redmine** мультипроектных окружений (с отслеживанием иерархий проектов, связей между ними и т.д.). Для отслеживания ошибок (bug tracking) применяются встроенные средства **Redmine**.

В качестве системы управления версиями исходного кода используется **Git** [32]. До нее мы применяли Subversion. Причиной миграции явилась более широкая функциональность **Git**, в особенности намного более удобная работа с ветвями (branches) и слияниями ветвей (merging). Использование системы контроля версий обеспечивает прослеживаемость (traceability) программного кода, значительно облегчает совместную работу над проектом. В частности, система контроля версий помогает четко организовать работу со специализированными сборками кода (сборки для интеграции нового функционала, тестирования, передачи конечным пользователям, экспериментальные сборки и т.д.) с отслеживанием взаимосвязей между ними.

В качестве системы конфигурирования и сборки исходного кода используется кросс-платформенная система **CMake** [33]. Использование кросс-платформенной системы сборки позволяет вести как совместную разработку программного продукта, так и его развертывание на различных аппаратно-программных платформах. В частности, при разработке мы используем одновременно как ОС Windows с различными коммерческими трансляторами, так и ОС семейства GNU/Linux с известными свободными трансляторами GCC.

Для автоматизированной генерации технической документации по исходному коду применяется утилита **Doxygen** [34]. Для использования **Doxygen** исходный код необходимо предварительно аннотировать в соответствии с некоторыми формальными правилами. Технически аннотации оформляются в виде комментариев в исходном коде. Утилита **Doxygen** преобразует аннотированный исходный код в техническую документацию требуемого формата (например, html или pdf).

Используется модульная, расширяемая архитектура программного обеспечения, значительно облегчающая реализацию мультифизичности (поддержки более чем одной физической модели в одном расчете), динамических схем расщепления, систем альтернативных солверов и др.

Поддерживаются неструктурированные расчетные сетки со смешанными типами элементов (шестигранники, тетраэдры, призмы, пирамиды). Как известно, такие сетки хорошо подходят для дискретизации геометрически сложных расчетных областей с большими вариациями размеров, при этом обычно удается обойтись приемлемым для расчета количеством сеточных элементов (что может представлять серьезную проблему для сеток более простой структуры).

Реализована поддержка сложных (составных) симметрий расчетной области (любые корректные комбинации преобразований движения, включая наиболее распространенные варианты: отражение и периодика). Использование механизма симметрий позволяет в разы сократить потребности в вычислительных ресурсах (разумеется, для задач, обладающих соответствующим типом симметрии).

Имеется поддержка стороннего препроцессинга и постпроцессинга в открытых (свободных) и коммерческих программных продуктах, а также относительно скромные встроенные (независимые) средства препроцессинга и постпроцессинга. При решении задач пре- и постпроцессинга мы рассчитываем в первую очередь на сторонние утилиты (в особенности — на свободное программное обеспечение) и открытые форматы обмена данными. Для выполнения внешнего постпроцессинга используются утилиты **Paraview** [35] и, в существенно меньшей степени, **Tecplot** [36]. Внутренний постпроцессинг, имеющий минимальную функциональность, актуален в основном при отладке кода — внешний постпроцессинг в этом случае менее удобен. При выполнении препроцессинга активно используется пакет **Salome** [37] — для построения и коррекции геометрических моделей, разметки расчетной области, построения и разметки расчетной сетки, и т.д. Что касается внутренних средств препроцессинга, то они не обладают графическим интерфейсом пользователя, представляя собой по сути набор библиотечных классов и функций для работы с геометрическими моделями и расчетными сетками. Использование внутреннего препроцессинга требует определенных навыков программирования и вряд ли подойдет для конечного пользователя, однако может быть удобным, например, при автоматизации препроцессинга (пакетный неинтерактивный режим работы).

Вычислительная инфраструктура, представляющая собой набор библиотечных классов-шаблонов и функций-шаблонов, содержит готовые аппроксимации и вспомогательные вычислительные объекты для солверов конвекции, диффузии и характеристических алгоритмов (конечно-объемные TVD-схемы (Total Variation Diminishing); схемы конечных элементов; дискретные схемы Галеркина; явные, неявные и явно-неявные схемы по времени; различные схемы расщепления; трассировка лучей; программные зонды и т.д.). Из простых вычислительных объектов можно конструировать более сложные, составные вычислительные объекты в соответствии с принципом объектно-ориентированной декомпозиции.

В коде используется унифицированная централизованная база программных объектов (фабрика классов) с автоматизацией выделения и освобождения памяти и регулирования общего доступа субъектов (например, солверов различных уровней иерархии) к объектам (например, аппроксимациям, квадратурам, уравнениям состояния и т.д.).

Имеется поддержка реализации пользовательских численных схем за счет предоставления централизованного доступа к различным сервисным вычислительным объектам (кубатуры и квадратуры высоких порядков, интерполяции, аппроксимации, функции формы, ортогональные полиномиальные базисы, актуализация распределенных данных и т.д.).

Используются унифицированные интерфейсы доступа к различным параллельным линейным солверам (решателям систем линейных алгебраических уравнений) для поддержки реализации параллельных распределенных неявных и явно-неявных численных схем. Унификация интерфейсов позволяет легко переключаться между различными линейными солверами без модификации исходного кода.

В коде реализован унифицированный динамически конфигурируемый механизм актуализации (обновления) распределенных данных разных типов для поддержки явных и явно-неявных численных схем (виртуальные сеточные элементы всех размерностей, являющиеся образами других сеточных элементов).

Конфигурирование численного кода осуществляется непосредственно во время выполнения, а не трансляции и сборки. Это означает, что связи между объектами устанавливаются и разрываются динамически, конфигурационные файлы считываются и обрабатываются во время выполнения, для подстановки одних объектов (например, солверов и граничных условий) вместо других может использоваться специальный механизм псевдонимов и т.п.

Применяется достаточно развитый механизм журналирования событий на распределенных параллельных системах. Поддерживаются гибкое конфигурирование, фильтрация вывода, уровни важности сообщений

(ошибки, предупреждения, уведомления, отладочные сообщения), локальные и распределенные сообщения.

Активно используется лицензионно доступный исходный программный код третьих лиц **Metis** [38] и **ParMetis** [39] для выполнения разбиения сетки для параллельного расчета, **Aztec** [40] для параллельного решения систем линейных алгебраических уравнений и др.

Как можно видеть, при реализации параллелизма в нашем пакете программ использована модель вычислений с распределенной памятью, а средством реализации послужила библиотека MPI. Соответственно, пакет может быть использован для вычислений на компьютерах как с распределенной, так и с общей памятью (в последнем случае — с некоторой потерей эффективности по сравнению с программами, предназначенными специально для систем с общей памятью). Распараллеливание работы явных солверов осуществляется с помощью известного механизма фиктивных (виртуальных) ячеек (*ghost cells*), являющихся локальными образами оригинальных ячеек расчетной сетки на удаленных вычислительных узлах. Обновление значений в локальных фиктивных ячейках-образах на основе актуальных значений в оригинальных ячейках с удаленных узлов осуществляется на требуемых этапах работы численного алгоритма средствами MPI. Распараллеливание работы неявных солверов выполняется с помощью распределенной параллельной сборки матриц систем линейных алгебраических уравнений и последующего численного решения этих линейных систем с распределенными по всем вычислительным узлам матрицами. Для решения распределенных линейных систем используется специализированное стороннее программное обеспечение, например *Aztec* и другие подобные библиотеки.

При разработке рассматриваемого пакета программ используются некоторые теоретические и практические наработки, возникшие в ходе многолетней работы над нашими предыдущими проектами: трехмерным [41] и двумерным [42] кодами для численного моделирования импульсной магнитоускоренной плазмы. Таким образом, нам удастся обеспечить определенную преемственность работ над численными кодами, относящимися к различным предметным областям: однофазной одножидкостной радиационной магнитной гидродинамике и многофазной многокомпонентной гидродинамике.

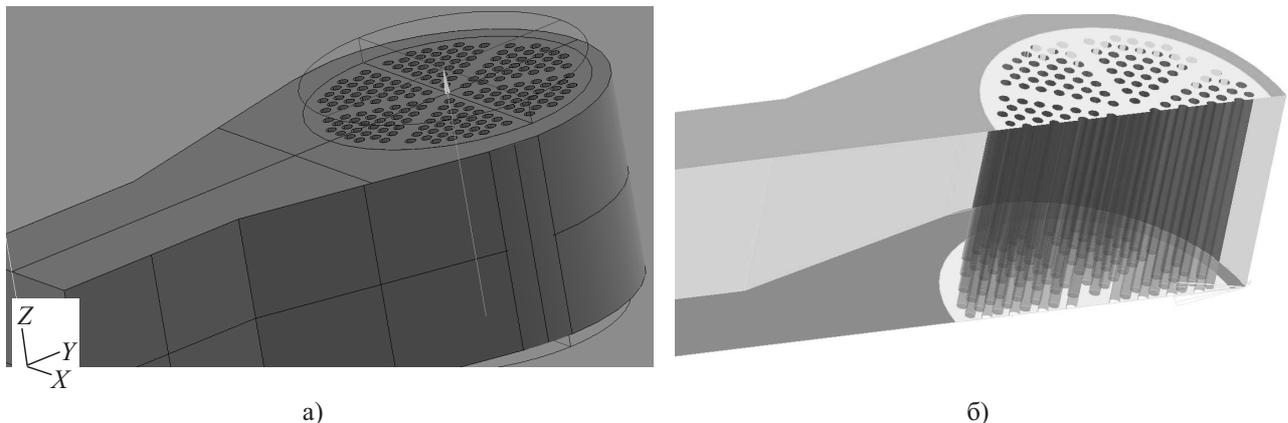


Рис. 1. Геометрическая модель коллектора (а) и ее разметка (б) с использованием Salome

Разрабатываемый пакет программ в настоящее время находится в фазе активного развития и ни в коем случае не является полностью законченным программным продуктом. Несомненно, требуется большая работа по верификации, улучшению и дополнению используемых моделей, методов и алгоритмов, а также по тестированию и рефакторингу исходного кода. Приведем ряд иллюстраций, демонстрирующих использование описываемого пакета программ на текущей стадии его развития. На рис. 1 и 2 представлен пример работы с геометрической моделью коллектора и ее разметкой, расчетной сеткой и ее разметкой, а также разбиением расчетной сетки для параллельного расчета с использованием *Salome* и *Paraview*. Для импорта сеточных данных из *Salome* в разрабатываемый прикладной код используются созданные нами ранее специализированные инструменты, подробно описанные в [43]. На рис. 3 представлены примеры визуализации результата параллельного численного расчета течения в коллекторе средствами *Paraview*.

На рис. 4 и 5 представлены некоторые численные метрики [44] параллельного расчета на машине с распределенной памятью: ускорение, эффективность и стоимость вычислений. Данные носят существенно

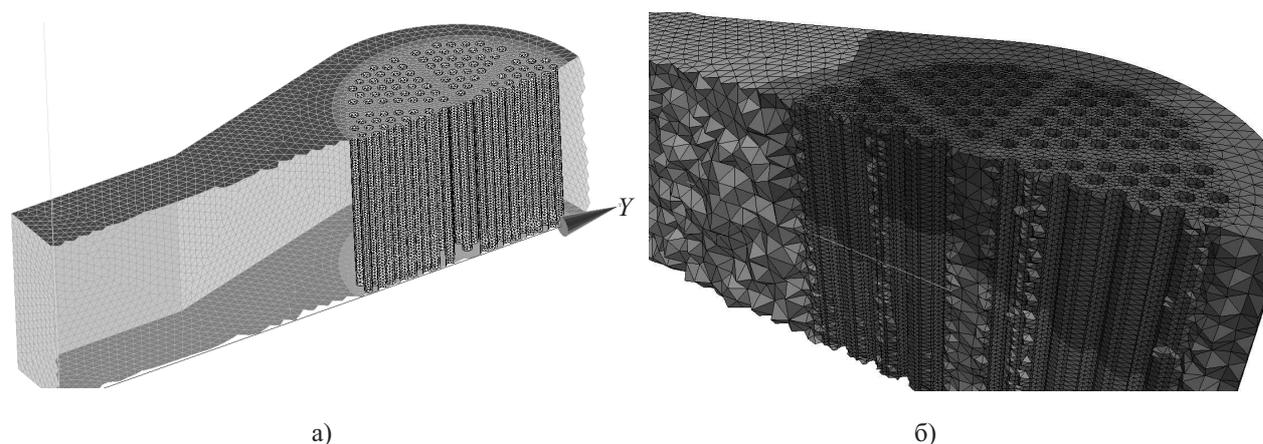


Рис. 2. Построение и разметка расчетной сетки с использованием Salome (а) и визуализация разбитой для параллельного расчета сетки средствами Paraview (б)

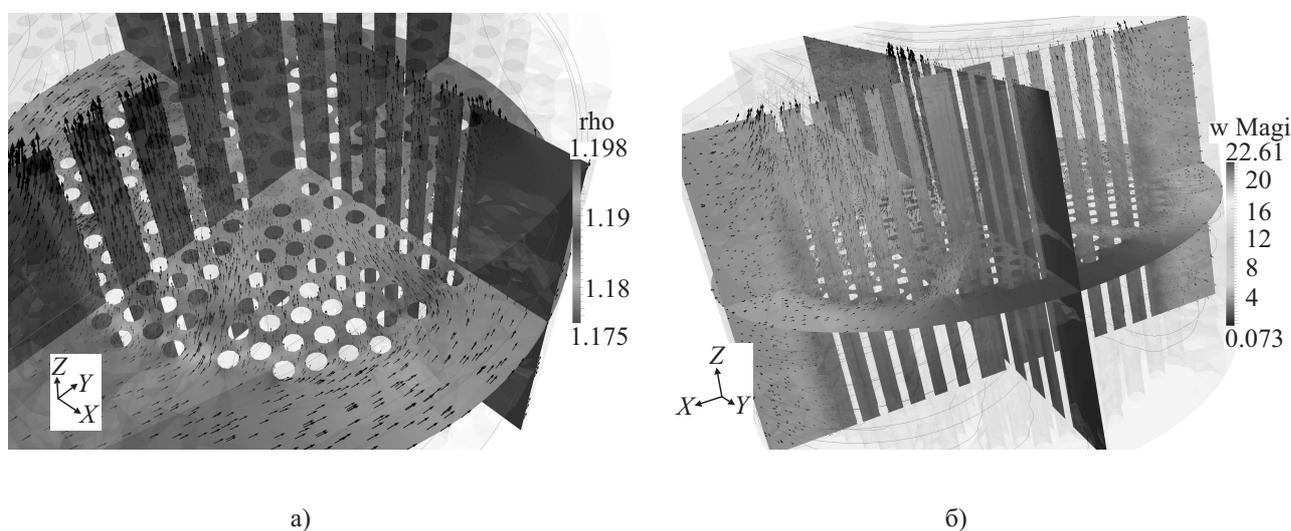


Рис. 3. Примеры визуализации результата параллельного численного расчета течения в коллекторе средствами Paraview: распределения плотности (а) и скорости (б). Тонкими сплошными линиями показаны интегралы вектора скорости для разных точек

предварительный, оценочный характер и будут корректироваться по мере дальнейшего развития численного кода. Заметим, что отмечаемое на графиках небольшое превышение единичной эффективности может быть связано с использованием в качестве базового (эталонного) параллельного расчета на 16 ядрах (а не последовательного расчета), нелинейностью и возможной недостаточной оптимизацией ряда вычислительных операций, особенностями распределенной подготовки расчетных данных и недостаточной точностью измерений. Данный вопрос будет исследован при дальнейшем уточнении приведенных предварительных данных с привлечением большего количества вычислительных ядер.

7. Заключение. В настоящей статье описан ряд теоретических и практических аспектов разработки пакета программ для трехмерного численного моделирования многофазных многокомпонентных течений в атомной энергетике, активно ведущейся в настоящее время в Физико-энергетическом институте им. А. И. Лейпунского.

Среди теоретических вопросов особое внимание уделено построению общей модели отношений между массовыми, скоростными, энергетическими, объемно-долевыми и материальными компонентами, задаче поиска равновесного давления фаз гетерогенной системы и проблеме организации сквозного однородного расчета

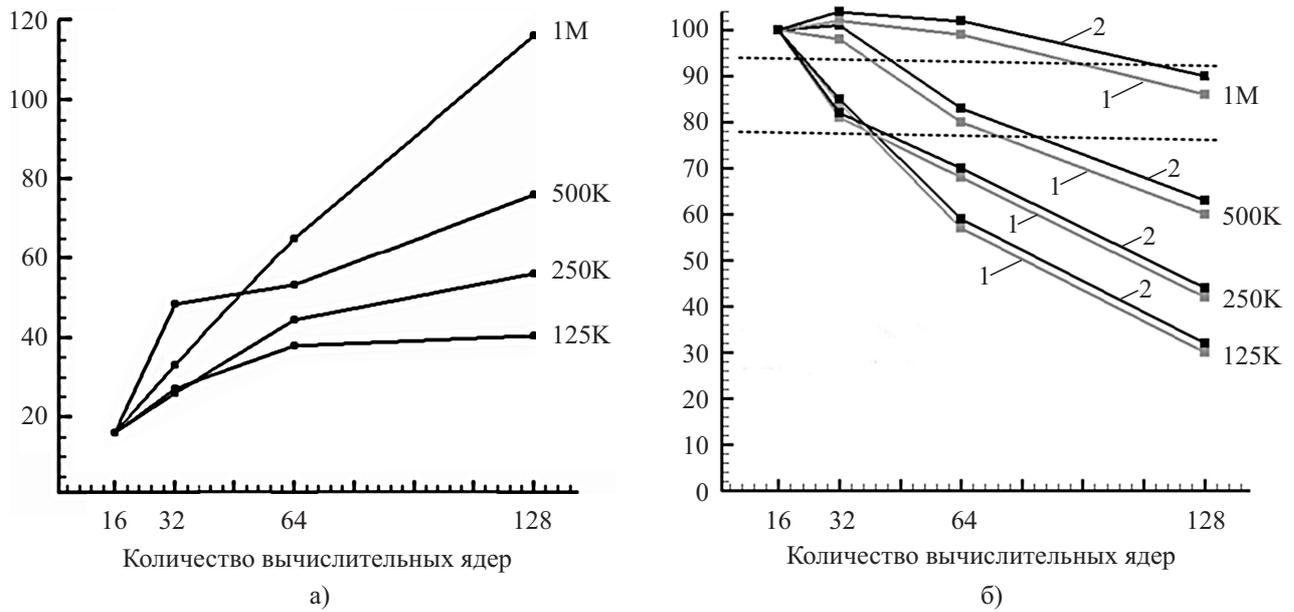


Рис. 4. Ускорение (а) и эффективность (б) параллельного расчета для различных размеров расчетной сетки. За основу (минимальное измерение) взят расчет на 16 ядрах. Серые линии 1 соответствуют вычислительным затратам непосредственно на итерации, черные линии 2 — полным затратам на расчет. Данные носят предварительный характер

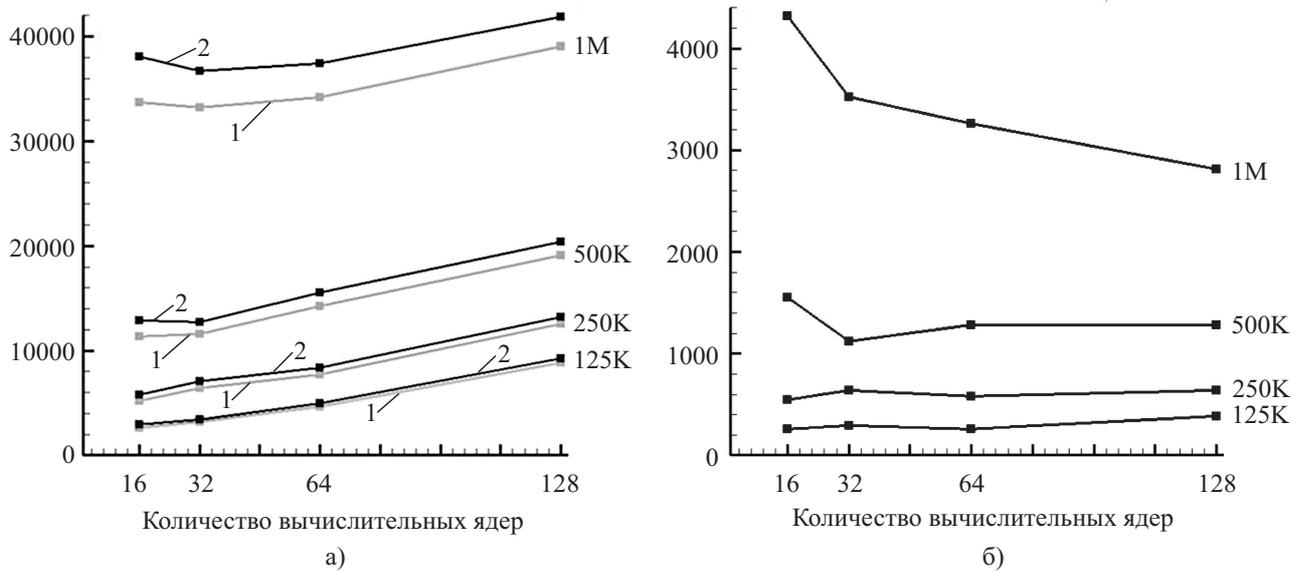


Рис. 5. Стоимость вычислений основного расчета (а) и этапа предрасчетной подготовки данных (б) для различных размеров расчетной сетки. За основу (минимальное измерение) взят расчет на 16 ядрах. Серые линии 1 соответствуют вычислительным затратам непосредственно на итерации, черные линии 2 — полным затратам на расчет. Данные носят предварительный характер

смеси сильносжимаемых и слабосжимаемых фаз в широком диапазоне чисел Маха (вплоть до предельного случая несжимаемого режима течения), для чего используется метод локального предобусловливания уравнений динамики сплошной среды.

Описаны технологические аспекты процесса разработки пакета, используемые подходы к пре- и пост-

процессингу с активным привлечением стороннего программного обеспечения (Salome, Paraview, Tecplot) и специализированных конвертеров. Приведены предварительные данные по масштабируемости параллельного кода.

Наши дальнейшие планы включают в себя многоэтапное усложнение моделей многофазных сред (в первую очередь за счет совершенствования используемых замыкающих соотношений и уравнений состояния фаз), учет сложных режимов течения многофазных сред (карт режимов течения), а также, в дальнесрочной перспективе, постепенную миграцию в направлении композитного мультифизического численного кода для моделирования тяжелых аварий в атомных реакторах (в качестве примера подобных кодов упомянем зарубежный SIMMER [16]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C.* A continuum method for modeling surface tension // *J. Comput. Phys.* 1992. **100**, N 2. 335–354.
2. *Scardovelli R., Zaleski S.* Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1999. **31**. 567–603.
3. *Osher S., Fedkiw R. P.* Level set methods: an overview and some recent results // *J. Comput. Phys.* 2001. **169**, N 2. 463–502.
4. *Jacqmin D.* Calculation of two-phase Navier–Stokes flows using phase-field modeling // *J. Comput. Phys.* 1999. **155**, N 1. 96–127.
5. *Yabe T., Xiao F., Utsumi T.* The constrained interpolation profile method for multiphase analysis // *J. Comput. Phys.* 2001. **169**, N 2. 556–593.
6. *Takagi S., Matsumoto Y.* Three-dimensional deformation of a rising bubble // *Proc. of the German–Japanese Symposium on Multiphase Flow (KfK 5389)*. 1994. 499–512.
7. *Ryskin G., Leal L. G.* Numerical solution of free-boundary problems in fluid mechanics. Part 2. Buoyancy-driven motion of a gas bubble through a quiescent liquid // *J. Fluid Mech.* 1984. **148**. 19–35.
8. *Oran E. S., Boris J. P.* Numerical simulation of reactive flow. New York: Elsevier, 1987.
9. *Hu H. H., Patankar N. A., Zhu M. Y.* Direct numerical simulations of fluid–solid systems using the arbitrary Lagrangian–Eulerian technique // *J. Comput. Phys.* 2001. **169**, N 2. 427–462.
10. *Johnson A. A., Tezduyar T. E.* 3D simulation of fluid–particle interactions with the number of particles reaching 100 // *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 1997. **145**, N 3/4. 301–321.
11. *Hou T. Y., Lowengrub J. S., Shelley M. J.* Boundary integral methods for multicomponent fluids and multiphase materials // *J. Comput. Phys.* 2001. **169**, N 2. 302–362.
12. *Pozrikidis C.* Interfacial dynamics for Stokes flow // *J. Comput. Phys.* 2001. **169**, N 2. 250–301.
13. *Glimm J., Grove J. W., Li X. L., Shyue K., Zeng Y., Zhang Q.* Three dimensional front tracking // *SIAM J. Sci. Comp.* 1998. **19**, N 3. 703–727.
14. *Yeoh G. H., Tu J.* Computational techniques for multiphase flows. Oxford: Butterworth–Heinemann, 2009.
15. *Нугматуллин Р.И.* Динамика многофазных сред. Т. 1. М.: Наука, 1987.
16. *Bohl W.R., Luck L.B.* SIMMER-II: a computer program for LMFBR disrupted core analysis. Report LA-11415-MS. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 1990.
17. *Писсанецки С.* Технология разреженных матриц. М.: Мир, 1988.
18. *Базаров И.П.* Термодинамика. М.: Физматлит, 1961.
19. *Flatten T., Morin A., Munkejord S. T.* On solutions to equilibrium problems for systems of stiffened gases // *SIAM Journal of Applied Mathematics*. 2011. **71**, N 1. 41–67.
20. *Samulyak R., Prykarpatsky Y.* Richtmyer–Meshkov instability in liquid metal flows: influence of cavitation and magnetic fields // *Mathematics and Computers in Simulation*. 2004. **65**, N 4/5. 431–446.
21. *Saurel R., Abgrall R.* A Simple method for compressible multifluid flows // *SIAM J. Sci. Comput.* 1999. **21**, N 3. 1115–1145.
22. *Cordier F., Degond P., Kumbaro A.* An asymptotic-preserving all-speed scheme for the Euler and Navier–Stokes equations // *J. Comput. Phys.* 2012. **231**, N 17. 5685–5704.
23. *Arun K. R., Noelle S., Lukáčová-Medvid'ová M., Munz C.-D.* An asymptotic preserving all mach number scheme for the Euler equations of gas dynamics. Preprint N 348. Aachen: Inst. für Geometrie und Praktische Mathematik, 2012.
24. *Haack J., Jin S., Liu J.-G.* An all-speed asymptotic-preserving method for the isentropic Euler and Navier–Stokes equations // *Commun. Comput. Phys.* 2012. **12**. 955–980.
25. *Weiss J. M., Smith W. A.* Preconditioning applied to variable and constant density flows // *AIAA Journal*. 1995. **33**, N 11. 2050–2057.

26. *Mulas M., Chibbaro S., Delussu G., Di Piazza I., Talice M.* Efficient parallel computations of flows of arbitrary fluids for all regimes of Reynolds, Mach and Grashof numbers // *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*. 2002. **12**, N 6. 637–657.
27. *Teixeira R., Alves L., Karagozian A. R., Kelly R. E.* On the solution of the compressible flow equations at small Mach numbers // *Proc. of the 12th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences (November 10–14, 2008, Belo Horizonte, MG)*. Rio de Janeiro: ABCM Press, 2008. 101–110.
28. *Fornberg B.* Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids // *Math. Comp.* 1988. **51**, N 184. 699–706.
29. ISO/IEC 14882:2003 Standard
(http://www.iso.org/iso/catalogue_detail.htm?csnumber=38110; дата обращения: 13.02.2014).
30. MPI Documents (<http://www.mpi-forum.org/docs/docs.html>; дата обращения: 13.02.2014).
31. Redmine (<http://www.redmine.org>; дата обращения: 13.02.2014).
32. Git (<http://www.git-scm.com>; дата обращения: 13.02.2014).
33. CMake — Cross Platform Make (<http://www.cmake.org>; дата обращения: 13.02.2014).
34. Doxygen (<http://www.stack.nl/~dimitri/doxygen/>; дата обращения: 13.02.2014).
35. Paraview — Open Source Scientific Visualization (<http://www.paraview.org>; дата обращения: 13.02.2014).
36. Tecplot (<http://www.tecplot.com>; дата обращения: 13.02.2014).
37. SALOME Platform (<http://www.salome-platform.org>; дата обращения: 13.02.2014).
38. METIS — Serial Graph Partitioning and Fill-Reducing Matrix Ordering
(<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/overview>; дата обращения: 13.02.2014).
39. ParMETIS — Parallel Graph Partitioning and Fill-reducing Matrix Ordering
(<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis/overview>; дата обращения: 13.02.2014).
40. Aztec (<http://acts.nersc.gov/aztec>; дата обращения: 13.02.2014).
41. *Гасилов В.А., Болдарев А.С., Дьяченко С.В., Ольховская О.Г., Карташева Е.Л., Болдырев С.Н., Багдасаров Г.А., Гасилова И.В., Бояров М.С., Шмыров В.А.* Пакет прикладных программ MARPLE3D для моделирования на высокопроизводительных ЭВМ импульсной магнитоускоренной плазмы // *Математическое моделирование*. 2012. **24**, № 1. 55–87.
42. *Gasilov V., D'yachenko S., Olkhovskaya O., Boldarev A., Kartasheva E., Boldyrev S.* Object-oriented programming and parallel computing in radiative magnetohydrodynamics simulations // *Parallel Computing: Architectures, Algorithms and Applications*. Series: Advances in Parallel Computing. Amsterdam: IOS Press, 2008. Vol. 15, pp. 475–482.
43. *Дьяченко С.В., Гасилова И.В., Дорофеева Е.Ю.* Разработка конвертера данных из интегрированной САД–САЕ системы Salome в прикладной код для численного решения начально-краевых задач методом сеток. Препринт № 36 ИПМ им. М. В. Келдыша. М., 2012.
44. *Дьяченко С.В., Багдасаров Г.А., Ольховская О.Г.* Средства профилирования и анализа многопоточных приложений Oracle (Sun) Studio Performance Analyzer. Препринт № 38 ИПМ им. М. В. Келдыша. 38. М., 2012.

Поступила в редакцию
17.02.2014

Development of a Software Package for 3D Modeling of Multiphase Multicomponent Flows in Nuclear Power Engineering

S. V. Dyachenko¹

¹ *Leypunsky Institute for Physics and Power Engineering; ploshchad' Bondarenko 1, Obninsk, 249033, Russia; Ph.D., Senior Scientist, e-mail: dyachenko.sergey@gmail.com*

Received February 17, 2014

Abstract: Some theoretical and practical aspects related to the development of a software package for 3D modeling of multiphase multicomponent flows in nuclear power engineering are considered. A particular attention is paid to the construction of a generic model of relations between the mass, velocity, energy, volume fraction, and material components of the flow, to finding the equilibrium pressure of phases of heterogeneous systems, and to performing uniform computing for mixtures of strongly compressible phases and weakly compressible phases in a wide range of the Mach numbers. An approach to data pre-processing and post-processing is discussed. Preliminary code parallelization metrics (speed-up, efficiency, and cost of computations) are also presented.

Keywords: multiphase flows, multicomponent flows, compressible flows, numerical simulation, parallel computing, software packages, nuclear power engineering.

References

1. J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach, "A Continuum Method for Modeling Surface Tension," *J. Comput. Phys.* **100** (2), 335–354 (1992).
2. R. Scardovelli and S. Zaleski, "Direct Numerical Simulation of Free-Surface and Interfacial Flow," *Annu. Rev. Fluid Mech.* **31**, 567–603 (1999).
3. S. Osher and R. P. Fedkiw, "Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results," *J. Comput. Phys.* **169** (2), 463–502 (2001).
4. D. Jacqmin, "Calculation of Two-Phase Navier–Stokes Flows Using Phase-Field Modeling," *J. Comput. Phys.* **155** (1), 96–127 (1999).
5. T. Yabe, F. Xiao, and T. Utsumi, "The Constrained Interpolation Profile Method for Multiphase Analysis," *J. Comput. Phys.* **169** (2), 556–593 (2001).
6. S. Takagi and Y. Matsumoto, "Three-Dimensional Deformation of a Rising Bubble," in *Proc. German–Japanese Symp. on Multiphase Flow* (Kernforschungszentrum, Karlsruhe, 1994), pp. 499–512.
7. G. Ryskin and L. G. Leal, "Numerical Solution of Free-Boundary Problems in Fluid Mechanics: Part 2. Buoyancy-Driven Motion of a Gas Bubble through a Quiescent Liquid," *J. Fluid Mech.* **148**, 19–35 (1984).
8. E. S. Oran and J. P. Boris, *Numerical Simulation of Reactive Flow* (Elsevier, New York, 1987).
9. H. H. Hu, N. A. Patankar, and M. Y. Zhu, "Direct Numerical Simulations of Fluid–Solid Systems Using the Arbitrary Lagrangian–Eulerian Technique," *J. Comput. Phys.* **169** (2), 427–462 (2001).
10. A. A. Johnson and T. E. Tezduyar, "3D Simulation of Fluid–Particle Interactions with the Number of Particles Reaching 100," *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **145** (3/4), 301–321 (1997).
11. T. Y. Hou, J. S. Lowengrub, and M. J. Shelley, "Boundary Integral Methods for Multicomponent Fluids and Multiphase Materials," *J. Comput. Phys.* **169** (2), 302–362 (2001).
12. C. Pozrikidis, "Interfacial Dynamics for Stokes Flow," *J. Comput. Phys.* **169** (2), 250–301 (2001).
13. J. Glimm, J. W. Grove, X. L. Li, et al., "Three Dimensional Front Tracking," *SIAM J. Sci. Comp.* **19** (3), 703–727 (1998).
14. G. H. Yeoh and J. Tu, *Computational Techniques for Multiphase Flows* (Butterworth–Heinemann, Oxford, 2009).
15. R. I. Nigmatulin, *Dynamics of Multiphase Media* (Nauka, Moscow, 1987; Hemisphere, Washington, 1991), Vol. 1.
16. W. R. Bohl and L. B. Luck, *SIMMER-II: A Computer Program for LMFBR Disrupted Core Analysis*, Report LA-11415-MS (Los Alamos Nat. Lab., Los Alamos, 1990).
17. S. Pissanetzky, *Sparse Matrix Technology* (Academic, London, 1984; Mir, Moscow, 1988).
18. I. P. Bazarov, *Thermodynamics* (Fizmatlit, Moscow, 1961; Pergamon, New York, 1964).
19. T. Flatten, A. Morin, and S. T. Munkejord, "On Solutions to Equilibrium Problems for Systems of Stiffened Gases," *SIAM J. Appl. Math.* **71** (1), 41–67 (2011).
20. R. Samulyak and Y. Prykarpatsky, "Richtmyer–Meshkov Instability in Liquid Metal Flows: Influence of Cavitation and Magnetic Fields," *Math. Comput. Simul.* **65** (4/5), 431–446 (2004).
21. R. Saurel and R. Abgrall, "A Simple Method for Compressible Multifluid Flows," *SIAM J. Sci. Comput.* **21** (3), 1115–1145 (1999).
22. F. Cordier, P. Degond, and A. Kumbaro, "An Asymptotic-Preserving All-Speed Scheme for the Euler and Navier–Stokes Equations," *J. Comput. Phys.* **231** (17), 5685–5704 (2012).
23. K. R. Arun, S. Noelle, M. Lukáčová-Medvid'ová, and C.-D. Munz, *An Asymptotic Preserving All Mach Number Scheme for the Euler Equations of Gas Dynamics*, Preprint No. 348 (Inst. für Geometrie und Praktische Math., Aachen, 2012).
24. J. Haack, S. Jin, and J.-G. Liu, "An All-Speed Asymptotic-Preserving Method for the Isentropic Euler and Navier–Stokes Equations," *Commun. Comput. Phys.* **12**, 955–980 (2012).
25. J. M. Weiss and W. A. Smith, "Preconditioning Applied to Variable and Constant Density Flows," *AIAA J.* **33** (11), 2050–2057 (1995).
26. M. Mulas, S. Chibbaro, G. Delussu, et al., "Efficient Parallel Computations of Flows of Arbitrary Fluids

for All Regimes of Reynolds, Mach and Grashof Numbers,” *Int. J. Numer. Meth. Heat Fluid Flow* **12** (6), 637–657 (2002).

27. R. Teixeira, L. Alves, A. R. Karagozian, and R. E. Kelly, “On the Solution of the Compressible Flow Equations at Small Mach Numbers,” in *Proc. 12th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, Belo Horizonte, MG, November 10–14, 2008* (ABCM Press, Rio de Janeiro, 2008), pp. 101–110.

28. B. Fornberg, “Generation of Finite Difference Formulas on Arbitrarily Spaced Grids,” *Math. Comp.* **51** (184), 699–706 (1988).

29. ISO/IEC 14882:2003 Standard.

http://www.iso.org/iso/catalogue_detail.htm?csnumber=38110. Cited February 13, 2014.

30. MPI Documents. <http://www.mpi-forum.org/docs/docs.html>. Cited February 13, 2014.

31. Redmine. <http://www.redmine.org>. Cited February 13, 2014.

32. Git. <http://www.git-scm.com>. Cited February 13, 2014.

33. CMake — Cross Platform Make. <http://www.cmake.org>. Cited February 13, 2014.

34. Doxygen. <http://www.stack.nl/~dimitri/doxygen/>. Cited February 13, 2014.

35. Paraview — Open Source Scientific Visualization. <http://www.paraview.org>. Cited February 13, 2014.

36. Tecplot. <http://www.tecplot.com>. Cited February 13, 2014.

37. SALOME Platform. <http://www.salome-platform.org>. Cited February 13, 2014.

38. METIS — Serial Graph Partitioning and Fill-Reducing Matrix Ordering.

<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/overview>. Cited February 13, 2014.

39. ParMETIS — Parallel Graph Partitioning and Fill-Reducing Matrix Ordering.

<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis/overview>. Cited February 13, 2014.

40. Aztec. <http://acts.nersc.gov/aztec>. Cited February 13, 2014.

41. V. A. Gasilov, A. S. Boldarev, S. V. Dyachenko, et al., “Program Package MARPLE3D for Simulation of Pulsed Magnetically Driven Plasma Using High Performance Computing,” *Mat. Mod.* **24** (1), 55–87 (2012).

42. V. A. Gasilov, S. V. Dyachenko, O. G. Olkhovskaya, et al., “Object-Oriented Programming and Parallel Computing in Radiative Magnetohydrodynamics Simulations,” in *Parallel Computing: Architectures, Algorithms and Applications. Ser.: Advances in Parallel Computing* (IOS Press, Amsterdam, 2008), Vol. 15, pp. 475–482.

43. S. V. Dyachenko, I. V. Gasilova, and E. Ju. Dorofeeva, *Development of a Data Converter from the Integrated CAD-CAE System Salome into an Application Code for the Mesh-Based Numerical Solution of Initial-Boundary Value Problem*, Preprint No. 36 (Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow, 2012).

44. S. V. Dyachenko, G. A. Bagdasarov, and O. G. Olkhovskaya, *Oracle (Sun) Studio Performance Analyzer — Profiling and Analysis Tools for Multithreaded Applications*, Preprint No. 38 (Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow, 2012).