

QGDsolver – открытый фреймворк для моделирования течений жидкости и газа на основе регуляризованных уравнений

Матвей Крапошин

ИСП РАН

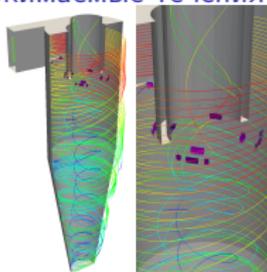
19 Декабря, 2021

- 1 Мотивация работы
- 2 Этапы развития
- 3 Исходный код
- 4 Валидация
- 5 Уравнения мелкой воды
- 6 Заключение

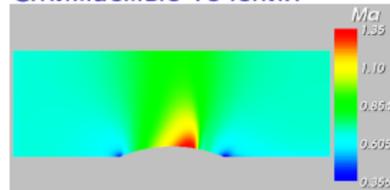
Пример: PIMPLE (PISO-SIMPLE)

Универсальный алгоритм и единый программный интерфейс позволяют в относительно сжатые сроки создавать сложные компьютерные модели физических процессов

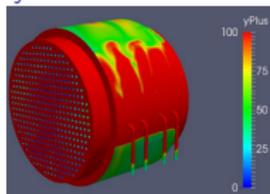
Несжимаемые течения



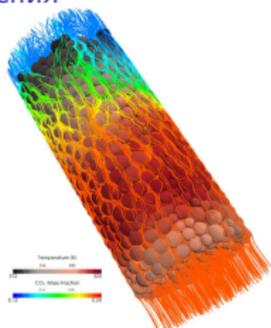
Сжимаемые течения



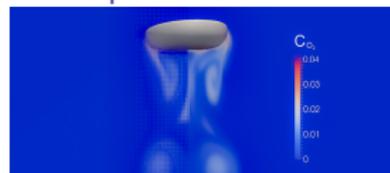
Течения с учетом плавучести



Многокомпонентные течения



Многофазные течения



CANDU-6 full scale simulation,

DOI: 10.3390/en12020330

Ограничения подхода PIMPLE

Общность подхода влечет за собой и ограничения

- Итеративная природа численного алгоритма – вопросы сходимости, организации вложенных циклов и пр.
- Ограничения по числу Маха, монотонность
- Вопросы применения ограничителей потоков
- Сеточная сходимость
- Сбалансированность слагаемых уравнений (например – объёмных сил и градиента давления)

Примеры невоспроизводимых задач

Таким образом, несмотря на формальное соответствие аппроксимирующих выражений задаче, область применения супекомпьютерной модели может оказаться уже, например:

- Аттрактор внутренних волн в стратифицированной среде
- Аттрактор внутренних волн в тороиде
- Равновесие капли
- Сжимаемые течения при $Ma > 2$

КГД/КГид как альтернатива PIMPLE в OpenFOAM

Преимущества

- относительно простые схемы для конвекции/диффузии: (1) без ограничителей потока, (2) без решения задачи Римана, (3) одинаковая процедура аппроксимации для всех типов течений
- монотонная сходимость по параметру схемы
- применимы к компактному шаблону
- интегрируемы с моделями OpenFOAM
- не требуют использования вложенных циклов

Недостатки

- вычислительно более затратные чем стандартные схемы (примерно в 3 раза)
- требуется дополнительное условие устойчивости
- зачастую желательные равномерные сетки и маленький шаг по времени

Этапы развития

- ① QGDFoam – тело с юбкой, профили, модель СПС, струйные течения
- ② QHDFoam – тройники, насос перекачки крови, аттракторы внутренних волн
- ③ Аппроксимация тау-слагаемых методом Остроградского-Гаусса (ЕВ Шильников, МА Истомина)
- ④ _____
- ⑤ Многокомпонентные и двухфазные программы
- ⑥ Валидация

Реализация КГД в OpenFOAM

Требует доработки OpenFOAM:

- 1) вычисление τ -слагаемых в центрах граней
- 2) выбор способов вычисления τ и КГД-вязкости
- 3) бесшовная связь параметров КГД-алгоритма (α , S_c , граничные условия) с остальными системами OpenFOAM

Релизуется стандартными средствами OpenFOAM:

- 1) Консервативная форма записи уравнений:
- 2) Явная схема интегрирования по времени
- 3) Вычисление потоков интерполяцией с центров объёмов на центры граней
- 4) Интеграция с другими моделями (турбулентности, горения и пр.)

КГД/КГидД vs. PISO

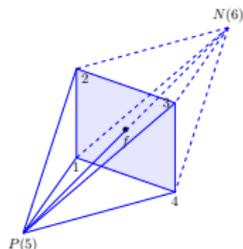


Figure 1: Geometrical scheme of stencil for numerical computation of partial derivatives on finite volume face f : P denotes center of cell to which normal of f points outward, N denotes center of cell to which normal of f points inward

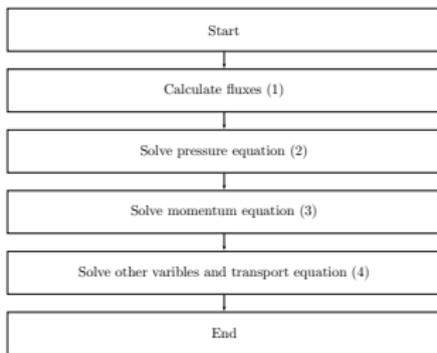


Figure 2: QHD algorithm flowchart

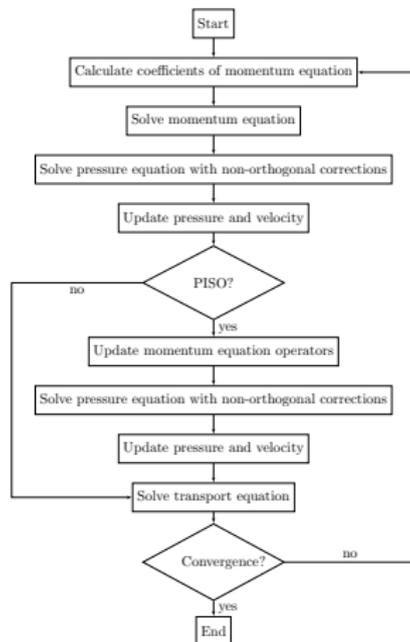


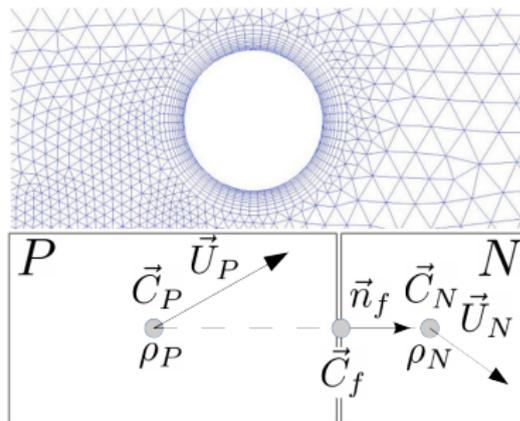
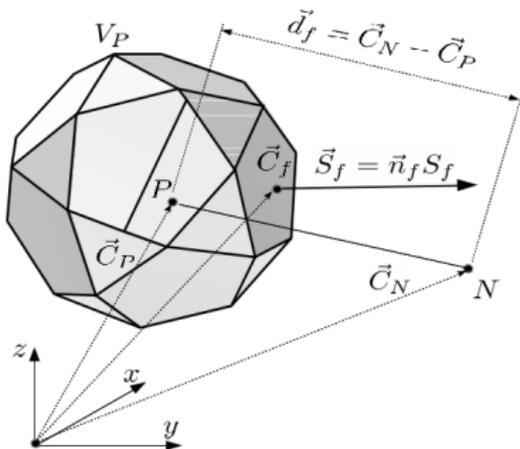
Figure 3: PIMPLE algorithm flowchart

Вычислительный шаблон OpenFOAM

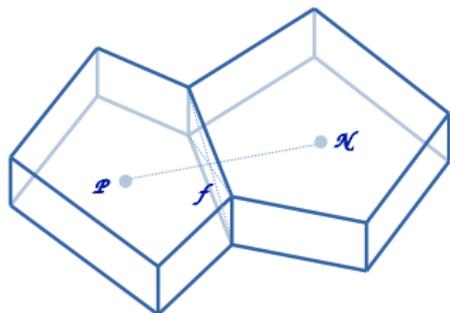
Строится относительно грани:

- 1 соединяющей 2 ячейки, если она находится внутри расчетной области;
- 2 прилегающей к 1 ячейке и смотрящей наружу, если она составляет внешнюю поверхность расчетной области.

Контрольный объем может быть произвольной формы



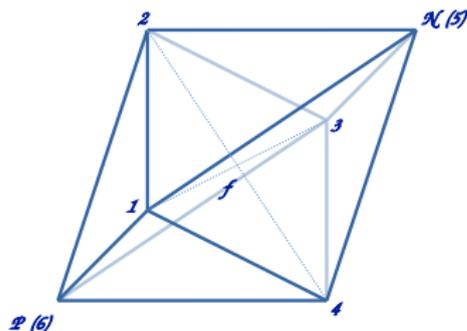
Вычисление τ – слагаемых по теореме Остроградского-Гаусса



The partial derivative on the face f centroid can be calculated as:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial x} = \frac{1}{V_f} \sum_{m=1}^6 n_{m,x} \alpha_m$$

- The formula can be extended to face with arbitrary number of vertices.
- Thanks to *snappyHexMesh*, most faces are quadrangle
- For other faces we can use *reduced* approach



All formulae could be found in M. Istomina, E. Shilnikov 2019, KIAM Preprint No. 86
(In Russian)

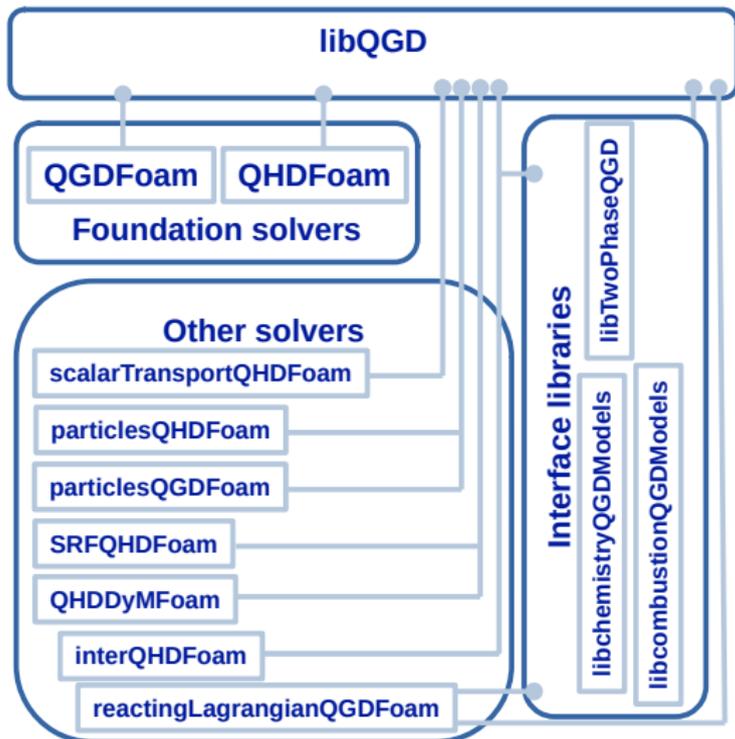
Явно- неявная аппроксимация

- Исходно КГД/КГиД алгоритмы используют полностью явную аппроксимацию потоков
- В OpenFOAM-реализации QGDsolver предложена явно-неявная аппроксимация, выделяющая разрешение диффузионных процессов в отдельные подшаги (на примере величины Y):

$$\textcircled{1} (Y^p - Y^o) \Delta t^{-1} = -V^{-1} \sum_f (\vec{S}_f \cdot \vec{j}_f Y^o)_f$$

$$\textcircled{2} (Y^n - Y^o) \Delta t^{-1} - (Y^p - Y^o) \Delta t^{-1} = V^{-1} \sum_f (\vec{S}_f \cdot \nabla Y^n)_f$$

Архитектура библиотеки



- Each solver implementing QGD algorithm must use libQGD library
- Two foundation solvers *QGDFoam* and *QHDFoam* show essential principles of QGD-algorithms
- Other solver could be regarded as combination of foundation algorithms and OpenFOAM models
- Interface libraries are used to connect QGD solver to OpenFOAM models when interfaces have changed

Реализованные в QGDsolver модели

Производные приложения

- Движение сетки и неинерционная система координат
 - QHDDyMFoam
 - SRFQHDFoam
- Перенос примеси
 - scalarTransportQHDFoam
 - mulesQHDFoam
- Течения с дисперсными примесями
 - particlesQGDFoam
 - particlesQHDFoam
- Многокомпонентные и многофазные течения
 - reactingLagrangianQGDFoam
 - interQHDFoam

Базовые приложения

- QGDFoam – течение вязкого совершенного газа в широком диапазоне чисел Маха
- QHDFoam – течение вязкой жидкости с учетом плавучести

Моделирование двухфазных и многокомпонентных течений

- Т. Г. Елизарова, А. А. Злотник, Е. В. Шильников, “Регуляризованные уравнения для численного моделирования течений гомогенных бинарных смесей вязких сжимаемых газов”
- А. В. Иванов, М. В. Крапошин, Т. Г. Елизарова, “О новом методе регуляризации уравнений двухфазной несжимаемой среды”

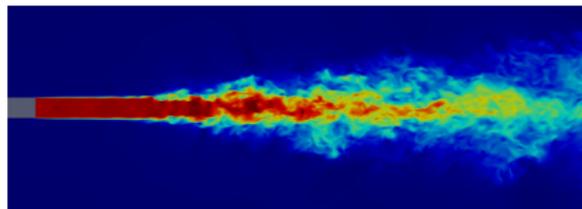
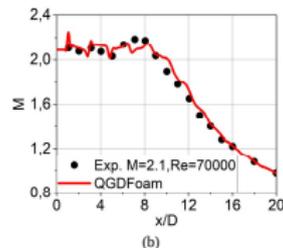
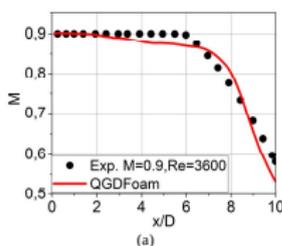
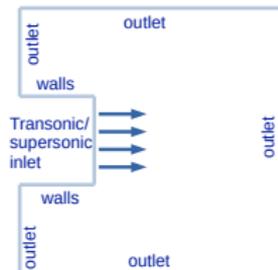
Transient high speed flows

Two free jets of perfect gas with $\gamma = 1.4$ were considered:

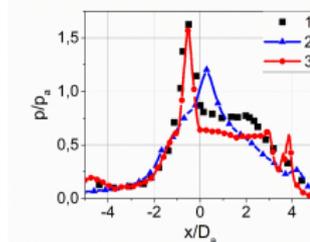
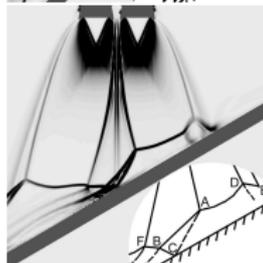
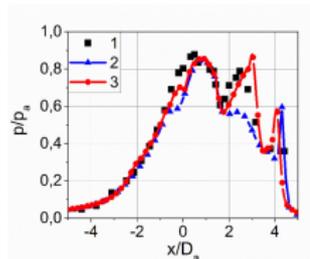
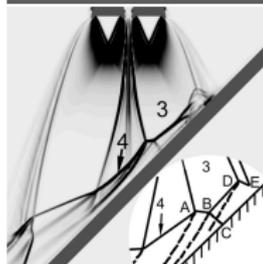
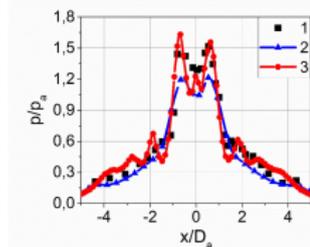
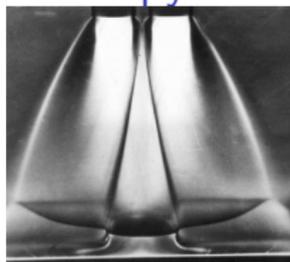
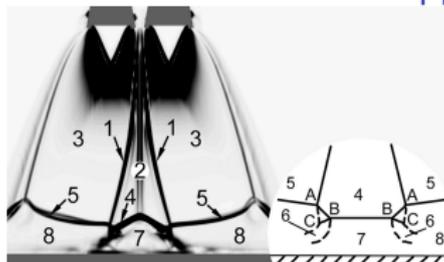
- ① $Re = 3600$
- ② $Re = 70000$

QGD settings was:

- $\alpha^{QGD} = 0.15$, $Co^{max} = 0.15$
- Sc^{QGD} was gradually reduced from 1 at the start to 0 at the end of calculation
- Ostrogradsky-Gauss approximation of τ -terms
- laminar model for $Re = 3600$ was used
- Smagorinsky model for $Re = 70000$ was used
- Computational mesh with 33 mln cells was used in both cases



Взаимодействие струй с преградой

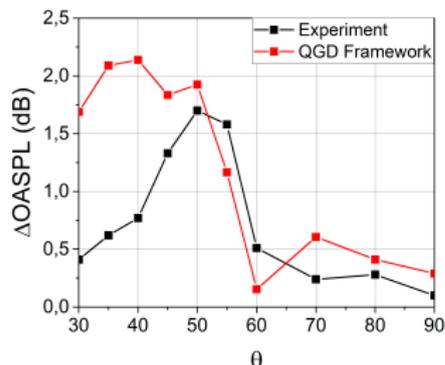
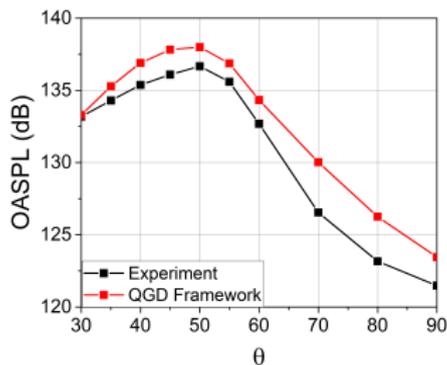
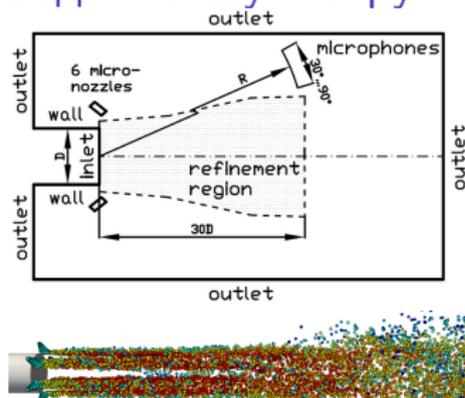


А.С. Епихин, Т.Г. Елизарова. Численное моделирование газодинамики процесса взаимодействия недорасширенных струй с наклонной преградой.

"1" - эксп, "2" - rhoCentralFoam, "3" - QGDFoam

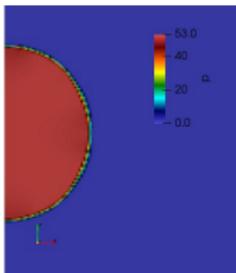
Влияние подачи воды на шум струй

Исследовалось влияние подачи воды на акустику в дальнем поле. Ближнее поле рассчитывалось в многокомпонентном приближении с использованием регуляризованных уравнений. Дальнее поле – с использованием аналогии ФВХ. Подаваемая вода моделировалась в приближении облака частиц.



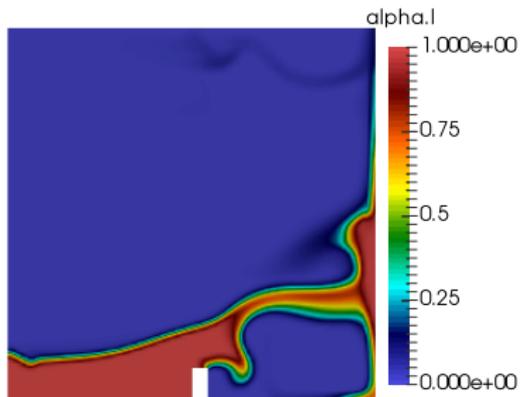
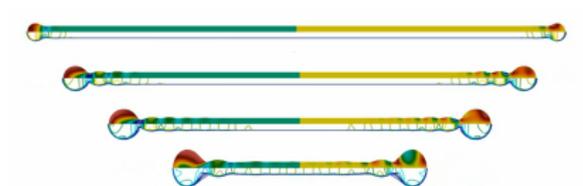
M. Kraposhin, A. Epikhin, V. Melnikova. The Eulerian-Lagrangian approach for the numerical investigation of an acoustic field generated by a high-speed gas-droplet flow

Течения с межфазной поверхностью

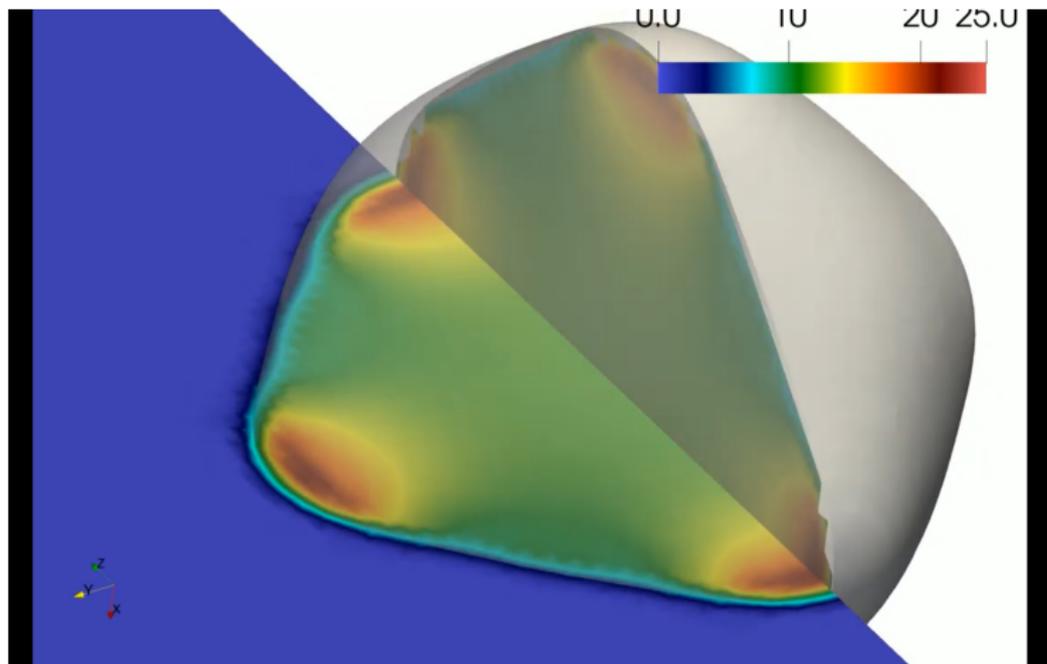


3D simulation can be viewed on
YouTube

https://youtu.be/fqqSXh5t_38



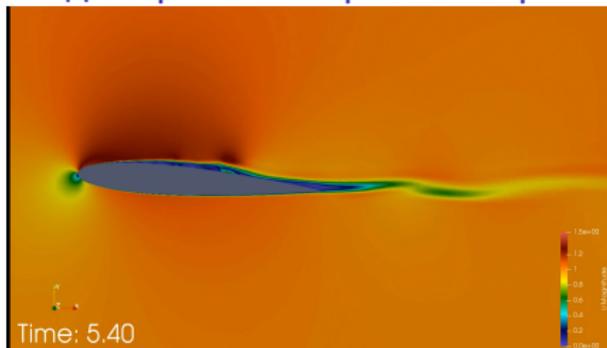
Деформация капли



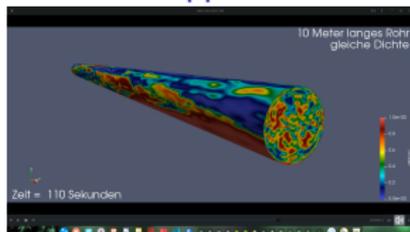
Нестационарные течения

Моделирование срыва вихря за профилем

Выполнено
 Dr.-Ing. Jörn
 Beilke
<https://www.beilke-cfd.de/>



Взаимодействие стратификации и неустойчивостей



$$\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1} = 0$$



$$\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1} = 0.037$$

Регуляризованные уравнения мелкой

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0, \quad \text{ВОДЫ} \quad (1)$$

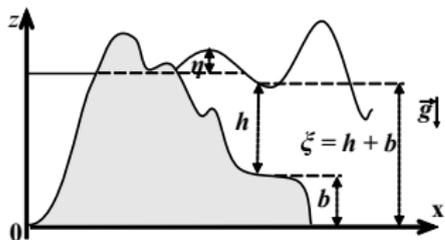
$$\frac{\partial (h\mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \nabla \frac{gh^2}{2} = h^* (\mathbf{f}^v - g\nabla b) + \mathbf{f}^s + \operatorname{div} \Pi, \quad (2)$$

$$h^* = h - \tau \operatorname{div} (h\mathbf{u}), \quad (3)$$

$$\mathbf{j}_m = h (\mathbf{u} - \mathbf{w}), \quad (4)$$

$$\mathbf{w} = \frac{\tau}{h} [\operatorname{div} (h\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + gh\nabla (b+h) - h\mathbf{f}^v - \mathbf{f}^s], \quad (5)$$

$$\Pi = \tau \mathbf{u} \otimes [h (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + gh\nabla (b+h) - h\mathbf{f}^v - \mathbf{f}^s] + \tau I [gh \operatorname{div} (h\mathbf{u})], \quad (6)$$



Булатов О. В., Елизарова Т. Г.

Регуляризованные уравнения мелкой воды и эффективный метод численного моделирования течений в неглубоких водоемах // ЖВМиМФ. 2011. Т.51, № 1. С.17–184. DOI

DOI

Булатов О.В., Елизарова Т.Г. (2016)

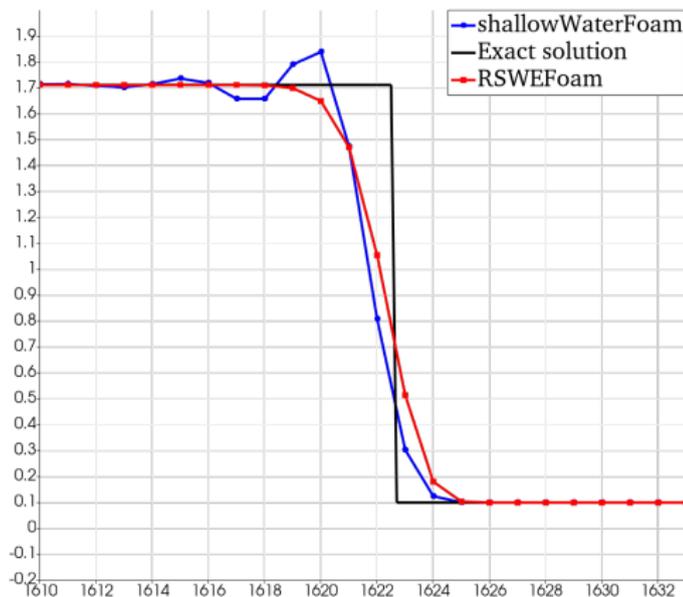
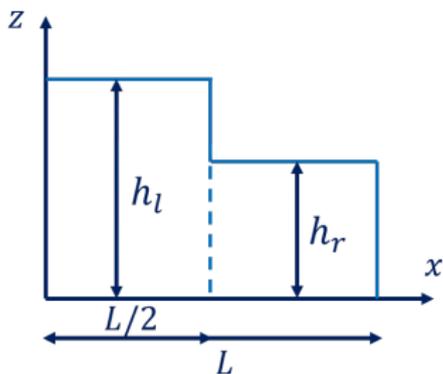
Регуляризованные уравнения мелкой воды для численного моделирования течений с подвижной береговой линией. ЖВМиМФ. 2016. Т.56. № 4. С.158–177

Разработка ведется А.В. Ивановым (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН и ИСП им. В.П. Иванникова РАН)

Сравнение с базовым решателем

Пример: задача Римана.

$x \in [0, L], h_l = 10 \text{ м},$
 $h_r = 0.1 \text{ м}$
 $L = 2000 \text{ м}, u = 0.$



Толщина слоя воды,
 $\Delta x = 1 \text{ м}, \alpha = 0.1.$

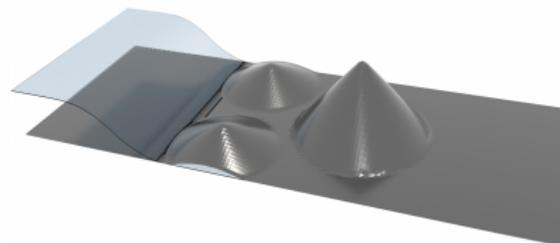
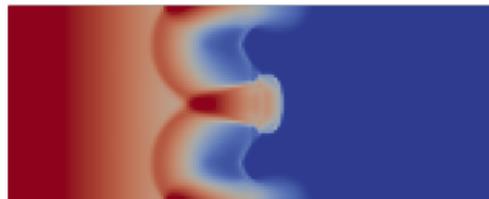
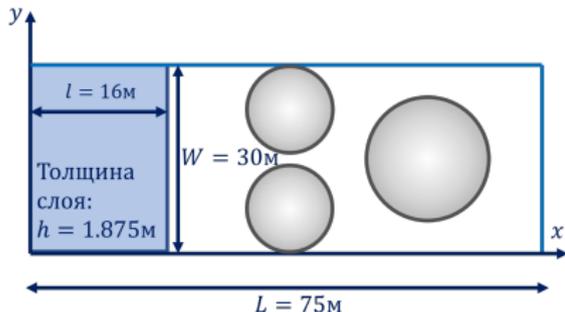
Задача о затоплении поверхности с тремя конусами

Используется как один из тестов для проверки возможности численного алгоритма работать с сухими областями.

Канал: $75\text{м} \times 30\text{м}$.

Разрыв расположен на линии $x = 16\text{м}$, толщина слоя жидкости слева от разрыва $h = 1.875\text{м}$, в остальной – сухое дно.

$\Delta x = \Delta y = 2\text{м}$.



Заключение

Страница GitHub QGDsolver

- <https://github.com/unicfdlab/QGDsolver>
- Текущая ветка OpenFOAM+: 2012 (ветка репозитория digitef-dev-2012)
- Следующая ветка OpenFOAM: 2112
- Версия для уравнений мелкой воды:
<https://github.com/kanorianec/QGDsolver>

Группа Телеграм QGDsolver

https://t.me/qgd_qhd

Учебные треки QGDsolver

- <https://github.com/unicfdlab/TrainingTracks/tree/master/OpenFOAM/QHDFoam-OFv2012>
- <https://github.com/unicfdlab/TrainingTracks/tree/master/OpenFOAM/QGDFoam-OFv2012>