УДК 519.651

О схемах высокого разрешения для решения задач переноса на неструктурированных многогранных сетках

Ф.В. Григорьев

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Московский физико-технический институт (государственный университет)

При численном решении задачи переноса с помощью метода конечных объемов (МКО) возникает потребность в определении концентраций на гранях ячеек. Для достижения устойчивости схемы необходимо использовать противопотоковую аппроксимацию. Но если просто брать концентрацию с элемента, лежащего выше по потоку, то получается метод первого порядка точности по пространству с высокой численной диффузией. Для снижения численной диффузии и повышения порядка точности используются методы кусочно-линейного восполнения концентрации на ячейках сетки. В настоящей работе рассматриваются две схемы высокого разрешения с кусочно-линейным восполнением, реализованные в расчетном коде GeRa.

Математическая постановка первого метода выглядит следующим образом. Пусть $\bar{C}_i(x) = C_i + g\cdot(x - x_i)$ – линейная аппроксимация распределение концентрации в ячейке E_i (x_i – центр масс ячейки E_i). Требуется найти вектор градиента g. Ставятся следующие условия:

– Условие наилучшего приближения:

$$\sum_{\mathbf{x}_k \in \Sigma_{E_i}} \left\| \bar{C}_i(x_k) - C_k \right\|^2 \to \min \tag{1}$$

здесь Σ_{E_i} – множество центров масс ячеек, граничащих с E_i, а так же центров граней, лежащих на границе первого рода.

– Условие принципа максимума:

$$\begin{cases} C_i + g(x_{e_{ij}} - x_i) \geq \min(C_i, C_j), \\ C_i + g(x_{e_{ij}} - x_i) \leq \max(C_i, C_j) \end{cases}, \forall j : x_j \in \Sigma_{E_i} \tag{2}$$

Здесь $e_{ij} \in \partial E_i \bigcap \partial E_j$, $x_{e_{ij}}$ – центр масс грани e_{ij}. Концентрации на гранях должны лежать в пределах значений концентраций в центрах прилегающих ячеек.

Поиск g с учетом одновременно (1) и (2) есть задача квадратичного программирования с ограничениями в виде неравенств. Для ее решения используется метод активного множества. Он подробно описан в [1] и заключается в следующем. Последовательно ищется набор ограничений-неравенств, активных (выполняющихся в виде равенства) на оптимальном решении. На каждом шаге метода решается оптимизационная задача с ограничениями-равенствами, составляющими активное множество ограничений. Проверяется оптимальность данного набора ограничений. Если он не является оптимальным, то либо набор дополняется еще одним ограничением, либо некоторое ограничение отбрасывается.

В [2] описан второй метод решения (назовем его методом Барта по имени автора). Он заключается в том, что сначала ищется g_1 - решение задачи (1) без ограничений. Затем находится максимальное значение $\alpha \in [0;1]$ такое, что $g = \alpha g_1$ удовлетворяет (2).

В ИБРАЭ РАН разрабатывается код GeRa для моделирования миграции радионуклидов. В рамках этого кода были реализованы два вышеуказанных метода. В ходе тестовых расчетов выявлено, что первый метод требует дополнительного контроля машинной точности и более сложен вычислительно. Второй метод проще, но обладает более высокой численной диффузией.

Литература

1. *Nocedal J., Wright S.* Numerical Optimization. – USA: Springer – 2006. – 683 p.
2. *Barth, T., Ohlberger, M.*: Finite Volume Methods: Foundation and Analysis. In: Stein, E., de Borst, R., Hughes, T.J.R. (eds.) Encyclopedia of Computational Mechanics, vol. 1, Chap. 15. Wiley, New York – 2004.