

CFD Weekend-2023, 9–10 декабря 2023



Комплекс программ SINF/Flag-S и опыт его применения для моделирования подлёдной радиационно-генерированной конвекции

Смирнов Е.М., Смирновский А.А., Колесник Е.В., Бабич Е.В.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ)

Физико-Механический Институт

Высшая школа прикладной математики и вычислительной физики

Комплекс программ SINF (Supersonic to INcompressible Flows) разрабатывается с 1993 г.

Цели и задачи

- Освоение и реализация современных методов и технологий вычислительной гидродинамики.
Подготовка кадров, основательно владеющих соответствующими знаниями и навыками
- Проведение фундаментальных исследований
- Решение задач промышленной гидрогазодинамики и теплообмена

Разработчики

- Сотрудники, аспиранты и студенты **кафедры «Гидроаэродинамика, горение и теплообмен»** СПбПУ (ныне в составе Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики)

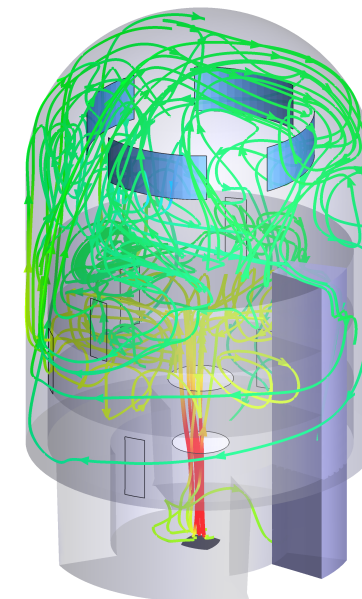
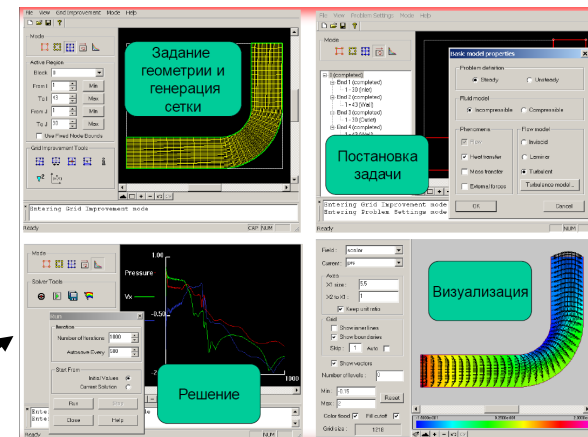
Результаты по подготовке кадров

- 10 кандидатских, 1 докторская и более 20 магистерских диссертаций, непосредственно связанных с разработкой базовых версий и ответвлений

Комплекс программ SINF: основные составляющие

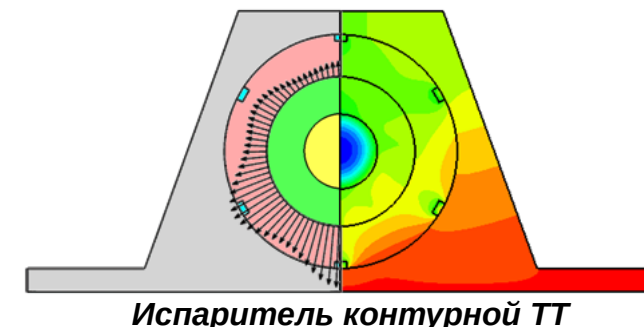
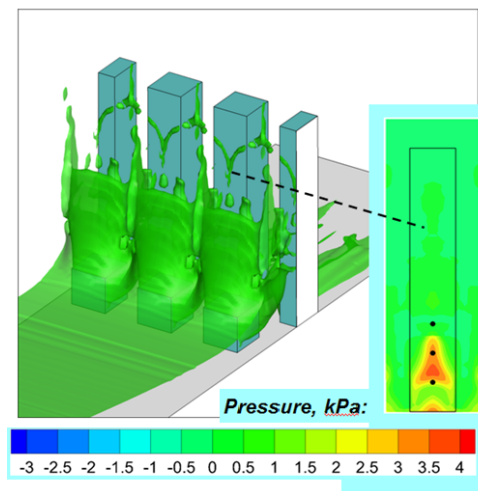
Блочнo-структурированные сетки

- Базовый расчетный код **SINF** (3D Навье-Стокс, газ/жидкость; 1992-2010)
- Специализированные коды/версии:
 - Интегрированный учебный пакет **FLOS** (*Flow Studio*; 2003- наст. вр.)
 - **ПГС-ТК** (многокомпонентная парогазовая смесь, равновесная объёмная и плёночная конденсация и др.; для СПб АЭП, 2009-2012)



Неструктурированные (полиэдральные) сетки

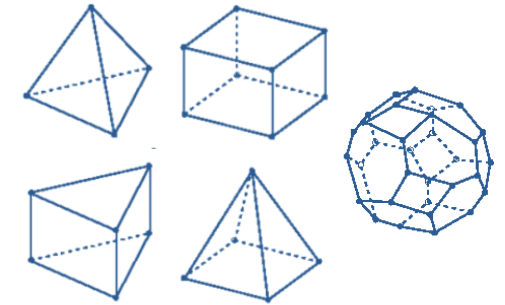
- Базовый код **SINF/Flag-S** (2005-наст.вр.)
- Специализированные коды:
 - **Flag-FS** (течения со свободной поверхностью; 2009-2014, *внутренний*)
 - **ТЕМБР** (жидкие металлы; для ГК Росатом, 2012-2013)
 - **СКАТ³** (сопряженный 3D тепломассоперенос в тепловых трубах (ТТ), для Роскосмос-а, 2014-2015)



Код SINF/Flag-S

Основные характеристики

- **Flag-S: Fluids and gases** — **S**imulations
- Разрабатывается с 2005 г. по настоящее время
- Языки программирования: Fortran-90, C
- Метод конечных объемов (объемно-центрированный подход)
- Неструктурированные многоблочные сетки с ячейками произвольной топологии
- Регулярная стыковка на межблочных границах
- Параллелизация на основе MPI, для декомпозиции сетки используется библиотека Metis



Классы задач, решаемых с использованием кода SINF/Flag-S

- Ламинарные и турбулентные течения жидкости
- Задачи сопряженного теплообмена, процессы испарения и конденсации на границах раздела сред
- Течения со свободной поверхностью (метод Volume of Fluid)
- Течения и теплообмен в пористых средах
- Высокоскоростные течения газа
- Теплообмен при вынужденной, свободной и смешанной конвекции в полях массовых сил

Комплекс программ SINF/Flag-S

Расчет течений несжимаемой жидкости (слабосжимаемого газа)

- SIMPLE-подобные алгоритмы
- Метод Роджерса-Квака
- «Безытерационный» алгоритм из класса методов дробных шагов
- Схемы расчета конвективных потоков:

First order upwind, Second order upwind, QUICK, Central Difference 2-nd, 4-th order

- Линейный солвер

CG, BiCGStab, GMRES, Geometric Multi Grid, предобуславливатели SGS, ILU, IC

Расчет течений сжимаемого газа в широком диапазоне чисел Маха на основе единого подхода

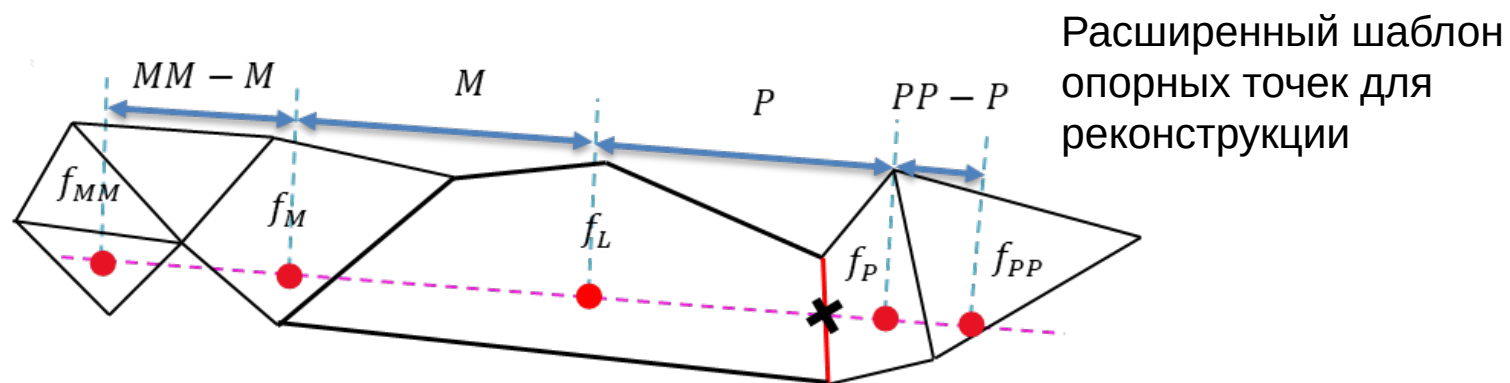
- Неявная схема
- Схемы расчета конвективных невязких потоков:
Godunov, ROE, HLL, HLLC, AUSM (AUSM+, AUSM+up, AUSMD, SLAU)
- MUSCL подход, схемы второго порядка точности
TVD схемы, скалярные ограничители
- Способы подавления карбункул-неустойчивости
искусственная вязкость, гибридные схемы
- Регуляризация системы уравнений динамики сжимаемого газа на основе метода Turkel

Развитие кода SINF/Flag-S в 2022-2023 гг.

- Разработка составляющих для реализации гибридного 3D/1D подхода при решении связанных задач гидроаэроупругости, возникающих при обтекании удлинённых тел
- Модификация базовых модулей кода для обеспечения возможности расчётов с использованием уравнений состояния реального газа
- Реализация и тестирование схем повышенной точности с квазиодномерной реконструкцией переменных для расчёта высокоскоростных течений
- Тестовые и кросс-верификационные расчёты различных течений с использованием кодов открытого доступа
- Доработка кода в целях его применения для моделирования подлёдной радиационно-генерированной конвекции

Тестирование схем повышенной точности с квазиодномерной реконструкцией переменных на «задаче Родионова»

- Схемы второго порядка точности с применением ограничителей
- Схемы с квазиодномерной реконструкцией переменных повышенной точности (до 5 – го порядка на равномерных сетках)

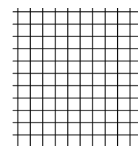


- Тестировавшиеся схемы расчета невязких потоков (ограничитель van Albada):

ROE, Godunov, AUSM(+), AUSM+up, AUSMD, SLAU, HLL, HLLC

- Высокоточная схема для расчета задач с разрывами (**WENO-5**)*
- Набор сгущающихся последовательных сеток с квадратными ячейками

Размер ячейки h	1/200	1/400	1/500	1/600
-------------------	-------	-------	-------	-------



* П. А. Бахвалов, Т. К. Козубская, “Схема EBR-WENO для решения задач газовой динамики с разрывами на неструктурированных сетках”, Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2017, 023, 32 с.

Взаимодействие изоэнтропического вихря с плоской ударной волной

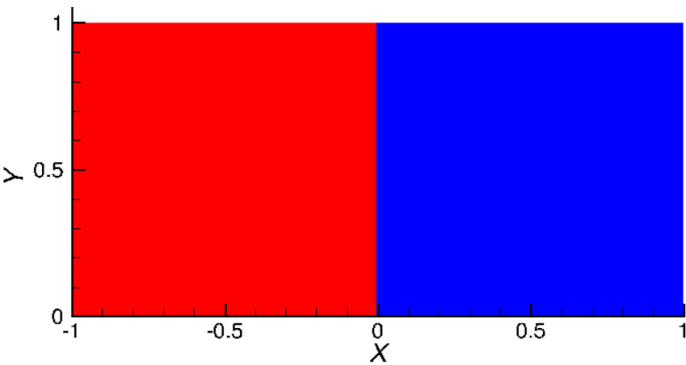
Верификационная задача, предложенная А.В. Родионовым (РФЯЦ-ВНИИЭФ) на Девятой российской конференции «Вычислительный эксперимент в аэроакустике и аэродинамике»

(<https://ceaa.imamod.ru/vandv.html>)

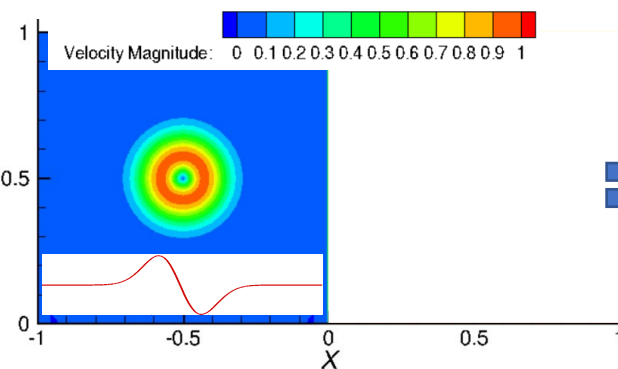
Начальный момент времени $t = 0$

Стационарная ударная волна

($M_s = 3$)



Изоэнтропический вихрь в левой части ($M_v = 0.8$)



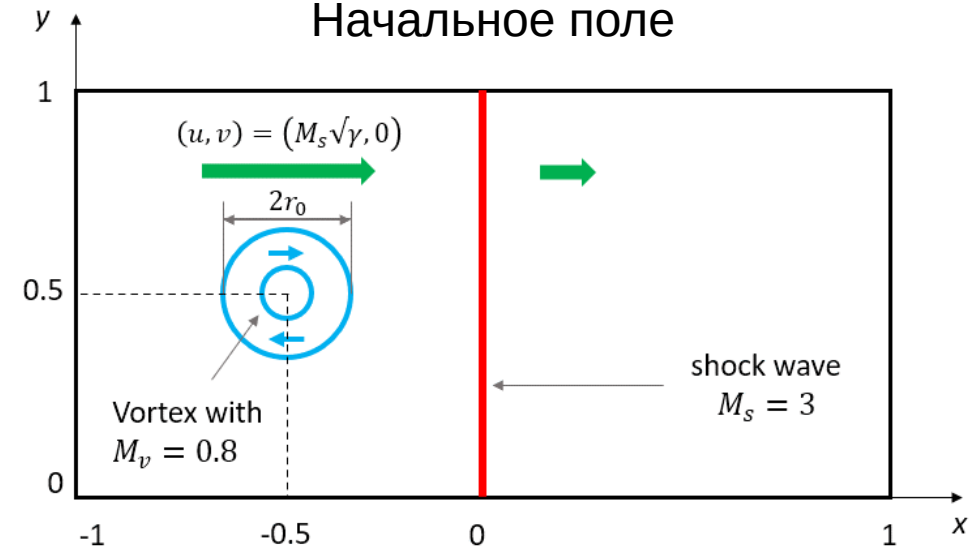
Профиль скорости вихря:

$$V(r) = V_m \left(\frac{r}{r_0} \right) \exp \left\{ \frac{1 - (r/r_0)^2}{2} \right\}$$

$r_0 = 0.075$ – эффективный радиус вихря

$$M_v = V_m / c$$

Начальное поле



$$p_1 = 1 \quad p_2 = 10.3$$

$$\rho_1 = 1 \quad \rho_2 = 3.86$$

$$u_1 = 3.55 \quad u_2 = 0.92$$

Граничные условия

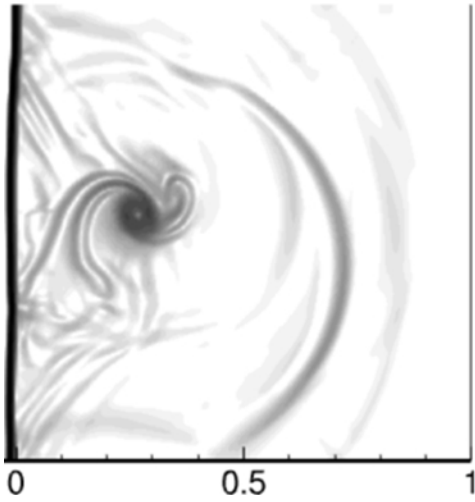
Левая граница: сверхзвуковой вход

Правая граница: дозвуковой выход

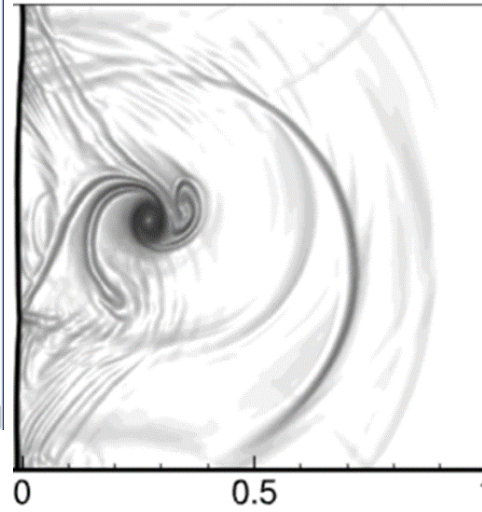
Верхняя и нижняя границы: симметрия

Сеточная сходимость

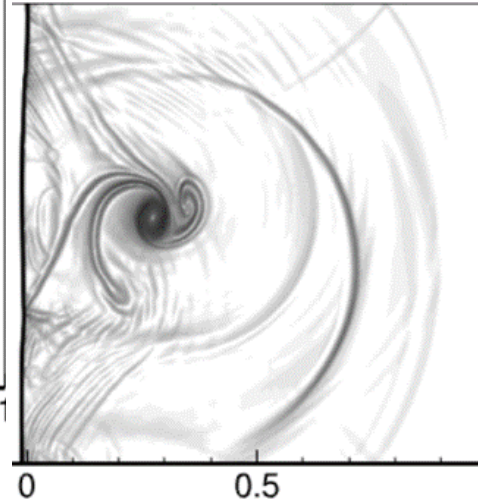
$h = 1/200$



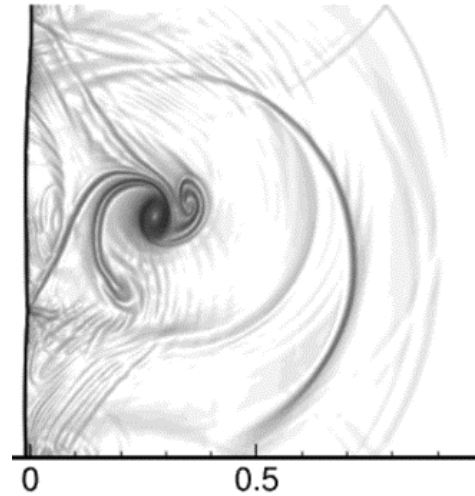
$h = 1/400$



$h = 1/500$

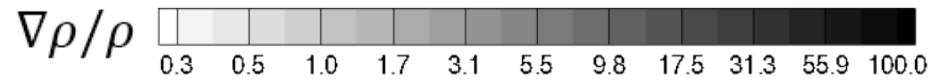
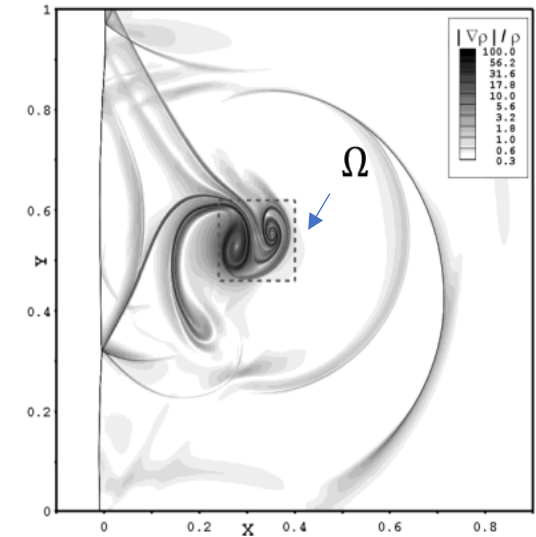


$h = 1/600$



Расчёты проведены по схеме TVD-2 AUSM

Решение
А.В. Родионова
 $h = 1/7200$
(104 млн ячеек)



Расчёты по схемам второго порядка на сетке с $h=1/200$

Схема	Ошибка, %
Roe	5.597
HLLC	5.704
Godunov	5.785
AUSMD	6.055
AUSM+	6.103
AUSM+up	6.194
AUSM	6.222
HLL	6.526
SLAU	6.785

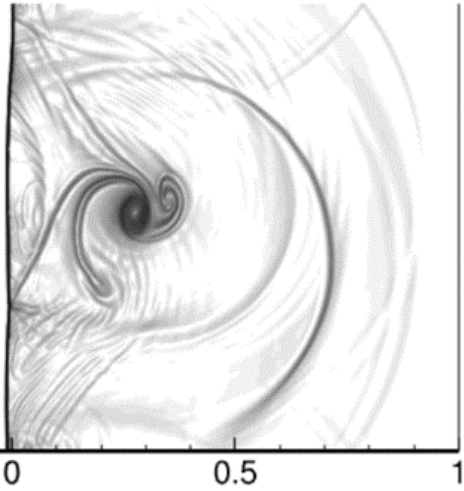
Интегральная ошибка в области Ω :

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{\sum_{i=i_1}^{i_2} \sum_{j=j_1}^{j_2} (\rho_{i,j} - \rho_{i,j}^{ref})^2}{(i_2 - i_1)(j_2 - j_1)}} \times \frac{100\%}{\rho_2}$$

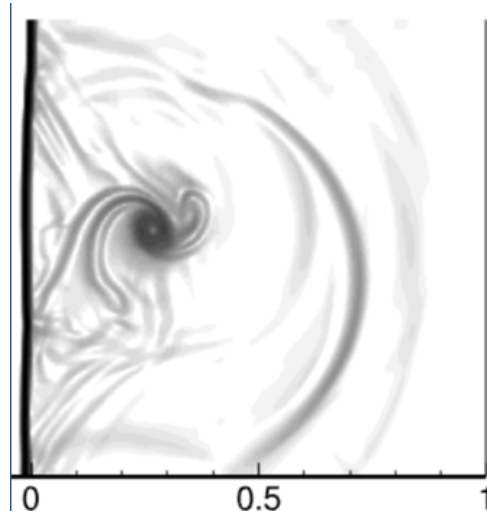
$\rho_{i,j}^{ref}$ - решение на сетке 600 x 1200

Расчёты по WENO-схемам

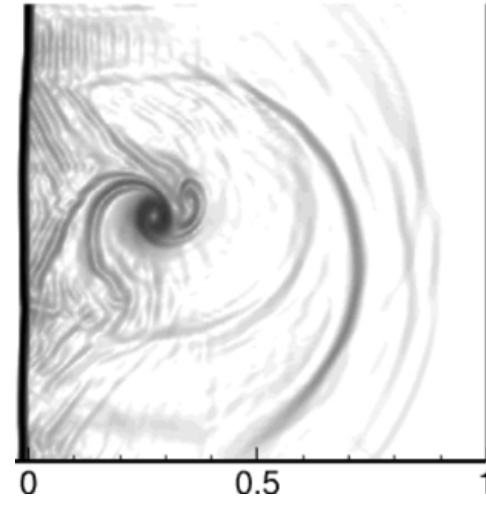
AUSM, $h = 1/600$, ref.



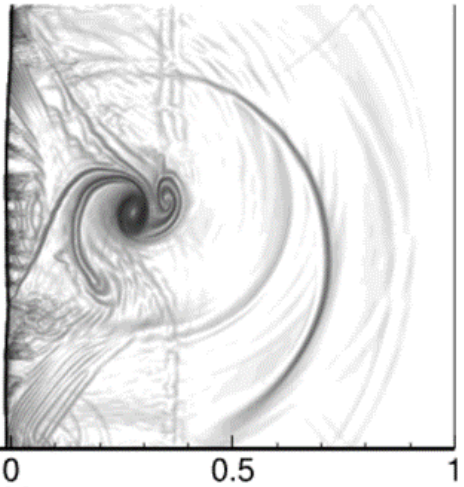
AUSM, $h = 1/200$



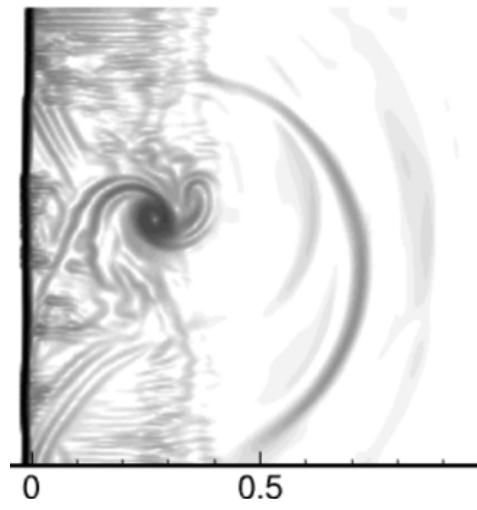
WENO AUSM, $h = 1/200$



Roe, $h = 1/600$, ref.



Roe, $h = 1/200$



WENO Roe, $h = 1/200$

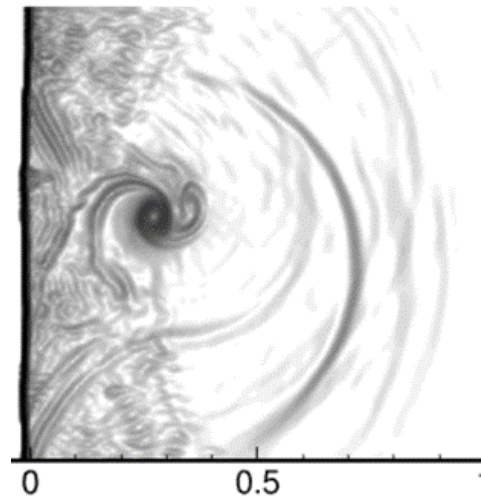
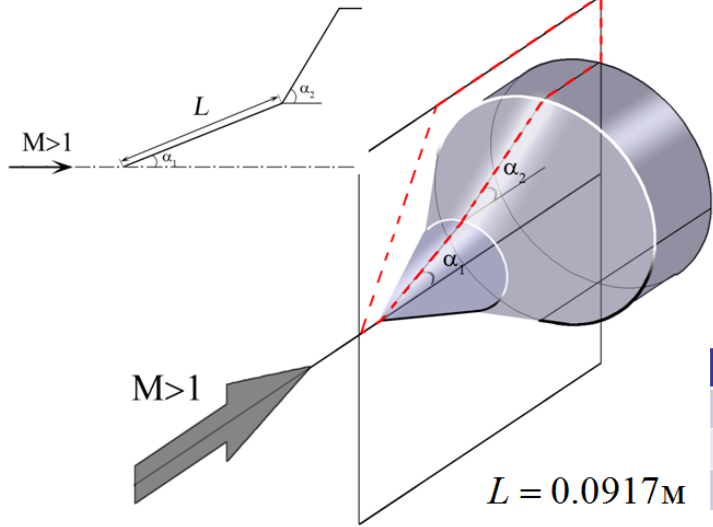


Схема	Ошибка, %
TVD-2 AUSM	6.222
WENO AUSM	3.246
TVD-2 Roe	5.597
WENO Roe	2.321

Кросс-верификационные расчёты “SINF/Flag-S vs. Open codes” для задачи сверхзвукового обтекания двойного конуса вязким газом

Код Eilmer	Код OpenFOAM	Код SU2
Queensland (Australia)	Great Britain	Stanford (USA), Delft (Netherlands), etc.
D	C++	C++, Python
Высокоскоростные течения	Широкое назначение	Ориентированность на высокоскоростные течения
Метод конечных объёмов		
Структурированные и неструктурированные сетки	Неструктурированные сетки	Неструктурированные сетки
Riemann solver schemes: AUSMDV , HLLE, ROE	Kurganov-Tadmor scheme	Riemann solver schemes: ROE, AUSM , HLLC
Схемы второго порядка точности, ограничители:		
Barth	van Albada	Venkatakrishnan-Wang
OpenMP и MPI	MPI	MPI

Постановка задачи



Определяющие параметры: $M_\infty = 12.5$

$Re[l/m] = 2.05 \cdot 10^4$ $T_w/T_\infty = 2.9$

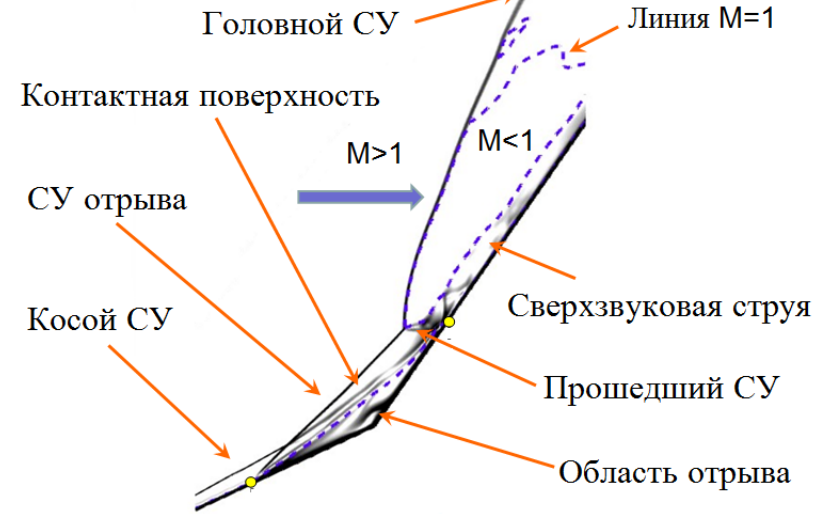
Рабочий газ: азот $Pr = 0.7$ $\gamma = 1.4$

Параметры расчетных сеток

№ сетки	Число ячеек	Δ_1 , мм
Mesh 1	64x128	0.023
Mesh 2	128x256	0.011
Mesh 3	256x512	0.005

- уравнения Навье-Стокса
- совершенный газ
- закон Сазерленда для вязкости

*СУ – скачок уплотнения

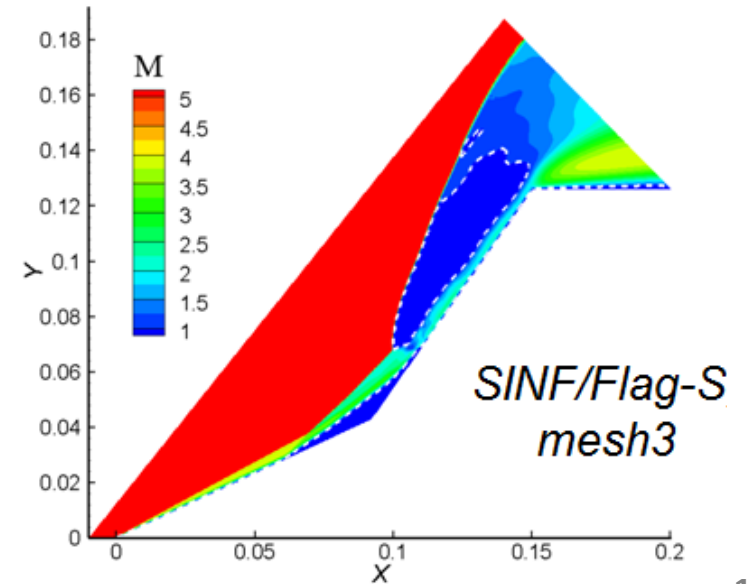
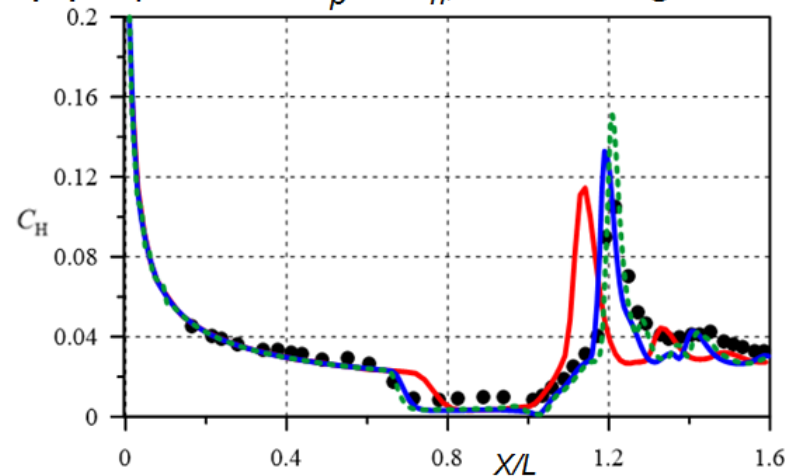
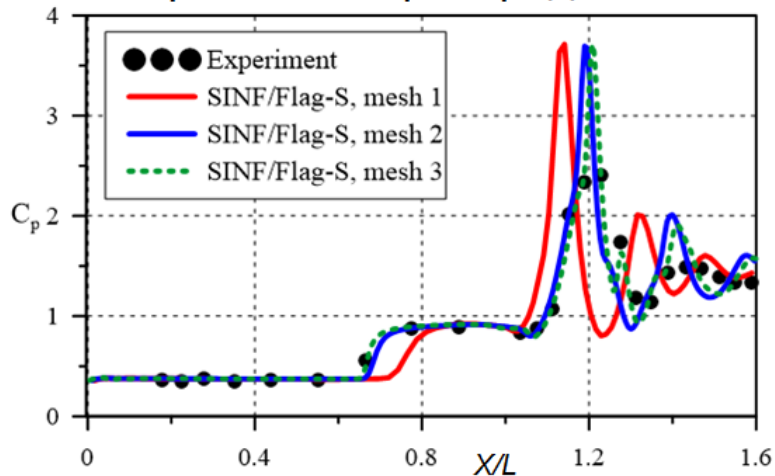


$$C_p = \frac{p - p_\infty}{0.5 \rho_\infty V_\infty^2}$$

$$C_h = \frac{q_{wall}}{0.5 \rho_\infty V_\infty^3}$$

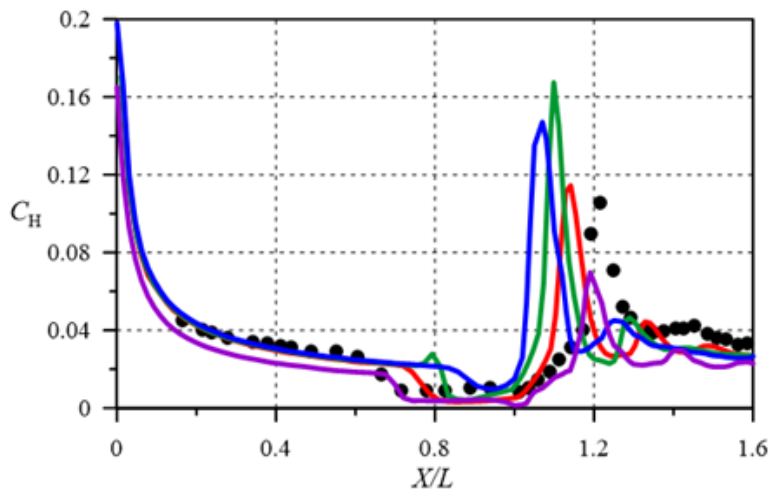
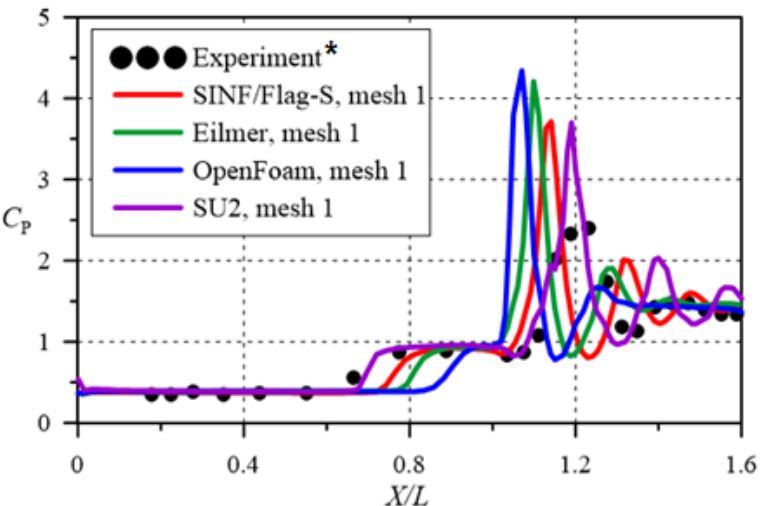
Сеточная сходимость

Поверхностные распределения коэффициентов C_p и C_h , SINF/Flag-S

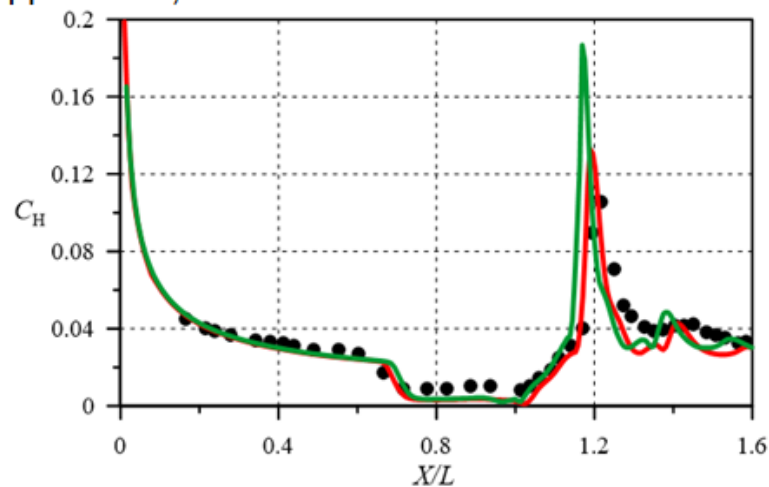
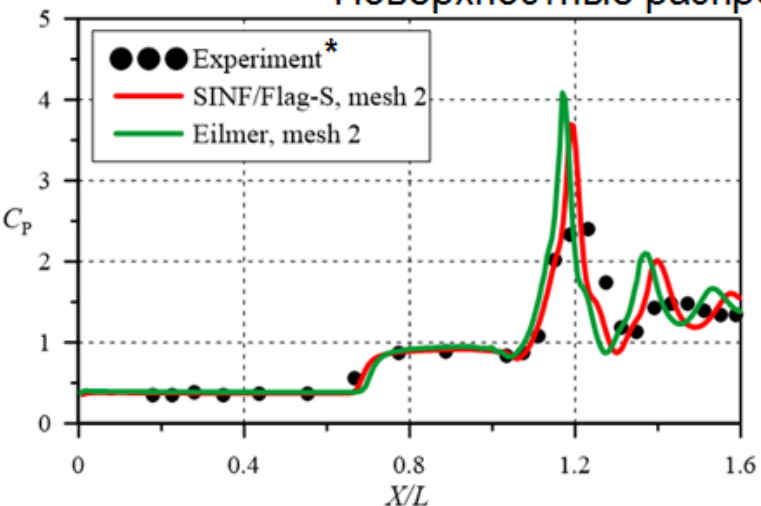


Результаты, полученные с использованием разных кодов

Поверхностные распределения, сетка mesh1



Поверхностные распределения, сетка mesh2



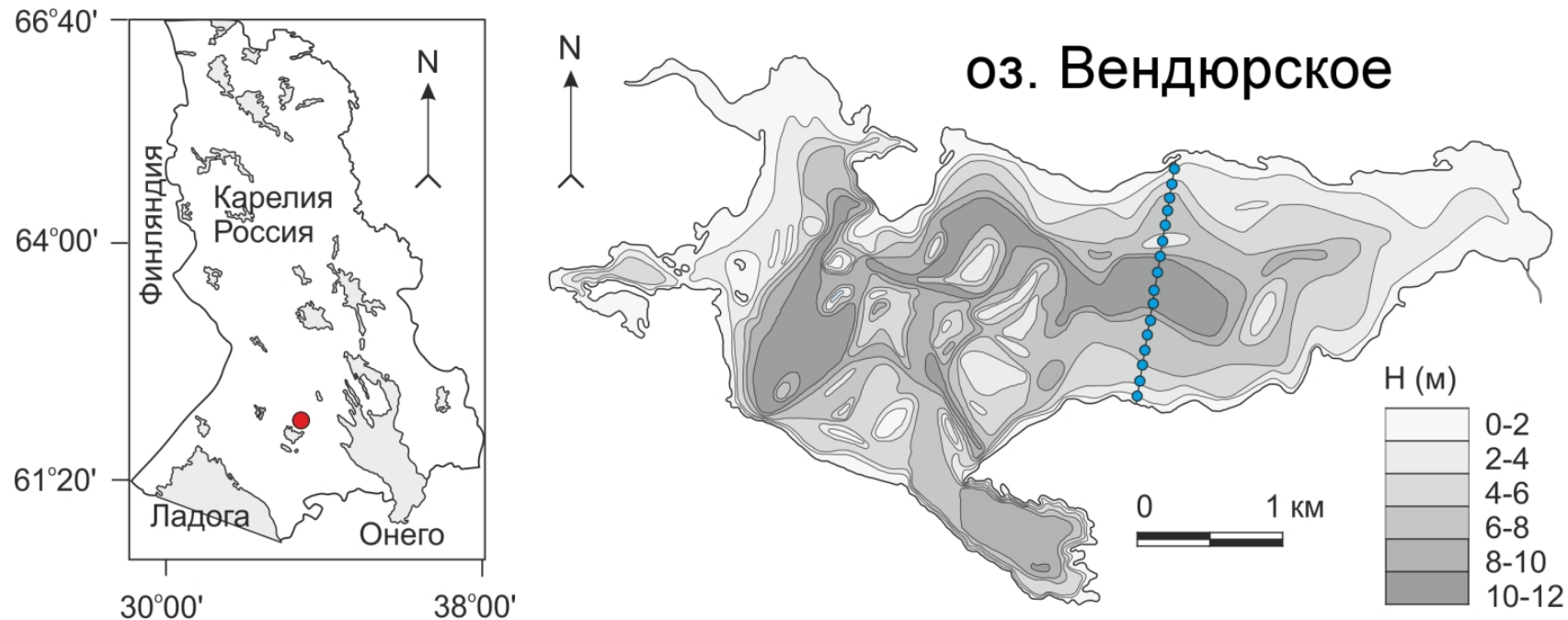
*MacLean M., Holden M., 2004 (CUBRC, Run#35a)

- Для задачи обтекания двойного конуса при $M = 12.54$ характерна высокая чувствительность расчётного теплового потока на лобовой части, а также длины отрывной зоны, к пространственному разрешению.
- Результаты, полученные с использованием различных CFD-кодов, проявляют особенности, связанные, в том числе, с выбором численной схемы.
- В частности, излишняя диссипативность схемы в коде OpenFOAM приводит к существенному занижению размера зоны отрыва, а низкая диссипативность схемы в коде SU2 делает решение на подробной сетке неустойчивым.
- **Наиболее адекватное разрешение структуры вязко-невязкого взаимодействия и наилучшее совпадение с экспериментальными данными удаётся получить при использовании кодов SIN/Flag-S и Eilmer.**

Моделирование подлёдной радиационно-генерированной конвекции

Исследование подлёдной конвекции в озёрах

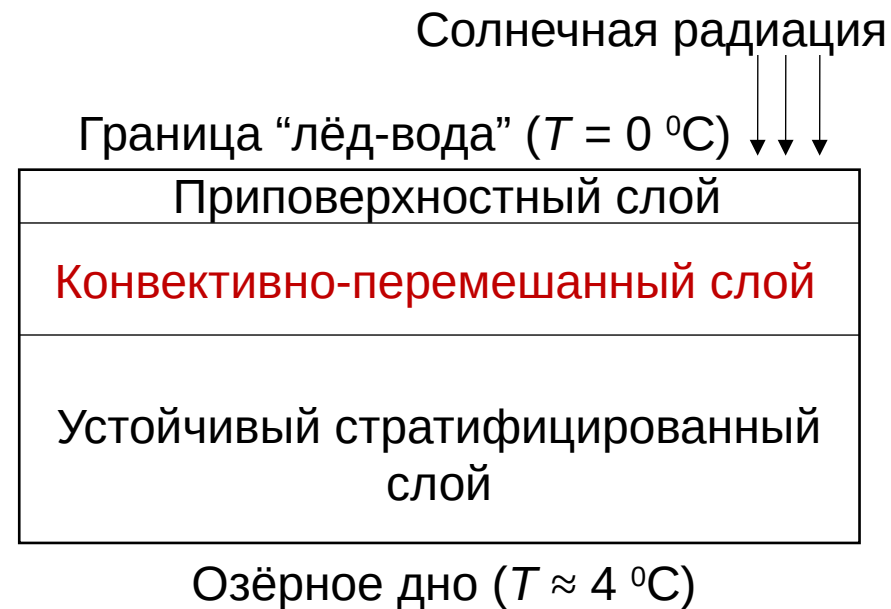
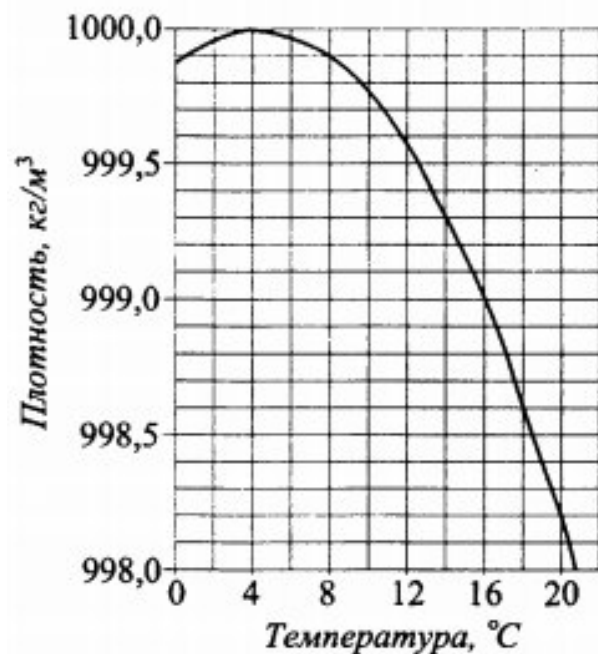
- Особенности турбулентного теплопереноса в стратифицированных средах при периодическом неоднородном объёмном нагреве представляют большой практический и фундаментальный интерес. Подобные явления имеют место в геофизических средах, например, в покрытых льдом озёрах весной, где механизмы и эффективность смешения водных масс оказывают влияние на химические и биологические процессы.
- На протяжении многих десятилетий сотрудники Института водных проблем Севера Карельского научного центра РАН (г. Петрозаводск) проводят натурные наблюдения в озёрах в различные сезоны, в т.ч. в весенний период, когда озёра в основном покрыты льдом, а конвективное движение вызвано радиационным прогревом толщи воды подо льдом.



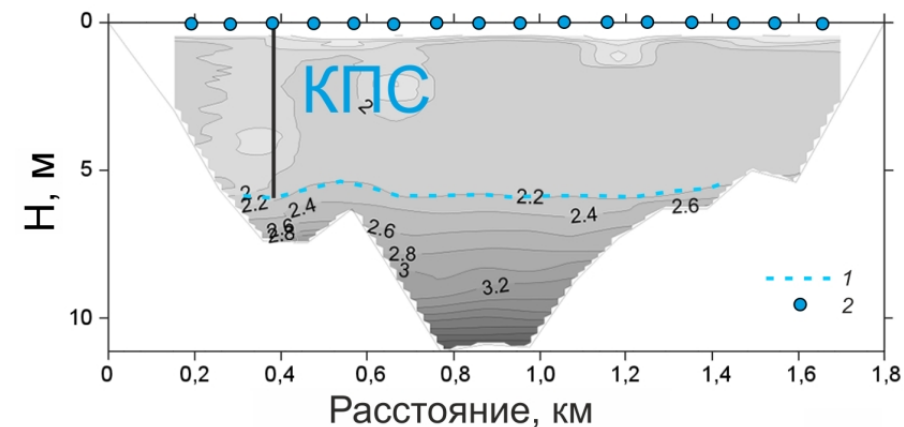
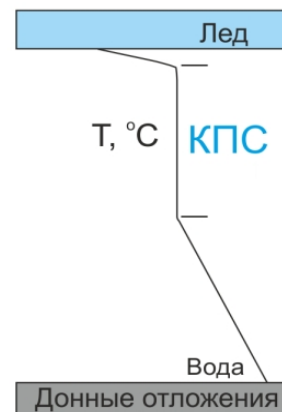
Возникновение подлёдной конвекции

Плотность чистой воды

Temperature °C	Density kg/m ³
0 (ice)	917.00
0	999.82
1	999.89
2	999.94
3	999.98
4	1000.00
5	1000.00
6	999.99
7	999.96



Солнечная радиация приводит к увеличению плотности воды, что в свою очередь ведёт к гравитационной неустойчивости, которая вызывает конвективное перемешивание



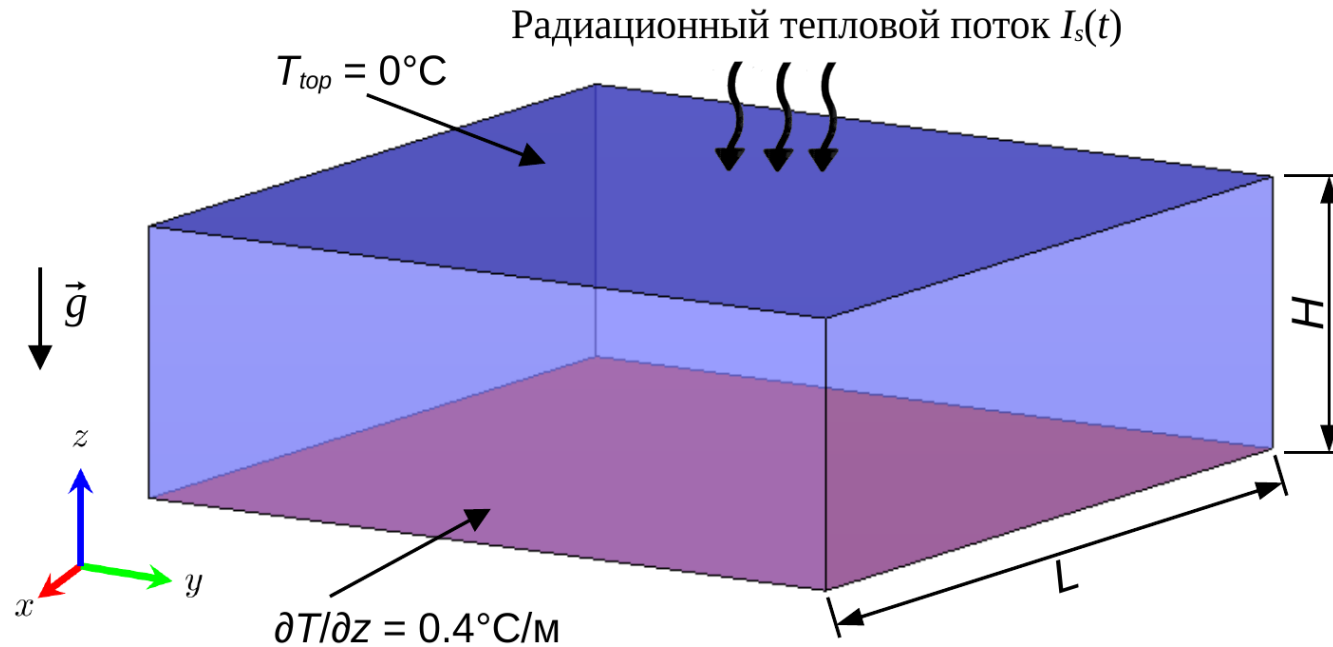
Исследование подлёдной конвекции

- Грант РФФ «Перемешивание в бореальных озерах: механизмы и их эффективность» (2021-2023).
- Цели и задачи исследований:
 - изучение механизмов и эффективности перемешивания водных масс;
 - исследование динамики температурных профилей, эволюции термоклина, перемешивания глубинных стратифицированных слоёв.
- Эти процессы играют важную роль в описании взаимодействия атмосферы и водных масс, приобретают особое значение в контексте предполагаемых изменений климата. В лимнологии это важно для изучения функционирования биоты, интенсивности эмиссии парниковых газов, а также при прогнозировании динамики эвтрофикации бореальных озёр.

Задачи численного моделирования

- Проведение расчётов в модельных постановках с учётом основных особенностей моделируемых явлений (турбулентная конвекция в поле силы тяжести в результате объёмного радиационного нагрева).
- Исследование и анализ возникающих турбулентных структур, расчёт динамики конвективно перемешанного слоя.
- Сравнение результатов расчётов с экспериментальными (натурными) данными.

Модельная задача радиационно-генерированной подлёдной конвекции



Постановка задачи основывалась на данных для озера Вендюрское (Карелия)

- Геометрия расчётной области: $19.2 \times 19.2 \times 6.4 \text{ м}^3$ и $9.6 \times 9.6 \times 6.4 \text{ м}^3$
- Уравнения Навье-Стокса для несжимаемой жидкости с учётом плавучести в приближении Буссинеска
- Теплофизические параметры жидкости: чистая вода при 2°C , коэффициент температурного расширения задаётся как линейная функция температуры
- Начальные поля соответствуют состоянию равновесия: скорость равна нулю, для температуры задан линейный профиль
- На боковых поверхностях – условия периодичности

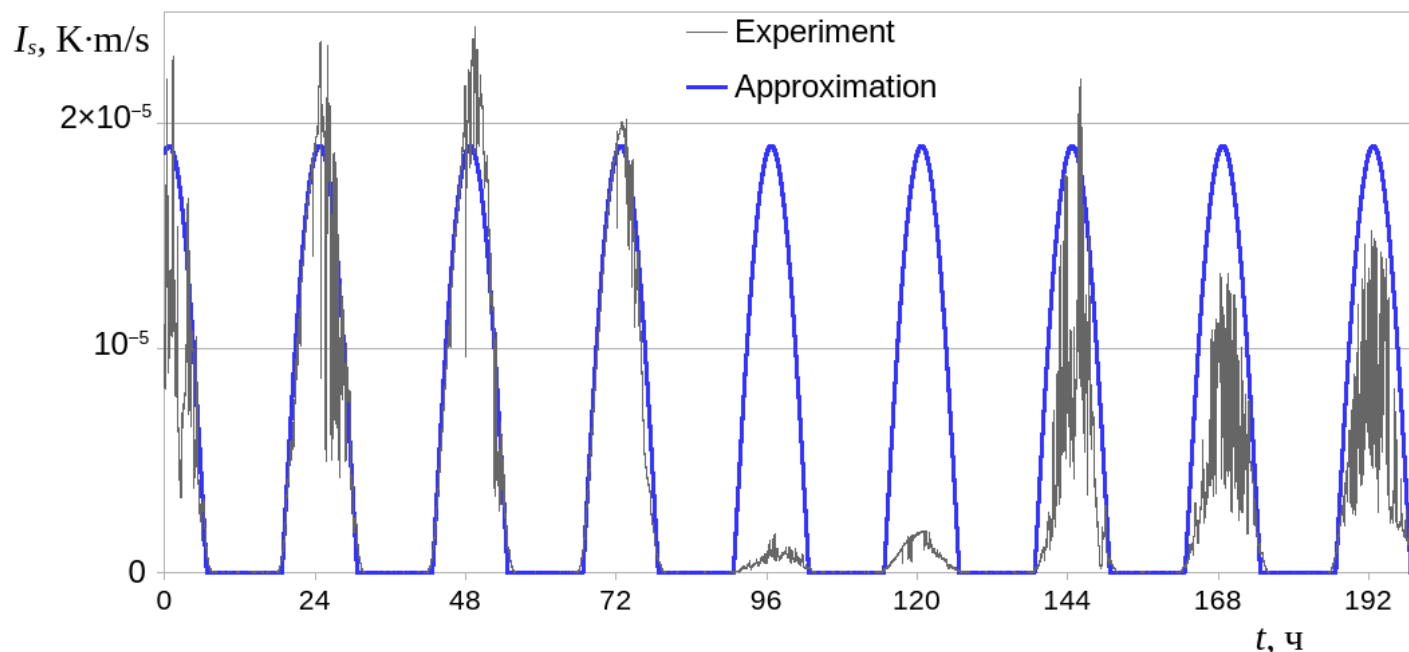
Модель объёмного радиационного нагрева

Используется двух-полосная модель объёмного поглощения радиации:

$$I(z, t) = I_s(t)[a_1 \exp(-\gamma_1 z) + a_2 \exp(-\gamma_2 z)]$$

Лучистый тепловой поток на границе «лёд-вода» I_s задаётся периодической функцией на основе экспериментальных данных (измерения на оз. Вендюрское в весенний период 2020 г.)

$$I_s(t) = I_0 \max(\sin(2\pi t/T), 0)$$



$$T = 24 \text{ ч}$$

$$I_0 = 1.9 \cdot 10^{-5} \text{ K} \cdot \text{m}/\text{с}$$

$$\gamma_1 = 0.7 \text{ м}^{-1}, \gamma_2 = 2.7 \text{ м}^{-1}$$

$$a_1 = a_2 = 0.5$$

Модификации кода и вычислительные аспекты

Математическая модель

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0$$

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \beta(T_0 - T) \vec{g} + \nu \nabla^2 \vec{V}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) T = a \nabla^2 T + \frac{\partial I}{\partial z}$$

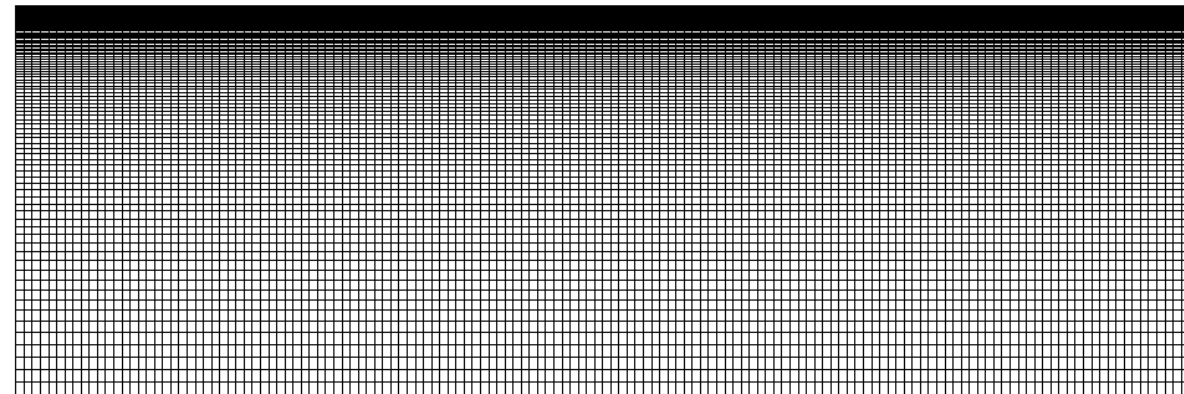
- Implicit LES подход
- Алгоритм SIMPLEC
- Схема QUICK для конвективных слагаемых
- Структурированная расчётная сетка, сгущённая к поверхности льда
- Основная серия расчётов проведена на сетке 27 млн ячеек

Модификации кода

- Учёт зависимости $\beta(T) = b_1(T - T_{md})$
- Учёт в силе плавучести начального профиля $T_0(y)$
- Объёмный источник в уравнении энергии

Обработка данных

- Запись мгновенных профилей температуры по глубине в нескольких точках в каждый момент времени
- Осреднение полей за 1 час (по аналогии с экспериментами)



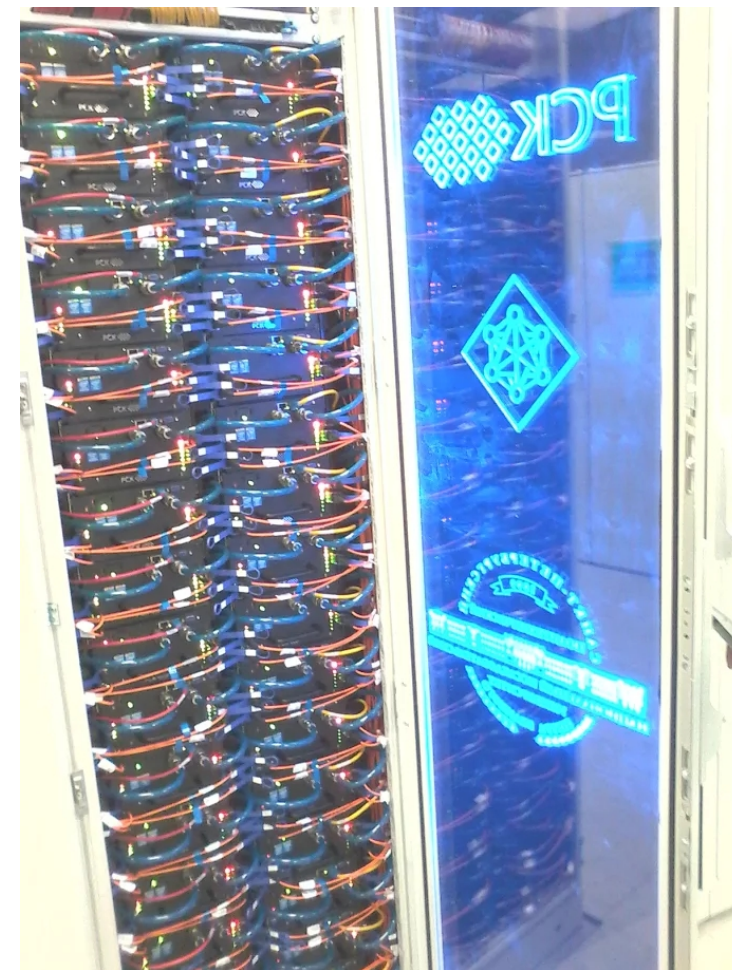
Вычислительные аспекты

Расчёты проводились с использованием ресурсов СКЦ «Политехнический»

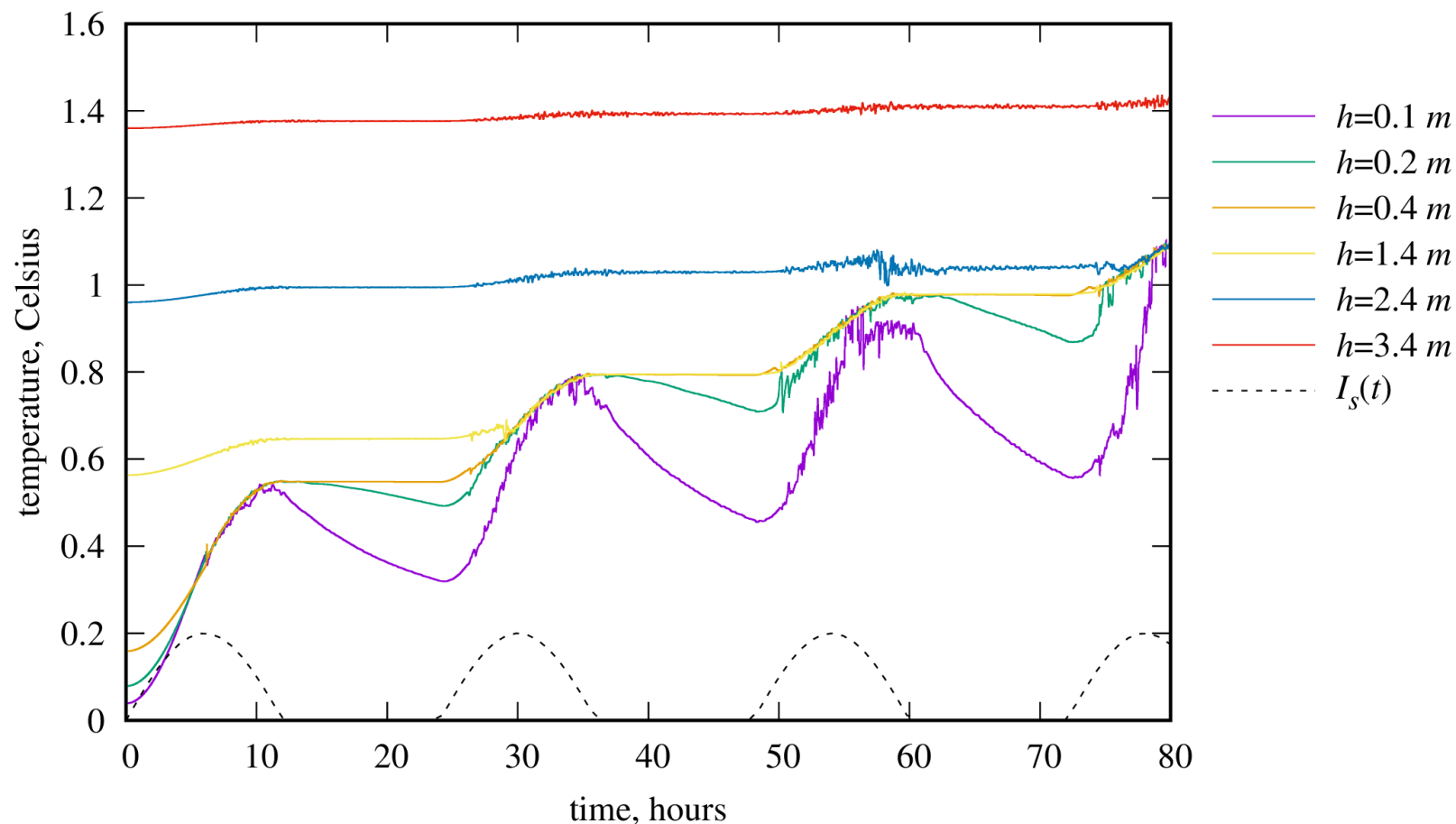
- СКЦ располагает высокопроизводительными вычислительными системами разной архитектуры с общей пиковой производительностью более 1.2 Пфлопс.
- Для расчётов использовался кластер «Политехник – РСК Торнадо», содержащий 668 узлов с двумя процессорами Intel Xeon E5 2697 v3 на узле. Общее число ядер «Политехник – РСК Торнадо» составляет 18704.
- Узлы кластера объединены высокоскоростной сетью InfiniBand FDR; управление данными и их хранение – распределенная файловая система Lustre и система хранения ёмкостью 1.1 Пбайт.

Сетка 27 млн ячеек, шаг по времени 2.5 с, 10 итераций на шаг:

- расчёт одного дня подлёдной конвекции на 16 узлах кластера занимает около 9 дней;
- рассчитывались различные варианты, максимальное число рассчитанных дней – 9;
- требуемое место на диске для одного варианта ~0.5 Тб.

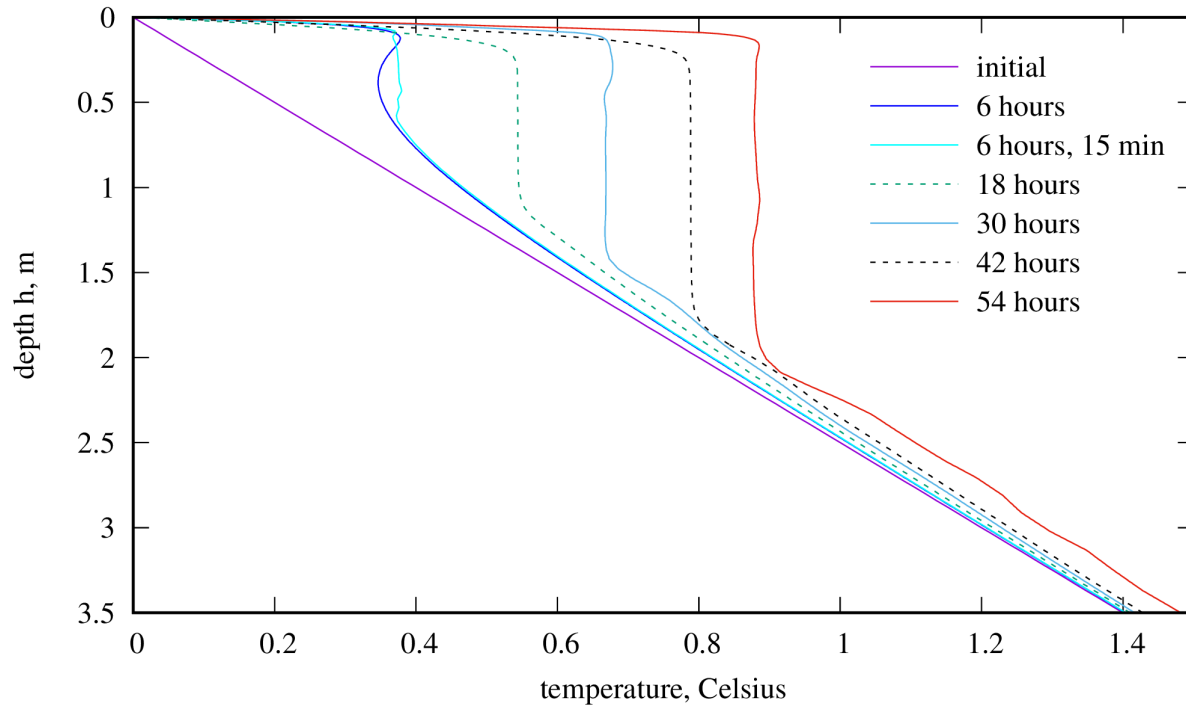


Динамика температуры на разных глубинах

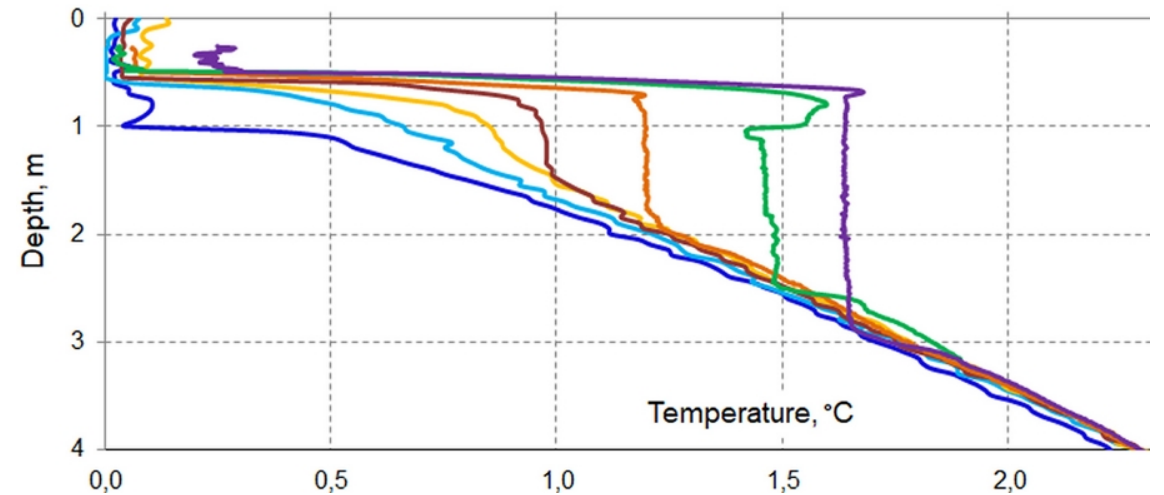


- В первые несколько часов прилёдный слой прогревается, и в мгновение ока возникает конвективное движение из-за гравитационной неустойчивости.
- Когда радиации нет (ночной период), вода остывает, конвективное движение практически прекращается.
- На следующий день процесс эволюции конвективно-перемешанного слоя возобновляется из-за радиационного нагрева, цикл повторяется.

Температурные профили в разные моменты времени



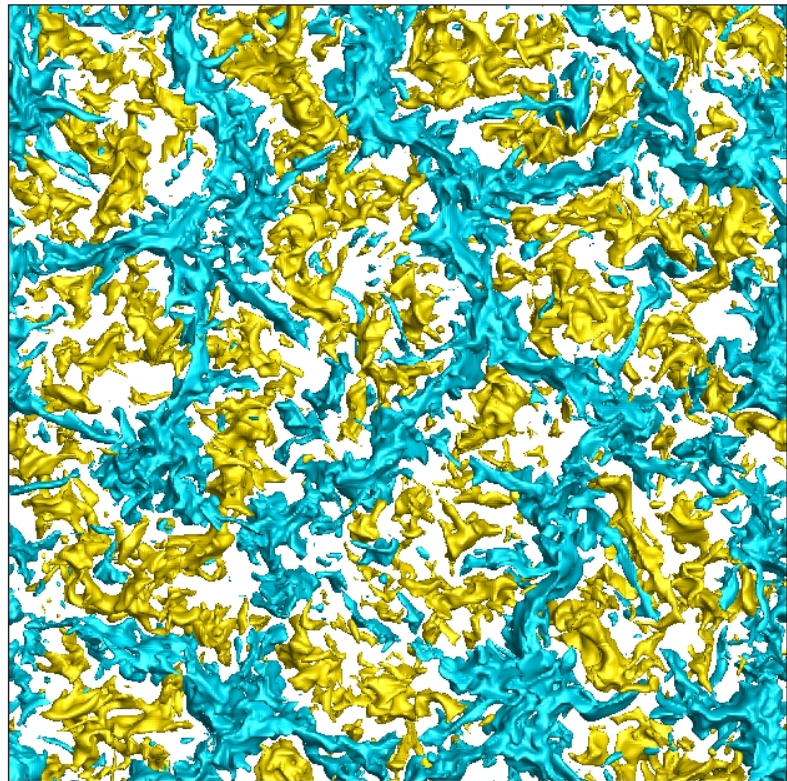
Скорость роста конвективно-перемешанного слоя качественно и количественно согласуется с экспериментальными наблюдениями



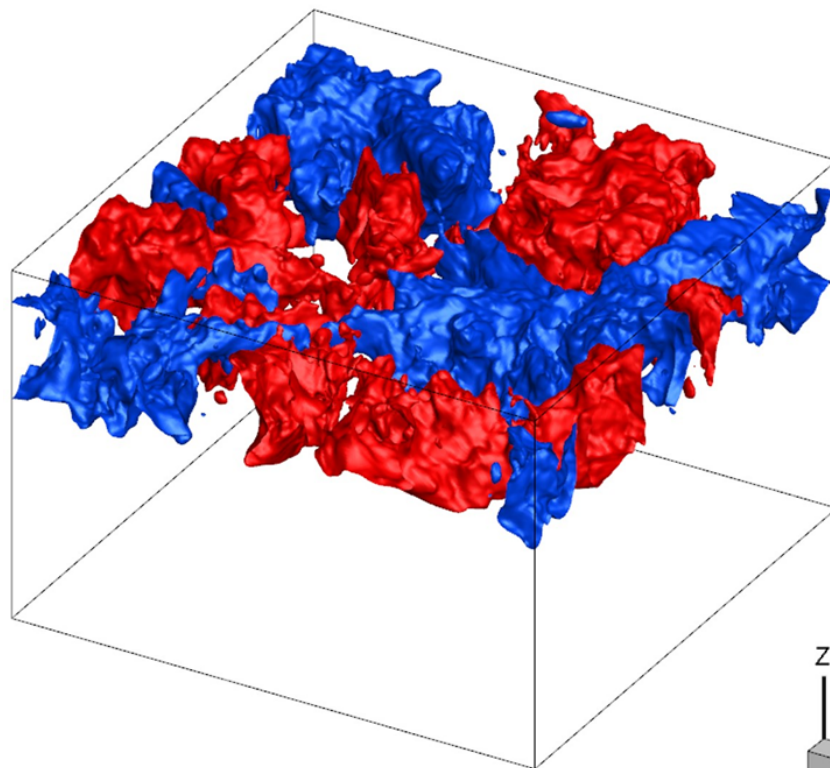
Bogdanov S., et al Deriving of Turbulent Stresses in a Convectively Mixed Layer in a Shallow Lake Under Ice by Coupling Two ADCPs // *Fundamentalnaya i Prikladnaya Gidrofizika*. 2021, 14, 2, 17–28.

Визуализация конвективных ячеек (изоповерхности средней вертикальной скорости)

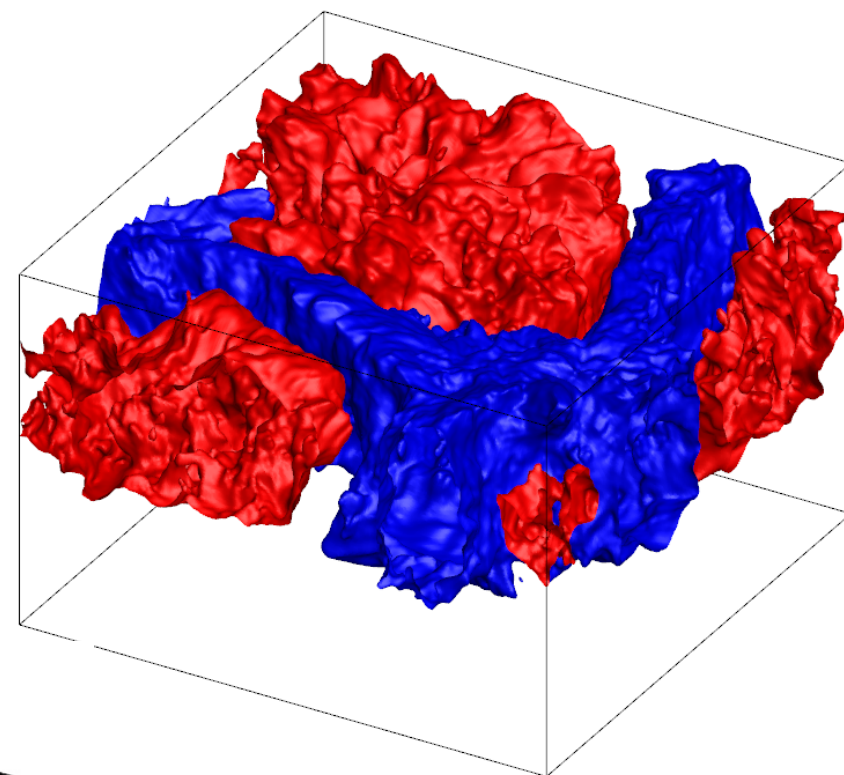
3-ый день, вид сверху



4-ый день, 15 часов



9-ый день, 15 часов

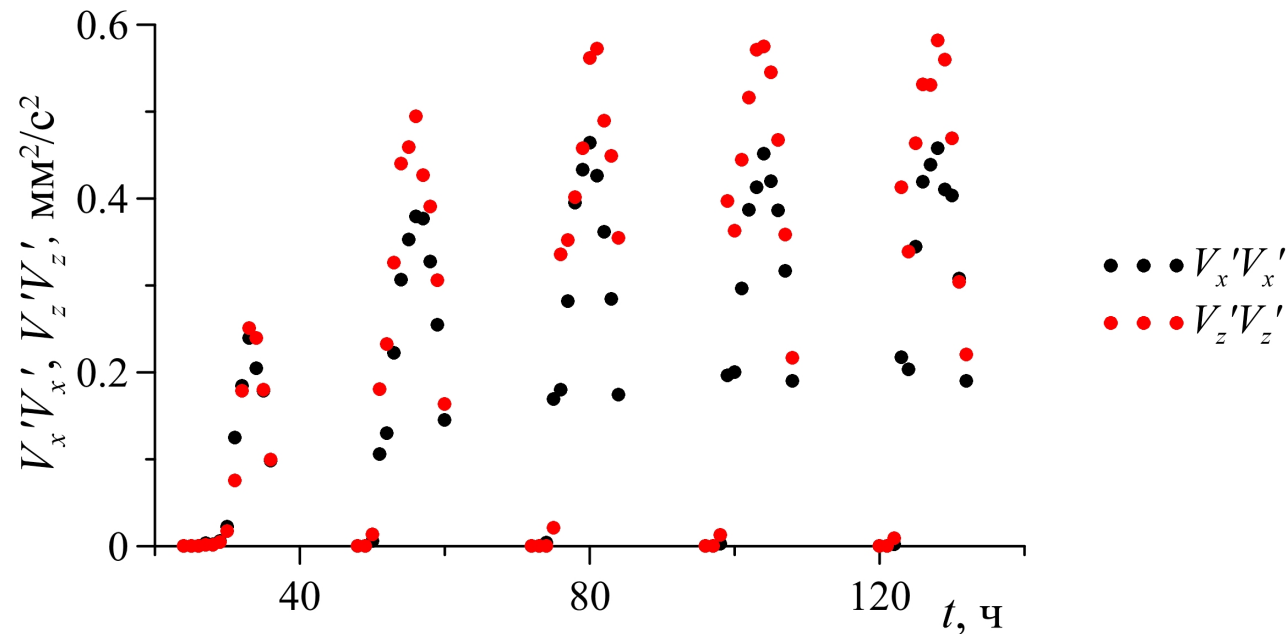
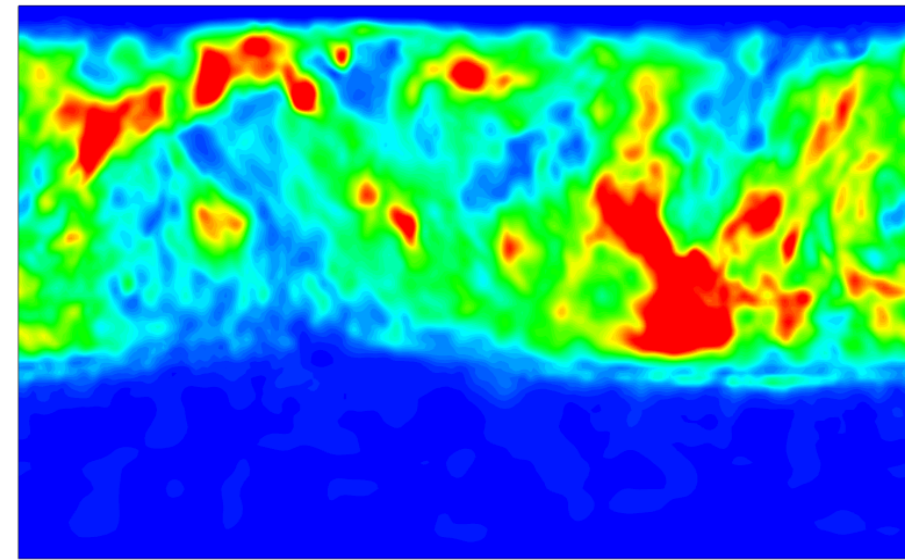
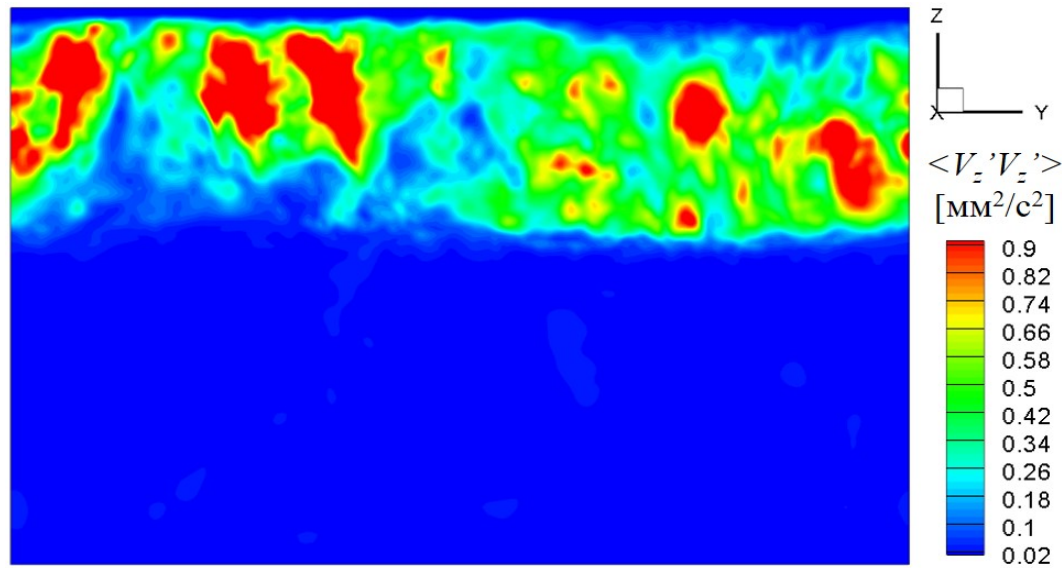


$$|\langle V_z \rangle| = 0.7 \text{ мм/с}$$

Пульсационные характеристики компонент скорости

4-ый день, 15 часов

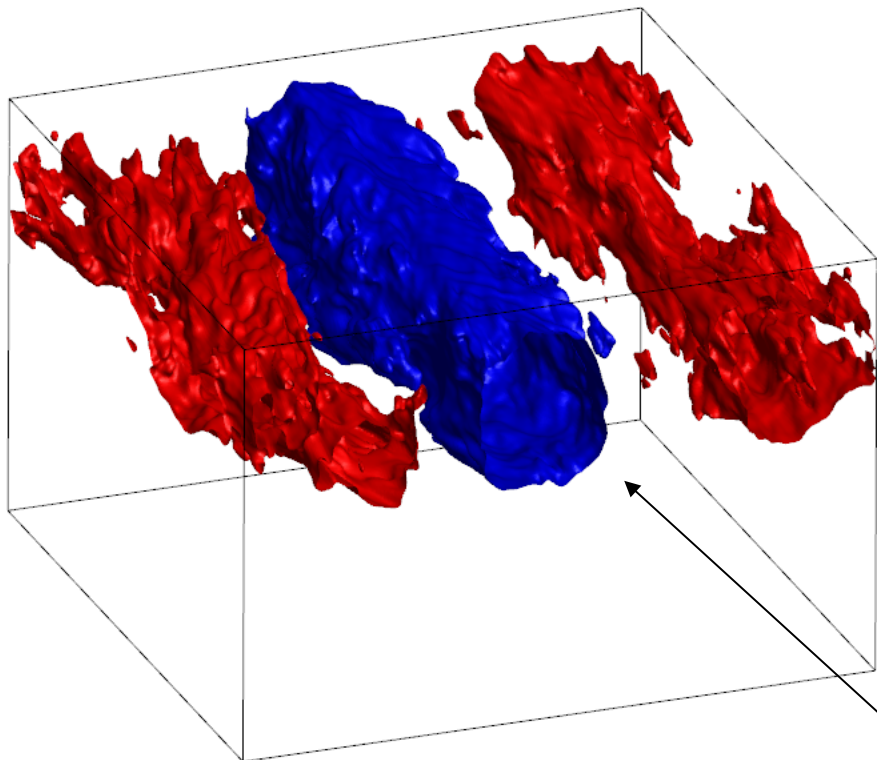
9-ый день, 15 часов



Влияние наложенного продольного градиента давления

$$\partial p / \partial x = 3.28 \cdot 10^{-5} \text{ Па/м}$$

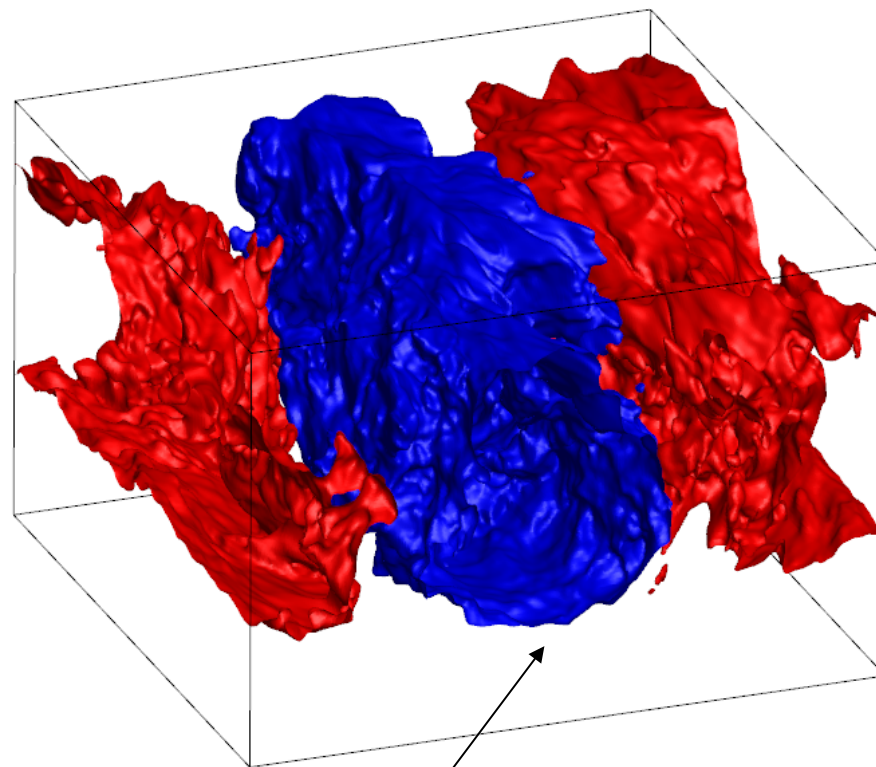
(второй день после задания градиента давления)



$$|\langle V_z \rangle| = 0.4 \text{ мм/с}$$

$$\partial p / \partial x = 3.28 \cdot 10^{-6} \text{ Па/м}$$

(девятый день после задания градиента давления)

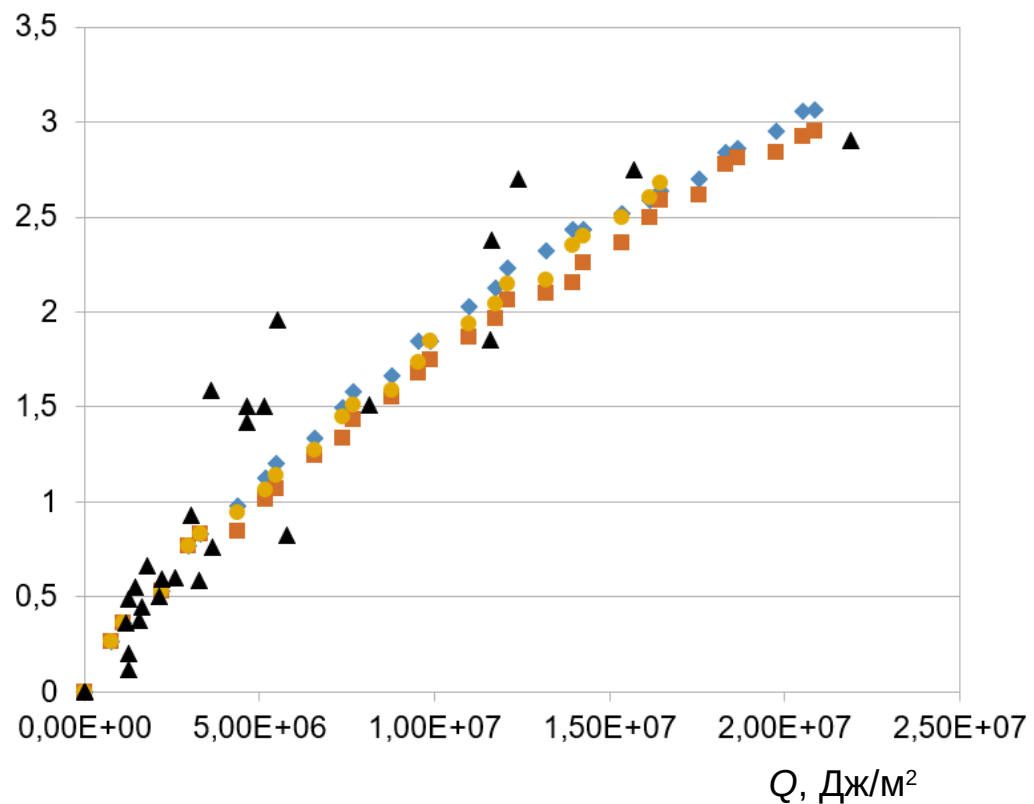


Формирование двумерных валов

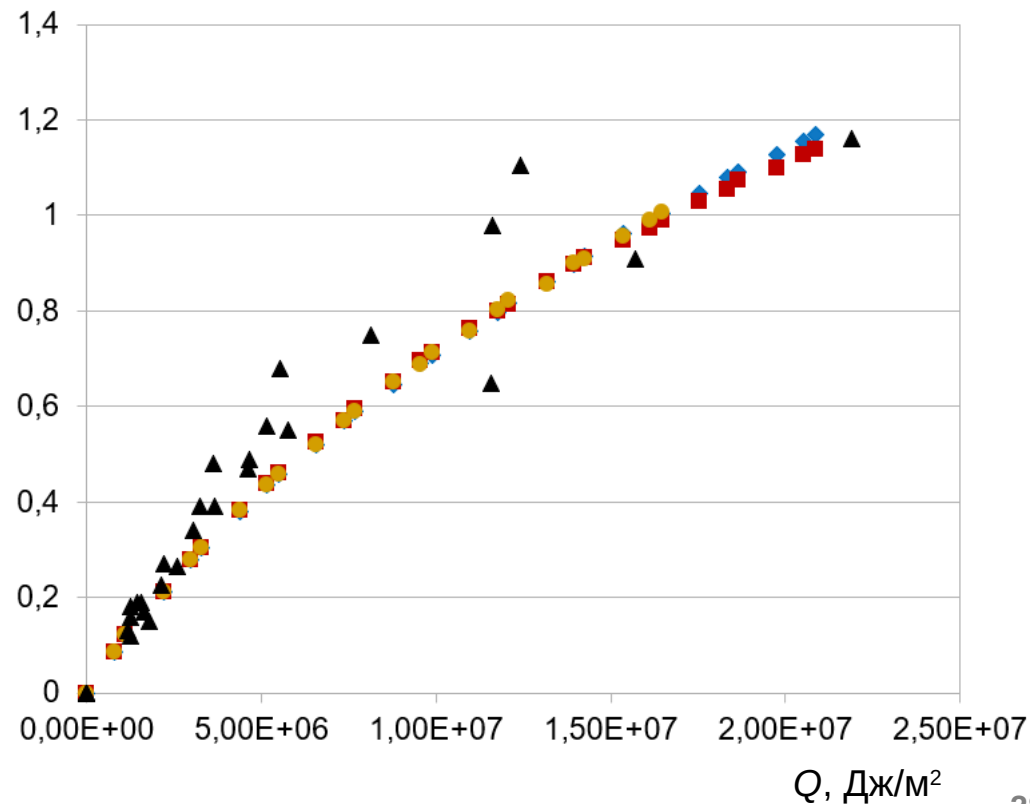
Увеличение глубины и температуры КПС в зависимости от кумулятивной накачки

- ▲ Эксперимент
- ◆ Без градиента давления
- $\partial p/\partial x = 3.28 \cdot 10^{-5}$ Па/м
- $\partial p/\partial x = 3.28 \cdot 10^{-6}$ Па/м

Приращение глубины, м



Приращение температуры, К



Заключение

- В ходе работы над кодом SINF/Flag-S в 2022-2023 гг. были реализованы гибридные 3D/1D подходы при решении связанных задач гидроаэроупругости; была проведена модификация модулей кода для обеспечения возможности расчётов с использованием произвольных уравнений состояния газа; были реализованы и протестированы схемы повышенной точности с квазиодномерной реконструкцией переменных для расчёта высокоскоростных течений.
- Проведены кросс-верификационные расчёты с использованием открытых свободно распространяемых кодов для ряда тестовых задач сверхзвуковой аэродинамики. Проведено сопоставление с результатами расчётов, полученных при помощи кода SINF/Flag-S. Наиболее адекватное разрешение структуры вязко-невязкого взаимодействия и наилучшее совпадение с экспериментальными данными удаётся получить при использовании кодов SINF/Flag-S и Eilmer.
- Код SINF/Flag-S адаптирован для возможности моделирования свободной турбулентной подлёдной конвекции с периодическим проникающим объёмным нагревом (на основе Implicit LES). Как показало численное моделирование, в области возникают крупномасштабные нерегулярные конвективные ячейки, заполняющих всю глубину конвективно-перемешанного слоя. При наложении горизонтального градиента давления с течением времени конвективные ячейки трансформируются в вытянутые вдоль градиента двумерные валы. Представленные результаты численного моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными наблюдениями.

Спасибо за внимание!