



«Отечественные CFD коды – 2020»

**Код MSFL расчета нестационарных
многокомпонентных течений**

**В. Борисов, В. Жуков, М. Краснов, Б. Критский,
Н. Новикова, О. Феодоритова**
vic.zhukov@gmail.com

**Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша
РАН**

28-29 ноября 2020, Москва

План

- Код MCFL (Multicomponent Flows)
- Принцип расщепления по физическим процессам
- Явно-итерационная схема интегрирования по времени параболических уравнений
- Схема интегрирования по времени уравнений Навье-Стокса / многокомпонентных реагирующих течений
- Численные примеры
- Заключение

Код MCFL (Multicomponent Flows)= NOISEtte-M

MCFL - это исследовательский код, развитие комплекса программ NOISEtte ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Код MCFL создается в парадигме современного программирования в системе совместной разработки SVN(Subversion) кода NOISEtte, т.е. в системе бесконфликтной одновременной удаленной работы над единым кодом множества разработчиков.

Код MCFL наследует основные функциональные возможности присущие NOISEtte, в том числе параллельную эффективность.

Код MCFL находится в процессе развития, проводятся верификационные расчеты на модельных задачах.

Команда кода MCFL: Феодоритова О.Б., Новикова Н.Д., М.М. Краснов, В.Е. Борисов, Б.В. Критский с участием Жукова В.Т., Рыкова Ю.Г и коллектива создателей кода NOISEtte.

Расщепление по физическим процессам

Пример. Уравнение конвекции-диффузии

$$u_t = c \cdot u_x + (d \cdot u_x)_x \quad c = c(x), d = d(x)$$

Аппроксимация по пространству :

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

Алгоритм расчета шага $t \rightarrow t + \tau$:

гиперболический этап $u_t = C_h u$

параболический этап $u_t = D_h u$

Проблема точности: C и D – квадратные неперестановочные матрицы (если c , d не константы)

$$\frac{du}{dt} = (C + D)u, \quad t \rightarrow t + \tau$$

$$1. v(t) = u(t) \quad \frac{dv}{dt} = Dv \quad \Rightarrow \quad v(t + \tau) = e^{D\tau} v(t)$$

$$2. w(t) = v(t + \tau), \quad \frac{dw}{dt} = Cw \quad \Rightarrow \quad w(t + \tau) = e^{C\tau} w(t),$$

$$u(t + \tau) = e^{C\tau} w(t) = e^{C\tau} e^{D\tau} u(t)$$

$$\text{Точное решение: } U(t + \tau) = e^{(C+D)\tau} u(t)$$

Погрешность схемы $O(\tau)$, т.к. $C \cdot D \neq D \cdot C$

$$\delta = e^{(C+D)\tau} - e^{C\tau} e^{D\tau} = 0.5[D \cdot C - C \cdot D] \tau^2 + \dots$$

Кроме того, есть проблема сохранения стационарного решения.
Для нелинейных задач расщепление может приводить к разным решениям.

Новые алгоритмические элементы

Гиперболический этап – схема Годунова с точным решением задачи Римана для многокомпонентной смеси (Ю.Г. Рыков, В.Е. Борисов)

Параболический этап – оригинальная явно-итерационная схема LINS, основанная на многочленах Чебышёва. Не использует эмпирические параметры. Обобщение схемы LI-M. Число итераций:

$$\nu = 2p - 1, \quad p = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{\tau \lambda_{max} + 1} \right\rceil, \quad \lambda_{max} = \|D_h\|$$

p - степень многочлена Чебышева

Схема Л1-М для параболических уравнений

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

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

$\Omega \subset \mathbb{R}^3$, n - внешняя нормаль к Γ

$$u(t_0, x, y, z) = u_0(x, y, z)$$

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

Дискретизация по пространству и времени

$$\Omega_{h,\tau} = \Omega_h \times \Omega_\tau$$

$$\Omega_\tau = \{t_j, 0 \leq j \leq J, t_J = T\}, \quad \tau > 0: \quad \tau_j = t_{j+1} - t_j$$

$$\Omega_h = \{x_n \in \Omega, 0 \leq n \leq N\}, \quad h \sim N^{1/3}.$$

Пространство U_h , $L_2(\Omega_h)$.

Полудискретная схема:

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

L_h - самосопряж. неотриц.опр. оператор

Схемы интегрирования $u_t + L_h u = f_h$

$$L_h = L_h^* \geq 0 \quad sp(L_h) \subset [0; \lambda_{\max}]$$

$$u_j \equiv u(t_j) \in U_h, \quad t_j \rightarrow t_{j+1} = t_j + \tau$$

$$\text{Явная схема: } \frac{u_{j+1} - u_j}{\tau} + L_h \cdot u_j = f_j$$

$$\text{Неявная схема: } \frac{u_{j+1} - u_j}{\tau} + L_h \cdot u_{j+1} = f_j$$

Явно-итерационная схема ЛІ-М на основе многочленов Чебышева

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

Многочлен Чебышева степени p : $T_p(x) = \cos(p \arccos x)$, $-1 \leq x \leq 1$

$$\text{Нули } \beta_i = \cos \frac{2i-1}{2p} \pi, \quad i = 1, \dots, p$$

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

$$\nu = 2p - 1, \quad \text{итер. параметры: } \{b_1, \dots, b_q\} \equiv \{a_p, \dots, a_2, a_p, \dots, a_2, a_1\}$$

$$\text{Схема: } y^0 = u_j,$$

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

Операторная запись схемы LI-M

$$y^{n+1} = S^+ y^n + \tau Q^n, \quad t_n \rightarrow t_{n+1} = t_n + \tau$$

$$S^+ = (I - G_p^2)(I + \tau L_h)^{-1}$$

$$G_p(L_h) = H_p(L_h) / H_p(-1/\tau)$$

$$H_p(\lambda) = \prod_{m=1}^{m=p} (a_m - \lambda) \equiv T_p(z_1 - (z_1 + 1) \lambda / \lambda_{\max})$$

G_p – нормированный многочлен Чебышева

Качество схем: спектры операторов перехода

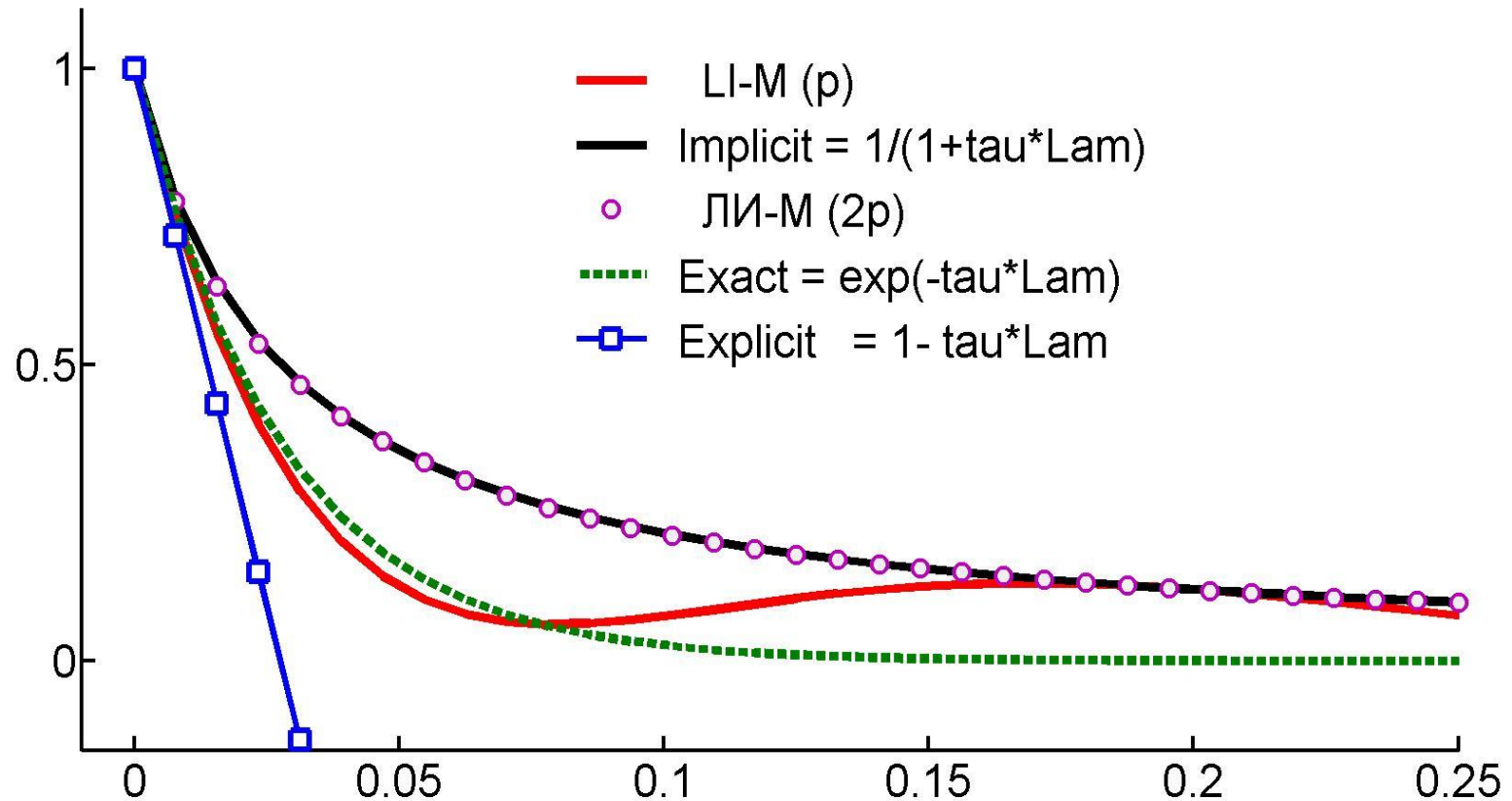
$$\lambda \in [0; \lambda_{max}] = \text{sp} (L_h)$$

Явная схема: $\rho_{\text{exp}}(\lambda) = 1 - \tau\lambda$

Неявная схема: $\rho_{\text{imp}}(\lambda) = \frac{1}{1 + \tau\lambda}$

Схема LI-M : $\rho_{\text{LI-M}}(\lambda) = \frac{1 - G_p^2(\lambda)}{1 + \tau\lambda}, \quad |G_p| \leq 1$

Качество схем: спектры операторов перехода по сравнению с точным $\exp(-\tau \cdot \lambda)$



Красная линия ближе к зеленой!

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

Математическая модель RANS (в отсутствии горения)

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

$$\frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_\mu + \boldsymbol{\tau}_t),$$

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{u} \left(E + \frac{p}{\rho} \right) \right) = \nabla \cdot \left[\vec{u} \cdot (\boldsymbol{\tau}_\mu + \boldsymbol{\tau}_t) + (\vec{q}_\mu + \vec{q}_t) \right],$$

$$\boldsymbol{\tau}_\mu = \mu(T) \left(\nabla \vec{u} + [\nabla \vec{u}]^t - \frac{2}{3} \mathbf{I} \nabla \cdot \vec{u} \right), \quad \vec{q}_\mu = -\lambda(T) \nabla T \left(+ \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \mathbf{J}_{k,j} \right)$$

+ Уравнение состояния

+ Модель турбулентности (Ментера, ...)

$\boldsymbol{\tau}_\mu$, $\boldsymbol{\tau}_t$, \vec{q}_μ , \vec{q}_t – молекулярная и турбулентная компоненты тензора вязких напряжений и теплового потока соотв.

Многокомпонентные течения реагирующих газов

Хим. состав смеси:

N_{sp} – количество компонентов в смеси;

N_r – число реакций;

Y_m – массовая доля компонента сорта m : $\sum_{m=1}^{N_{sp}} Y_m = 1$.

Парциальная плотность $\rho_m = \rho Y_m$

\vec{u} – среднемассовая скорость: $\rho \vec{u} = \sum_{m=1}^{N_s} \rho_m \vec{u}_m$

Диффузионный поток:

$\vec{J}_m = \rho_m (\vec{u}_m - \vec{u}) \sim \rho D_m \text{grad } Y_m$, $\sum_{m=1}^{N_{sp}} \vec{J}_m = 0$.

УРС : $p = \left(\sum_{m=1}^{N_{sp}} Y_m R/W_m \right) \rho T$, W_m – молярная масса

Уравнения балансов хим. компонентов смеси в диффузионном приближении

$$\frac{\partial(\rho Y_m)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_m)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho D_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right] + \dot{\omega}_m, \quad m = \overline{1, N_{sp}}$$

Диффузионный поток \vec{J}_m и скорость $\dot{\omega}_m$ изменения компонента m :

$$\vec{J}_m = -\rho D_m \nabla Y_m, \quad \dot{\omega}_m = W_m \sum_{j=1}^{N_r} \nu_{j,m} s_j,$$

$\nu_{j,m}$ – стехиометр. коэфф. компонента m в реакции j

W_m – молярная масса компонента, s_j – скорость реакции j :

$$s_j = Q(Y) \left\{ k_{fj} \prod_{t=1}^{N_{sp}} \left[\frac{\rho Y_t}{W_t} \right]^{\alpha_{tj}} - k_{bj} \prod_{t=1}^{N_{sp}} \left[\frac{\rho Y_t}{W_t} \right]^{\beta_{tj}} \right\}$$

α_{tj}, β_{tj} – степени компонента t , k_{fj} ,

k_{bj} – константы скорости реакции

Химическая кинетика

Скорости изменения молярно-объемных концентраций - источник в уравнениях диффузии компонентов - определяются в каждой ячейке сетки из решения нелинейной жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dY}{dt} = F(T, Y)$$

Здесь функция F зависит от скоростей реакций.

Схема интегрирования LINS для уравнений Навье-Стокса

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2} + \frac{\partial F_3}{\partial x_3} = 0,$$

$$U = (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, E)^T, \quad E = \rho(e + 0.5u^2)$$

$$F_k(U) = F_k^{conv}(U) + F_k^\mu(U) + F_k^\lambda(U)$$

Конвективный, вязкий и тепловой потоки :

$$F_k^{conv}(U) = u_k U + (0, p \delta_{k1}, p \delta_{k2}, p \delta_{k3})$$

$$F_k^\mu(U) = -(0, \tau_{k1}, \tau_{k2}, \tau_{k3}, 0)^T$$

$$F_k^\lambda(U) = -(0, 0, 0, 0, u_1 \tau_{k1} + u_2 \tau_{k2} + u_3 \tau_{k3} + q_k)^T$$

Схема LINS для уравнений Навье-Стокса

$$\frac{dU}{dt} + F^{conv}(U) + F^\mu(U) + F^\lambda(U) = 0$$

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

Гиперболика: схема Годунова

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

Результат:

$$\bar{U} = (\bar{\rho}, \bar{\rho} \bar{u}_1, \bar{\rho} \bar{u}_2, \bar{\rho} \bar{u}_3, \bar{E})^T,$$

$$\bar{E} = \bar{\rho} (\bar{e} + 0.5 \bar{u}^2)$$

Параболический этап I, вязкость

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

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

Предиктор (неполный LINS):

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

Корректор:

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

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

Предиктор + Корректор = LINS

Параболический этап II, теплопроводность

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

Уравнение энергии: *скорость известна*

$$\bar{E} = \bar{\rho} (\bar{e} + 0.5 \bar{u}^2)$$

Предиктор (неполный LINS):

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

Корректор:

$$\frac{E^{n+1} - \bar{E}}{\tau_{conv}} + F^\lambda (\tilde{U}^n) = 0$$

$$\text{Результат: } \bar{\bar{E}} \equiv E^{n+1} = \bar{\rho} (\bar{e} + 0.5 \bar{u}^2)$$

Предиктор + Корректор = LINS

Схема расщепления в многокомпонентном случае

$$U \equiv \rho \left(1, u_1, u_2, u_3, E, k, \omega, \left\{ Y_m, m = 1, \dots, N_{sp} \right\} \right)$$

Разностная схема :

$$\frac{\partial}{\partial t} U + C_h(U) = D_h(U)$$

$C_h(U)$ – *нелинейный конвективный оператор*

$D_h(U)$ – *нелинейный диффузионный оператор*

Явная схема : (ограничение на шаг $\tau \sim h^2$)

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\tau} + C_h U^n = D_h U^n$$

Расщепление: $\tau \sim \tau_{\text{cov}} \sim h$

Гиперболический этап – схема Годунова с точным решением задачи Римана для многокомпонентной смеси (Ю.Г. Рыков, В.Е. Борисов)

Параболический этап: вязкость, теплопроводность, диффузия компонентов смеси

\tilde{U}^n – результат предикторных итераций LINS

$$\frac{\bar{U}^{n+1} - U^n}{\tau} + C_h U^n = 0$$

$$\frac{U^{n+1} - \bar{U}^{n+1}}{\tau} = D_h \tilde{U}^n$$

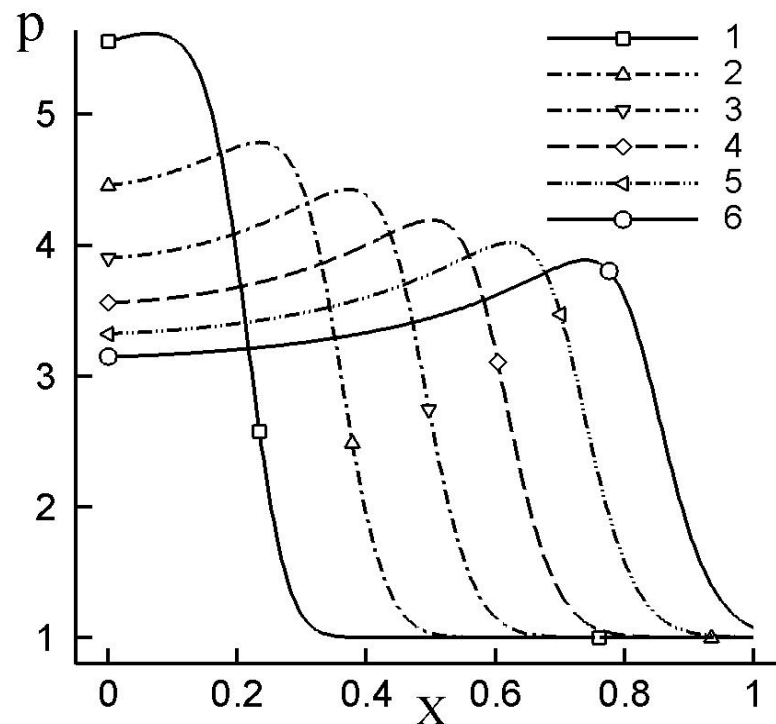
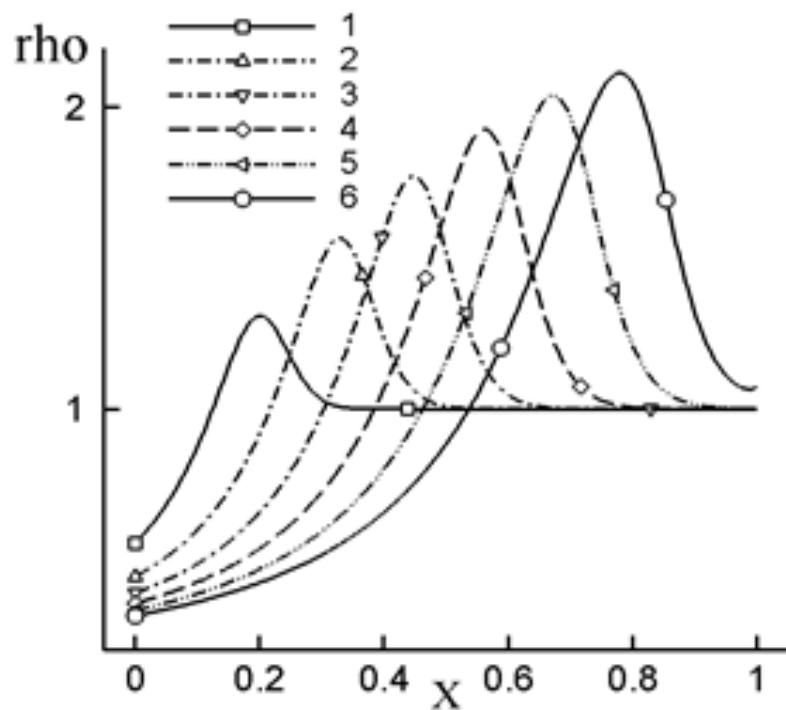
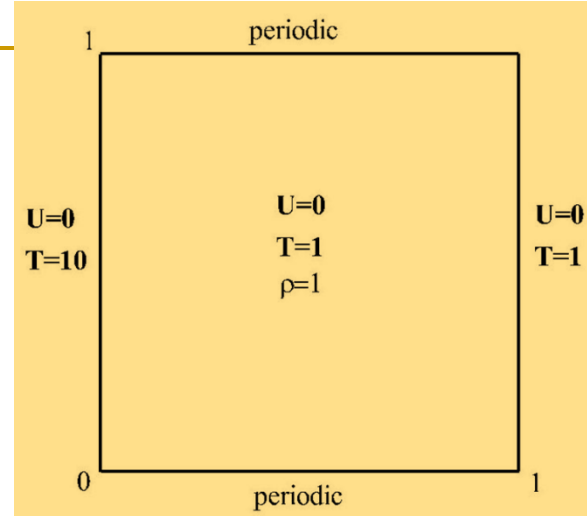
Сумма этапов:

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\tau} + C_h U^n = D_h \tilde{U}^n$$

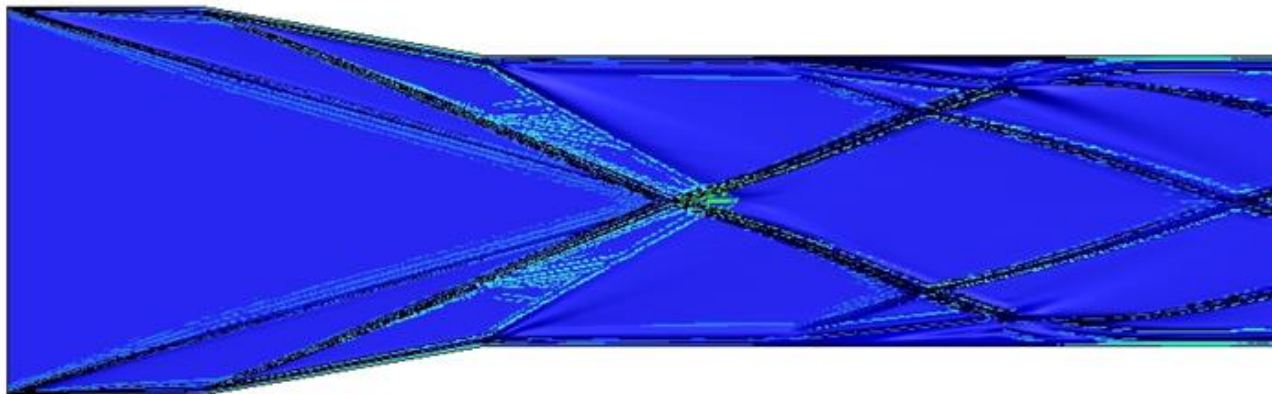
Примера расчетов. NS-Eqns

Расчет I. Тепловая конвекция:

(Полежаев В.)



Расчет 2. Сверхзвуковое высокотемпературное течение в канале (Башкин В.А., Егоров И.В.) NS-Eqns



Шлирен плотности

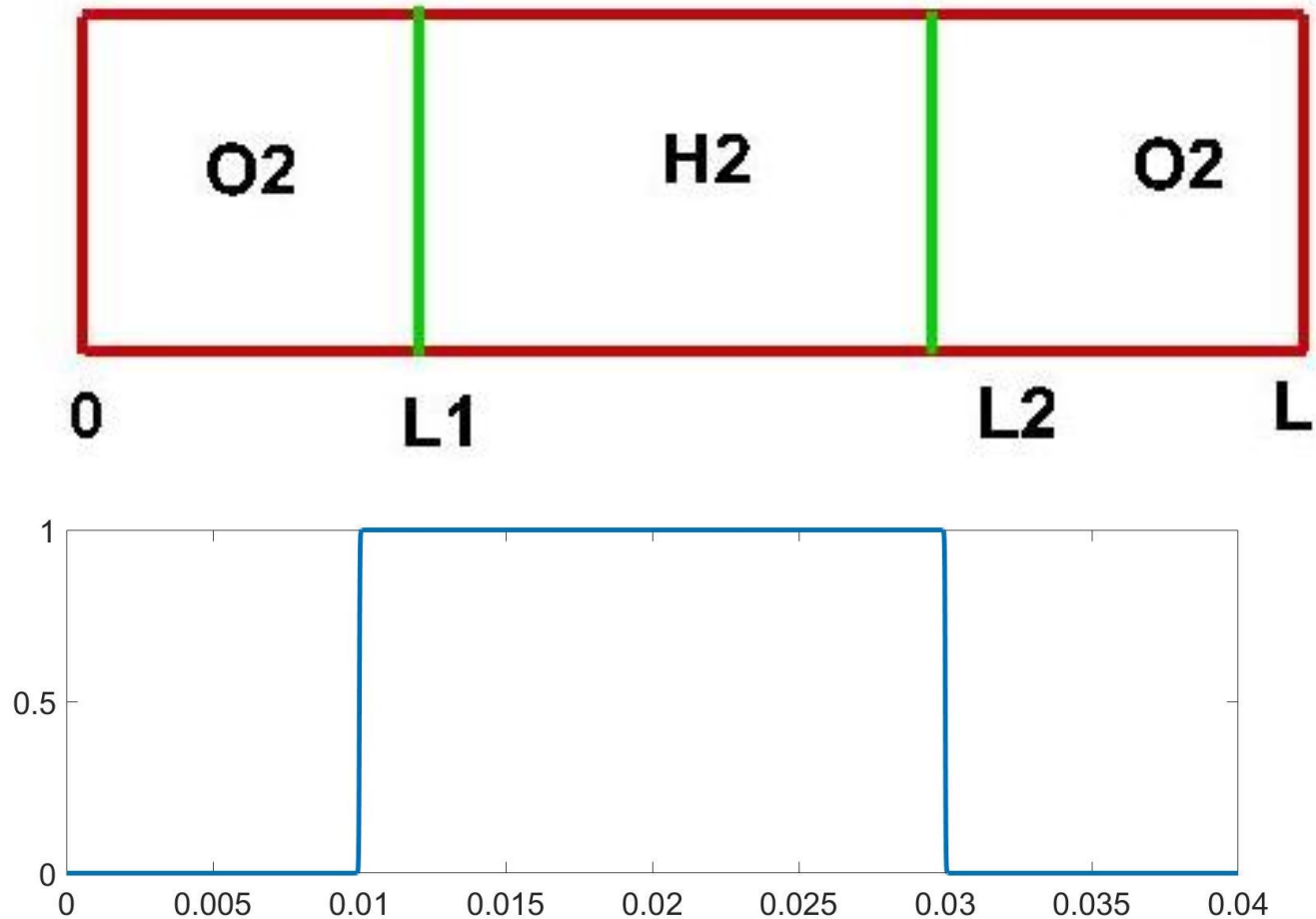
Сравнение с явной схемой: вычислительная эффективность схемы LINS выше и при $h \rightarrow 0$ ее преимущество многократно увеличивается

Сверхзвуковое течение в плоском канале переменного сечения. Установление. Сравнение схем.

Сетка 16 000, $T=150$

	Неявная схема	Явная схема $k_{CFL+D} = 0.5$	LINS, $p = 4 \div 5$ $k_{CFL} = 0.5$
Число шагов	136 364	587 356	136 364
τ_{aver}	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$2.6 \cdot 10^{-4}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$
Время счета, сек	6 300	6 695	3 000
Точность, норма невязки	$8.5 \cdot 10^{-6}$	$8.5 \cdot 10^{-6}$	$2.6 \cdot 10^{-6}$

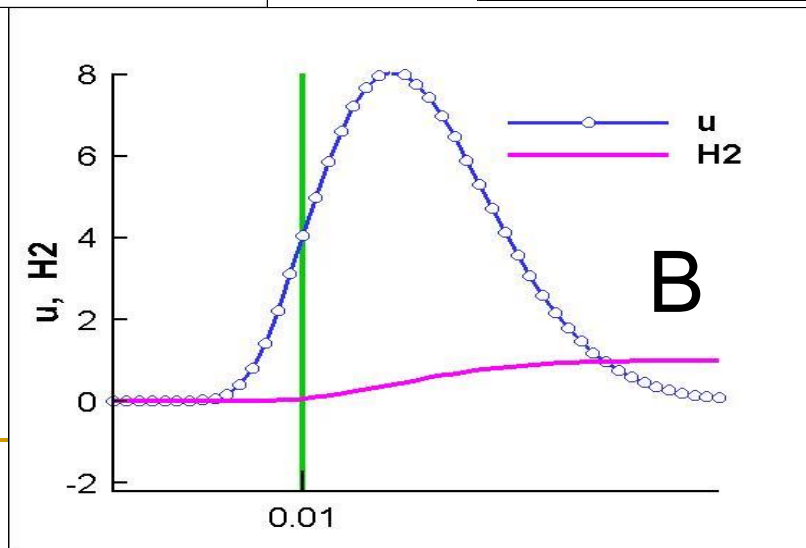
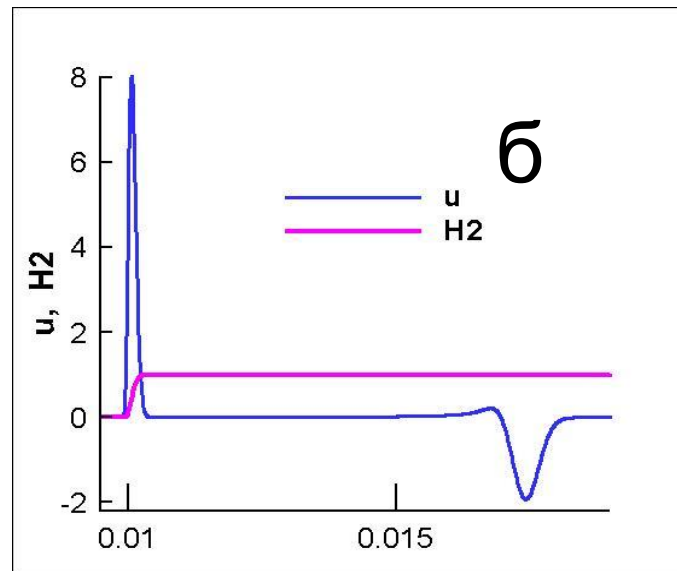
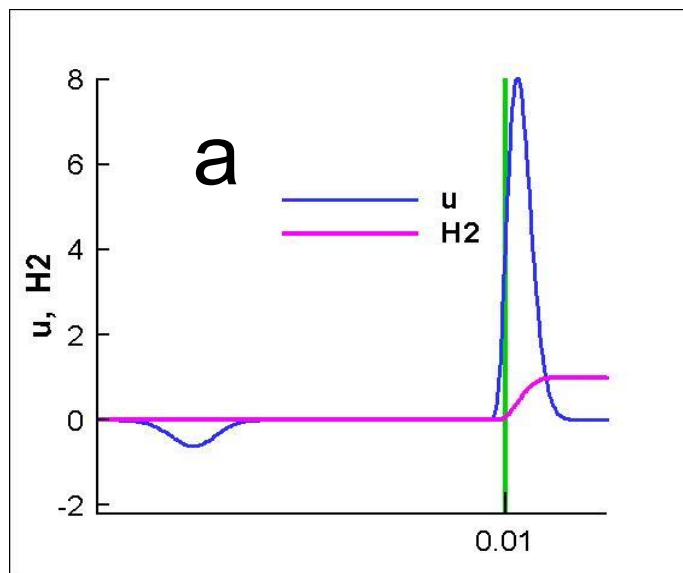
Акустические волны на диффузионной границе двух газов



$p_0 = 1$ атм, $T_0 = 850$ К, скорости звука: $O_2 - 550$ м/с, $H_2 - 2200$ м/с

Скорость и концентрации водорода:

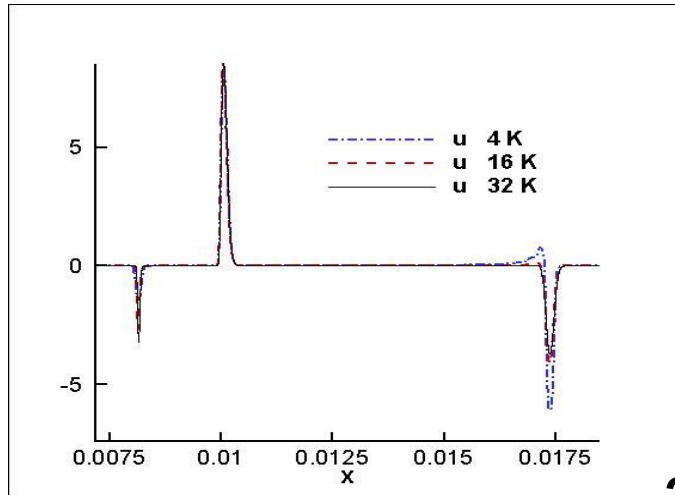
а) левая волна и зона смешения б) правая волна и зона смешения
в) зона смешения



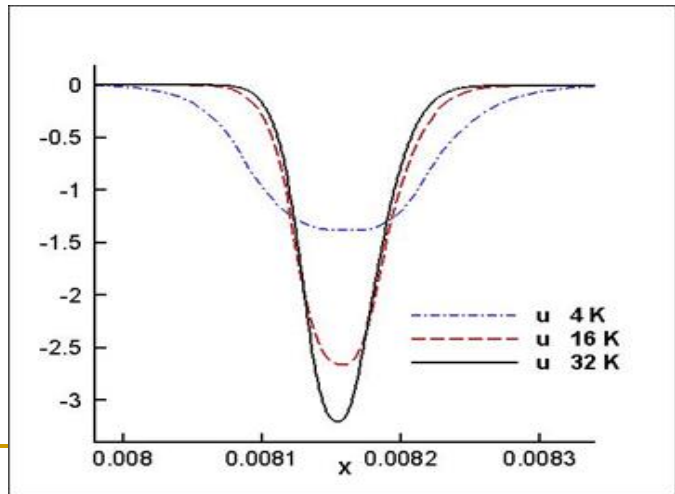
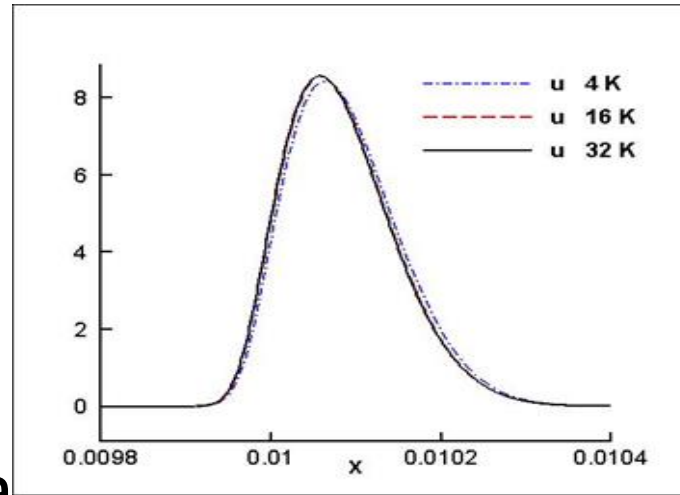
Профили скорости на разных сетках:

а) во всей области и в зоне интерфейса,

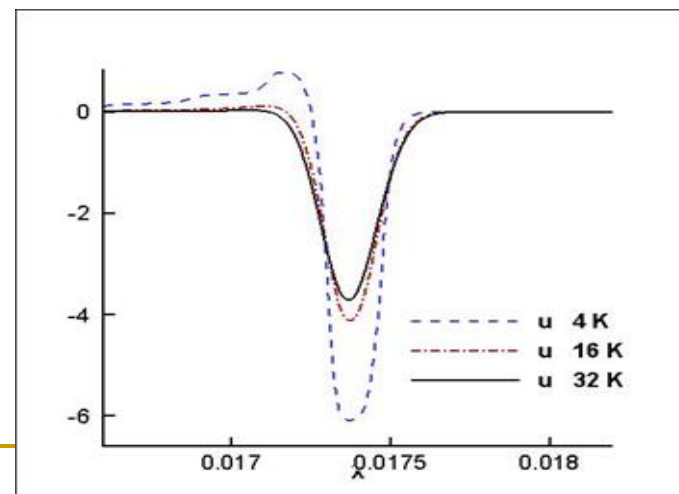
б) в окрестности левой и правой акустических волн



а

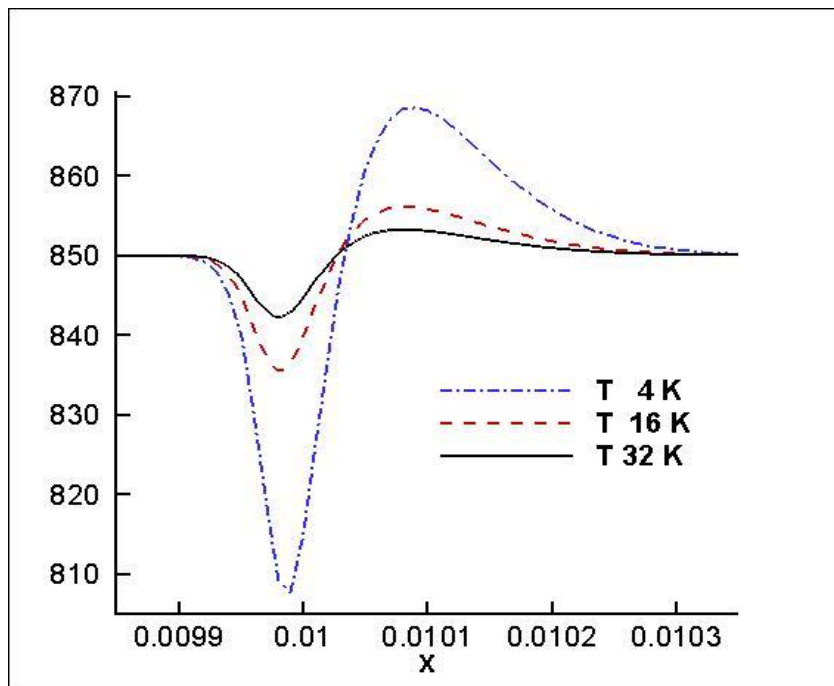


б

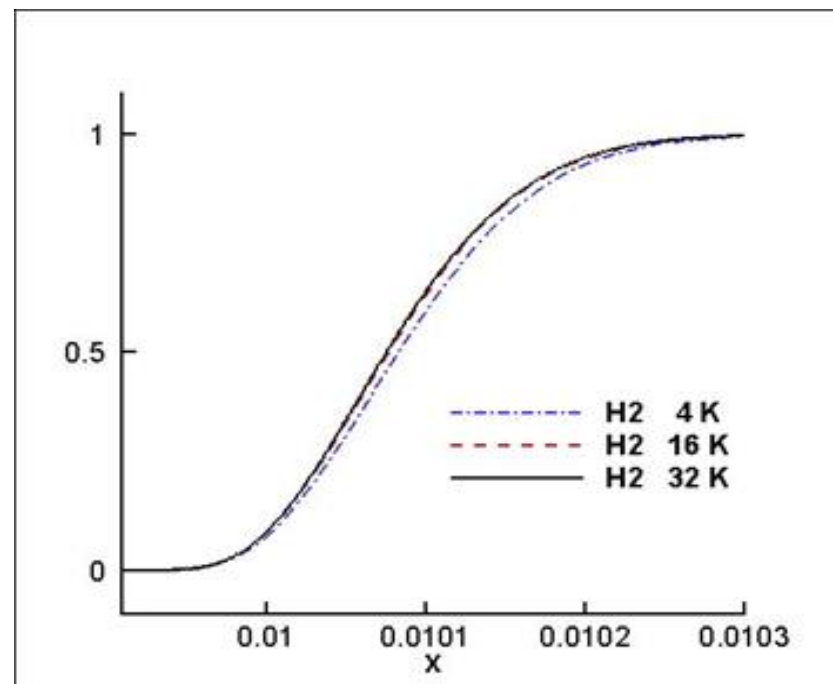


Профили температуры и концентрации водорода в зоне интерфейса

Температура



Концентрация водорода



Заключение

Схема LINS расчета многокомпонентных химически реагирующих сред имеет следующие особенности :

- конвекция и диссипативные процессы (вязкие, теплопроводные, диффузионные) реализуются явными и явно-итерационными алгоритмами соответственно.
- схема LINS обеспечивает выполнение законов сохранения, эффективна в параллельной реализации.

1. Жуков В.Т., Феодоритова О.Б., Новикова Н.Д. Об одном подходе к интегрированию по времени системы уравнений Навье-Стокса. // *ЖВМ и МФ.* 2020. Т. 60. №2.
2. В.Т. Жуков, О.Б. Феодоритова, Н.Д. Новикова, А.П. Дубень. Явно-итерационная схема для интегрирования по времени системы уравнений Навье-Стокса // *Матем. моделирование*, 2020, Т. 32, № 4, с. 57-74
3. 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
4. Жуков В. Т. О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // *Матем. мод.* 2010. Т. 22. № 10. С. 127–158
5. MacNamara, Shev & Strang, Gilbert. (2016). *Operator Splitting*. doi: 10.1007/978-3-319-41589-5_3.
6. Марчук Г.И. Методы расщепления. М.: Наука, 1988.

СПАСИБО
за внимание