

# Разработка ПО для трехмерного численного моделирования многофазных многокомпонентных течений в атомной энергетике

С.В. Дьяченко

ГНЦ РФ – Физико-энергетический институт имени А.И. Лейпунского, г. Обнинск

В статье описаны теоретические и практические аспекты ведущейся в настоящее время в «ФГУП ГНЦ РФ – ФЭИ» разработки ПО 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 слабожимаемых фаз в широком диапазоне чисел Маха. Описаны технологические аспекты процесса разработки и непосредственно самого ПО, используемые подходы к пре- и постпроцессингу. Приведены предварительные данные по масштабируемости параллельного кода.

## 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. При этом в контексте именно численного компьютерного моделирования на современных параллельных компьютерных платформах (мультипроцессоры, мультикомпьютеры и т.д.) в дополнение к сложным проблемам чисто физического характера возникает большое число новых, не менее сложных вопросов из других областей: вычислительной математики, теории численных методов, информатики, теории программирования, теории 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 настоящей статье описаны некоторые теоретические и практические аспекты разработки ПО для трехмерного численного моделирования многофазных многокомпонентных течений в атомной энергетике, которая активно ведется в настоящее время в «ФГУП ГНЦ РФ – ФЭИ».

## 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. Уравнения динамики для гетерогенной среды, состоящей из  $N$  вязких сжимаемых фаз с общим равновесным давлением, сформулированные с привлечением схемы расщепления Рахматулина [1], могут быть представлены в следующем виде:

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_i \mathbf{v}_i + \nabla^k \rho_i \mathbf{v}_i v_i^k = \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i \mathbf{g}_i + \sum_{j=1}^N \mathbf{P}_{ji} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i u_i) = \rho_i A_i + \rho_i Q_i + \sum_{j=1}^N J_{ji} u_{ji} - \nabla \rho_i u_i \mathbf{v}_i \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_i v_i^2}{2} \right) = \mathbf{v}_i \nabla^k \sigma_i^k + \rho_i \mathbf{g}_i \mathbf{v}_i - \nabla \left( \frac{\rho_i v_i^2}{2} \mathbf{v}_i \right) + \sum_{j=1}^N \left[ \mathbf{R}_{ji} \mathbf{v}_i + J_{ji} \left( \mathbf{v}_{ji} - \frac{\mathbf{v}_i}{2} \right) \mathbf{v}_i \right] \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i E_i) = \nabla (\mathbf{c}_i - \mathbf{q}_i) + \rho_i \mathbf{g}_i \mathbf{v}_i - \nabla \rho_i E_i \mathbf{v}_i + \sum_{j=1}^N \left[ W_{ji} + Q_{ji} + J_{ji} \left( u_{ji} + \frac{v_{ji}^2}{2} \right) \right] \quad (5)$$

$$E_i = u_i + \frac{v_i^2}{2} \quad (6)$$

$$\sigma_i^{kl} = -\alpha_i P_i \delta^{kl} + \tau_i^{kl}, \quad c_i^k = \sigma_i^{kl} v_i^l \quad (7)$$

$$\rho_i Q_i = -\nabla^k q_i^k + \sum_{j=1}^N Q_{ji} \quad (8)$$

$$\rho_i A_i = \underbrace{\nabla^k c_i^k - v_i^l \nabla^k \sigma_i^{kl}}_{\sigma_i^{kl} \nabla^k v_i^l} + \sum_{j=1}^N \left[ W_{ji} - R_{ji}^k v_i^k + \frac{1}{2} J_{ji} (\mathbf{v}_{ji} - \mathbf{v}_i)^2 \right] = \frac{\alpha_i P_i}{\check{\rho}_i} \frac{d_i \check{\rho}_i}{dt} + \tau_i^{kl} e_i^{kl} + \sum_{j=1}^N \left[ \mathbf{F}_{ji} (\mathbf{v}_{ji} - \mathbf{v}_i) + J_{ji} \frac{(\mathbf{v}_{ji} - \mathbf{v}_i)^2}{2} \right] \quad (9)$$

$$\mathbf{P}_{ji} = -\mathbf{P}_{ij} = \mathbf{R}_{ji} + J_{ji} \mathbf{v}_{ji} \quad (10)$$

$$\sum_{j=1}^N \mathbf{R}_{ji} = P \nabla \alpha_i + \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ji} \quad (11)$$

$$\mathbf{F}_{ji} = \mathbf{F}_{ji} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i, \dots) = -\mathbf{F}_{ij} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j, \dots) \quad (12)$$

$$\sum_{j=1}^N W_{ji} = -P_i \left[ \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} - \frac{\alpha_i}{\rho_i} \sum_{j=1}^N J_{ji} \right] + \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ji} \mathbf{v}_i \quad (13)$$

$$P_1 \left( \check{\rho}_1 = \frac{\rho_1}{\alpha_1}, T_1 \right) = P_2 \left( \check{\rho}_2 = \frac{\rho_2}{\alpha_2}, T_2 \right) = \dots = P_N \left( \check{\rho}_N = \frac{\rho_N}{\alpha_N}, T_N \right) = P \quad (14)$$

$$\check{\rho}_i = \frac{\rho_i}{\alpha_i} \quad (15)$$

$$u_i = u_i(\check{\rho}_i, T_i, \dots), \quad P_i = P_i(\check{\rho}_i, T_i, \dots), \quad S_i = S_i(\check{\rho}_i, T_i, \dots), \quad \dots \quad (16)$$

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_{ji}, \quad \mathbf{R}_{ji} = -\mathbf{R}_{ij} \quad (17)$$

В уравнениях использованы следующие обозначения:  $\rho_i$  – макроскопическая (гидродинамическая) плотность  $i$ -й фазы;  $\check{\rho}_i$  – микроскопическая (истинная) плотность  $i$ -й фазы;  $\alpha_i$  – 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 в единицу времени;  $\boldsymbol{\sigma}_i$  – 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 в единицу времени;  $u_i$  – интенсивность переноса импульса из  $j$ -й фазы в  $i$ -ю фазу в единице объема смеси в единицу времени);  $E_i$  – полная удельная энергия  $i$ -й фазы;  $\mathbf{c}_i$  – вектор переноса механической энергии за счет работы внешних поверхностных сил для  $i$ -ой фазы;  $\mathbf{q}_i$  – вектор теплового потока для  $i$ -ой фазы;  $E_{ji}$  – интенсивность переноса энергии из  $j$ -й фазы в  $i$ -ю фазу в единице объема смеси в 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  $i$ -ой фазы;  $S_i$  – энтропия (или иные доступные для прямого вычисления термодинамические функции, определяемые уравнением состояния)  $i$ -ой 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, 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 фаз в системе  $N$ , 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 количества фаз в системе  $N^2$ .

### 3. Модель отношений между массовыми, скоростными, энергетическими, объемно-долевыми, материальными компонентами

В данном разделе рассматривается вопрос единообразного представления различных конфигураций многофазных многокомпонентных сред, включая гетерогенные и гомогенные, в рамках единой математической 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, 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, 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 [2] 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 [2] 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 как  $R_{\rho\alpha} = R_{\alpha\rho}^{-1}$ . 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 как  $R_{\rho e} = R_{e\rho}^{-1}$ . 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  $R_{\rho M} = R_{M\rho}^{-1}$ .

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 компонент. Общая плотность гомогенной подсистемы, соответствующей некоторому конкретному объемно- долевому компоненту с индексом  $k$ , определяется по формуле

$$\rho_{\alpha_k} = \sum_{i: R_{\rho\alpha}(i)=k} \rho_i = \sum_{i \in R_{\alpha\rho}(k)} \rho_i \quad (18)$$

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

$$\rho_{w_k} = \sum_{i:R_{\rho w}(i)=k} \rho_i = \sum_{i \in R_{w\rho}(k)} \rho_i, \quad \rho_{\varepsilon_k} = \sum_{i:R_{\rho\varepsilon}(i)=k} \rho_i = \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(k)} \rho_i, \quad \rho_{M_k} = \sum_{i:R_{\rho M}(i)=k} \rho_i = \sum_{i \in R_{M\rho}(k)} \rho_i \quad (19)$$

С помощью вышеприведенного подхода можно конструировать комбинированные величины. Например, формула для общей плотности подсистемы, соответствующей (в смысле отображений) некоторым конкретным объемно-долевым, скоростным, энергетическим и материальным компонентам (с индексами соответственно a, b, c, d), записывается следующим образом:

$$\rho_{\alpha_a w_b \varepsilon_c M_d} = \sum_{i \in R_{\alpha\rho}(a) \cap R_{w\rho}(b) \cap R_{\varepsilon\rho}(c) \cap R_{M\rho}(d)} \rho_i \quad (20)$$

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. Используемая нами общая модель в качестве частных случаев (при наложении соответствующих ограничений на отношения  $R$ ) позволяет описать такие подклассы многофазных систем, как полностью гомогенные системы (в которой все фазы разделяют физически один и тот же объем, но могут иметь различные скорости), полностью гетерогенные системы ( $N$  фаз с  $N$  независимыми скоростями,  $N$  объемными долями и т.д.), «раскраски» полностью гомогенной односкоростной среды (отдельные массовые компоненты можно интерпретировать как «цвета» или маркеры, позволяющие независимо отслеживать временную эволюцию отдельных фракций-«цветов») и т.п. 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.

Для уменьшения громоздкости и облегчения понимания иллюстрацию нашего способа группировки уравнений динамики многофазных сред с учетом вышеописанных отношений между компонентами целесообразно выполнить на примере упрощенной (базовой) расширяемой многофазной модели, в которой выключены любые обмены между фазами, а также вязкая диссипация. Изложенный ниже подход может применяться и для расширенной любыми 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  $m$ ):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_i + \nabla \rho_i \mathbf{v}_i = 0 \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{w_m} \mathbf{v}_m + \nabla^k \rho_{w_m} \mathbf{v}_m v_m^k = - \sum_{i \in R_{w\rho}(m)} \alpha_i \nabla P_i + \sum_{i \in R_{w\rho}(m)} \rho_i \mathbf{g}_i \quad (22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{w_m} + \nabla \rho_{w_m} \mathbf{v}_m = 0 \quad (23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\varepsilon_m} u_m + \nabla u_m \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \rho_i \mathbf{v}_i = - \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} P_i \nabla \alpha_i \mathbf{v}_i - \nabla \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \mathbf{q}_i - \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} P_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \sum_{j=1}^N Q_{ji} \quad (24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho_{\varepsilon_m} u_m + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \frac{\rho_i v_i^2}{2} \right] + \nabla \left[ u_m \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \rho_i \mathbf{v}_i + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \frac{\rho_i v_i^2}{2} \mathbf{v}_i \right] =$$

$$- \nabla \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \alpha_i P_i \mathbf{v}_i - \nabla \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \mathbf{q}_i + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \rho_i \mathbf{g}_i \mathbf{v}_i - \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} P_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \sum_{i \in R_{\varepsilon\rho}(m)} \sum_{j=1}^N Q_{ji} \quad (25)$$

$$\sum_{i \in R_{\alpha\rho}(m)} P_i (\alpha_m, \rho_i, \dots) = P_{\alpha_m} = P \quad (26)$$

В целях обеспечения более компактной и ясной для понимания записи уравнений в них использована укороченная запись компонент с индексом  $i$ . Приведем правила формального перехода от использованной выше компактной записи сгруппированных уравнений к полностью формальной записи с использованием соответствующих отношений:

$$\alpha_i \longrightarrow \alpha_{R_{\rho\alpha}(i)}, \quad \mathbf{v}_i \longrightarrow \mathbf{v}_{R_{\rho\mathbf{v}}(i)}, \quad u_i \longrightarrow u_{R_{\rho\varepsilon}(i)}, \quad M_i \longrightarrow M_{R_{\rho M}(i)} \quad (27)$$

## 4. Уравнения состояния фаз

Уравнение состояния для той или иной фазы по сути представляет собой полный набор соотношений между термодинамическими параметрами этой фазы (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 т.д.) 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 привнести в нее некоторую очень малую степень сжимаемости, восстановив, таким образом, связь давления с термодинамическими параметрами и формально устранив вырождение уравнения состояния.

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 stiffened equation of state или stiffened EOS) [3] 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 опре-

деленном диапазоне параметров, в первую очередь – давления). В частности, опубликованы результаты об успешном применении этого уравнения состояния для моделирования воды, жидкой ртути, воздуха и т.д. Кроме того, известны подходы к его обобщению на случай наличия фазовых переходов между жидкой и газообразной фазами вещества. Для «жесткого» уравнения состояния зависимость давления от плотности и удельной внутренней энергии отдельной фазы может быть записана в следующем виде [3]:

$$P = (\gamma - 1) \rho (\varepsilon - \varepsilon_*) - \gamma P_\infty \quad (28)$$

Здесь  $P$  – давление;  $\rho$  – микроскопическая (истинная) плотность;  $\varepsilon$  – удельная внутренняя энергия;  $\gamma, \varepsilon_*, P_\infty$  – параметры «жесткого» уравнения состояния для рассматриваемой фазы. Нелинейное уравнение относительно давления записывается следующим образом ( $i$  – номер фазы):

$$F(\hat{P}) = f(\hat{P}) - 1 = \sum_{i=1}^N \frac{(\gamma_i - 1) [\rho_i \varepsilon_i - \rho_i (\varepsilon_*)_i]}{\hat{P} + \gamma_i (P_\infty)_i} - 1, \quad F(\hat{P}) = 0 \quad (29)$$

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

$$\hat{P}^{(n+1)} = \hat{P}^{(n)} - \frac{F(\hat{P}^{(n)})}{F'(\hat{P}^{(n)})} = \hat{P}^{(n)} + \frac{1 - f(\hat{P}^{(n)})}{f'(\hat{P}^{(n)})} \quad (30)$$

в общем случае не обеспечивает абсолютной сходимости при любых допустимых начальных значениях равновесного давления (по которому производятся итерации). Для решения этой проблемы [3] предлагается произвести следующую модификацию базового численного метода, адаптированную к конкретному рассматриваемому уравнению состояния:

$$\hat{P}^{(n+1)} = \hat{P}^{(n)} + \frac{1 - f(\hat{P}^{(n)})}{f'(\hat{P}^{(n)})} \cdot \left[ 1 - \frac{1 - f(\hat{P}^{(n)}) + |1 - f(\hat{P}^{(n)})|}{2f'(\hat{P}^{(n)}) (\hat{P}^{(n)} + \min_i (\gamma_i (P_\infty)_i))} \right]^{-1} \quad (31)$$

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 [4], [5], [6]. Классические методы решения уравнений динамики сплошных сред, основанные как на расчете давления (так называемые *pressure based solvers*), так и на расчете плотности (так называемые *density based solvers*), применимы только для некоторого диапазона чисел Маха, а для расширения их применимости используются специальные методики, в свою очередь не свободные от недостатков. 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. Во-первых, это 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 несжимае-

тому пределу (для несжимаемого режима течения акустические скорости формально являются бесконечно большими). Во-вторых, наблюдается сильный рост паразитной численной диффузии (схемной диссипации) при расчете конвективных потоков, что связано с неограниченным ростом собственных чисел соответствующего якобиана в несжимаемом пределе (собственные числа якобиана входят в выражения для расчета конвективных потоков).

Суть метода локального предобуславливания уравнений динамики сплошной среды, используемого нами для обеспечения сквозного однородного счета, заключается в следующем [4], [5], [6]. С целью искусственного уменьшения акустических скоростей (являющихся собственными числами 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 предобуславливание (модификацию коэффициентов уравнений) – снова вернуться к консервативным величинам. При этом схема сохраняет свойство консервативности.

Процедура предобуславливания 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 вносится искусственное время  $\tau$ , по которому осуществляются внутренние итерации на установление. Таким образом, на каждой внешней итерации по физическому времени  $t$  решается квази-стационарная задача на установление по искусственному времени  $\tau$ , для чего осуществляются внутренние итерации. Поскольку искусственное время не играет никакой физической роли и может масштабироваться произвольно, то процедура предобуславливания применяется именно для внутренних итераций, т.е. при решении задачи на установление по искусственному времени. Для внешних итераций по физическому времени предобуславливание не применяется. Соответственно, в ходе процедуры предобуславливания искажаются только производные по искусственному времени, что не является существенным (при установлении квази-стационара эти производные зануляются), при этом производные по физическому времени остаются корректными, что принципиально при решении нестационарных задач.

Кратко формализуем вышесказанное. Ниже приводятся формулы, относящиеся к той или иной конкретной фазе, а соответствующий этой фазе нижний индекс в них для удобства опускается. Исходная система уравнений, записанная в векторной форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{W} \cdot dV + \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \mathbf{H} \cdot dV \quad (32)$$

приводится к следующему виду (без использования предобуславливания):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{W} \cdot dV + \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial}{\partial \tau} \int_V \mathbf{Q} \cdot dV + \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \mathbf{H} \cdot dV \quad (33)$$

Предобуславливание, заключающееся в заменах  $\rho_P \rightarrow \theta$ ,  $\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{Q}} \rightarrow \mathbf{\Gamma}$  ( $\rho_P$  – производная плотности по давлению при постоянной температуре,  $\theta$  – предобуславливающий параметр,  $\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{Q}}$  – якобиан перехода от консервативных к простым переменным,  $\mathbf{\Gamma}$  – предобусловленная версия якобиана  $\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{Q}}$  после замены в нем  $\rho_P$  на  $\theta$ ), приводит к системе

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{W} \cdot dV + \mathbf{\Gamma} \frac{\partial}{\partial \tau} \int_V \mathbf{Q} \cdot dV + \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \mathbf{H} \cdot dV \quad (34)$$

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; вектор скорости имеет вид  $\mathbf{v} = (u, v, w)^T$ . Обращаем внимание на то, что предобуславливание применяется только к производной по искусственному времени  $\tau$ , а не к производной по физическому времени  $t$ .

Воспользовавшись для производной по времени аппроксимацией «назад по времени» (backward difference) специального вида



$$\left. \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} \right|_{k+1} \approx \frac{1}{\Delta t} \sum_{i=0}^{K-1} \alpha_i \mathbf{W}^{n-i} + \frac{1}{\Delta t} \beta \mathbf{W}^{k+1} = \frac{1}{\Delta t} \sum_{i=0}^{K-1} \alpha_i \mathbf{W}^{n-i} + \frac{1}{\Delta t} \beta \left[ \mathbf{W}^k + \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{Q}} (\mathbf{Q}^{k+1} - \mathbf{Q}^k) \right] \quad (35)$$

и введя для удобства обозначения

$$\Delta \mathbf{W}^{k+1} = \mathbf{W}^{k+1} - \mathbf{W}^k, \quad \Delta \mathbf{Q}^{k+1} = \mathbf{Q}^{k+1} - \mathbf{Q}^k \quad (36)$$

$$\mathbf{K}_W = \frac{\Gamma}{\Delta \tau} \left( \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{Q}} \right)^{-1} + \frac{\beta}{\Delta t} \mathbf{I}, \quad \mathbf{K}_Q = \frac{\Gamma}{\Delta \tau} + \frac{\beta}{\Delta t} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{Q}}, \quad (37)$$

получим следующие два варианта конечно-объемной расчетной схемы с предобуславливанием, отличающиеся между собой способом выполнения внутренних итераций по искусственному времени:

$$\Delta \mathbf{W}^{k+1} + \mathbf{K}_W^{-1} \frac{1}{V} \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \mathbf{K}_W^{-1} \left[ \mathbf{H} + \frac{1}{\Delta t} \left( - \sum_{i=0}^{K-1} \alpha_i \mathbf{W}^{n-i} - \beta \mathbf{W}^k \right) \right] \quad (38)$$

$$\Delta \mathbf{Q}^{k+1} + \mathbf{K}_Q^{-1} \frac{1}{V} \oint_{S_V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \mathbf{K}_Q^{-1} \left[ \mathbf{H} + \frac{1}{\Delta t} \left( - \sum_{i=0}^{K-1} \alpha_i \mathbf{W}^{n-i} - \beta \mathbf{W}^k \right) \right] \quad (39)$$

В вышеприведенных формулах верхним 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  $\tau$ . Во время выполнения внутренних итераций по  $\tau$  все временные слои по  $t$  остаются неизменными. При достижении сходимости внутренних итераций по искусственному времени  $\tau$  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 целое семейство схем, отличающихся аппроксимациями производной по  $t$ .

Для предобуславливающего параметра  $\theta$  можно выбрать, например, следующее значение, основанное на термодинамических свойствах рассматриваемой фазы и реферативной скорости [5]:

$$\theta = \frac{1}{V_{\text{ref}}^2} - \frac{\rho_T}{\rho \cdot h_T}, \quad V_{\text{ref}} = \min \left\{ \max \left[ |\mathbf{v}|, \frac{\nu}{\Delta x}, \frac{\alpha}{\Delta x}, \sqrt{\frac{\Delta P}{\rho}} \right], c \right\} \leq c, \quad c = \sqrt{\frac{\rho h_T}{d}} \quad (40)$$

Здесь  $\nu$  – реферативный (калибровочный) коэффициент вязкости;  $\alpha$  – реферативный (калибровочный) коэффициент теплопроводности;  $c$  – скорость звука;  $\Delta P$  – вариации давления в масштабе размера счетной ячейки (соответствующий член начинает доминировать в регионах с локальной стагнацией течения, но заметным перепадом давления).

Формальный анализ показывает, что акустические собственные числа исходной системы (без предобуславливания) 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. Акустические собственные числа модифицированной системы (с предобуславливанием) 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. Таким образом, предобуславливание регулирует акустические скорости, которые без такой регуляризации становятся неограниченно высокими по мере приближения к несжимаемому пределу, и позволяет использовать стандартные численные схемы (например, TVD или

ENO/WENO) для преобусловленной системы без катастрофического уменьшения допустимого временного шага и внесения аномальной численной диффузии.

## 6. Программная реализация численного кода

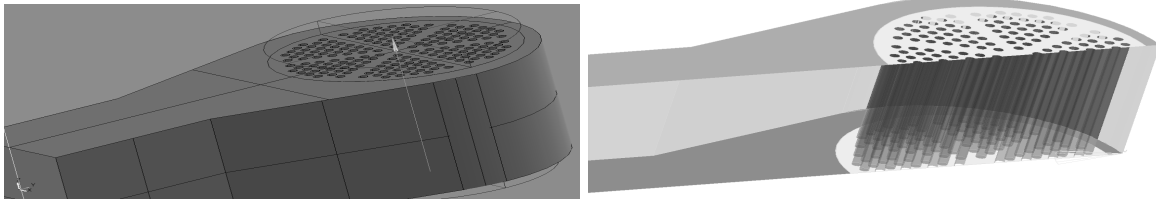


Рис. 1. Геометрическая модель коллектора(слева) и ее разметка (справа) с использованием Salome.

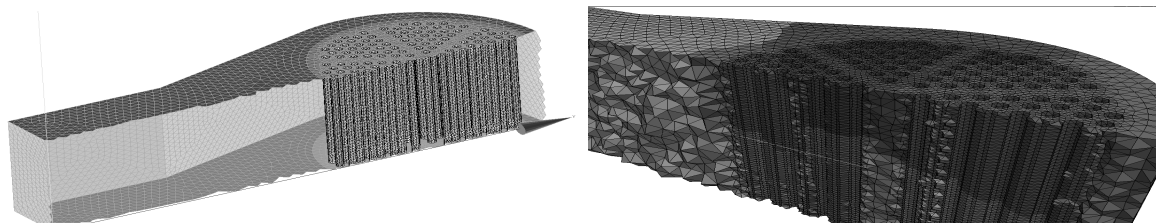


Рис. 2. Построение и разметка расчетной сетки с использованием Salome (слева) и визуализация разбитой для параллельного расчета сетки средствами Paraview (справа).

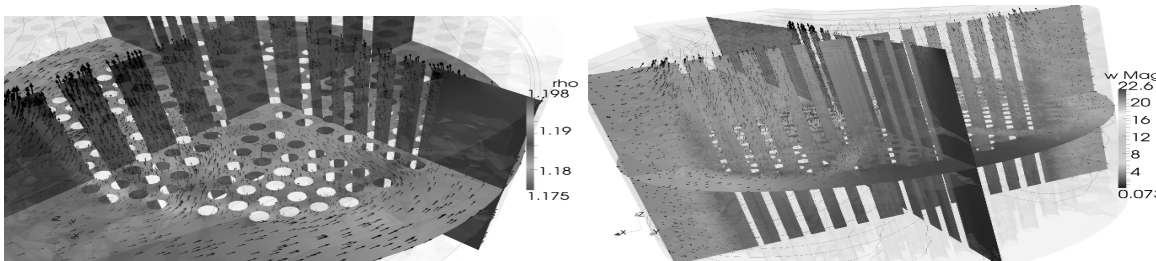


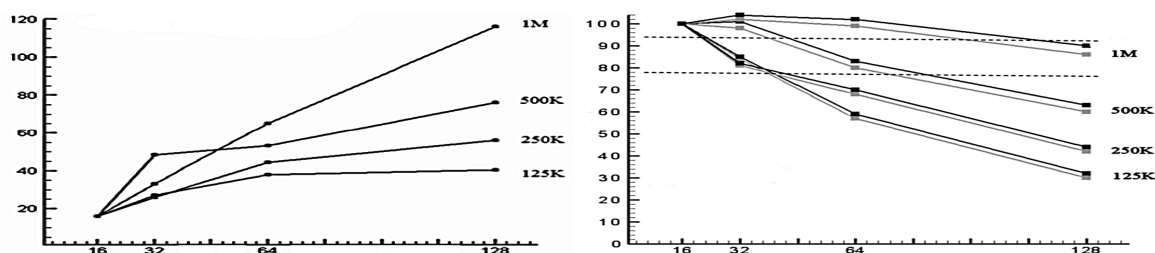
Рис. 3. Примеры визуализации результата параллельного численного расчета течения в коллекторе средствами Paraview: распределения плотности (слева) и скорости (справа). Тонкими сплошными линиями показаны интегралы вектора скорости для разных точек.

Кратко перечислим некоторые технологические аспекты нашего процесса разработки и непосредственно самого ПО. В качестве языка разработки используется **C++** стандарта ISO/IEC 14882:2003. В качестве средства организации параллелизма используется **MPI** стандарта 1.3. В качестве веб-системы организации коллективной работы над проектом и управления проектом используется **Redmine**. До нее нами вполне успешно использовалась альтернативная система Trac. Причиной миграции явилась более удачная, на наш взгляд, поддержка в Redmine мульти-проектных окружений (с отслеживанием иерархий проектов, связей между ними и т.д.). В качестве системы управления версиями исходного кода используется **Git**. 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). В качестве системы конфигурирования и сборки исходного кода используется система **CMake**. Активно используется лицензионно доступный исходный программный код третьих лиц: **Metis** для выполнения разбиения сетки для параллельного расчета, **Aztec** для параллельного решения систем линейных алгебраических уравнений и т.д. При решении задач пре- и постпроцессинга мы рассчитываем в первую очередь на

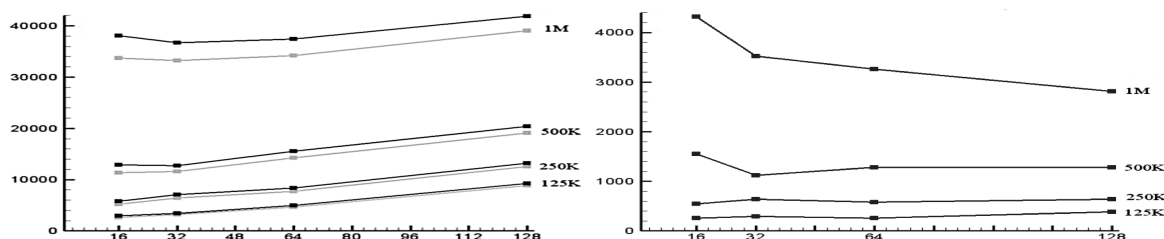
сторонние утилиты (в особенности – на свободное ПО) и открытые форматы обмена данными. Для выполнения постпроцессинга используются утилиты **Paraview** и, в существенно меньшей степени, **Tecplot**. При выполнении препроцессинга активно используется пакет **Salome** – для построения и коррекции геометрических моделей, разметки расчетной области, построения и разметки расчетной сетки и т.д.

Распараллеливание работы явных солверов осуществляется с помощью известного механизма фиктивных 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 ПО, например, Aztec.

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 разработанные нами ранее специализированные инструменты, подробно описанные в [7]. На рис. 3 представлены примеры визуализации результата параллельного численного расчета течения в коллекторе средствами Paraview.



**Рис. 4.** Ускорение (слева) и эффективность (справа) параллельного расчета для различных размеров расчетной сетки. За основу (минимальное измерение) взят расчет на 16 ядрах. По оси абсцисс отмечено количество вычислительных ядер. Серые линии соответствуют вычислительным затратам непосредственно на итерации, черные линии – полным затратам на расчет. Данные носят предварительный характер.



**Рис. 5.** Стоимость вычислений основного расчета (слева) и этапа предрасчетной подготовки данных (справа) для различных размеров расчетной сетки. За основу (минимальное измерение) взят расчет на 16 ядрах. По оси абсцисс отмечено количество вычислительных ядер. Серые линии соответствуют вычислительным затратам непосредственно на итерации, черные линии – полным затратам на расчет. Данные носят предварительный характер.

На рис. 4 и 5 представлены некоторые численные метрики [8] параллельного расчета: ускорение, эффективность, стоимость вычислений. Данные носят существенно 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 (реферативного) 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 статье описан ряд теоретических и практических аспекты разработки ПО для трехмерного численного моделирования многофазных многокомпонентных течений в атомной энергетике, активно ведущейся в настоящее время в «ФГУП ГНЦ РФ – ФЭИ».

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 слабожимаемых фаз в широком диапазоне чисел Маха (вплоть до предельного случая несжимаемого режима течения), для чего используется метод локального предобуславливания уравнений динамики сплошной среды. Описаны технологические аспекты процесса разработки и непосредственно самого ПО, используемые подходы к пре- и постпроцессингу с активным привлечением стороннего ПО (Salome, Paraview, Tecplot) и специализированных конвертеров. Приведены предварительные данные по масштабируемости параллельного кода.

Наши дальнейшие планы включают 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 долгосрочной перспективе, постепенную миграцию в направлении композитного мультифизического численного кода для моделирования тяжелых аварий в атомных реакторах (в качестве примера подобных кодов упомянем зарубежный SIMMER [2]).

## Литература

1. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. В 2 т. Т. 1. М.: Наука, 1987.
2. Bohl W.R., Luck L.B. SIMMER-II: A Computer Program for LMFBR Disrupted Core Analysis (LA-11415-MS). Los Alamos National Laboratory report, 1990.
3. Flatten T., Morin A., Munkejord S. On Solutions to Equilibrium Problems for Systems of Stiffened Gases // SIAM Journal of Applied Mathematics. 2011. Vol. 71(1). P. 41-67.
4. Weiss J., Smith W. Preconditioning applied to variable and constant density flows // AIAA Journal. 1995. Vol. 33(11). P. 2050-2057.
5. 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. Vol. 12(6). P. 637-657.
6. Teixeira R., Alves L., Karagozian A., Kelly R. On the Solution of the Compressible Flow Equations at Small Mach Numbers // Proceedings of the 12th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences (November 10-14, 2008, Belo Horizonte, MG). 2008. P. 101-110.
7. 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 // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 36.
8. Дьяченко С.В., Багдасаров Г.А., Ольховская О.Г. Средства профилирования и анализа многопоточных приложений Oracle (Sun) Studio Performance Analyzer // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 38.