

«Отечественные CFD коды – 2021»



МСFL. Код для расчетов многокомпонентных течений с учетом сопряженного теплообмена

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

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН

МОСКВА, 18-19 ДЕКАБРЯ 2021 Г.

План

- Назначение кода MCFL (Multicomponent Flows). Объекты: камеры сгорания, внешнее обтекание ЛА, сопряженный теплообмен системы «газ-твердое тело».
- Численные алгоритмы моделирования многокомпонентных течений вязкого теплопроводного газа.
- Математическая модель, схема расщепления в многокомпонентном случае.
- Схема интегрирования по времени уравнений Навье-Стокса / системы уравнений многокомпонентных течений/.
- Явно-итерационная схема интегрирования по времени параболических уравнений.
- Моделирование процессов сопряженного теплообмена (Conjugate Heat Transfer) системы «газ-твердое тело».
- Численные примеры.
- Выводы.

Код MCFL (Multicomponent Flows)

Компьютерный код MCFL - это функциональное развитие кода NOISEtte ИИМ им. М.В. Келдыша .

Код MCFL создается в парадигме современного программирования в системе совместной разработки кода NOISEtte.

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

И добавляет новые: многокомпонентную диффузию, хим. кинетику, сопряженный теплообмен, деформацию границ.

Код находится в процессе развития, проводятся верификационные расчеты на модельных задачах, на задаче расчета течения многокомпонентной смеси в модельной камере сгорания ЦАГИ, для которой известны результаты экспериментов и расчеты по разным методикам.

Команда кода MCFL: Феодоритова, Новикова, Краснов, Борисов, Критский, Жуков В.Т., Рыков Ю.Г и коллектив создателей кода NOISEtte. Отдельная благодарность Горобцу, Бобкову, Бахвалову.

Математическая модель : уравнения Навье-Стокса

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

$$\frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\tau_\mu + \tau_t),$$

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

+ Уравнение состояния +

**Усложнение модели: уравнения балансов
компонентов смеси в диффузионном приближении**

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

Схема расщепления в многокомпонентном случае

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

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:

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

Расщепление с использованием явно-итерационной схемы LINS (Local Iterations for Navier - Stokes):

Гиперболический этап – схема Годунова с точным решением задачи Римана для многокомпонентной смеси

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

Параболический этап - обобщение LINS:
вязкость, теплопроводность,
диффузия компонентов смеси

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

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

Сумма этапов:

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

Здесь C_h , D_h – линейные операторы (линеаризация по нижнему слою)

Базовая схема параболического этапа - схема LI-M
для параболических уравнений.

Схема не требует настроечных параметров.

Идеальна для распараллеливания.

$$\mathbf{R}^3 : \quad u_t = \Delta u + f \quad \text{in} \quad G = [t_0; T] \times \Omega$$

$$\mathbf{R}^1 : \quad u_t = u_{xx} + f$$

Схемы интегрирования

$$u_t + L_h u = f_h$$

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

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

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

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

Явно-итерационная схема LI-M 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

Схема LI-M. Сравнение с явной и неявной схемами.

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

$$p = \left\lceil 0.5 \pi \sqrt{\tau \lambda_{max} + 1} \right\rceil$$

Нет настроечных параметров, конечное число итераций $\nu = 2p - 1$

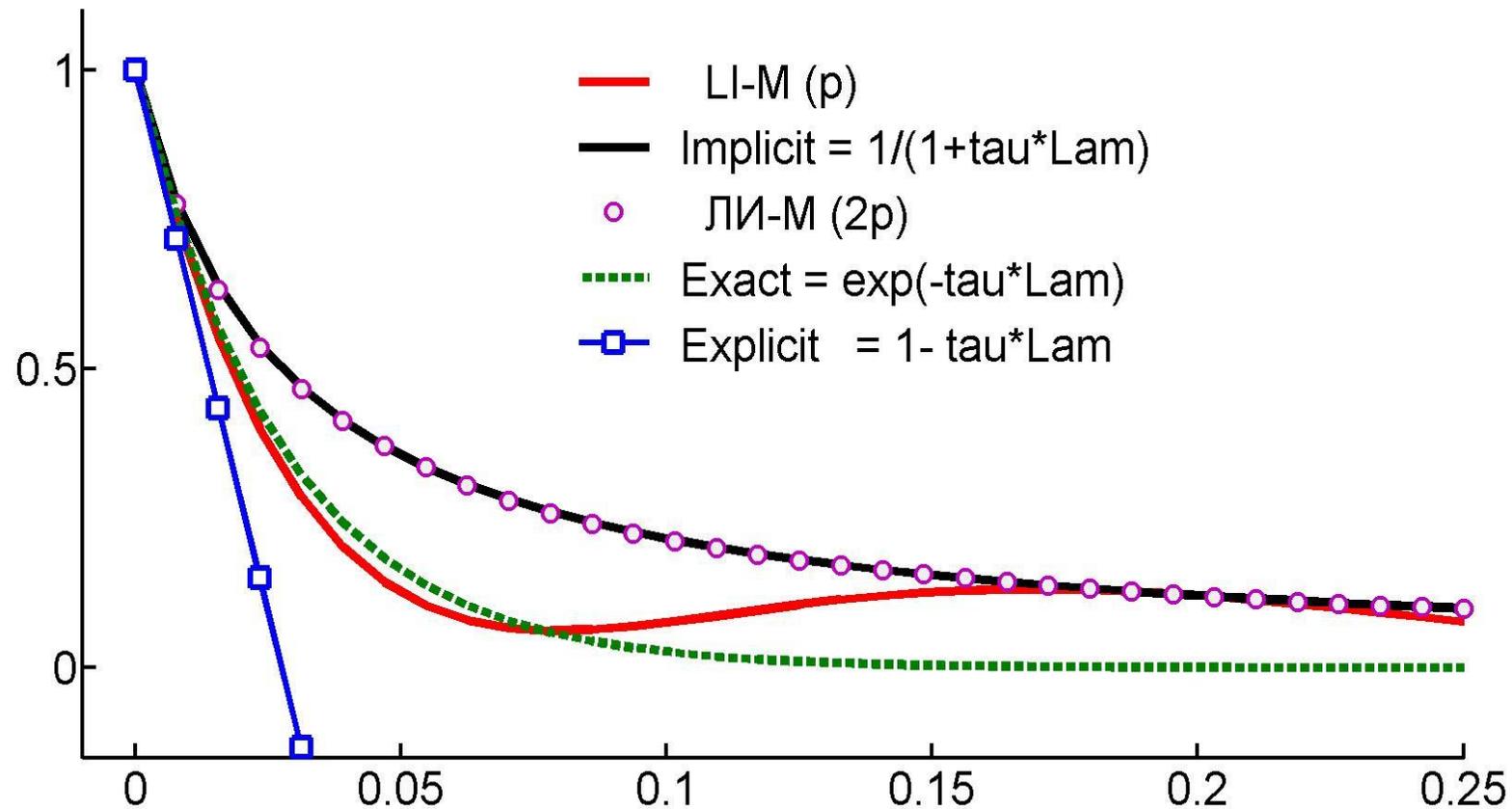
Спектры операторов послойного перехода :

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

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

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

Спектры операторов перехода по сравнению с точным оператором $\exp(-\tau \cdot \lambda)$



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

На начальном участке спектр ЛИ-M (Красная линия) ближе к точному спектру (Зеленая линия)!

Постановка задачи сопряженного теплообмена (Conjugate Heat Transfer)

Пример - две области: обтекание пластины конечной толщины.

1. Fluid region: уравнения Навье –Стокса

/или система уравнений

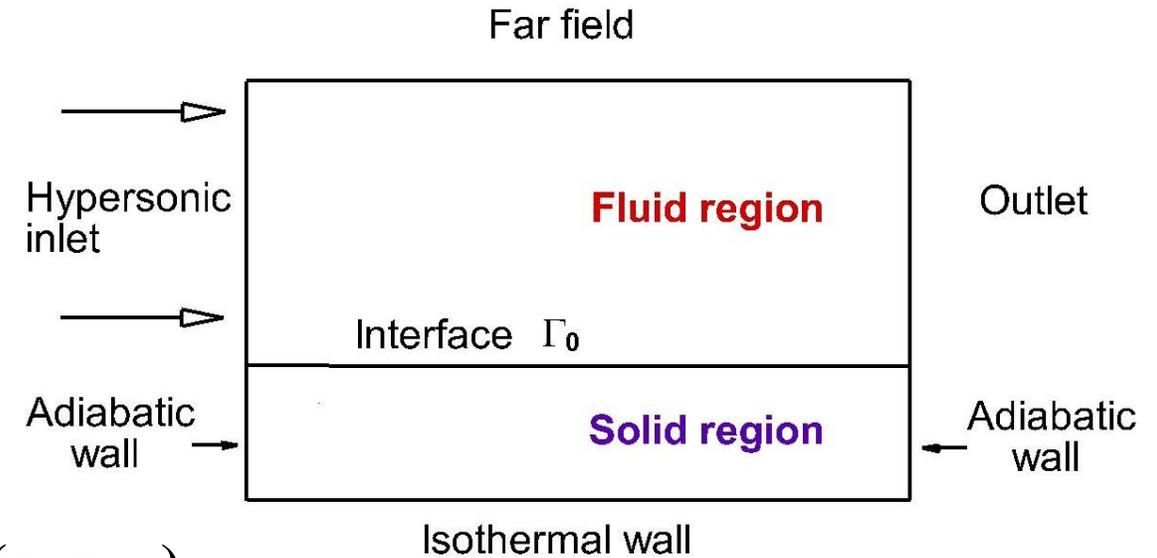
многокомпонентных течений /.

2. Solid region: уравнение теплопроводности

$$c(T) \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T) + f, \quad T = T(t, r), \quad r = (x, y, z)$$

Interface: условия теплообмена (непрерывность температуры и теплового потока)

$$T|_{\Gamma_0^-} = T|_{\Gamma_0^+}, \quad \kappa \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\Gamma_0^-} = \kappa \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\Gamma_0^+}, \quad r \in \Gamma_0$$



Модификация MCFL алгоритма для сквозного **многообластного** расчета уравнения энергии в газе и твердом теле: элегантное решение, благодаря возможностям явно-итерационной схемы LINS.

Возможные подходы к решению задачи сопряженного теплообмена

1. Циклически-последовательный расчет областей 1 и 2 с итерированием краевых условий.

Этап 1. При заданном на границе тепловом потоке в области 1 решается система уравнений Навье-Стокса до установления. Тепловой поток - с предыдущей итерации.

Этап 2. На интерфейсе определяется температура - это краевое условие для уравнения теплопроводности в твердом теле.

Этап 3. В области 2 решается уравнение теплопроводности при заданной на границе температуре.

Этап 4. Расчет теплового потока на интерфейсе по сеточному решению в обл. 2 (твердом теле) .

Если условия теплообмена не выполнены с заданной точностью, то делается переход к этапу 1.

Вопрос об устойчивости этого алгоритма открыт. Для 1D двухобластной задачи на сетке, равномерной в каждой области, необходимое условие устойчивости имеет вид

$$a_1 > a_2, \quad a_1/h_1 > a_2/h_2, \quad \text{где } a_1, a_2, h_1, h_2$$

соответственно коэффициенты температуропроводности и шаги сетки в области 1 и 2.

[1] В.Л. Загускин, В.Е. Кудряшов. О счете уравнений теплопроводности и газовой динамики прогонкой по отдельным областям. //ДАН. 1965. Т. 163(5). С. 1107–110. ВНИИЭФ.

MCFL: Сквозной многоблочный расчет

- Для решения задачи сопряженного теплообмена (СНТ) используем подход без итераций по условиям теплообмена.
- Подход является сквозным расчетом теплопроводности с помощью явно-итерационной схемы LINS для случая многоблочной сетки, **с отдельной обработкой каждого блока и интерфейсов на каждой итерации LINS.**
- Предполагаем, что этап топологической декомпозиции сложной области на блоки произведен и, как минимум, таких блоков два: **газ и твердое тело.**
- В каждом блоке строится неструктурированная или структурированная сетка. Полная сетка по границам блоков состыкована, но граница одного блока может примыкать к нескольким соседним блокам.
- При решении уравнения теплопроводности в многоблочной области **каждая явная итерация схемы LINS в каждом блоке выполняется независимо вплоть до интерфейсных узлов.**
- В интерфейсных узлах обеспечивается выполнение условий теплообмена в процессе обработки парциальных интерфейсных значений.
- Два последних шага обеспечивают эквивалентность сквозному однородному расчету.

Сквозной расчет

1. В газовой области записывается система уравнений Навье-Стокса, включающая уравнение для полной энергии. В твердом теле – уравнение теплопроводности. Дискретизация по пространству – метод конечных объемов: ячейки консервативности – дуальные объемы.

2. В силу схемы расщепления, на шаге по времени дискретное уравнение теплового этапа является аппроксимацией уравнения

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} = \operatorname{div} (\kappa \operatorname{grad} T) + f$$

с правой частью f , учитывающей диссипацию энергии за счет трения и пр.

3. Это уравнение можно рассматривать как единое для газовой и твердой сред. Тогда при принятой консервативной пространственной аппроксимации **условия теплообмена выполняются автоматически.** [См. Самарский, Вабищевич]

Явная схема : счет по областям, разделенным интерфейсом

Интегрируя уравнение теплопроводности по дуальному объему, ассоциированному с узлом сетки, получаем в явную схему

$$\Omega \frac{\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^n}{\tau} = D(T^n) + f \cdot \Omega$$

Используем уравнение состояния в разрешенном относительно температуры виде.

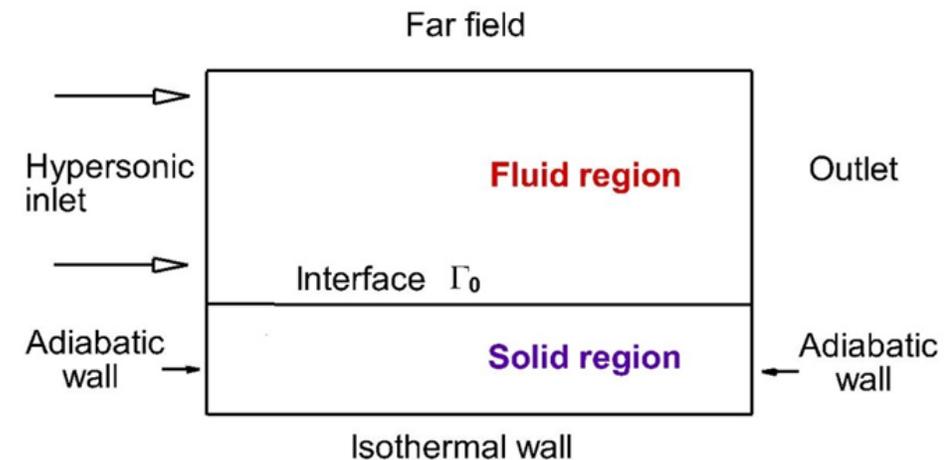
На интерфейсе в узле кратности $l > 1$ имеем

$$\Omega = \sum_{i=1}^l \Omega_i, \quad f = \sum_{i=1}^l f_i, \quad D = \sum_{i=1}^l D_i$$

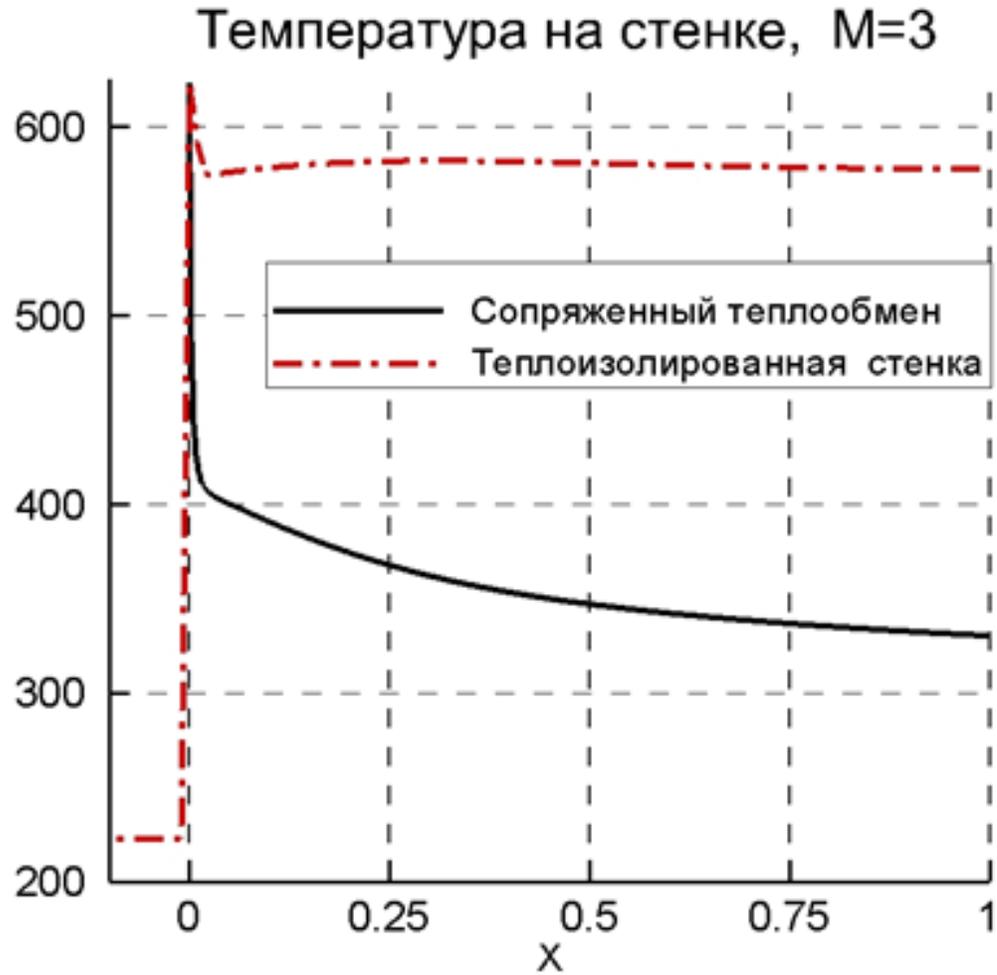
Запишем в каждой области для интерфейсного узла кратности $l > 1$ (т.е. это узел стыковки l областей) результат парциальной дискретизации

$$\Omega_i \frac{\varepsilon_i^{n+1} - \varepsilon_i^n}{\tau} = D_i(T^n) + f_i \cdot \Omega_i, \quad i = 1, \dots, l$$

Коррекция на интерфейсе: $\varepsilon^{n+1} = \sum_{i=1}^{i=l} \gamma_i \varepsilon_i^{n+1}$, $\gamma_i = \Omega_i / \Omega$, $i = 1, \dots, l$



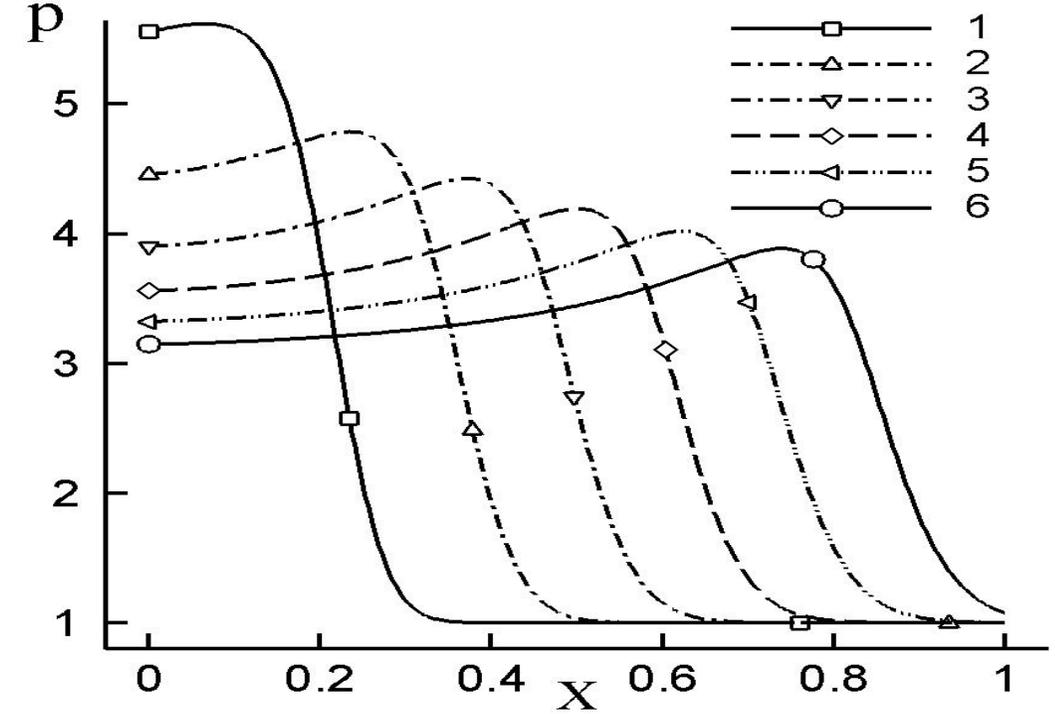
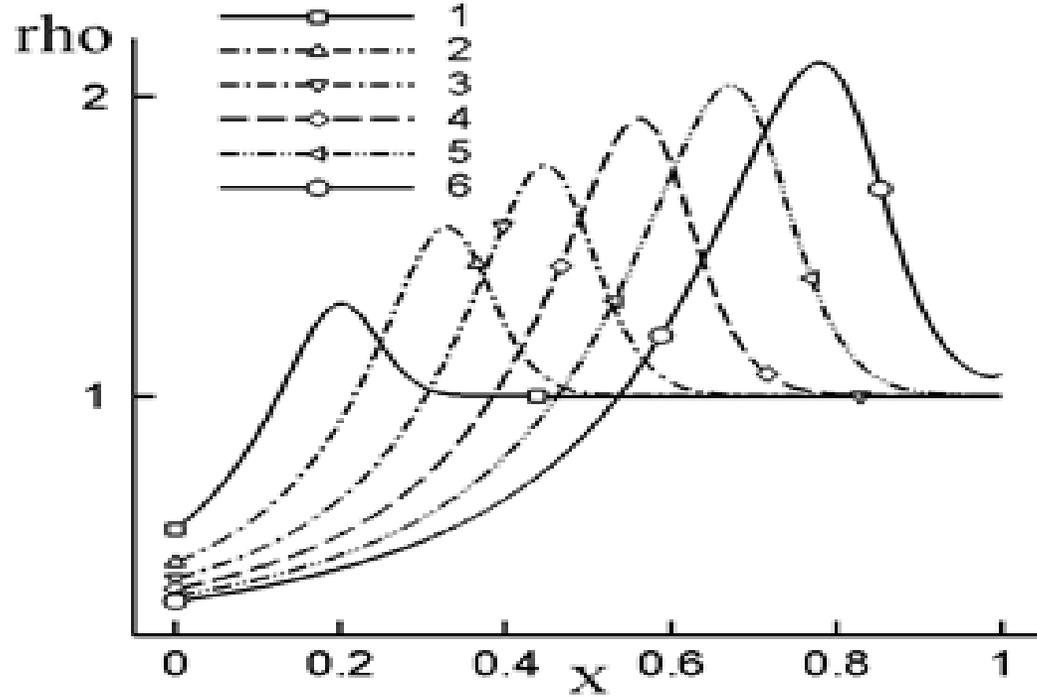
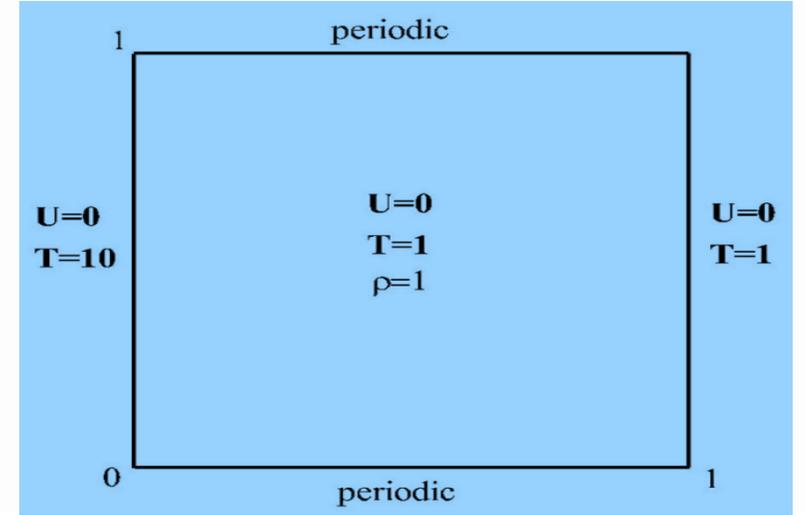
Сверхзвуковое обтекание пластины конечной толщины: $M=3$, $Re=1$ млн



Пластина толщиной $b=1$ см, длиной $L=1$ м



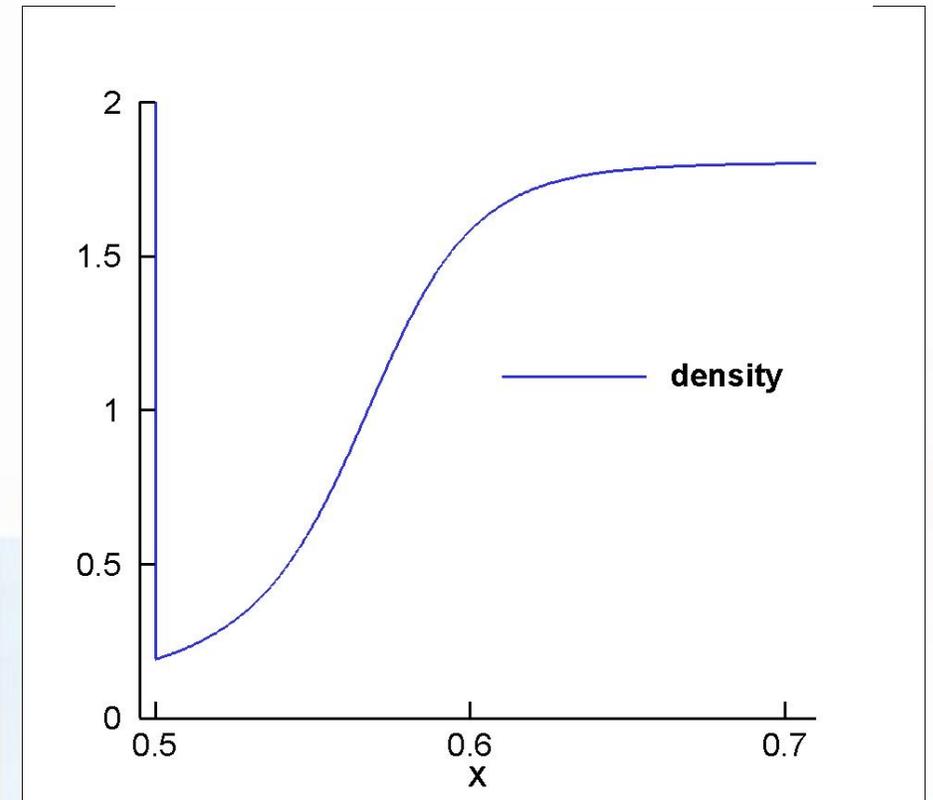
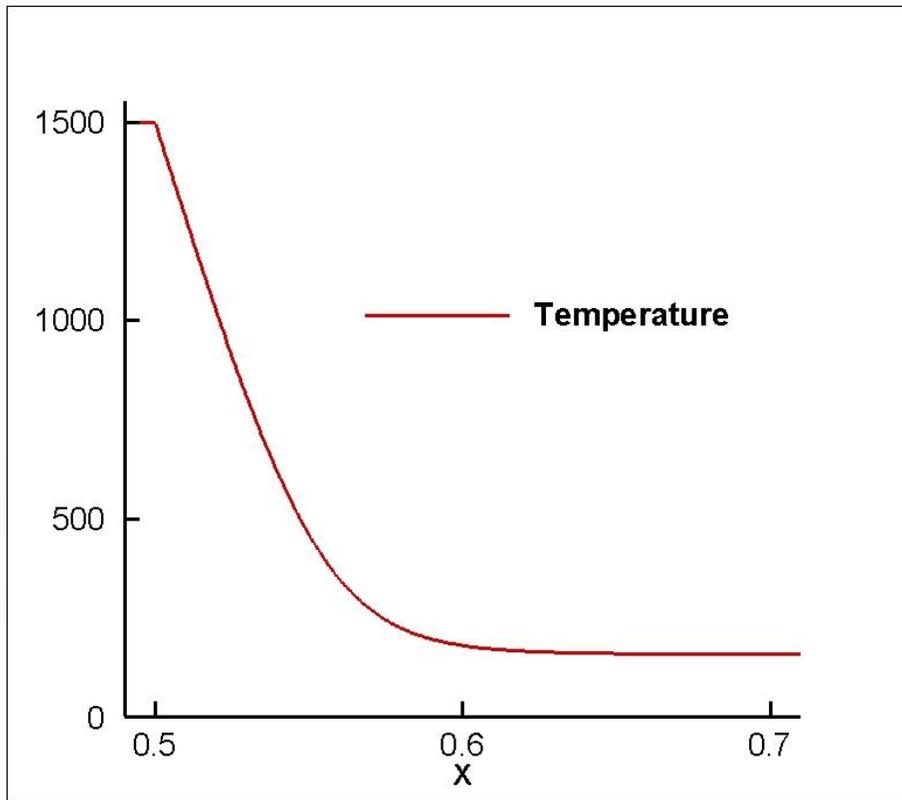
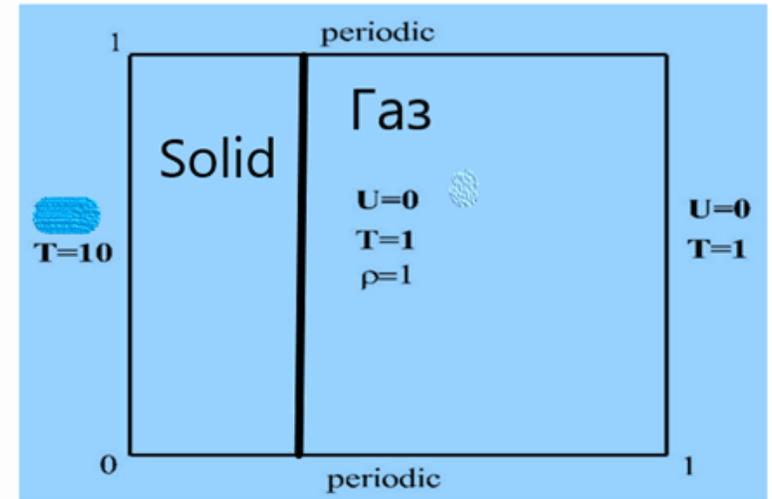
Примера расчетов. NS-Eqns
Расчет 1. Тепловая конвекция:
(Полежаев В.И.)



Динамика плотности (слева) и давления (справа)

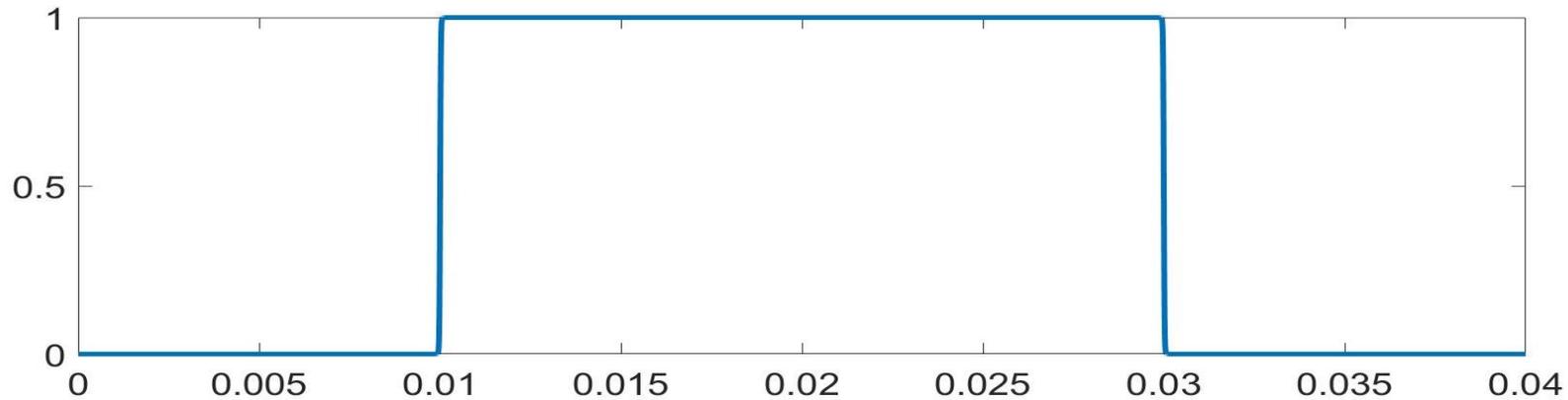
Смесь идеальных газов. Сопряженный теплообмен + Тепловая конвекция.
Стационарное состояние:

$$u = 0, \quad p = R\rho T = const$$



Стационарное состояние: температура (слева) и плотность (справа)

Акустические волны на диффузионной границе двух газов (кислород – водород)

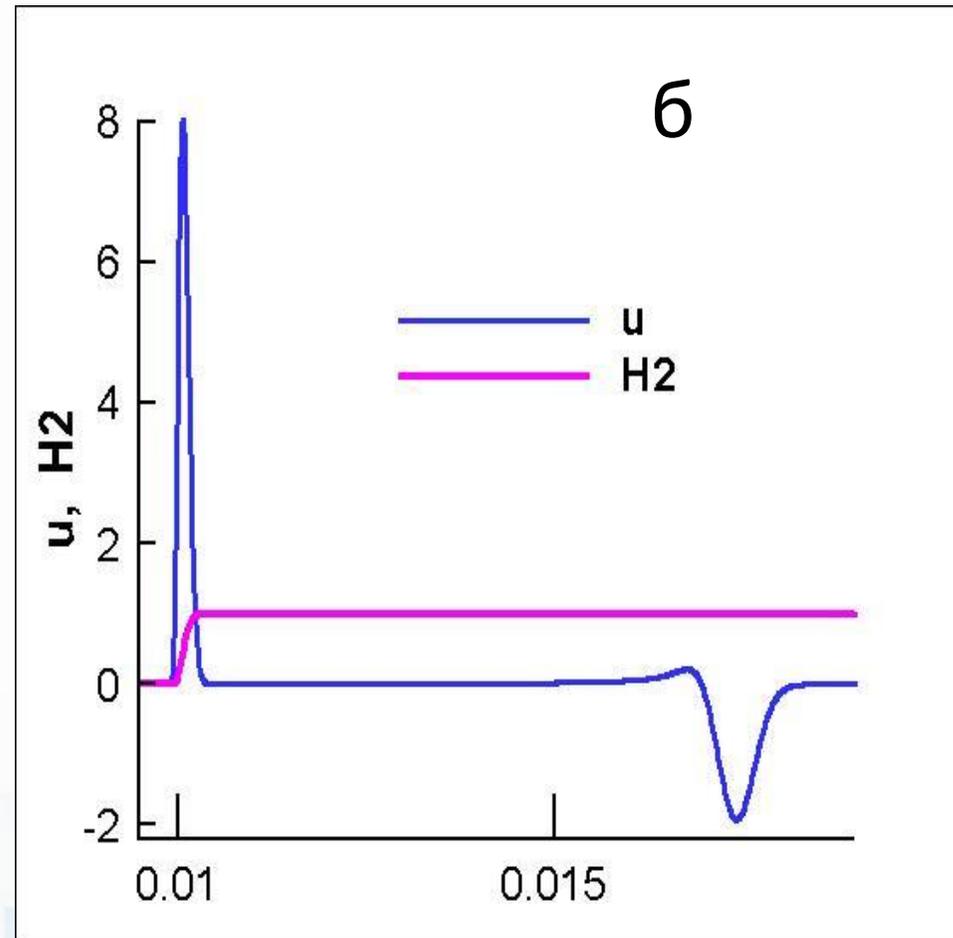
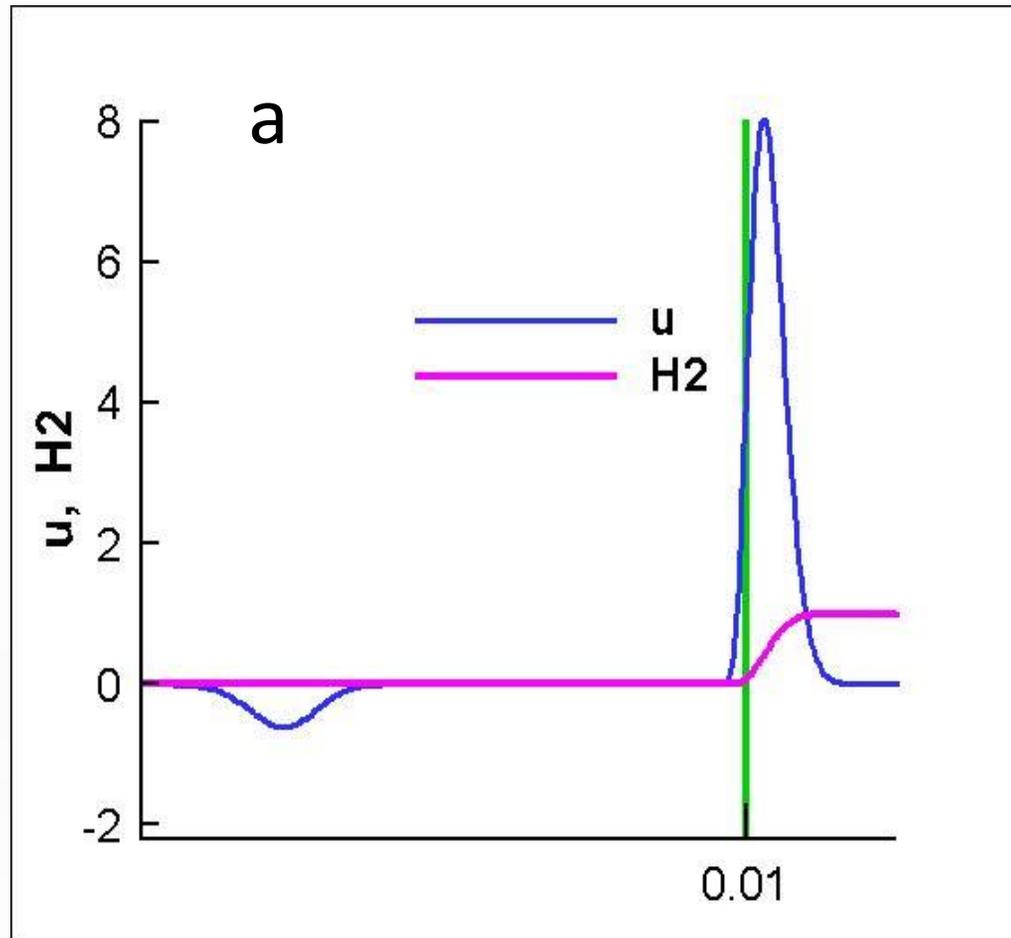


$p_0 = 1$ атм, $T_0 = 850$ К, скорости звука: O_2 - 550 м/с, H_2 - 2200 м/с

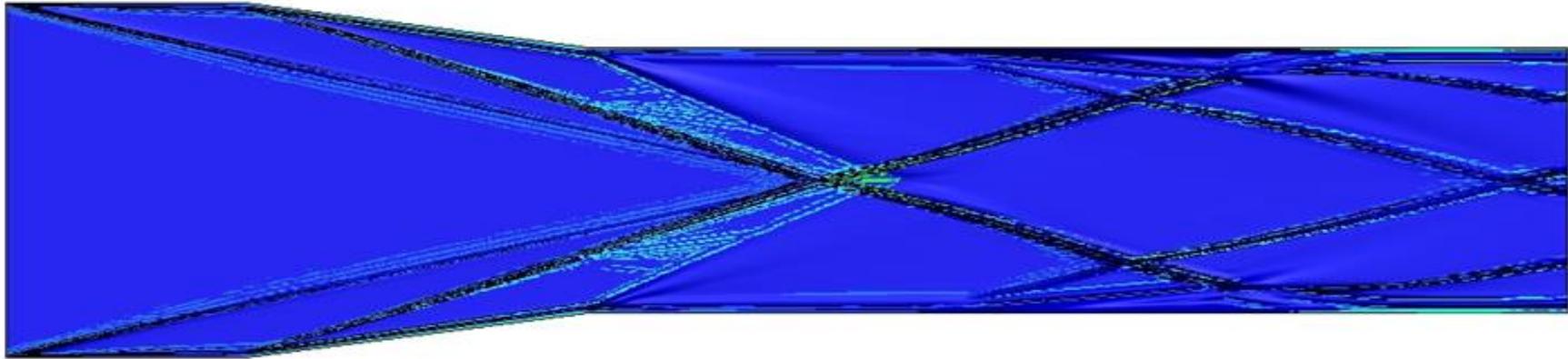
Скорость и концентрация водорода:

а) левая волна и зона смешения

б) правая волна и зона смешения



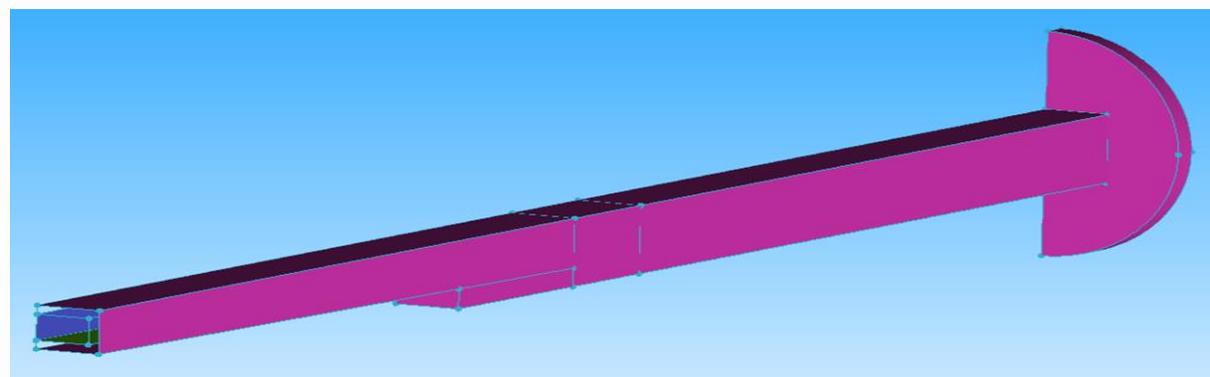
Сверхзвуковое высокотемпературное течение в канале
(Башкин В.А., Егоров И.В. ЦАГИ.) NS Eqns



Шлирен плотности

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

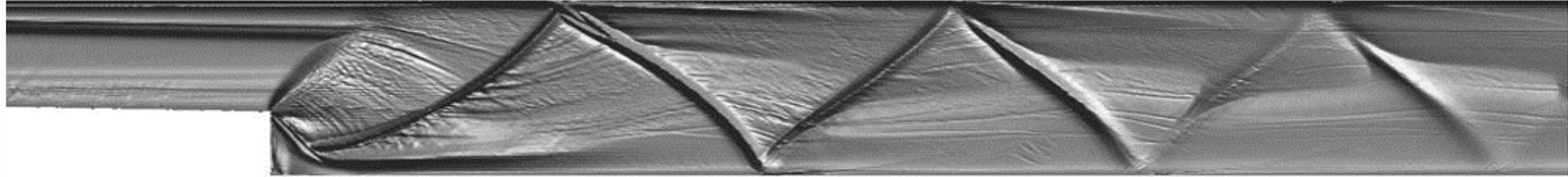
Камера сгорания ЦАГИ: автоколебательные режимы горения (В.В. Власенко и др.)



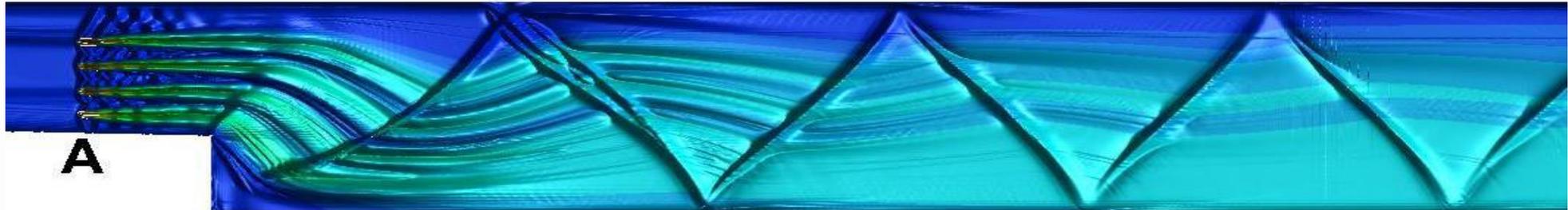
А – зона впрыска топлива; В – пневмодрессель

Коэффициент избытка окислителя $\alpha_1 = 1.34$ $\alpha_2 = 1.99$ $\alpha_3 = 2.45$

Расход керосина $G_1 \approx 1.315$ $G_2 \approx 0.886$ $G_3 \approx 0.719$



Поле градиента плотности. Идеальный газ



Массовая доля топлива. Многокомпонентный газ

Совпадение картины течения с расчетами по OpenFOAM.

Заключение

Основные особенности кода MCFL численного интегрирования на основе схемы явных итераций LINS

- Конвективные процессы реализуются явной схемой с шагом $\tau_{\text{conv}} \sim h$.
- Диссипативные процессы (вязкие, теплопроводные, диффузия компонентов) реализуются явно-итерационной схемой LINS с тем же шагом τ_{conv} .
- Эффективный шаг схемы LINS $\tau \sim O(h^{3/2})$ ослабляет диффузионное ограничение явной схемы $O(h^2)$.
- *Сквозной многообластной алгоритм обеспечивает расчет сопряженного теплообмена системы "газ – твердое тело".*
- Алгоритмическая структура эффективна в параллельной реализации на массивно-параллельных компьютерах гибридной архитектуры.
- Код MCFL функционирует в параллельном режиме на CPU-кластере и сейчас переносится на GPU
- *В процессе разработки :*
 - 1) *Расчет течений с горением*
 - 2) *Деформация границ*

- 1. В. Т. Жуков, Н. Д. Новикова, О. Б. Феодоритова. Об одном подходе к интегрированию по времени системы уравнений Навье–Стокса // ЖВМ и МФ, 2020, том 60, № 2, с. 267–280**
- 2. Жуков В. Т. О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // Матем. мод. 2010. Т. 22. № 10. С. 127–158**
- 3. MacNamara, Shev & Strang, Gilbert. (2016). Operator Splitting.**
- 4. Марчук Г.И. Методы расщепления. М.: Наука, 1988.**
- 5. Абалакин И. В., Бахвалов П. А., Горобец А. И., Дубень А. П., Козубская Т.К. Параллельный программный комплекс NOISEtte для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики. Вычисл. методы и программирование. 2012. Т. 13. С.110–125.**

Спасибо за внимание !