VIII Российская конференция
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ
В АЭРОАКУСТИКЕ И АЭРОДИНАМИКЕ
CEAA
20—25 сентября 2021 г., ГЕЛЕНДЖИК

МИНОБРНАУКИ
РОССИИ

СВЕРХЗВУК
НЦМУ

Год науки и технологий '21

Явная схема расчета нестационарных трехмерных течений вязкого теплопроводного многокомпонентного газа

Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б.

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН

План

- **Особенности расщепления по физическим процессам.**
- **Схема интегрирования по времени уравнений Навье-Стокса / системы уравнений многокомпонентных течений/.**
- **Явно-итерационная схема интегрирования по времени параболических уравнений**
- **Численные примеры**
- **Код MCFL (MultiComponent Flows) - функциональное развитие NOISEtte**
- **Заключение**
- **Цель – моделирование многокомпонентных течений, в том числе, как источник шума**

Luca Magri (2017). *On indirect noise in multicomponent nozzle flows. J. of Fluid Mechanics, 828(), R2–.* doi:10.1017/jfm.2017.591

Расщепление по физическим процессам

Пример. Уравнение конвекции – диффузии

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

Аппроксимация по пространству:

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

Алгоритм расчета шага $t -> t + \tau$:

гиперболический этап $u_t = C_h u$

параболический этап $u_t = D_h u$

Свойства простейшей схемы расщепления

Проблема точности. Пример : А и В – квадратные неперестановочные матрицы.

$$\frac{du}{dt} = (A+B)u, \quad t \to t+\tau$$

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

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

$$u(t+\tau) = e^{A\tau} w(t) = e^{A\tau} e^{B\tau} u(t)$$

$$\textit{Точное решение}: U(t+\tau) = e^{(A+B)\tau} u(t)$$

$$\textit{Погрешность схемы } O(\tau), \textit{ т.к. } AB \neq BA$$

$$\delta = e^{(A+B)\tau} - e^{A\tau} e^{B\tau} = 0.5[BA - AB]\tau^2 + \ldots$$

Есть проблема сохранения стационарного решения.

Для нелинейных задач расщепление может приводить к разным решениям.

Математическая модель RANS (в отсутствии горения)

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

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

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

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

+ *Уравнение состояния*

+ Модель турбулентности (Ментера, ...)

τ_μ, τ_t, $\vec{q}_\mu$, $\vec{q}_t$ – *молекулярная и турбулентная компоненты тензора вязких напряжений и теплового потока соотв.*

Уравнения балансов компонентов смеси в диффузионном приближении

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

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

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

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

W_m – молярная масса компонета, 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

Схема расщепления в многокомпонентном случае

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

Разностная схема:

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

$C_h\left(\boldsymbol{U}\right)$ – ***нелинейный конвективный оператор***

$\boldsymbol{D_h}\left(\boldsymbol{U}\right)$ – ***нелинейный диффузионный оператор***

Явная схема:

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

Расщепление:

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:
вязкость, теплопроводность,
диффузия компонентов смеси

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

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

Сумма этапов:

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

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

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

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

Схема LI-M, свойства, спектр оператора перехода

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

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

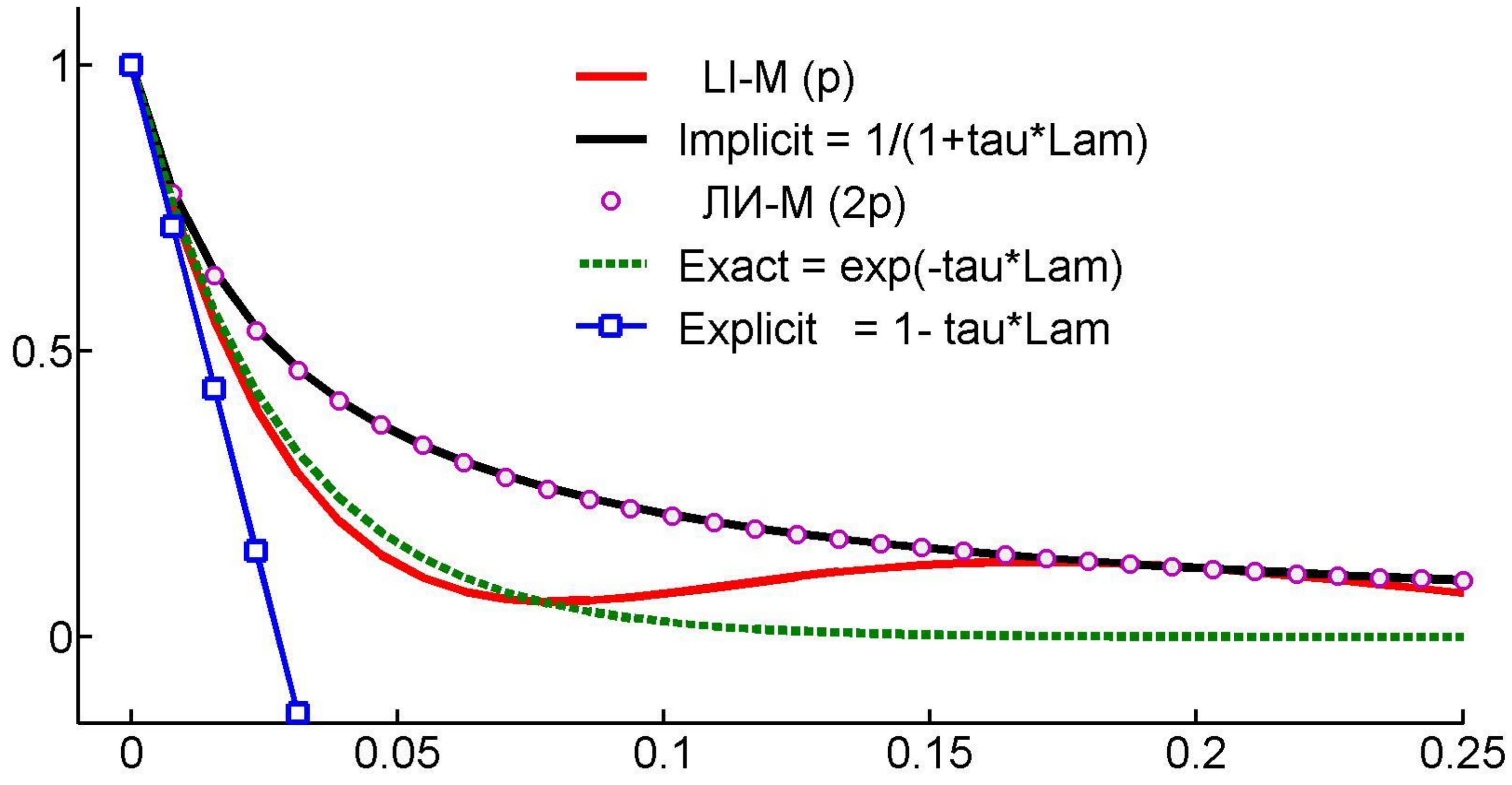
Нет настроечных параметров, конечное число итераций $\nu = 2p - 1$

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

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

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

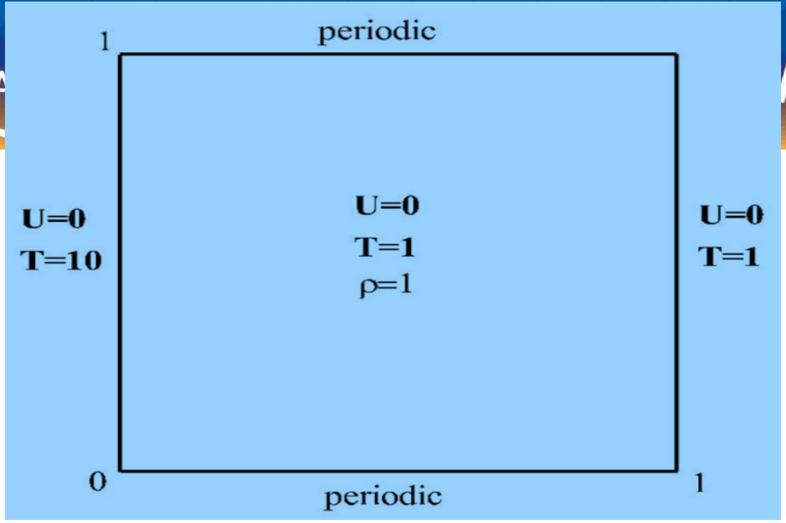
Спектры операторов перехода по сравнению с точным $\exp(-\tau \cdot \lambda)$

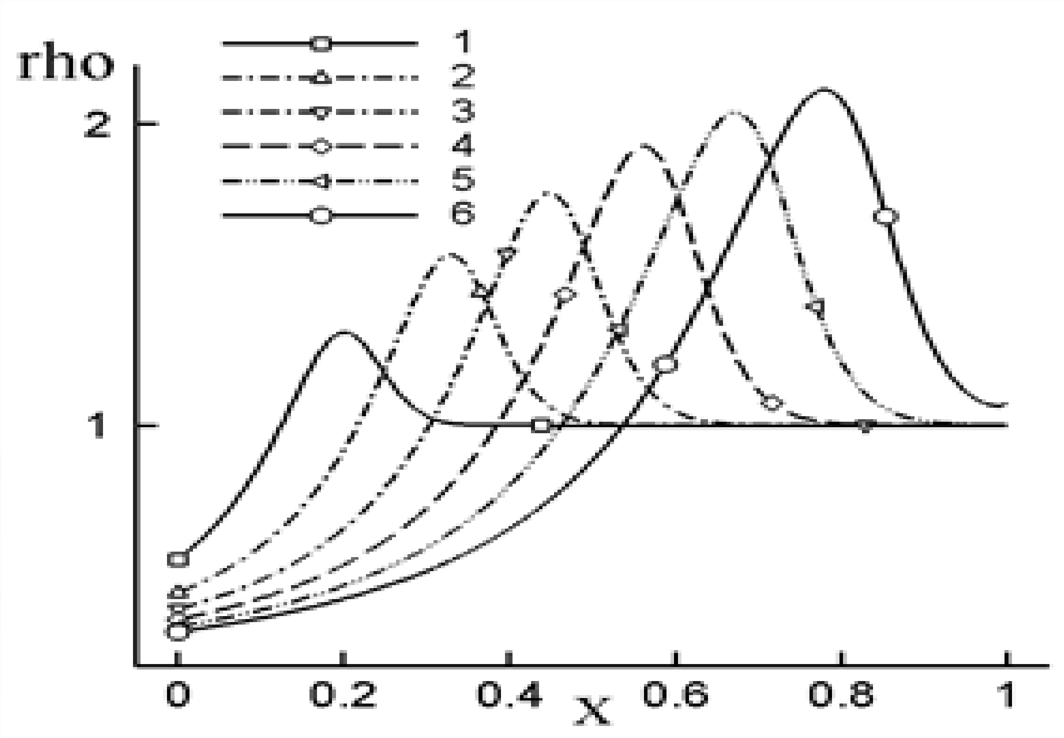


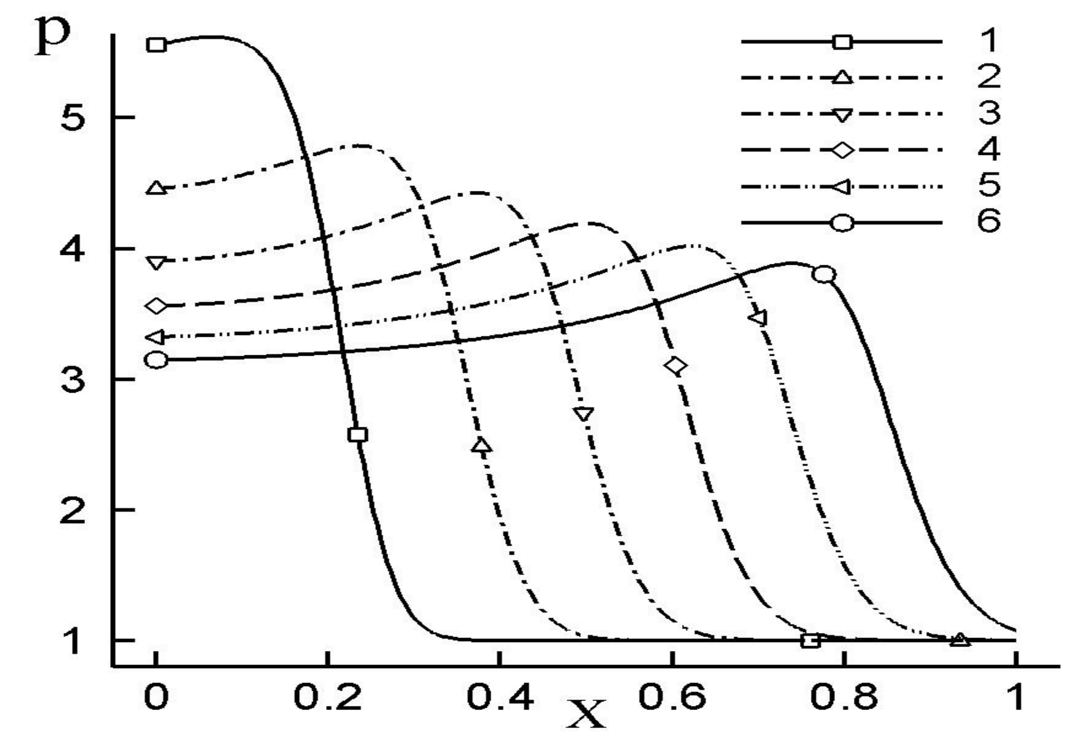
$$Lam \in \left[\, 0;\ h^2 \cdot \lambda_{max} \,\right]$$

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

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

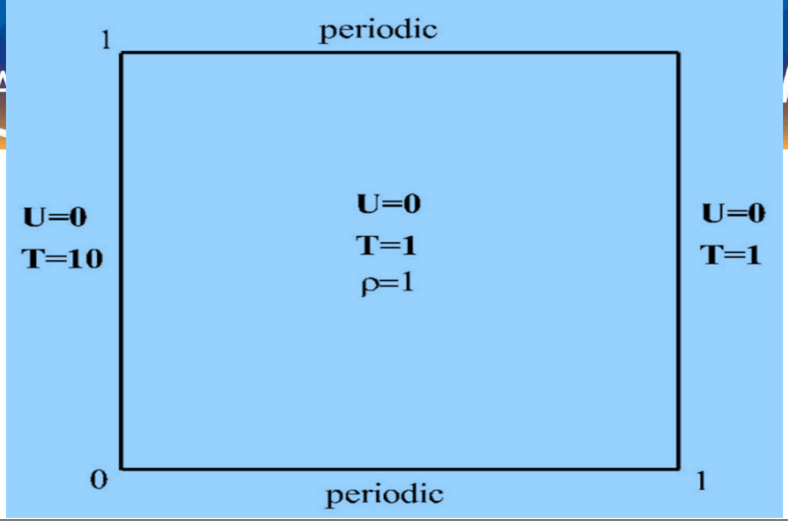




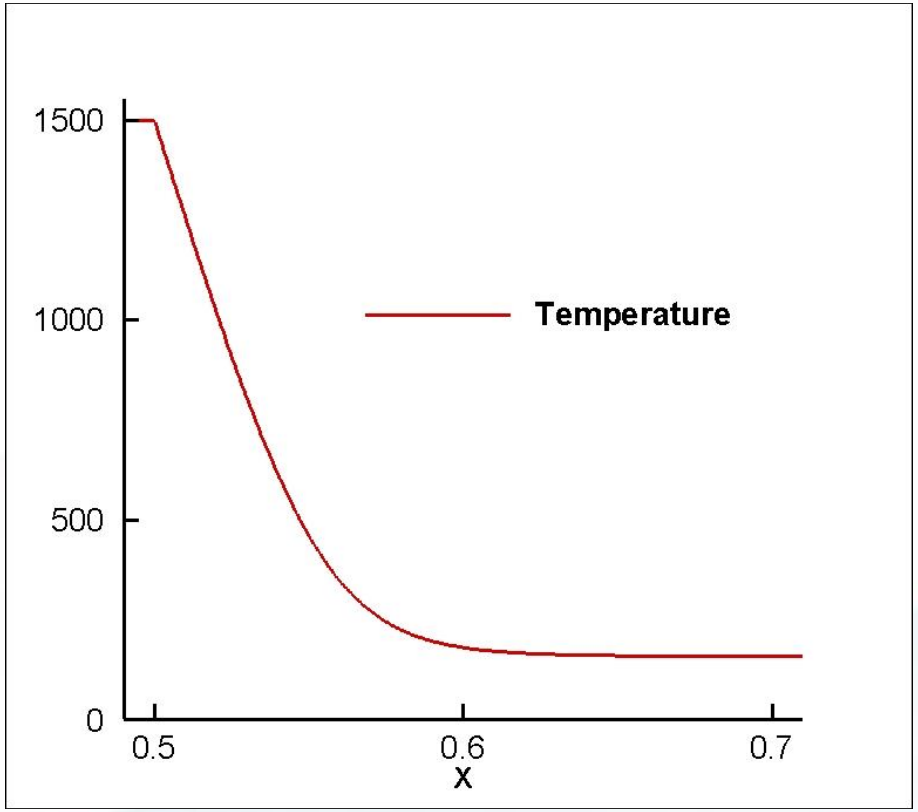


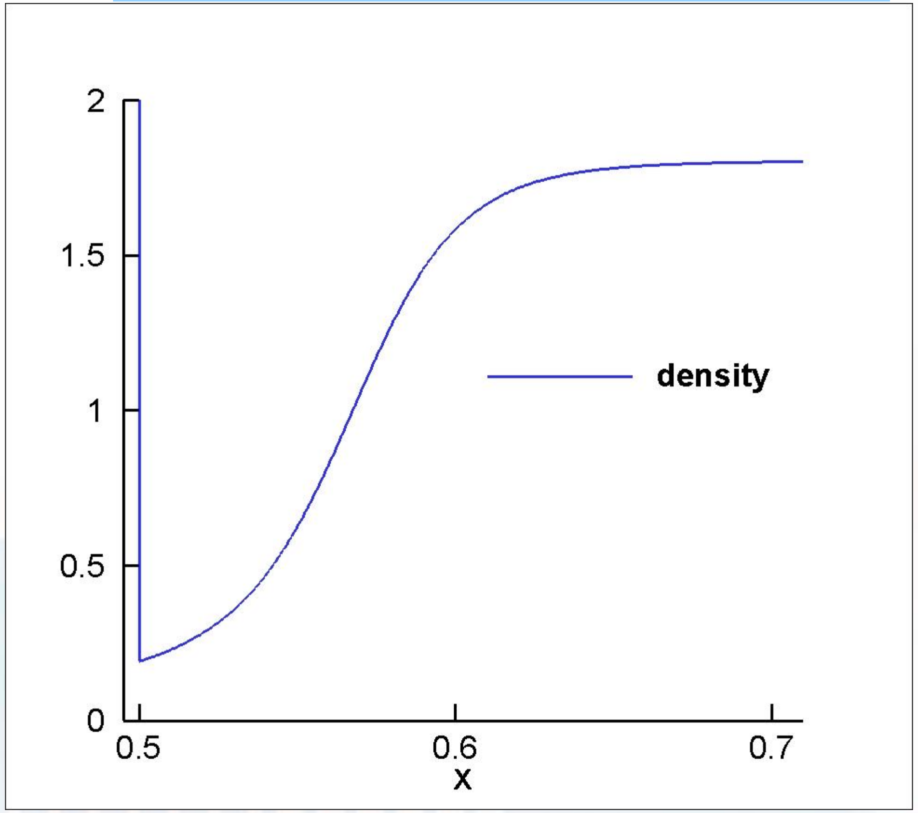
Динамика плотности (слева) и давления (справа)

Смесь идеальных газов.
Тепловая конвекция (Полежаев В.И.).
Стационарное состояние:



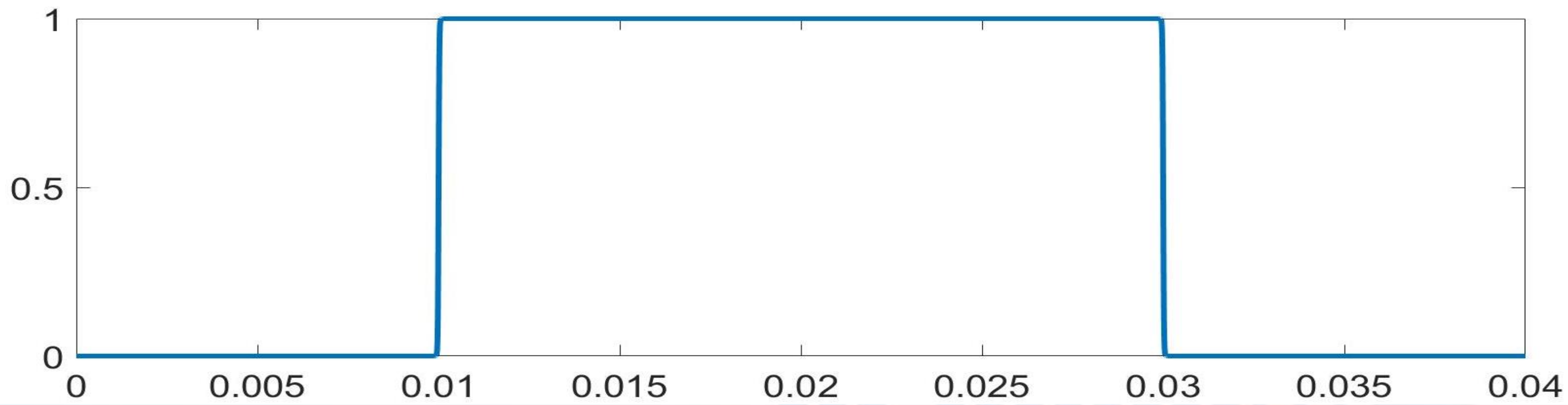
$$u = 0, \quad p = R\rho T = const$$





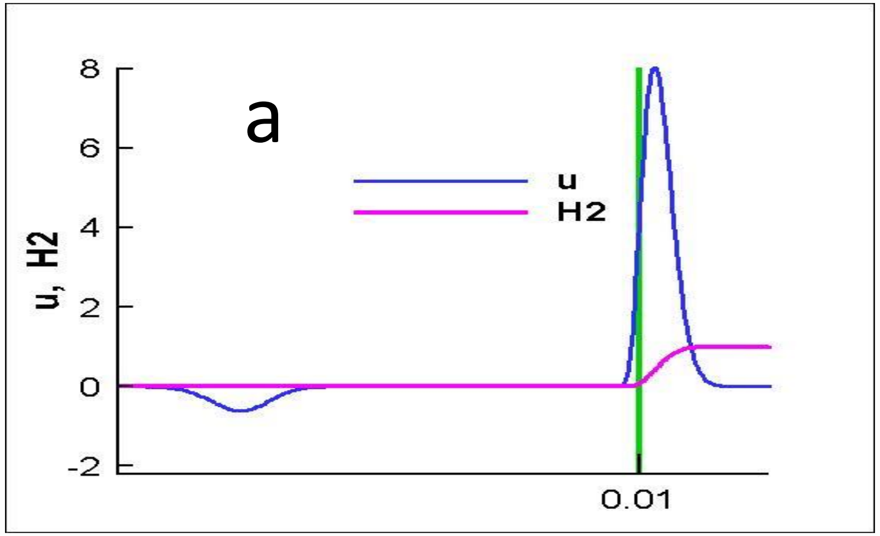
Стационарное состояние: температура (слева) и плотность (справа)

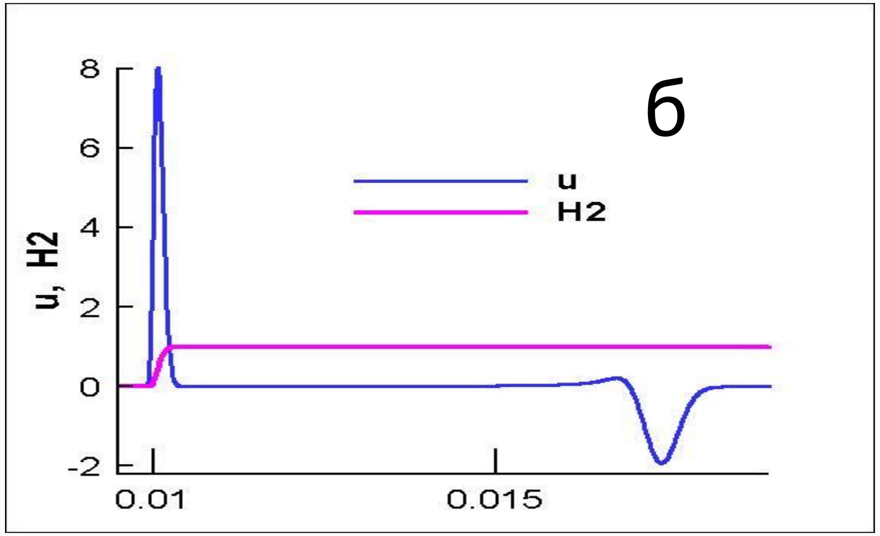
Акустические волны на диффузионной границе двух газов

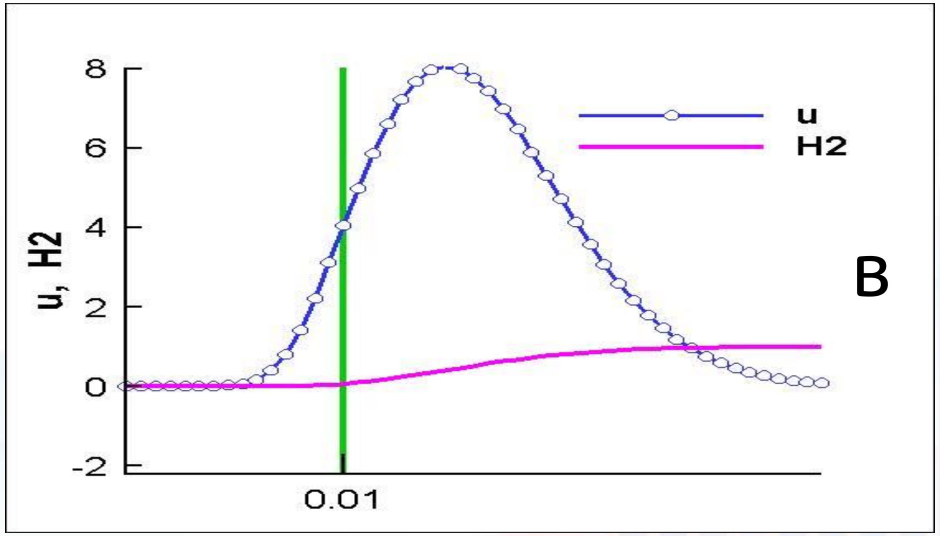


$p_0 = 1$ атм, $T_0 = 850$ K, скорости звука: O_2 - 550 м/с, H_2 - 2200 м/с

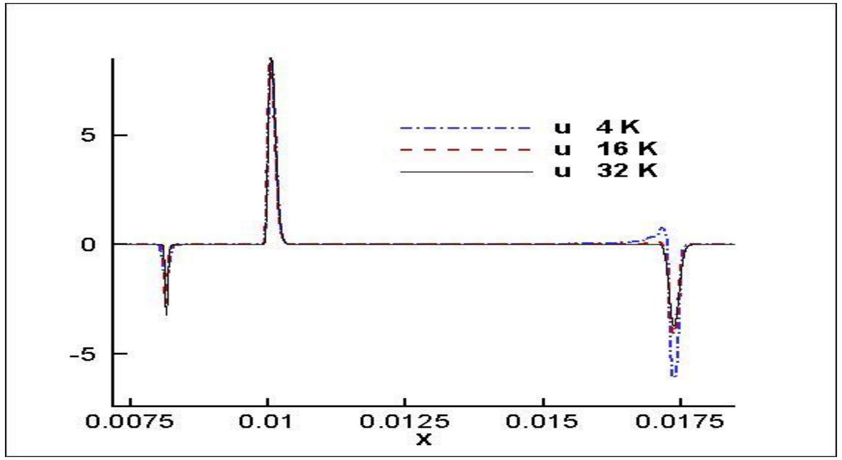
Скорость и концентрация водорода: а) левая волна и зона смешения б) правая волна и зона смешения в) зона смешения

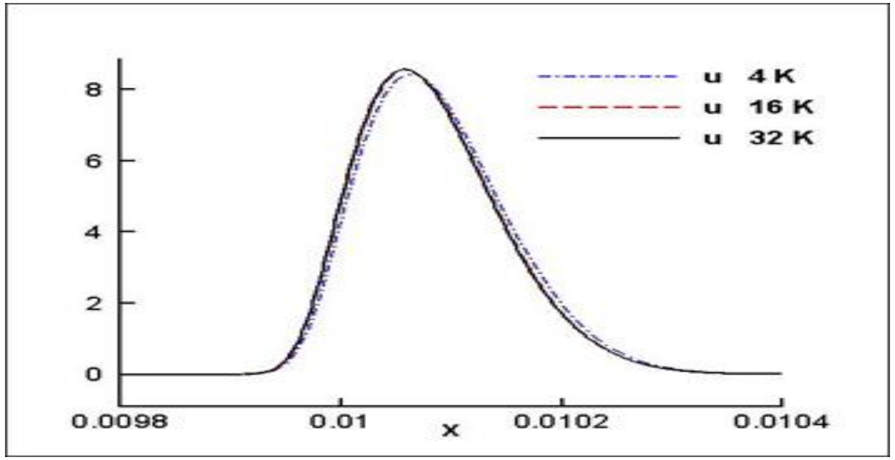




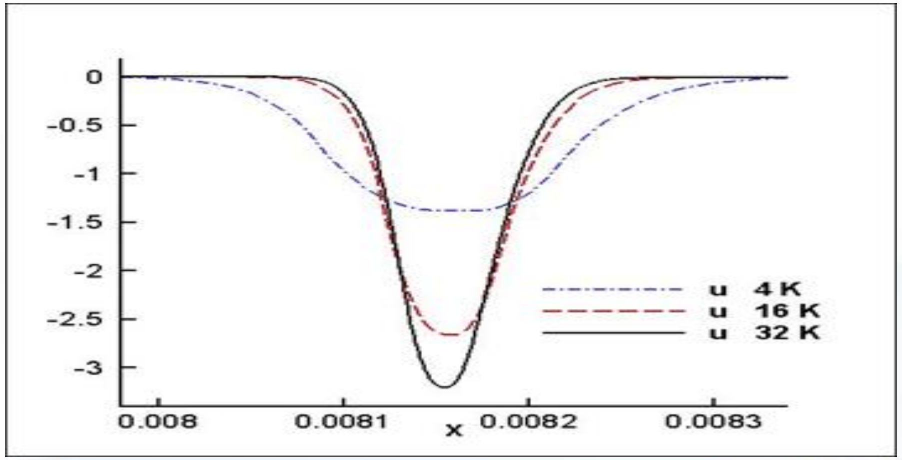


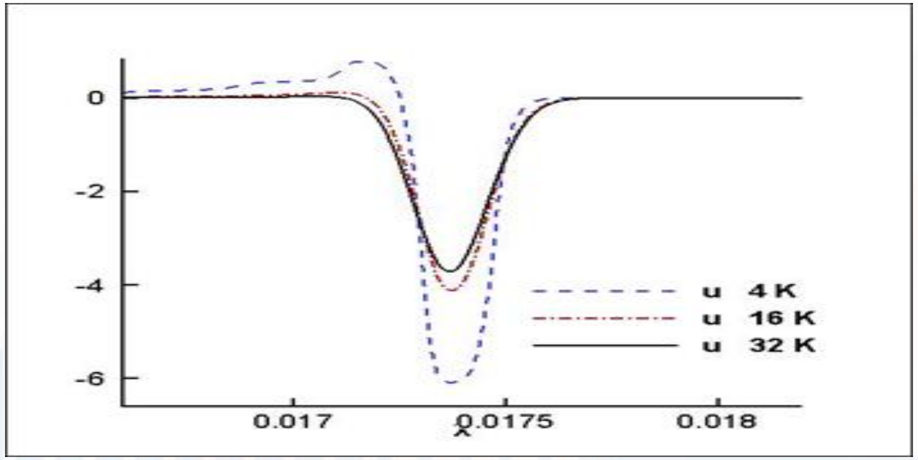
Профили скорости на разных сетках: а) во всей области и в зоне интерфейса, б) в окрестности левой и правой акустических волн





а

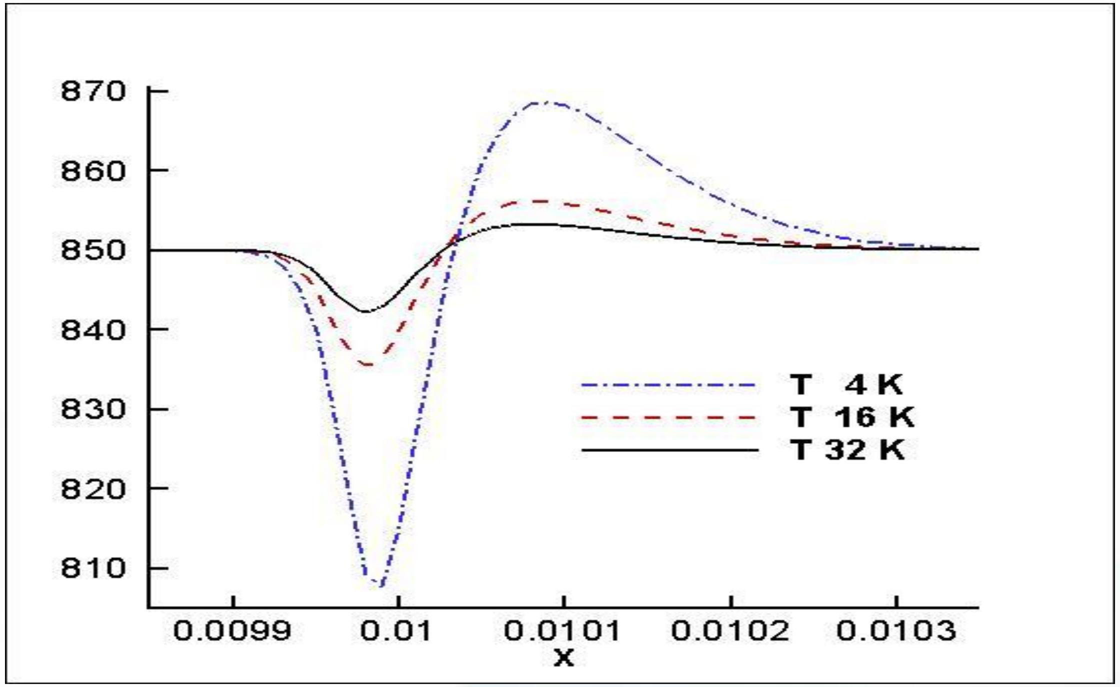




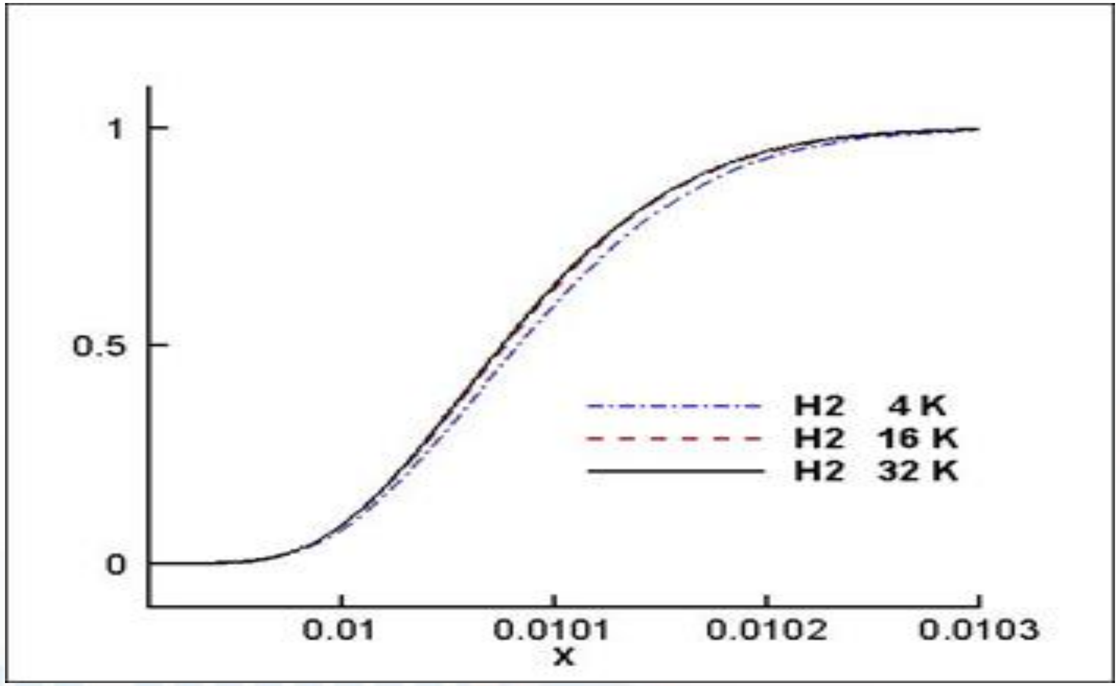
б

Профили температуры и концентрации водорода в зоне интерфейса

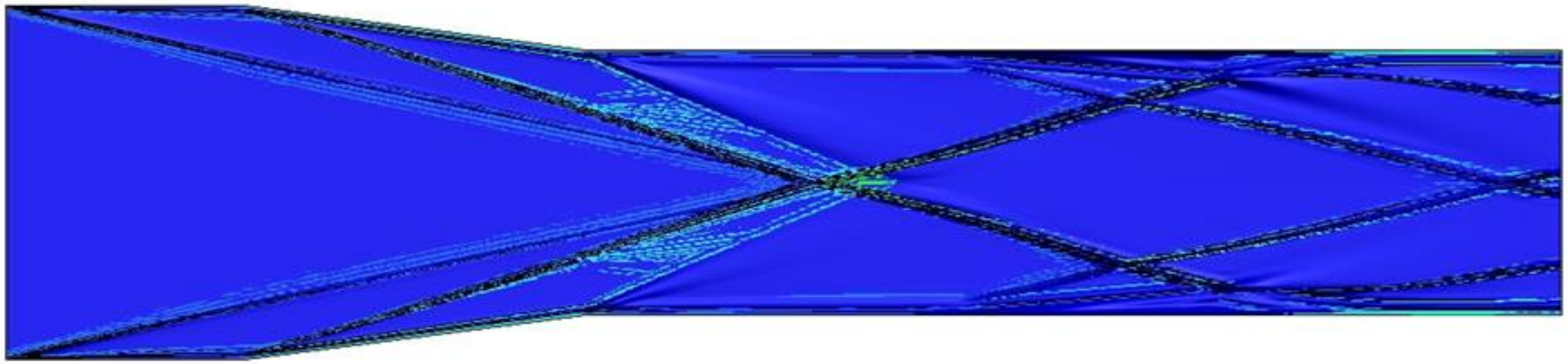
Температура



Концентрация водорода



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** → **0** ее преимущество многократно увеличивается

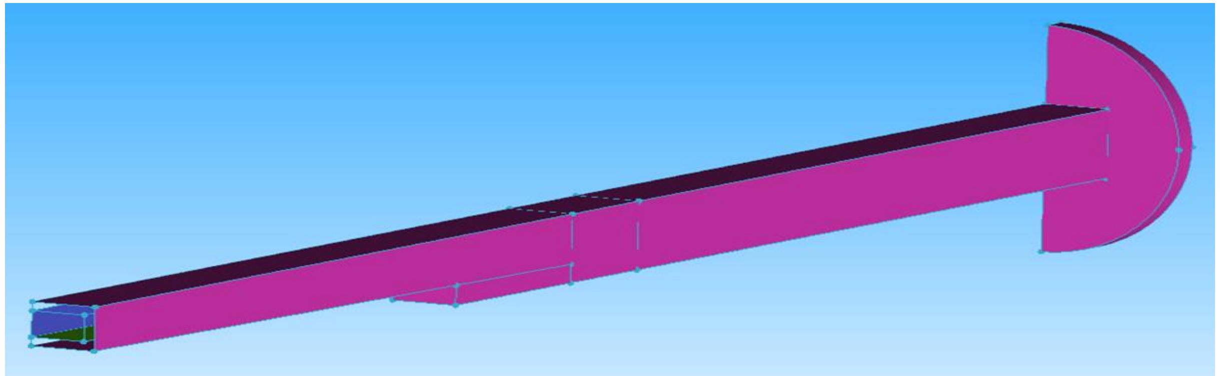
Сверхзвуковое течение в плоском канале переменного сечения. Установление. Сравнение схем. Сетка 16 К.

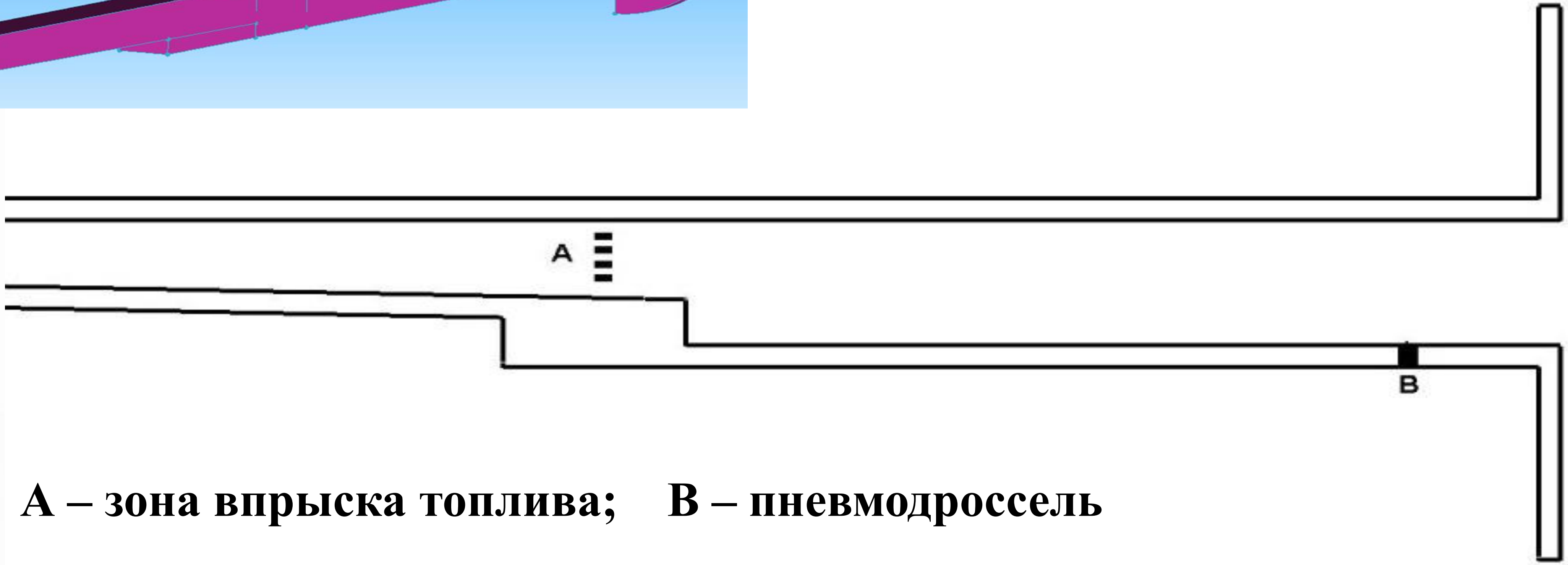
	Неявная схема	**Явная схема** $\boldsymbol{k_{CFL} = 0.5}$	**LINS,** $\boldsymbol{p = 4 \div 5}$
Число шагов	136 364	587 356	136 364
$\boldsymbol{\tau_{aver}}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$2.6 \cdot 10^{-4}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$
Время счета, сек	**6 300**	**6 695**	**3 000**
Точность, **норма невязки**	$8.5 \cdot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

В процессе разработки:

Расчеты высокоскоростных многокомпонентных течений с горением газофазного углеводородного топлива (керосина)

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



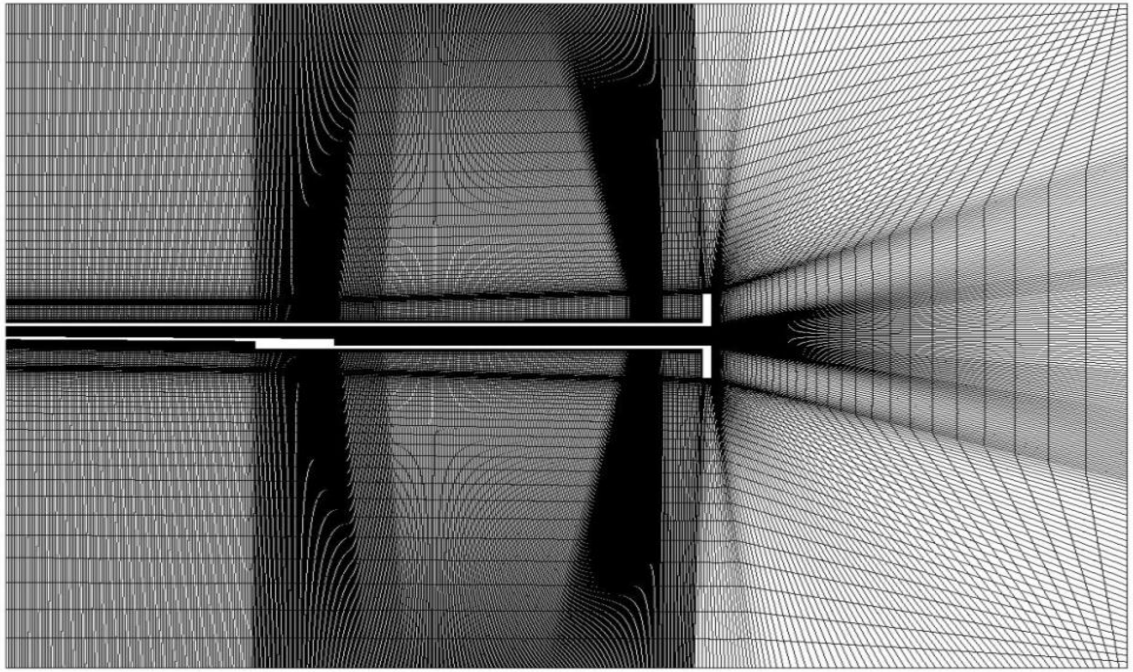


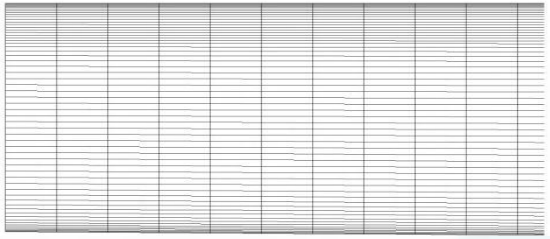
А – зона впрыска топлива;   В – пневмодроссель

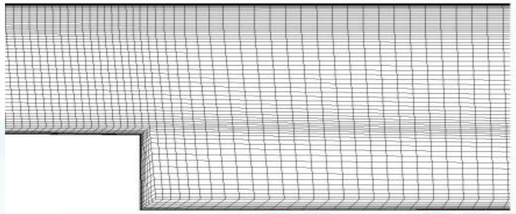
Коэффициент избытка окислителя $\alpha_1 = 1.34$ $\alpha_2 = 1.99$ $\alpha_3 = 2.45$

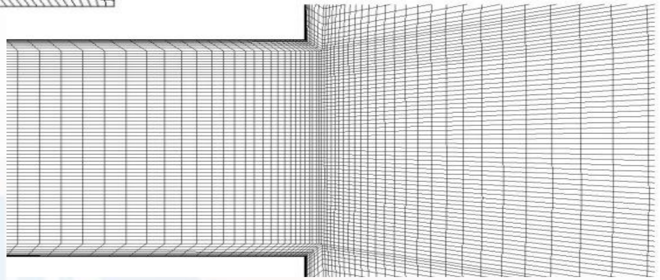
Расход керосина $G_1 \approx 1.315$ $G_2 \approx 0.886$ $G_3 \approx 0.719$

Сетка в установке с камерой сгорания



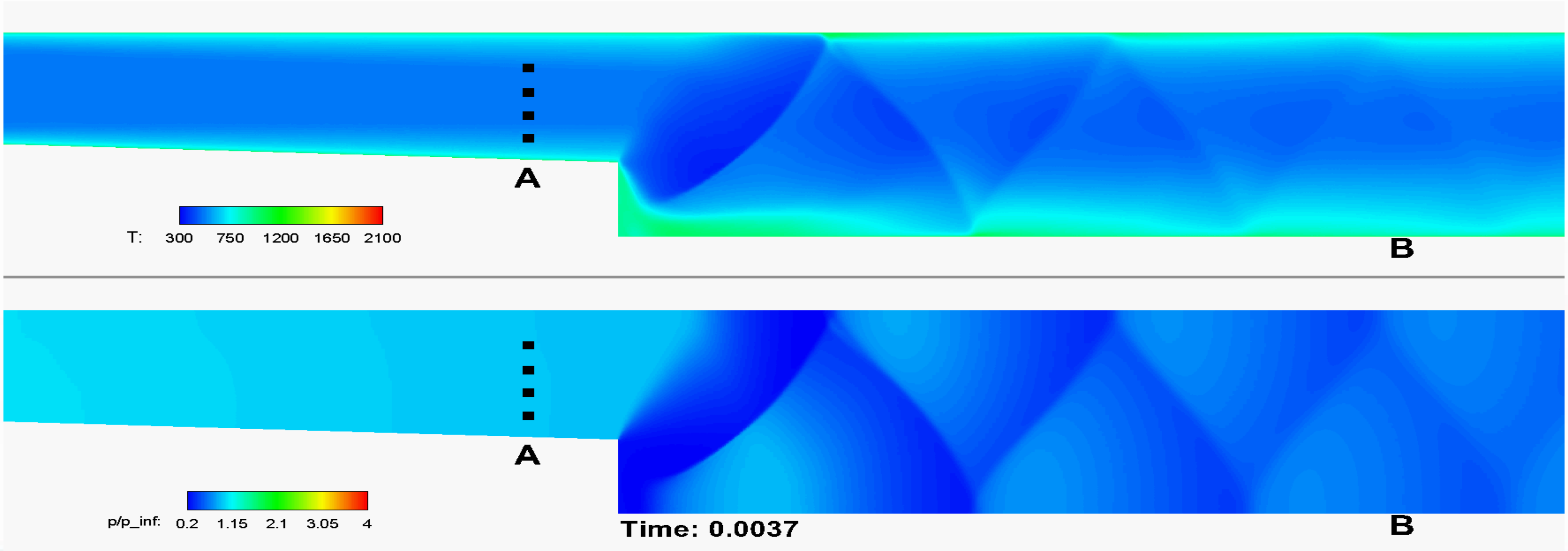


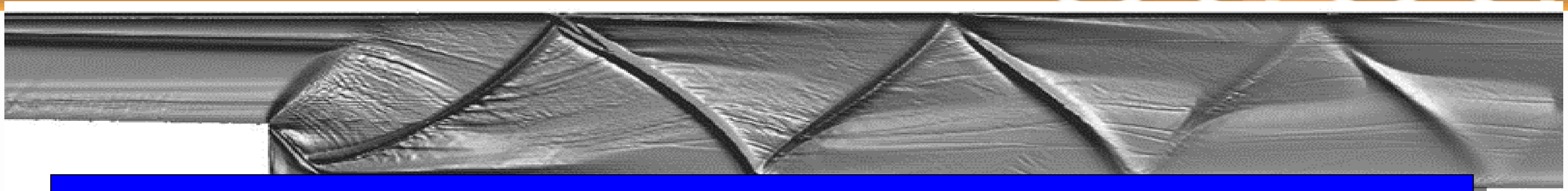




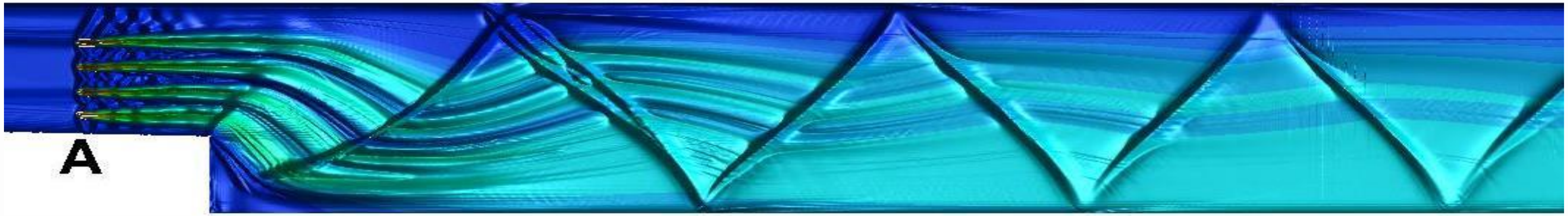
Четыре сетки: Сетка 1 ($\approx$ 100 тыс.ячеек), Сетка 2 ($\approx 2.2\ 10^5$ ячеек)
Сетка 3$\approx 6.6\ 10^5$ ячеек), Сетка 4 ($\approx 2.4\ 10^6$ ячеек)

Топливная смесь (среднее обогащение $\alpha_2 = 1.99$) температура и давление

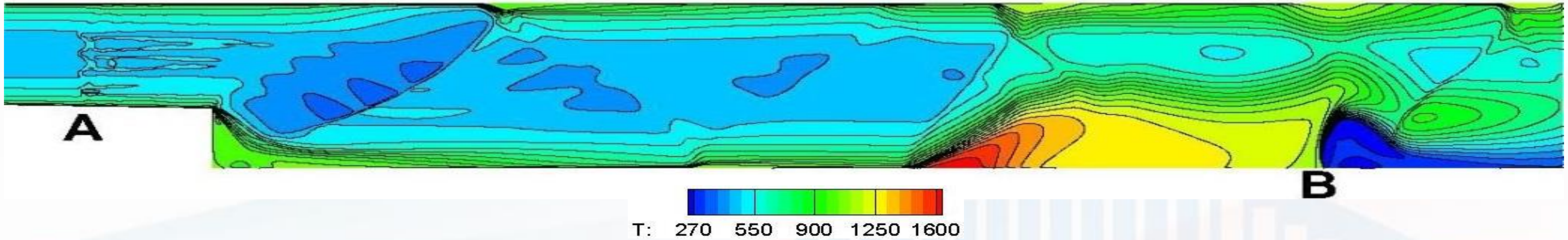




Поле градиента плотности. Идеальный газ

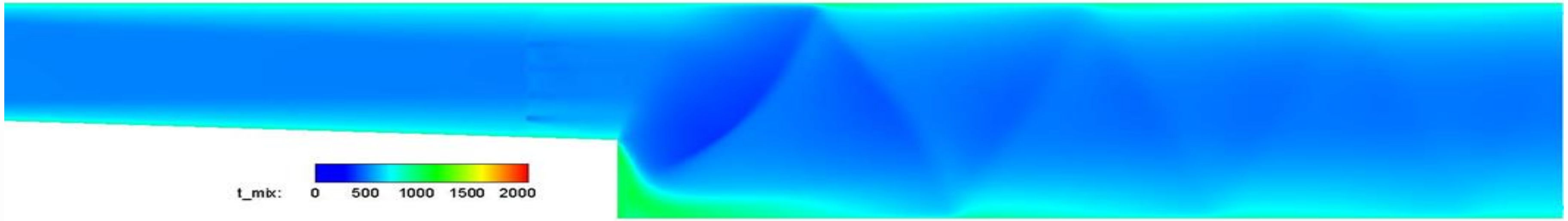


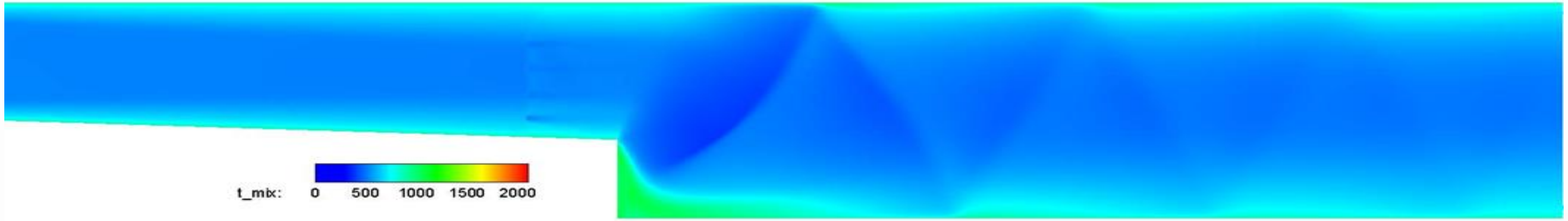
Массовая доля топлива. Многокомпонентный газ



Поле температуры

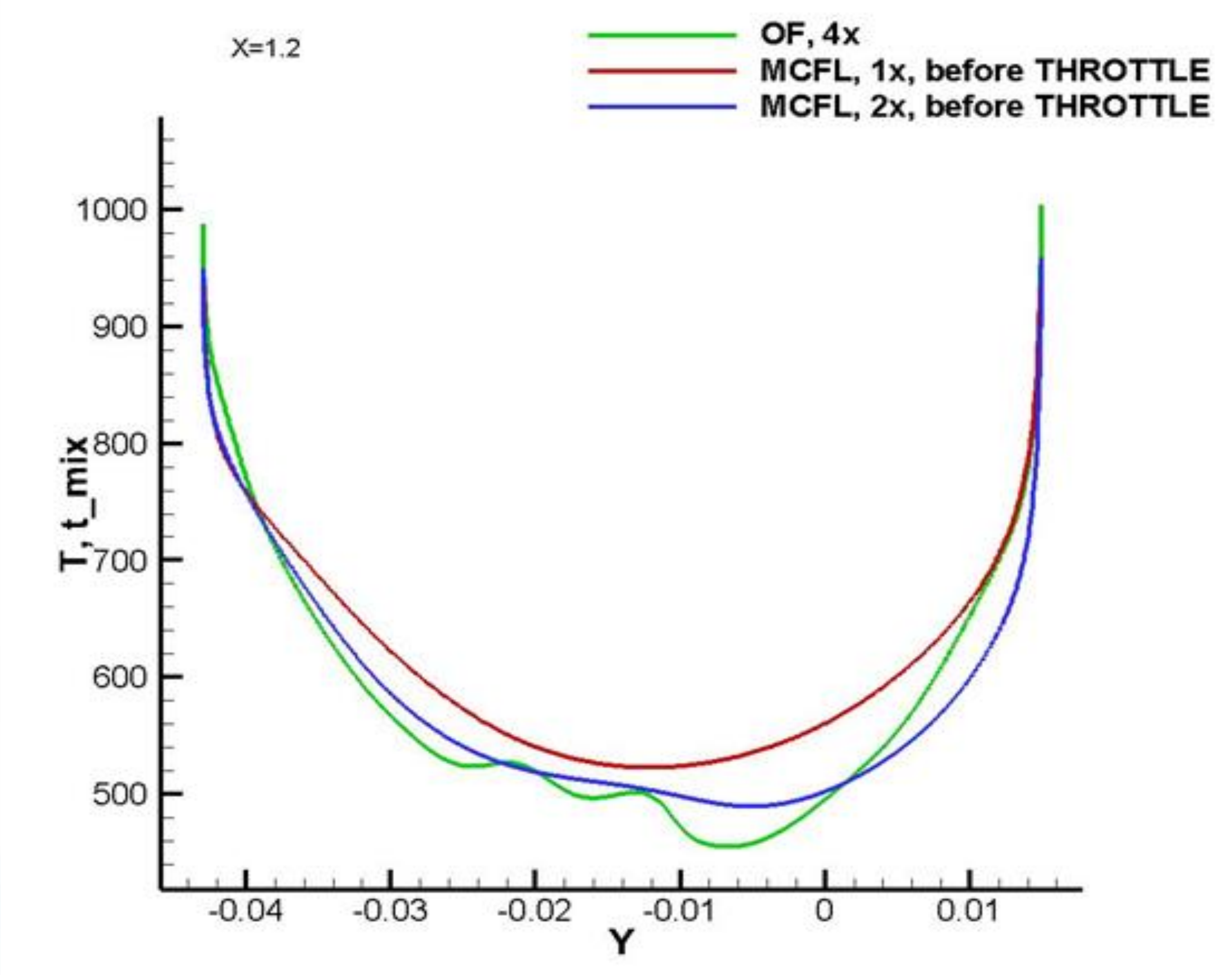
Сравнение «холодных» расчетов MCFL (наш код) и OpenFOAM. Температура топливной смеси





Перед включением дросселя:
MCFL (вверху, сетка 2x) и OpenFOAM (внизу, сетка 4x)

Сравнение «холодных» расчетов MCFL и OpenFoam. Температура топливной смеси в вертикальном сечении перед дросселем



Код MCFL (Multicomponent Flows)

Представленный подход реализован в виде компьютерного кода MCFL как функциональное развитие кода NOISEtte ИПМ им. М.В. Келдыша. Код MCFL создается в парадигме современного программирования в системе совместной разработки кода NOISEtte.

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

MCFL находится в процессе развития, проводятся верификационные расчеты.

Заключение

Схема LINS расчета многокомпонентных 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. **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, 32:4 (2020), 57–74. DOI: https://doi.org/10.20948/mm-2020-04-05**

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. doi: 10.1007/978-3-319-41589-5_3.***

4. ***Марчук Г.И*. Методы расщепления. М.: Наука, 1988.**

Спасибо за внимание!

Доклад подготовлен в рамках реализации Программы создания и развития научного центра мирового уровня «Сверхзвук» на 2020—2025 годы при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение от 8 декабря 2020 г. № 075-11-2020-023).