Бикомпактные схемы и их приложение к численному моделированию динамики идеальных и вязких газов

М. Д. Брагин

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН

Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)

XVI Международная конференция «Забабахинские научные чтения»

Снежинск, 29 мая – 2 июня 2023 г.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (проект № 21-11-00198).

Содержание доклада

Содержание доклада

Основные принципы построения бикомпактных схем для уравнений гиперболического типа

Смешанная задача

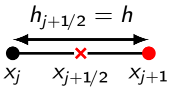
$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{A}(\mathbf{U}) = \partial_{\mathbf{U}} \mathbf{F}(\mathbf{U}) > 0, \quad (x, t) \in (0, X) \times (0, T);$$

$$\mathbf{U}|_{t=0} = \varphi(x), \quad \mathbf{U}|_{x=0} = \psi(t).$$

Аппроксимация по пространству

Полудискретная бикомпактная схема 4-го порядка:

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\mathbf{U}_j + 4\mathbf{U}_{j+1/2} + \mathbf{U}_{j+1}}{6}\right) + \dfrac{\mathbf{F}_{j+1} - \mathbf{F}_j}{h} = \mathbf{0}, \\ \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\mathbf{U}_{j+1} - \mathbf{U}_j}{h}\right) + 4\,\dfrac{\mathbf{F}_j - 2\mathbf{F}_{j+1/2} + \mathbf{F}_{j+1}}{h^2} = \mathbf{0}, \end{cases}$$



$$j = 0, 1, \ldots, N-1; \qquad \mathbf{F}_\alpha = \mathbf{F}(\mathbf{U}_\alpha) \quad \forall \alpha.$$

Дискретные Н/ГУ: $\mathbf{U}_\alpha|_{t=0} = \varphi(x_\alpha), \quad \mathbf{U}_0 = \psi(t).$

Аппроксимация по времени

Диагонально-неявные методы Рунге-Кутты (DIRK).

Обобщения

Если матрица A(U) не является знакоопределенной...

... то применяется глобальное потоковое расщепление Лакса-Фридрихса:

$$\mathbf{F}^{\pm}(\mathbf{U}) = \tfrac{1}{2}\mathbf{F}(\mathbf{U}) \pm C_2\mathbf{U}, \quad C_2 = (\tfrac{1}{2}+\delta)\max_{\alpha,p}|\lambda_p(\mathbf{U}^n_\alpha;\mathbf{A})|, \quad \delta > 0.$$

Схема расщепления: $\mathbf{U}^n \xrightarrow{\mathbf{F}^+} \mathbf{U}^* \xrightarrow{\mathbf{F}^-} \mathbf{U}^{n+1}$ (порядок по t сохраняется!)

Альтернативная аппроксимация по времени

Неявно-явные методы Рунге-Кутты (IMEX RK):

$$\mathbf{F}^{\pm}(\mathbf{U}_i^{\text{new}}) = \tfrac{1}{2}\mathbf{F}(\mathbf{U}_i^{\text{new}}) \pm C_2\mathbf{U}_i^{\text{new}} \longrightarrow \tfrac{1}{2}\mathbf{F}(\mathbf{U}_i^{\text{old}}) \pm C_2\mathbf{U}_i^{\text{new}}.$$

Многомерный случай

- Структурированные сетки.
- Нерасщепленные схемы: система и ее дифференциальные следствия интегрируются по многомерной ячейке, кратные интегралы сводятся к повторным. Вычислительно трудоемкие, но сохраняют точность по времени.
- Локально-одномерные (LOD) схемы. Самые экономичные, однако имеют не более чем 2-й порядок по времени (теоретически).

Метод консервативной монотонизации

Две схемы

Схема A: монотонная 1-го порядка.
Схема B: бикомпактная высокого порядка (немонотонная).

Алгоритм

1. Вычислить решения $\mathbf{U}^A, \mathbf{U}^B$ на слое t_{n+1} по схемам A, B соответственно.
2. Выбрать параметр $C_1 > 0$ и ограничить наклоны в каждой ячейке:

$$\widetilde{u}_{k+s} = \overline{u}_k^B + \beta_k(u_{k+s}^B - \overline{u}_k^B), \quad k = j + \tfrac{1}{2}, \quad s = 0, \pm\tfrac{1}{2},$$

$$\beta_k = \frac{1}{1 + w_k^2}, \quad w_k = \frac{C_1 \max_{s=0,\, \pm 1/2} |u_{k+s}^A - u_{k+s}^B|}{\max_{s=0,\, \pm 1/2} |u_{k+s}^A|};$$

$u = U_p$, $\mathbf{U} = (U_1, \ldots, U_m)$; $\overline{\mathbf{U}}_k^B$ — интегральное среднее по ячейке.

3. Устранить многозначность решения $\widetilde{\mathbf{U}}$ на границах между ячейками:

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \frac{h_{j-1/2}\widetilde{\mathbf{U}}_j^- + h_{j+1/2}\widetilde{\mathbf{U}}_j^+}{h_{j-1/2} + h_{j+1/2}}, \quad j = 1, 2, \ldots, N-1.$$

Определить результирующее решение в центрах ячеек:

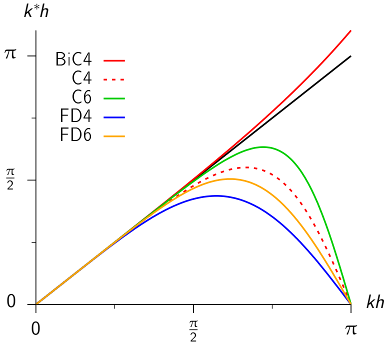
$$\mathbf{U}_{j+1/2}^{n+1} = \widetilde{\mathbf{U}}_{j+1/2}, \quad j = 0, 1, \ldots, N-1.$$

Свойства

1. Консервативность.
2. Устойчивость при любом τ/h.
3. Неявный метод Эйлера по времени $\Rightarrow$ монотонность при CFL $\geqslant 0.25$.

Достоинства

1. Хорошая устойчивость при экономичной реализации бегущим счетом.
2. Равное число ГУ в схеме и в исходной задаче для УЧП.
3. Хорошее спектральное разрешение:



$$\partial_t u + c\,\partial_x u = 0;$$

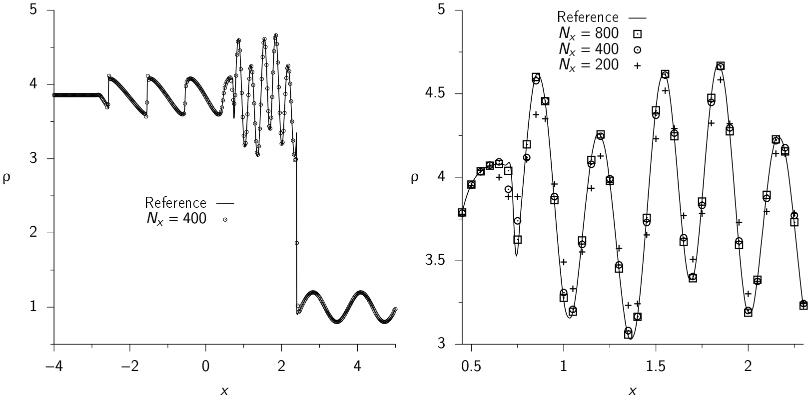
$$u(x,t) = A\exp[i(kx - ct)];$$
(точное решение)

$$u_j(t) = A\exp[i(kx_j - c^* t)];$$
(численное решение)

$$k^* = k\frac{c^*}{c}.$$

Содержание доклада

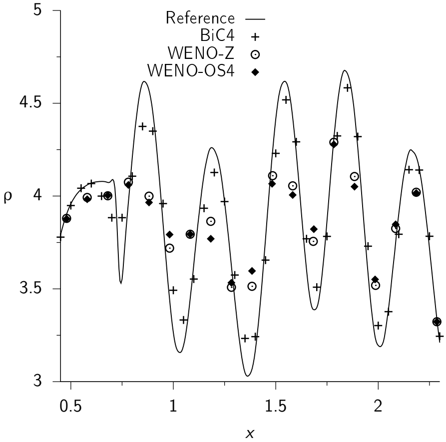
Схема A: BiC4 + неявный метод Эйлера.
Схема B: BiC4 + DIRK 3-го порядка.
$\mathrm{CFL} = 0.5$, $\delta = 0.2$, $C_1 = 5$.



Постановка задачи может быть найдена в работе:

Shu C.-W., Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II // J. Comput. Phys. 1989. V. 83. P. 32–78.

Сравнение со схемами WENO-Z, WENO-OS4



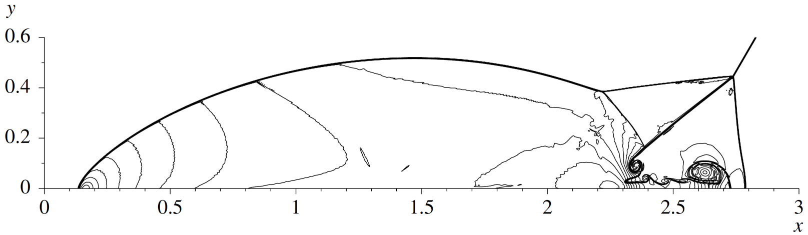
($N_x = 200.$)

Результаты для схем WENO-Z, WENO-OS4 взяты из работы:

Li Q., Guo Q., Sun D., Liu P., Zhang H. A fourth-order symmetric WENO scheme with improved performance by new linear and nonlinear optimizations // J. Sci. Comput. 2017. V. 71. P. 109–143.

Схема A: «явный уголок» + LOD.
Схема B: BiC4 + IMEX RK 3-го порядка + LOD.
$h_x = h_y = 1/480$, CFL $= 0.9$, $\delta = 0.5$, $C_1 = 5$.

Изолинии плотности газа:



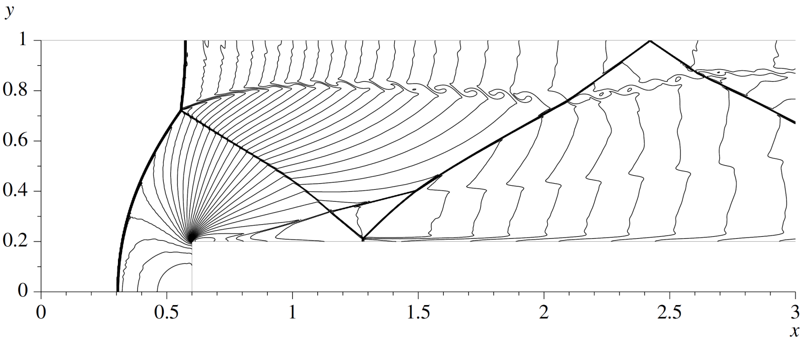
Постановка задачи может быть найдена в работе:

Woodward P.R., Colella P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks // J. Comput. Phys. 1984. V. 54, № 1. P. 115–173.

Задача о течении в плоском канале с уступом

Бикомпактная схема та же, что и в задаче о двойном отражении.
$h_x = h_y = 1/320$, CFL $= 0.9$, $\delta = 0.5$, $C_1 = 5$.

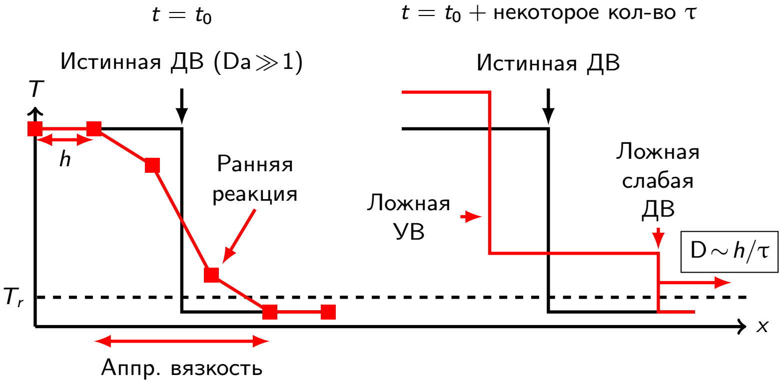
Изолинии плотности газа:



Постановка задачи может быть найдена в работе:

Woodward P.R., Colella P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks // J. Comput. Phys. 1984. V. 54, № 1. P. 115–173.

Проблема

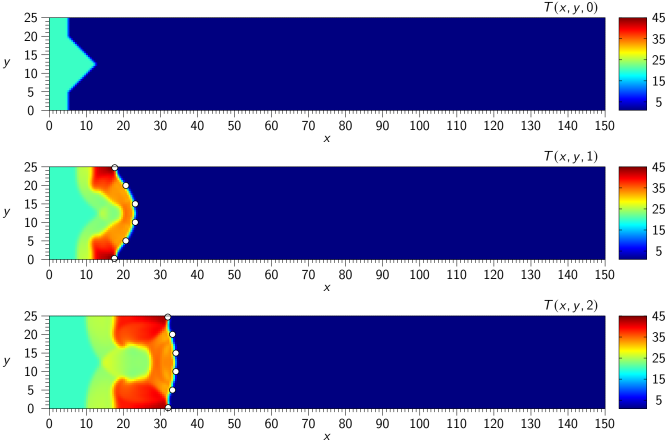


См. также:

Colella P., Majda A., Roytburd V. Theoretical and numerical structure for reacting shock waves // SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1986. V. 7, №4. P. 1059–1080.

Тестовая задача, сравнение с WENO5-SR

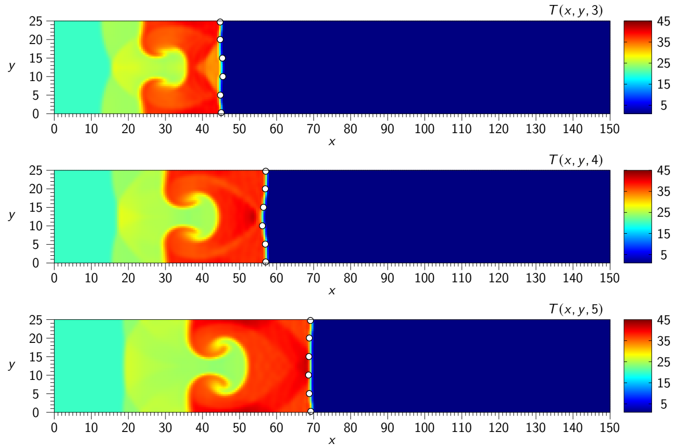
Схемы A/B: BiC4 + неявный метод Эйлера/DIRK 3-го порядка + LOD.
$h_x = h_y = 1/2$, $\underline{\mathrm{CFL} = 2}$, $\delta = 0.2$, $C_1 = 10$.



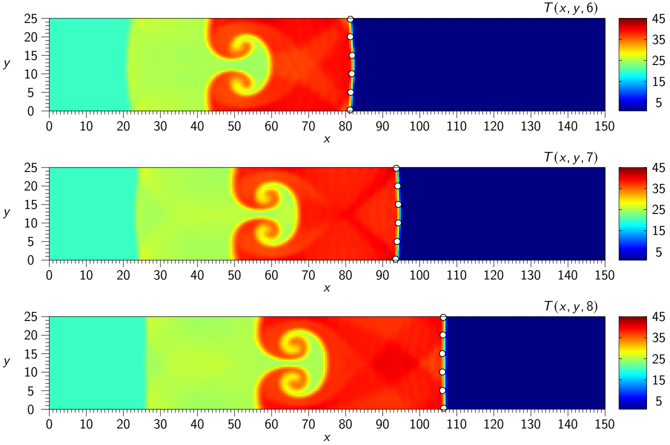
(Реакции: $H_2 + O_2 \to 2OH$, $2OH + H_2 \to 2H_2O$, катализатор N_2. Число Da $\sim 10^5$.)

Постановка задачи и результаты для схемы WENO5-SR могут быть найдены в работе:
Wang W., Shu C.-W., Yee H.C., Kotov D.V., Sjögreen B. High order finite difference methods with subcell resolution for stiff multispecies discontinuity capturing // Commun. Comput. Phys. 2015. V. 17, №2. P. 317–336.

Тестовая задача, сравнение с WENO5-SR



Тестовая задача, сравнение с WENO5-SR



(Шаг по времени в схеме WENO5-SR в 40 раз меньше.)

Содержание доклада

Основные принципы построения бикомпактных схем для уравнений параболического типа

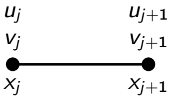
Смешанная задача

$$\partial_t u = \nu\,\partial_x^2 u, \quad \nu = \mathrm{const} > 0, \quad (x,t) \in (0,X)\times(0,T);$$
$$u|_{t=0} = \varphi(x), \quad u|_{x=0} = \psi_1(t), \quad u|_{x=X} = \psi_2(t).$$

Аппроксимация по пространству

Дополнительная искомая функция: $v = \partial_x u$.
Полудискретная бикомпактная схема 4-го порядка:

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{u_j + u_{j+1}}{2} - \dfrac{h}{12}(v_{j+1} - v_j)\right) = \nu\,\dfrac{v_{j+1} - v_j}{h}, \\ \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{u_{j+1} - u_j}{h}\right) = \dfrac{6\nu}{h^2}\left(v_j - 2\,\dfrac{u_{j+1} - u_j}{h} + v_{j+1}\right), \end{cases}$$
$$j = 0, 1, \ldots, N-1.$$



Дискретные Н/ГУ: $u_j|_{t=0} = \varphi(x_j)$, $v_j|_{t=0} = \varphi'(x_j)$, $u_0 = \psi_1(t)$, $u_N = \psi_2(t)$.

Аппроксимация по времени

Методы DIRK. Схемы устойчивы при любом τ/h, можно брать $\tau = O(h)$.

Обобщения на многомерный и квазилинейный случаи

Многомерный случай

1. Используются структурированные сетки.
2. Вводятся дополнительные искомые функции — производные (3 шт. в 2D, 7 шт. в 3D). Уравнение и его дифференциальные следствия интегрируются по многомерной ячейке, кратные интегралы сводятся к повторным.
3. Сеточные уравнения на каждом временном шаге решаются методом итерируемой приближенной факторизации. Реализация одной итерации сводится к последовательности независимых 1D скалярных двухточечных прогонок. Число итераций до сходимости: 3–6.

Квазилинейный случай

1. Вводится вектор потока $\mathbf{q} = -\nu(u)\nabla u$.
2. Уравнение аппроксимируется по пространству как уравнение 1-го порядка относительно u и $\mathbf{q}$. Значения $\mathbf{q}$ в целых и полуцелых узлах, значения u в полуцелых узлах выражаются через значения u и ее производных в целых узлах при помощи би- либо трикубической интерполяции.
3. Для аппроксимации по времени используются методы IMEX RK:

$$\mathbf{q} = \underbrace{-\nu_0\nabla u}_{\text{неявно}} \underbrace{-\,(\nu(u) - \nu_0)\nabla u}_{\text{явно}}, \quad \nu_0 = \sigma \max_{\mathbf{x}\in\Omega} \nu(u^n(\mathbf{x})) = \text{const}, \quad \sigma \geqslant 0.5.$$

Свойства устойчивости не ухудшаются!

Бикомпактная схема для уравнений Навье-Стокса

Уравнения Навье-Стокса для сжимаемой жидкости

$$\partial_t \mathbf{U} + \sum_{i=1}^{3} \partial_{x_i} \mathbf{F}_i(\mathbf{U}, \nabla\mathbf{U}) = \mathbf{0}.$$

Расщепление по физическим процессам

$$\partial_t \mathbf{U} + \sum_{i=1}^{3} \partial_{x_i} \mathbf{G}_i(\mathbf{U}) = \mathbf{0}; \quad \partial_t \mathbf{U} + \sum_{i=1}^{3} \partial_{x_i} \mathbf{H}_i(\mathbf{U}, \nabla\mathbf{U}) = \mathbf{0}; \quad \mathbf{G}_i + \mathbf{H}_i = \mathbf{F}_i;$$

$\mathbf{G}_i$: конвекция и давление; $\mathbf{H}_i$: вязкое трение и теплопроводность.

Схема для подсистемы с $\mathbf{G}_i$ с оператором послойного перехода $S^E(\tau)$

Схема A: «явный уголок» + LOD.
Схема B: BiC4 + IMEX RK 3-го порядка + LOD.

Схема для подсистемы с $\mathbf{H}_i$ с оператором послойного перехода $S^D(\tau)$

BiC4 + IMEX RK 2-го порядка:

$$\partial_t \mathbf{U} + \underbrace{\sum_{i=1}^{3} \partial_{x_i} [\mathbf{H}_i(\mathbf{U}, \nabla\mathbf{U}) + \mathbf{D}_0\, \partial_{x_i} \mathbf{U}]}_{\text{явно}} = \underbrace{\mathbf{D}_0 \sum_{i=1}^{3} \partial_{x_i}^2 \mathbf{U}}_{\text{неявно}},$$

$$\mathbf{D}_0 = \mathrm{diag}(0, \nu_0, \nu_0, \nu_0, \lambda_0) = \mathrm{const}\,.$$

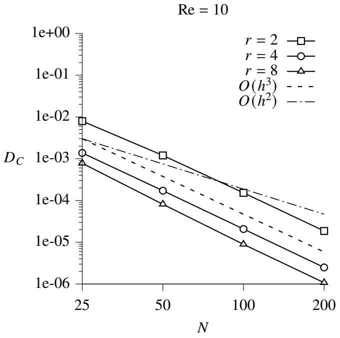
Результирующая схема

$$\mathbf{U}^{n+1} = S^D(0.5\tau)\, S^E(\tau)\, S^D(0.5\tau)\, \mathbf{U}^n.$$

Содержание доклада

$h_x = h_y = 10/N$, $\tau = 10\sqrt{\gamma}/(rN)$ $(N = 25, 50, \ldots, 400)$, $\delta = 0.5$, $C_1 = 0$.

Норма C разности решений на сетках $N \times N$ и $2N \times 2N$:



Постановка задачи может быть найдена в работе:

Shu C.-W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // Advanced numerical approximation of nonlinear hyperbolic equations / ed. by A. Quarteroni, V. 1697 of Lecture Notes in Mathematics. Springer, 1998. P. 325–432.

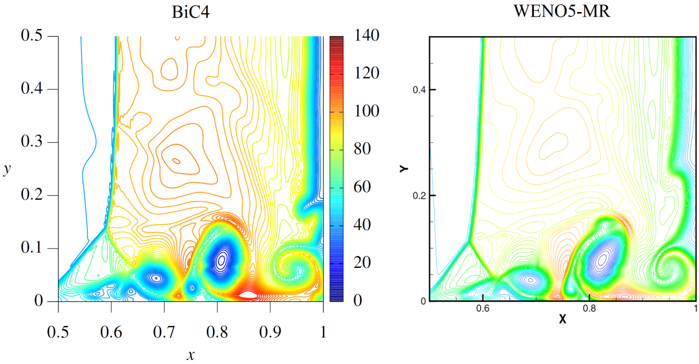
или

Spiegel S.C., Huynh H.T., DeBonis J.R. A survey of the isentropic Euler vortex problem using high-order methods // AIAA Paper 2015-2444. 2015.

Задача о вязком течении в ударной трубе

$h_x = h_y = 1/400$, $\text{CFL} = 0.6$, $\delta = 1$, $C_1 = 5$.

Изолинии плотности газа:



($\text{Re} = 200$; $\mu = \text{Re}^{-1} = \text{const.}$)

Постановка задачи может быть найдена в работе:

Daru V., Tenaud C. Evaluation of TVD high resolution schemes for unsteady viscous shocked flows // Comput. Fluids. 2001. V. 30. P. 89–113.

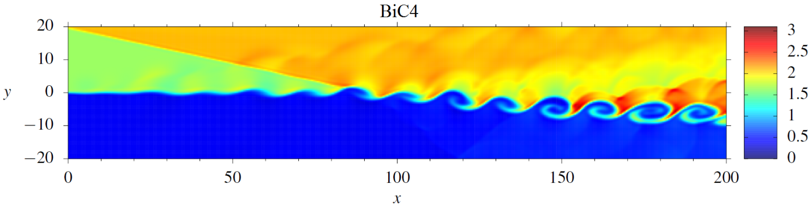
Результаты для схемы WENO5-MR взяты из работы:

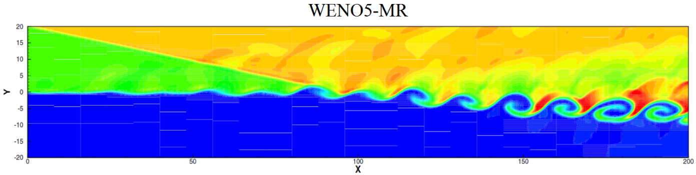
Wang Z., Zhu J., Tian L., Zhao N. A low dissipation finite difference nested multi-resolution WENO scheme for Euler/Navier-Stokes equations // J. Comput. Phys. 2021. V. 429. P. 110006.

Задача о взаимодействии слоя смешения и косой ударной волны

$h_x = h_y = 1/100$, CFL $= 0.8$, $\delta = 1$, $C_1 = 0$.

Поле плотности газа:





(Re $= 500$.)

Постановка задачи может быть найдена в работе:

Yee H.C., Sandham N.D., Djomehri M.J. Low-dissipative high-order shock-capturing methods using characteristic-based filters // J. Comput. Phys. 1999. V. 150. P. 199–238.

Содержание доклада

Заключение

1

Бикомпактные схемы не уступают по точности другим современным численным схемам высокого порядка, а в некоторых задачах превосходят их.

2

Вместе с тем,

- По сравнению с конечно-объемными/разностными WENO схемами бикомпактные схемы имеют более компактный шаблон (минимальный).
- По сравнению со схемами разрывного метода Галеркина бикомпактные схемы обходятся меньшим числом степеней свободы.
- Бикомпактные схемы имеют хорошие свойства устойчивости, что позволяет вести вычисления с бóльшим шагом по времени.

3

Бикомпактные схемы перспективны для практического применения при расчетах течений газов и жидкостей (в том числе, турбулентных), при моделировании явлений детонации и процессов теплопередачи.

Список литературы

1. *Михайловская М. Н., Рогов Б. В.* Монотонные компактные схемы бегущего счета для систем уравнений гиперболического типа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2012. Т. 52, № 4. С. 672–695.
2. *Рогов Б. В.* Высокоточная монотонная компактная схема бегущего счета для многомерных уравнений гиперболического типа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2013. Т. 53, № 2. С. 264–274.
3. *Брагин М. Д., Рогов Б. В.* Гибридные бикомпактные схемы с минимальной диссипацией для уравнений гиперболического типа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2016. Т. 56, № 6. С. 958–972.
4. *Брагин М. Д., Рогов Б. В.* О точном пространственном расщеплении многомерного скалярного квазилинейного гиперболического закона сохранения // Докл. АН. 2016. Т. 469, № 2. С. 143–147.
5. *Брагин М. Д., Рогов Б. В.* Метод итерируемой приближенной факторизации операторов высокоточной бикомпактной схемы для систем многомерных неоднородных уравнений гиперболического типа // Докл. АН. 2017. Т. 473, № 3. С. 263–267.
6. *Рогов Б. В., Брагин М. Д.* О свойствах спектрального разрешения симметричных бикомпактных схем четвертого порядка аппроксимации // Докл. АН. 2017. Т. 475, № 2. С. 140–144.
7. *Брагин М. Д., Рогов Б. В.* Бикомпактные схемы для многомерных уравнений гиперболического типа на декартовых сетках с адаптацией к решению // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2019. № 11. 27 с. http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-11
8. *Bragin M. D., Rogov B. V.* Conservative limiting method for high-order bicompact schemes as applied to systems of hyperbolic equations // Applied Numerical Mathematics. 2020. V. 151. P. 229–245.

9. *Брагин М. Д., Рогов Б. В.* Высокоточные бикомпактные схемы для численного моделирования течений многокомпонентных газов с несколькими химическими реакциями // Матем. моделирование. 2020. Т. 32, № 6. С. 21–36.
10. *Брагин М. Д., Рогов Б. В.* Бикомпактные схемы для задач газовой динамики: обобщение на сложные расчетные области методом свободной границы // Компьютерные исследования и моделирование. 2020. Т. 12, № 3. С. 487–504.
11. *Брагин М. Д.* Энтропийная устойчивость бикомпактных схем в задачах газовой динамики // Матем. моделирование. 2020. Т. 32, № 11. С. 114–128.
12. *Брагин М. Д., Рогов Б. В.* Комбинированная многомерная бикомпактная схема, имеющая повышенную точность в областях влияния нестационарных ударных волн // Докл. АН. 2020. Т. 494. С. 9–13.
13. *Брагин М. Д., Рогов Б. В.* Бикомпактные схемы для многомерного уравнения конвекции-диффузии // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2021. Т. 61, № 4. С. 625–643.
14. *Брагин М. Д., Рогов Б. В.* О точности бикомпактных схем в задаче о распаде вихря Тейлора-Грина // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2021. Т. 61, № 11. С. 1759–1778.
15. *Bragin M. D.* High-order bicompact schemes for the quasilinear multidimensional diffusion equation // Applied Numerical Mathematics. 2022. V. 174 P. 112–126.
16. *Брагин М. Д.* Влияние монотонизации на спектральное разрешение бикомпактных схем в задаче о невязком вихре Тейлора-Грина // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2022. Т. 62, № 4. С. 625–641.
17. *Брагин М. Д.* Неявно-явные бикомпактные схемы для гиперболических систем законов сохранения // Матем. моделирование. 2022. Т. 34, № 6. С. 3–21.
18. *Брагин М. Д.* Бикомпактные схемы для уравнений Навье-Стокса в случае сжимаемой жидкости // Докл. АН. 2023. Т. 509. С. 17–22.

Спасибо за внимание!