



Код MCFL_KIAM расчета нестационарных многокомпонентных течений на основе вычислительного комплекса NOISEtte

Борисов В.Е., Жуков В.Т., Краснов М.М., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б.

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН

Математическая модель

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\tau_{ij}]$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j E + u_j p^*)}{\partial x_j} = -\frac{\partial q_j^T}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_i \tau_{ij}] - \frac{\partial J_j}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j^T}{\partial x_j}$$

$$\frac{\partial(\rho Y_m)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_m)}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_{j,m}}{\partial x_j} + \omega_m$$

$$E = e + 0.5 \cdot u_k u_k, \quad \mathbf{q}^T = -\lambda \nabla T, \quad \mathbf{J} = \sum_{m=1}^{N_{sp}} h_m \mathbf{J}_m, \quad \mathbf{J}_m = -\rho D_m \nabla Y_m$$

Математическая модель (термодинамика)

$$p = \rho T R_{mix}, \quad R_{mix} = R \sum_m \frac{Y_m}{W_m}$$

Концентрации $Y_m = \rho_m / \rho$

$$e = \sum_m e_m Y_m, \quad p = \sum_m p_m, \quad h = \sum_m h_m Y_m,$$

$$C_{P,mix} = \sum_m C_{P,m} Y_m, \quad C_{V,mix} = \sum_m C_{V,m} Y_m.$$

Математическая модель (кинетический механизм)

константы скорости реакции: закон Аррениуса

$$k_{fi}, k_{bi} = A T^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

Стехиометрическая
формула

$$\sum_{m=1}^{N_{sp}} \nu'_{mj} \langle C_m \rangle \dot{\tau} - \sum_{m=1}^{N_{sp}} \nu''_{mj} \langle C_m \rangle,$$

закон сохранения
массы

скорость реакции
компонента m в реакции j

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu'_{kj} M_k = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu''_{kj} M_k$$

$$\sum_{m=1}^{N_{sp}} \omega_m = 0$$

$$\omega_{mj} = \left(\frac{dC_m}{dt}\right)_j = (\nu''_{mj} - \nu'_{mj}) \left(k_{fj} \prod_{t=1}^{N_{sp}} [C_t]^{\nu'_{tj}} - k_{bj} \prod_{t=1}^{N_{sp}} [C_t]^{\nu''_{tj}} \right),$$

MCFL_KIAM схема

1. расщепление на гиперболическую и параболическую части

$$\frac{\bar{u} - u^n}{\tau_{conv}} + F^{conv} = 0 \quad \text{гиперболический шаг}$$

$$\frac{\bar{\bar{u}} - \bar{u}}{\tau_{conv}} + F^\mu = 0 \quad \text{параболический (вязкий) шаг I}$$

$$\frac{u^{n+1} - \bar{\bar{u}}}{\tau_{conv}} + F^\lambda = 0 \quad \text{параболический (тепловой) шаг II}$$

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau_{conv}} + F^{conv} + F^\mu + F^\lambda = 0 \quad \text{результующая схема}$$

2. схема LI-M для интегрирования по времени

Операторное расщепление = по физ. процессам

$$u_t = u_x + u_{xx} \Rightarrow$$

Разностная аппрок. по пространству

$$u_t = C_h u + D_h u .$$

*Шаг $t \rightarrow t + \tau$ расщеплен на два этапа
(гиперболический и параболический)*

$$u_t = C_h u \quad \text{и} \quad u_t = D_h u$$

Параболическое уравнение: схема LI-M

$$u_t + L u = f \quad \text{in } G = [t_0; T] \times \Omega$$

$$-(\kappa \nabla u) \cdot n = \alpha u + \gamma \quad \text{on } \Gamma$$

$$L u = -\nabla \cdot (\kappa \nabla u) + a_0 \cdot u + f$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + L_h \cdot u = f.$$

L_h - самопряж. неотриц.-опр. опер.

Метод LI-M

$$\|L_h\| \leq \lambda_{max}, \quad p = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{\tau \lambda_{max} + 1} \right\rceil$$

Полиномы Чебышева порядка p :

$$T_p(x) = \cos(p \arccos x), \quad x \in [-1, 1] \quad \text{нули } \beta_i = \cos \frac{2i-1}{2p} \pi, \quad i = 1 \div p$$

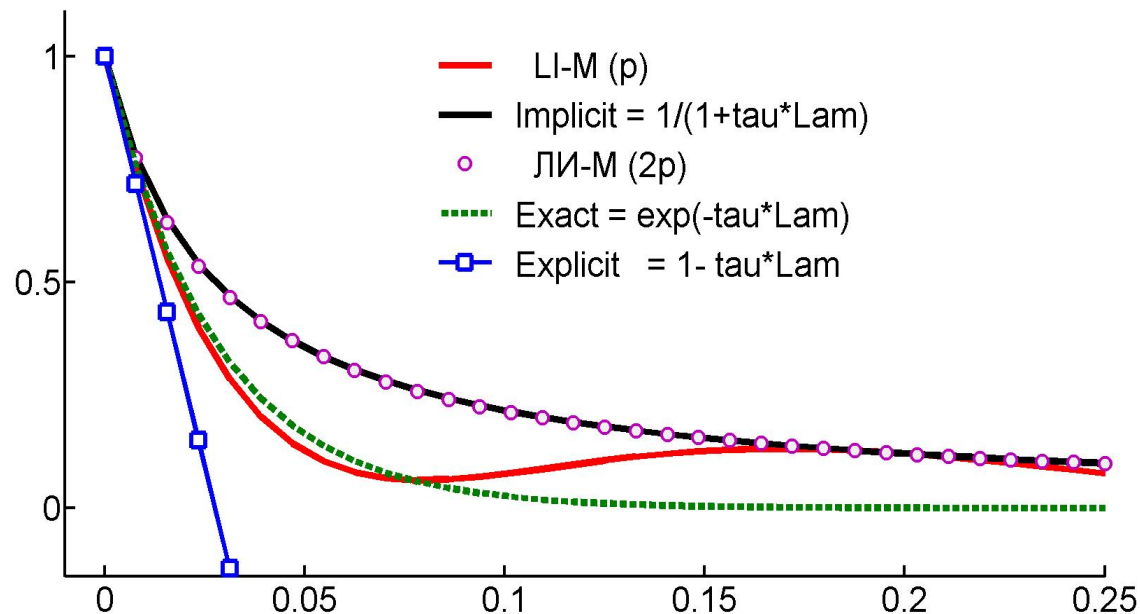
итерационные параметры ($\nu = 2p - 1$)

$$\{b_1, \dots, b_q\} \equiv \{a_p, \dots, a_2, a_p, \dots, a_2, a_1\}$$

$$a_m = \frac{\lambda_{max}}{1 + z_1} (z_1 - \beta_m), \quad \beta_1 = z_1 = \cos(0.5 \pi / p) \Rightarrow a_1 = 0$$

$$y^0 = u_j, \quad y^m = \frac{1}{1 + \tau b_m} [u_j + \tau b_m \cdot y^{m-1} - \tau (L_h \cdot y^{m-1} - f_h)], \quad u_{j+1} = y^\nu$$

Свойства схемы LI-M



Точное решение
 $\exp(-\tau \cdot \lambda)$

$$\lambda \in [0; h^2 \cdot \lambda_{max}]$$

- Консервативность
- Отсутствие ограничений на шаг по времени
- Практическая монотонность

Расщепление на примере уравнения импульса

$$t_n \rightarrow t_{n+1} = t_n + \tau_{conv}$$

Результат решения гиперболической системы $H^{conv} = (\bar{\rho} \bar{u}_1, \bar{\rho} \bar{u}_2, \bar{\rho} \bar{u}_3)^T$

Решаем уравнение $\frac{\bar{u} - \bar{u}}{\tau_{conv}} + F^\mu = 0$ схемой LI-M

Предиктор $\nu = 2p - 2$ LI-M итераций

$$\bar{U}^\nu = (\bar{\rho}, \bar{\rho} \bar{u}_1, \bar{\rho} \bar{u}_2, \bar{\rho} \bar{u}_3, \bar{E})^T, \bar{E}^\nu = \bar{\rho} (\bar{e} + 0.5 \bar{u}^2)$$

Корректор

$$\frac{H^{n+1} - H^{conv}}{\tau_{conv}} + F^\mu(\bar{U}^\nu) = 0$$

Результат

$$H^{n+1} = (\bar{\rho} \bar{u}_1, \bar{\rho} \bar{u}_2, \bar{\rho} \bar{u}_3)^T, \bar{E} = \bar{\rho} (\bar{e} + 0.5 \bar{u}^2)$$

Гиперболическая часть (расширенная система уравнений Эйлера)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I}) = 0$$

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + p) \mathbf{u}) = 0$$

$$\frac{\partial (\rho Y_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_m) = 0, \quad m = 1, \dots, N_s$$

Гиперболическая часть - аппроксимация

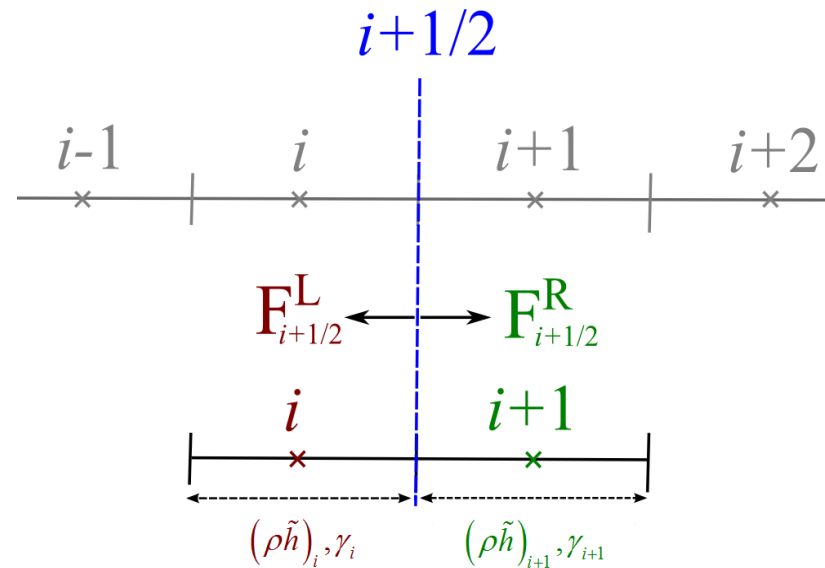
$$\frac{\mathbf{U}_i^{k+1} - \mathbf{U}_i^k}{\Delta t_k} + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1/2}^k) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i-1/2}^k)}{\Delta x_i} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho Y_1, \dots, \rho Y_{N_s})^T$$

$$\gamma \equiv \frac{C_{p,mix}}{C_{v,mix}} = \frac{c^2}{R_{mix} T}$$

- явная схема годуновского типа
(точный распад разрыва)
- осцилляции давления на контактных границах между газами с существенно различающимися параметрами
- «double flux method» (метод двойного потока)

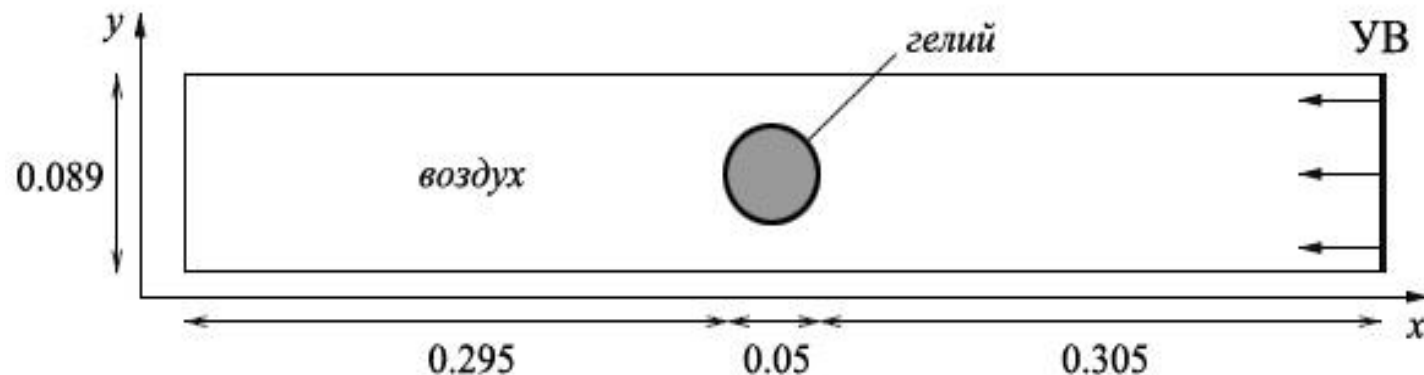
Гиперболическая часть (метод двойного потока)



- Поток для уравнения энергии по схеме предиктор-корректор
- На этапе предиктор определяем давление
- Расчитываем температуру из уравнения состояния
- Вычисляем полную энергию
- Компонентный состав смеси находим из задачи о распаде
- В уравнении энергии корректируем поток

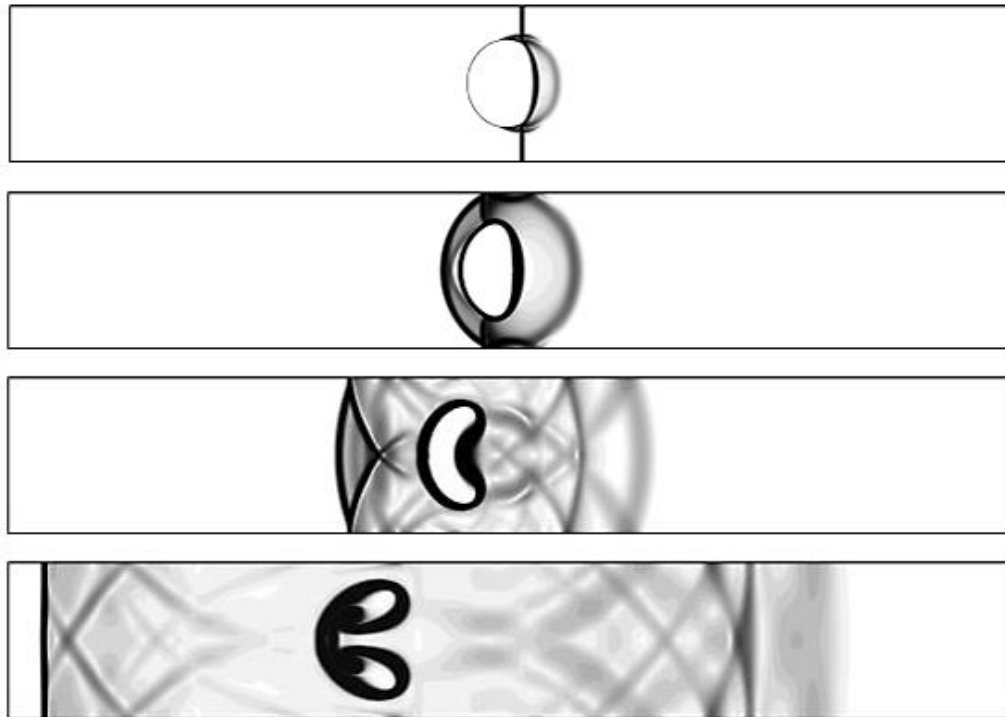
Abgrall R. How to prevent oscillations in multicomponent flow calculations: A quasi conservative approach // J. Comput. Phys. 1996. V. 125. P. 150–160.

Взаимодействие ударной волны в воздухе с пузырем гелия



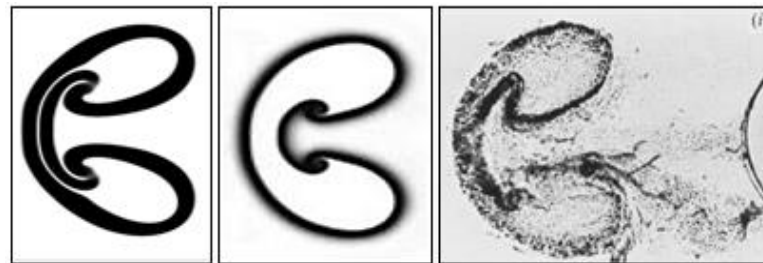
$$(\rho, u, v, p, \gamma)|_{t=0} = \begin{cases} 1.0, & 0.0, 0.0, 10^5, 1.4 & \text{для воздуха,} \\ 0.182, & 0.0, 0.0, 10^5, 1.6667 & \text{для гелия.} \end{cases}$$

Взаимодействие ударной волны в воздухе с пузырем гелия

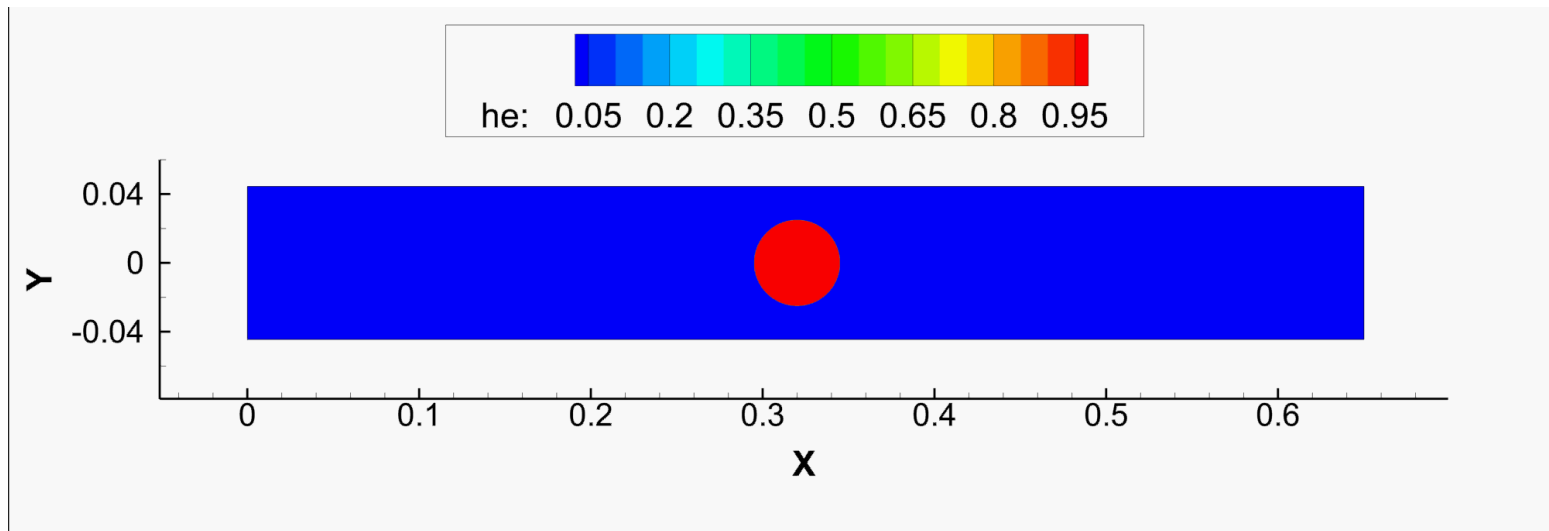
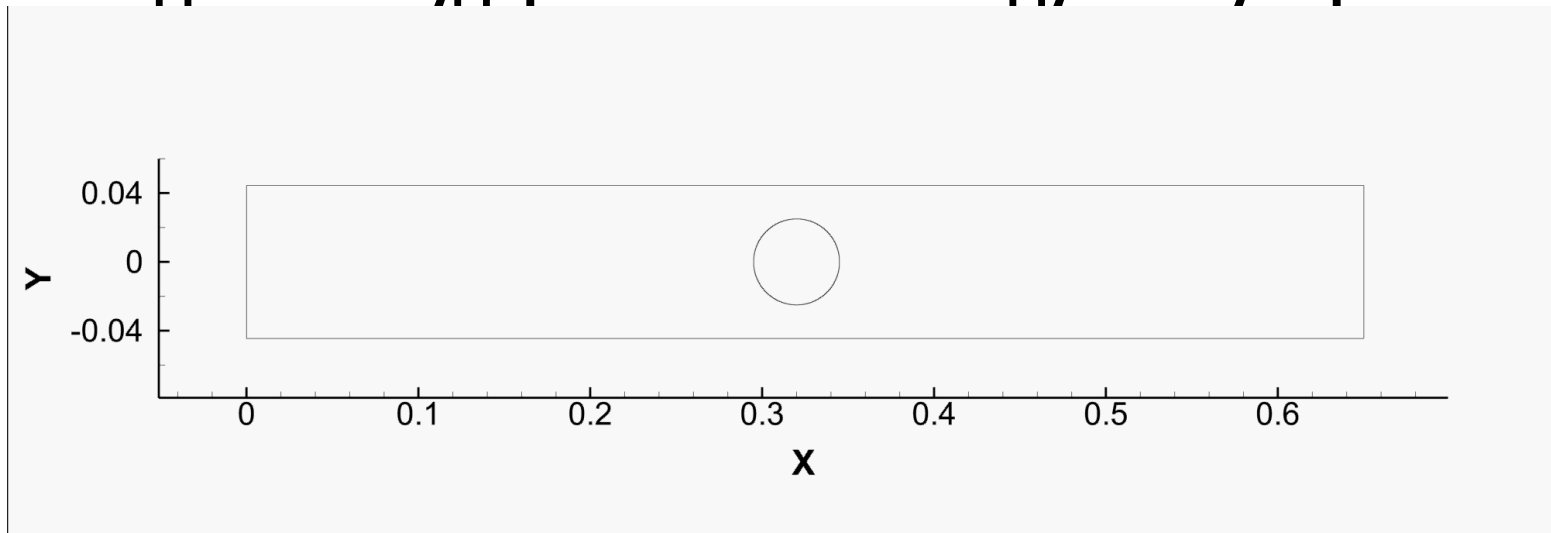


Расчет

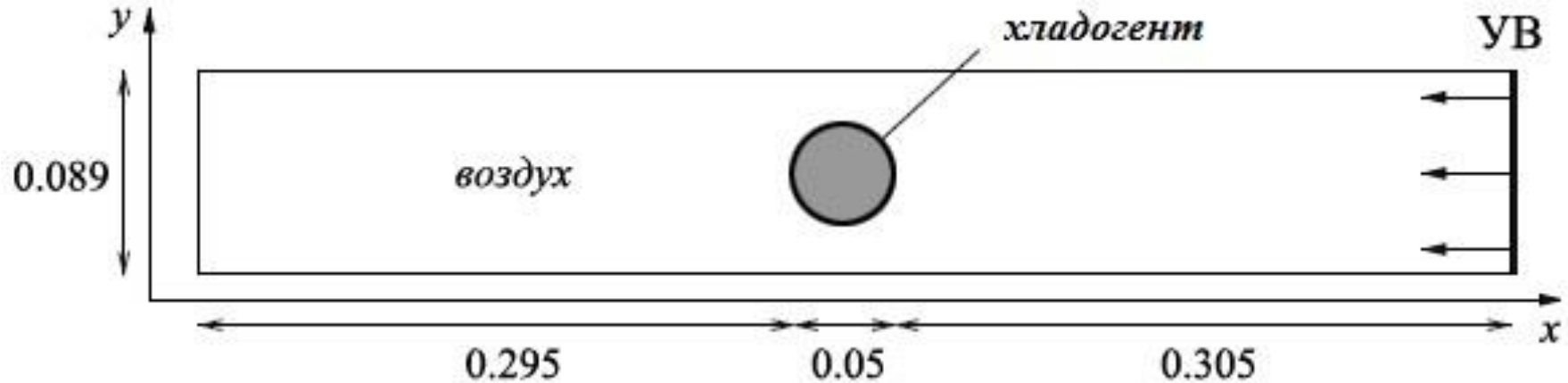
Эксперимент



Взаимодействие ударной волны в воздухе с пузырем гелия

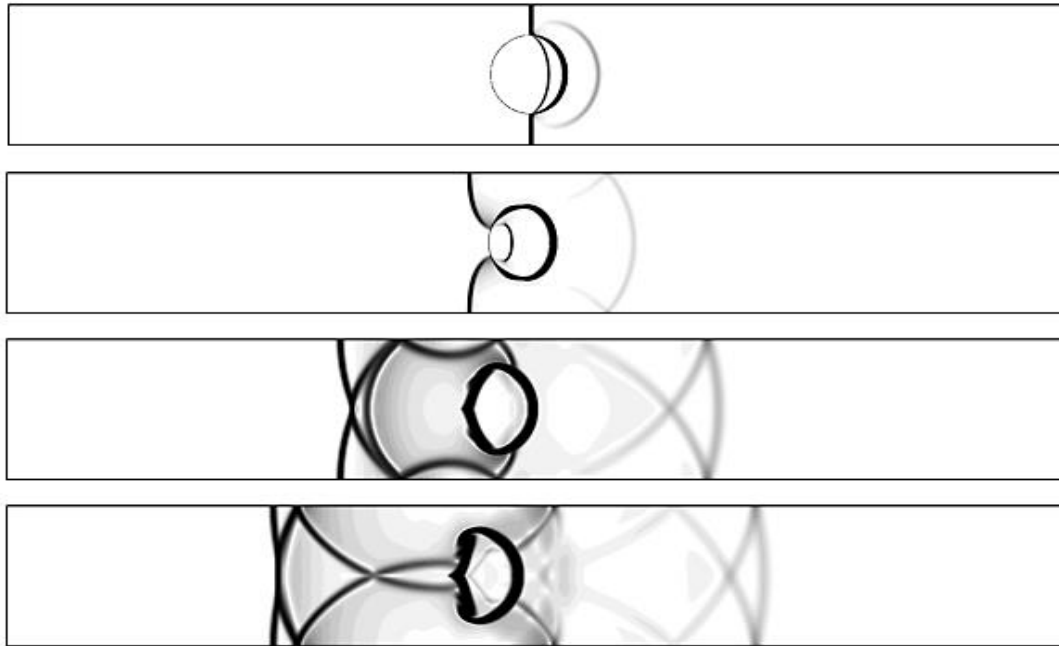


Ударная волны в воздухе с пузырем R22



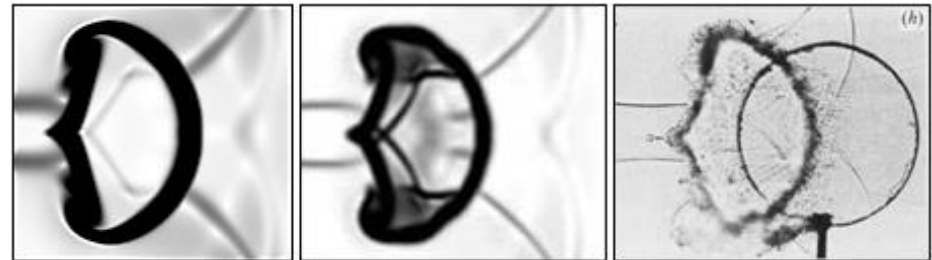
$$(\rho, u, v, p, \gamma)|_{t=0} = \begin{cases} 1.0, & 0.0, 0.0, 10^5, 1.4 & \text{для воздуха,} \\ 3.1538, & 0.0, 0.0, 10^5, 1.249 & \text{для R22.} \end{cases}$$

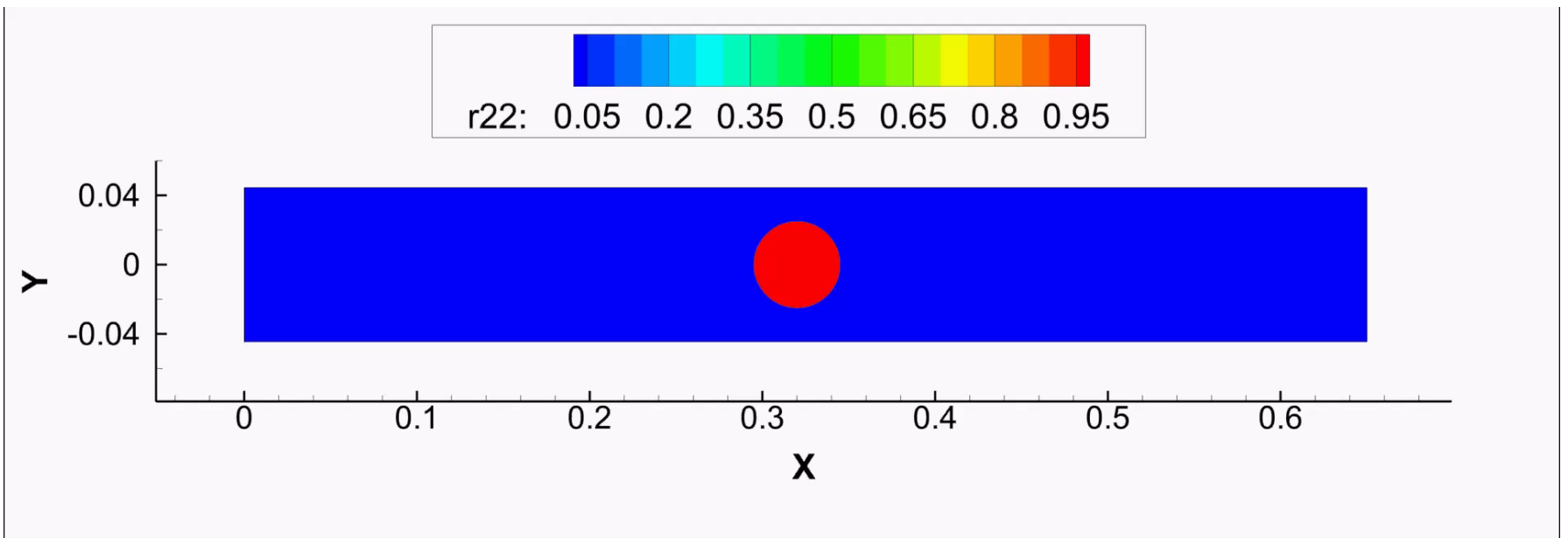
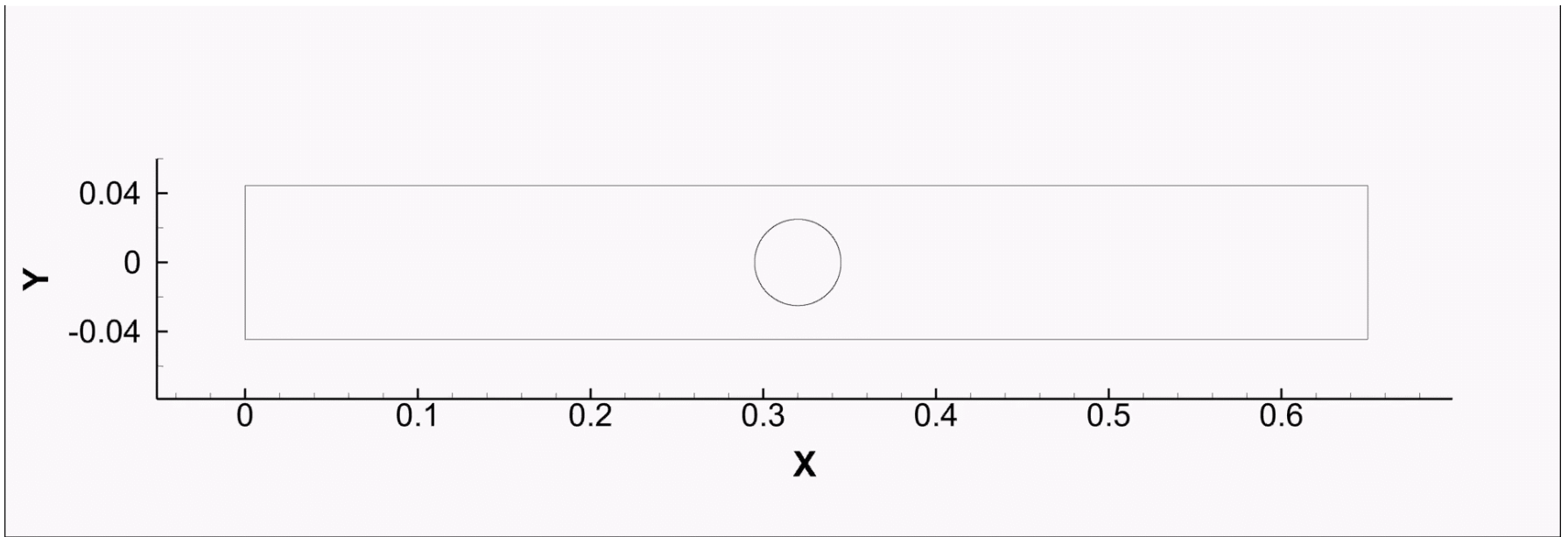
Взаимодействие ударной волны в воздухе с пузырьком R22



Расчет
Борисов,
Рыков

Расчет БР Расчет [2] Эксперимент [3]



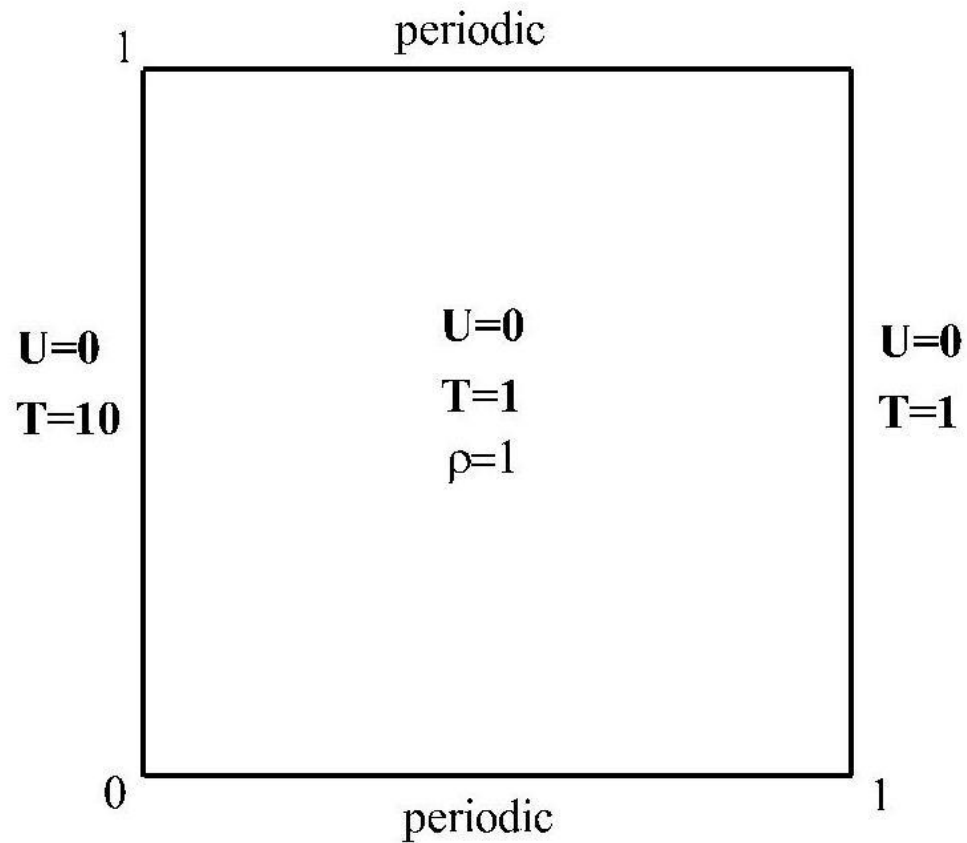


Параболическая часть

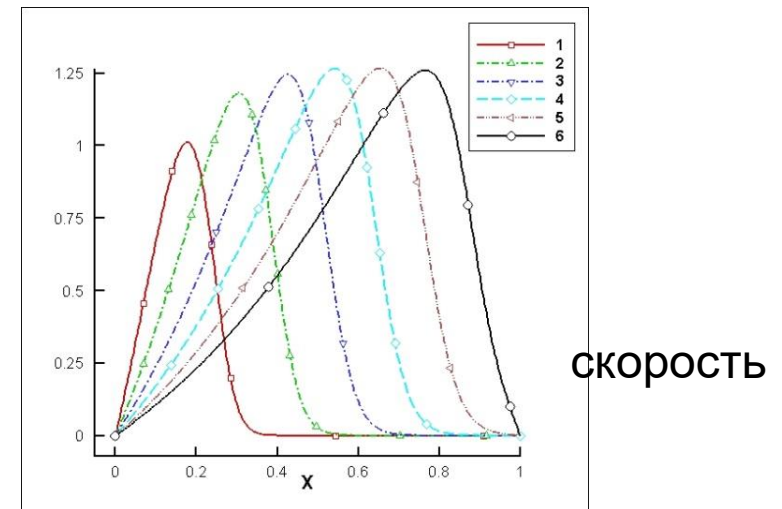
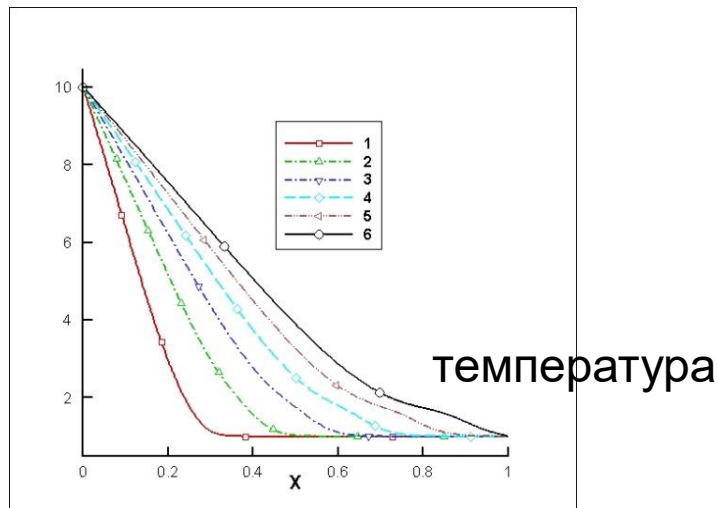
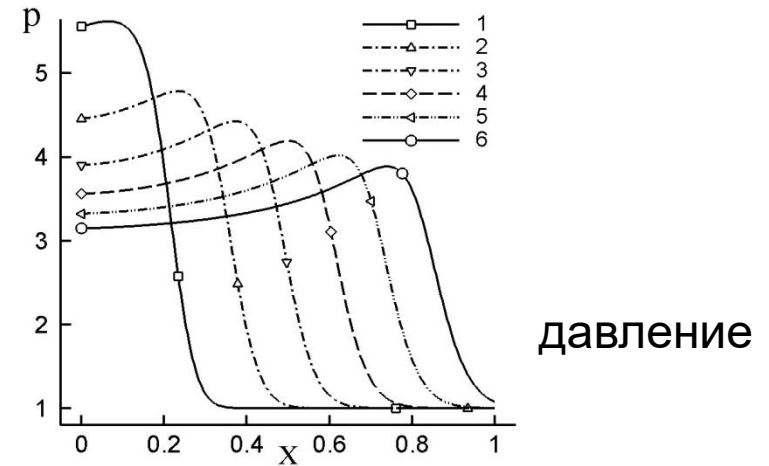
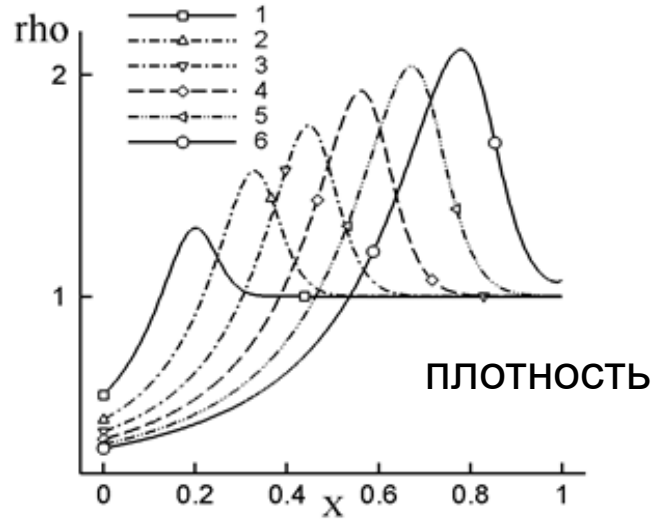
Использованы инфраструктура и подходы
комплекса **NOISEtte**

- Решение систем Эйлера и Навье-Стокса
- Широкий диапазон чисел Маха
- Модели турбулентности: RANS, LES, DES, DDES, IDDES
- Неструктурные сетки гибридного типа
- Смешанный метод аппроксимации:
 - Конвективный перенос
 - Диффузионный перенос

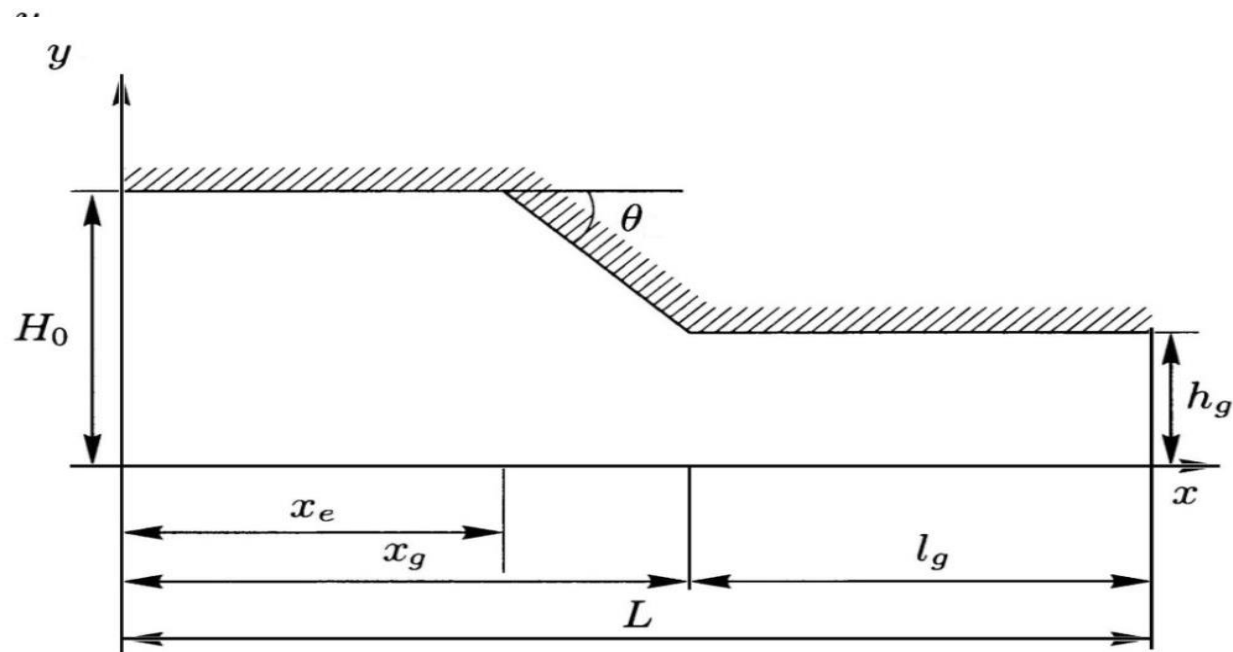
Задача тепловой конвекции



Задача тепловой конвекции

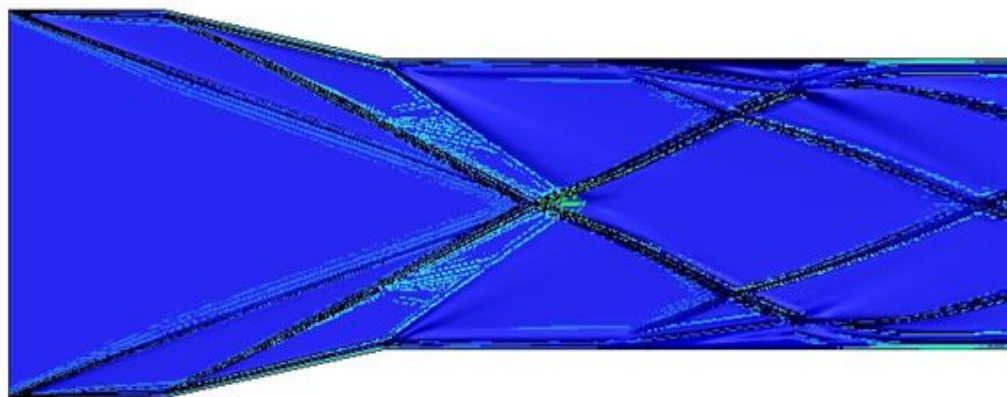
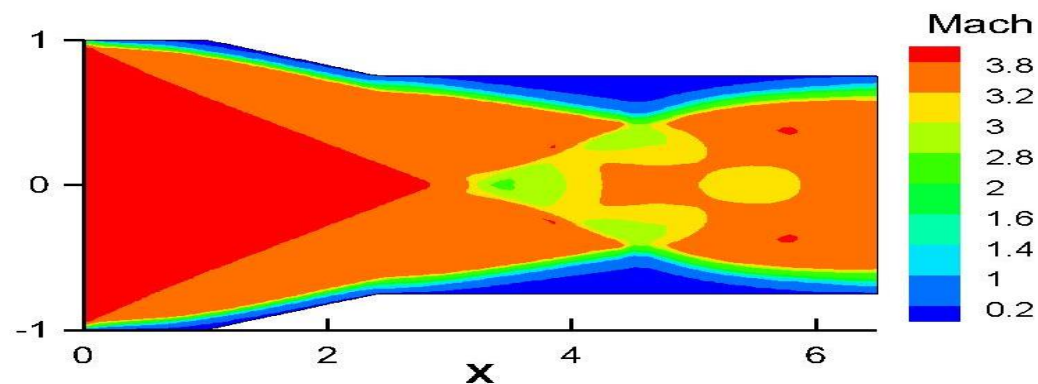


Сверхзвуковое течение в плоском канале переменного сечения



$$M_{\Gamma} = 4 \quad Re = 10^4$$

Сверхзвуковое течение в плоском канале переменного сечения



Шлирен рисунок плотности

Сверхзвуковое течение в плоском канале переменного сечения

Сетка 16 000, T=150

	Неявная схема	Явная схема $k_{CFL} = 0.5$	MCFL, $p = 4 \div 5$
<i>Steps</i>	136 364	587 356	136 364
<i>τ_{aver}</i>	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$2.6 \cdot 10^{-4}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$
<i>t_{total}, сек</i>	6 300	6 695	3 000
<i>residual</i>	$8.5 \cdot 10^{-6}$	$8.5 \cdot 10^{-6}$	$2.6 \cdot 10^{-6}$

1. Borisov V.E., Rykov Yu.G. Modified Godunov method for multicomponent flow simulation // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1250, P. 012006
2. Chen G., Tang H. & Zhang P. Second-Order Accurate Godunov Scheme for Multicomponent Flows on Moving Triangular Meshes // J. Sci. Comput. 2008. V. 34:1. P. 64–86. <https://doi.org/10.1007/s10915-007-9162-8>.
3. Haas J.-F., Sturtevant B. Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities // J. Fluid Mech. 1987. V.181. P. 41–76.
4. В.Е. Борисов, Ю.Г. Рыков. Точный римановский солвер в алгоритмах решения задач многокомпонентной газовой динамики // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. № 96. 2018. 28 С.
5. Жуков В.Т., Феодоритова О.Б., Новикова Н.Д. Об одном подходе к интегрированию по времени системы уравнений Навье-Стокса. // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 2020. Т. 60. №2.
6. В.Т. Жуков, О.Б. Феодоритова, А.П. Дубень, Н.Д. Новикова. Явное интегрирование по времени уравнений Навье–Стокса с помощью метода локальных итераций // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2019, №12, 32 с.

**Спасибо
за внимание**