

ОСОБЕННОСТИ МЕТОДИКИ ЧИСЛЕННОГО ТРЕХМЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЯЗКИХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ

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

*ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва, vic.zhukov@gmail.com,
nn@kiam.ru, feodor@kiam.ru*

В работе обсуждаются особенности численной модели расчета нестационарных течений вязкой теплопроводной многокомпонентной газовой смеси. Модель реализована в виде компьютерного кода MCFL (MultiComponent FLoWs), алгоритм которого представлен в [1]. Компьютерная реализация разрабатывается нами на базе аэродинамического кода NOISEtte [2] с наследованием основных его возможностей и добавлением новых. Основная специфика нашего подхода определяется целями создания методики прямого численного моделирования многокомпонентных течений с учетом диффузии компонентов, химических реакций, сопряженного теплообмена с обтекаемыми твердотельными конструкциями. В перспективе планируется учесть изменения геометрии конструкций под действием аэротермических процессов. Указанные цели определяют принцип выбора основных алгоритмических элементов методики. Этот принцип состоит в ориентации на явные алгоритмы. Явно-итерационные схемы успешно опробованы при решении линейных и квазилинейных уравнений теплопроводности [3], систем уравнений трехтемпературной газодинамики [4], уравнений кристаллизации жидких металлов [5], уравнений Навье-Стокса [6]. Для систем уравнений Навье-Стокса и их расширений на случай многокомпонентных смесей разработанная нами явно-итерационная схема носит название LINS (Local Iterations for Navier-Stokes) [7]. Схема LINS, как и ее предшественники, не требует эмпирических управляющих параметров, и обеспечивает минимизацию глобальных операций при реализации на массивно-параллельных суперкомпьютерах.

При изложении особенностей MCFL методики кратко опишем алгоритм интегрирования определяющей системы

уравнений динамики вязкой теплопроводной многокомпонентной газовой смеси.

В основе методики лежит схема расщепления расчета одного временного шага определяющих уравнений на гиперболический (конвективный) и параболический (диффузионный) этапы. Дискретизация по пространству проводится в рамках кода NOISEtte [2] на трехмерных неструктурированных сетках. Для расчета сопряженного теплообмена нами разрабатывается многоблочная сеточная технология на основе использования совокупности неструктурированных сеток, конформных на интерфейсных границах «газ – твердое тело».

Простейший пример разбиения расчетной области на блоки показан на рис. 1. Здесь приведена схема течения газа в канале, ограниченном теплопроводными стенками. Два блока – это твердые стенки с заданными теплофизическими свойствами. Граница Γ_0 контакта «газ – твердое тело» показана красным, на ней заданы условия теплообмена (непрерывность температуры и теплового потока по нормали к границе). На внешних границах стенок задается либо температура, либо тепловой поток, либо их комбинация. Третий блок – это газовая среда, ограниченная твердыми стенками, а также входной и выходной границами.

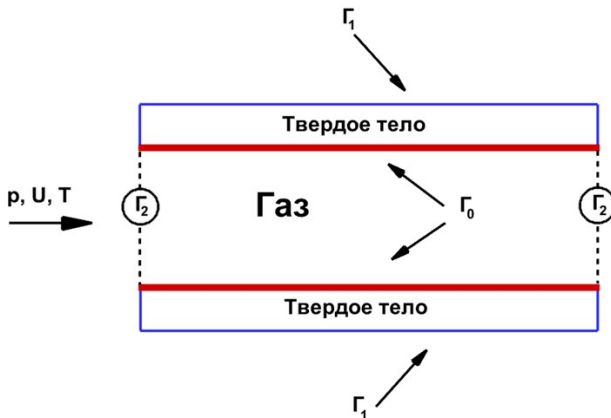


Рис. 1. Схема течения в канале с теплопроводными стенками

Отметим, что многоблочная технология существенно опирается на использование явных и явно-итерационных алгоритмов, что обеспечивает эквивалентность многоблочного расчета и сквозного расчета на объединенной сетке.

Для гиперболической подсистемы расчет одного шага по времени выполняется по явной схеме гудуновского типа с шагом, ограниченным условием устойчивости конвективного переноса массы, импульса, энергии. Такое ограничение при расчете нестационарных процессов носит физически естественный характер. Но при наличии зон с доминированием диффузии над конвекцией полный расчет по явной схеме практически невозможен. В этом случае можно записать неявную схему, и после линеаризации решать систему линейных алгебраических уравнений каким-либо итерационным алгоритмом. При таком подходе возникает этап эмпирической настройки алгоритма (вид предобусловливателей, критерии окончания итераций и др.).

В схеме LINS диффузионный этап реализуется с помощью явной чебышевской итерационной схемы специальной конструкции. Параметры этой конструкции определяются величиной конвективного временного шага и верхней границей сеточного диффузионного оператора, настроечных параметров нет. Результирующая схема обеспечивает выполнение основных законов сохранения, а ее алгоритмическая структура гарантирует эффективность параллельной реализации.

При расчете реагирующих смесей учитывается дополнительное условие на шаг по времени, ограничивающее рост внутренней энергии в результате химических реакций.

Один из основных результатов применения схемы расщепления по физическим процессам состоит в том, что на достаточно подробных сетках поэтапный расчет требует меньше вычислительных затрат (особенно при большем числе компонентов смеси), чем решение полной системы. Кроме того, гиперболические и параболические уравнения имеют разную физическую природу, и выбор численных методов с учетом этого фактора, приводит не только к экономии вычислительных ресурсов, но может повысить реальную точность приближенных решений. Дополнительно получен новый важный результат - запись схемы расщепления в виде последовательности явных и явно-итерационных алгоритмов обеспечивает эффективную реализацию схемы на многоблочных неструктурированных конформных сетках.

Для демонстрации особенностей схемы LINS обсуждаются результаты решения модельной задачи сопряженного теплообмена.

Публикация подготовлена в рамках реализации Программы создания и развития научного центра мирового уровня «Сверхзвук» на 2020–2025 годы при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение от 25.04.2022 N. 075-15-2022-330).

Литература

1. O.V. Feodoritova, M.M. Krasnov, V.T. Zhukov. A numerical method for conjugate heat transfer problems in multicomponent flows. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2021, 2028 012024.
2. Абалакин И.В., Бахвалов П.А., Горобец А.И., Дубень А.П., Козубская Т.К. Параллельный программный комплекс NOI-SEtte для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики. *Вычисл. методы и программирование*. 2012. Т. 13. С. 110–125.
3. Жуков В.Т. Явно итерационные схемы для параболических уравнений. *Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Математическое моделирование физических процессов*. 1993. N. 4. С. 40–46.
4. Жуков В.Т. О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений. *Математическое моделирование*. 2010. Т. 22. N. 10. С. 127–158.
5. Жуков В.Т., Феодоритова О.Б. Программа расчета газодинамики НЗТ. *Математика в приложениях*. Всероссийская конференция, приуроченная к 80-летию академика С. К. Годунова. 2009. С. 116–117.
6. Жуков В.Т., Зайцев Н.А., Лысов В.Г., Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б. Численный анализ модели процессов кристаллизации металлов, двумерный случай. *Математическое моделирование*. 2012. Т. 24. N. 1. С. 109–128.
7. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Об одном подходе к интегрированию по времени системы уравнений Навье–Стокса. *Ж. вычисл. матем. и матем. физики*. 2020. Т. 60. N. 2. С.267–280.