

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 47 за 2022 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

#### Р.С. Соломатин

Реализация модели смешения и горения турбулентных течений в рамках программного комплекса

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Соломатин Р.С. Реализация модели смешения и горения турбулентных течений в рамках программного комплекса // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 47. 28 с. <u>https://doi.org/10.20948/prepr-2022-47</u> <u>https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-47</u> Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

Р.С. Соломатин

# Реализация модели смешения и горения турбулентных течений в рамках программного комплекса

Москва — 2022

#### Соломатин Р.С.1,2

#### Реализация модели смешения и горения турбулентных течений в рамках программного комплекса

Рассматривается реализация математической модели И численного моделирования трехмерных турбулентных алгоритма для течений многокомпонентного реагирующего газа в рамках параллельного программного комплекса. Приводится краткое описание газодинамической системы уравнений и уравнений химической кинетики, используемых в расчетах. Описываются используемые схемы интегрирования по времени и численный метод. Приводятся подробные блок-схемы работы программного комплекса и его вычислительного модуля, описание используемых алгоритмов, форматов и структур файлов, применяемых сторонних пакетов и программ, а также некоторых особенностей реализации. Демонстрируется результат работы программного комплекса на примере численного решения модельных газодинамических задач.

*Ключевые слова:* математическое моделирование, программный комплекс, параллельные расчеты, турбулентные течения.

#### Roman Sergeevich Solomatin

# Realization of turbulent flows mixing and combustion model in the program complex framework

Mathematical model and numerical algorithm realization in parallel program complex for spatial turbulent multicomponent reactive flows modelling is considered. Summary of employed gas-dynamic and chemical kinetics equation systems is given. Time marching schemes and applied numerical method are described. Thorough flowcharts of program complex and its computational module operation with applied algorithms, file formats and structures, third-party packages and some realization features are introduced. Example of the result of program complex operation is demonstrated on numerical solution of model gas-dynamic problems.

*Key words:* mathematical modelling, program complex, parallel calculations, turbulent flows.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН по теме № 0580-2021-0005 "Математическое моделирование динамических процессов в деформируемых и реагирующих средах с использованием многопроцессорных вычислительных систем" (№ 121031300050-6).

Автор выражает благодарность администрации МСЦ РАН за возможность проведения расчетов на многопроцессорных системах.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, 117218 Москва, Нахимовский просп., 36, к. 1

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047 Москва, Миусская пл., 4

### Введение

С развитием вычислительной техники математическое моделирование становится основным методом решения научных и инженерных задач, вытесняя экспериментальные исследования. Проведение экспериментов часто является затратным ввиду дороговизны высокоточного регистрирующего оборудования, необходимости изготовления нескольких установок или их частей для проведения исследований с вариацией параметров. Точность же численного эксперимента зависит от используемой модели и доступных вычислительных ресурсов. Постоянное развитие моделей и рост вычислительных мощностей позволяет ученым получать все более точные результаты.

Одной из основных областей применения математического моделирования является внутренняя газодинамика. Расчет реагирующих газовых течений в трубах, каналах, трактах и иных закрытых областях актуален для таких сфер, как двигателестроение, проектирование систем пожаро- и взрывобезопасности на шахтах. Среди актуальных задач двигателестроения выделяется разработка прямоточных воздушно-реактивных двигателей нового поколения, главной особенностью которых является высокая (сверхзвуковая) скорость потоков внутри камеры, где протекают процессы смешения и горения.

Моделирование сверхзвуковых течений является сложной задачей, так как в таких течениях в большинстве случаев образуются ударные волны, взаимодействующие между собой и с особенностями расчетной геометрии. При расчете с использованием методов низкого порядка происходит «размазывание» и сильное ухудшение качества решения, в то время как применение методов повышенного порядка порождает численные неустойчивости, ведущие к необходимости снижения величины расчетного шага.

требования, Кроме этого, предъявляемые К разрабатываемым газодинамическим моделям, постоянно растут. Основным таким требованием является учет при моделировании турбулентных характеристик потока. Данное большинство требование обусловлено тем, что абсолютное течений, реализующихся в природе, носят турбулентный характер. Рост вычислительных мощностей способствует тому, что все больше численных экспериментов проводится с использованием современных вихреразрешающих подходов, позволяющих получить нестационарные мгновенные распределения параметров.

В данной работе приводится описание программного комплекса, разрабатываемого и используемого для проведения научных расчетов в отделе вычислительной ΦГУ ФНЦ НИИСИ математики PAH. Комплекс предназначается для моделирования трехмерных течений вязкого сжимаемого теплопроводного многокомпонентного газа с учетом химических реакций и используется многопроцессорных проведения расчётов на для высокопроизводительных вычислительных системах.

Дискретизация по пространству, используемая в программном комплексе, основана на методе конечных объемов. Расчетная область разбивается на

непересекающиеся многогранники произвольной формы (расчетные ячейки). Для расчетов используются многоблочные неструктурированные сетки.

Для интегрирования по времени используется две гибридные схемы: явнонеявная схема Меньшова-Накамуры вида предиктор-корректор, а также модифицированная неявная схема Кранка-Николсон (К-Н) с переключением на неявную схему Эйлера вблизи стенок для улучшения сходимости.

Повышение порядка аппроксимации по пространству достигается использованием интерполяционной схемы для подсеточного восполнения решения.

В качестве основного численного метода в программном комплексе используется безматричная модификация метода LU-SGS (Lower-Upper Symmetric Gauss-Seidel), позволяющая не только избежать операций обращения матриц, но и исключить работу с матрицами как таковую, что позволяет сэкономить как вычислительные ресурсы, так и ресурсы памяти вычислительной системы.

Основной системой уравнений является аналог осредненных уравнений Навье-Стокса. Ввиду актуальности задач, описанных выше, программный комплекс оптимизирован для расчета высокоскоростных течений. Вычисления ведутся консервативных переменных. В рамках рассматриваемого В программного комплекса доступно моделирование турбулентности с применением осредненного RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) И современного гибридного RANS-LES IDDES (Improved Delayed Detached Eddies Simulation) подхода.

В данной работе приводится описание математической модели, используемой для моделирования турбулентных течений, применяемых в работе программного комплекса численных методов и алгоритмов. Описывается принцип работы комплекса в виде блок-схемы с указанием используемых дополнительных пакетов и модулей. Демонстрируются результаты работы программного комплекса на примере численного решения некоторых модельных задач.

## 1. Математическая модель

#### 1.1. Система определяющих уравнений

Основной системой уравнений является осреднённая система Навье-Стокса, записанная для многокомпонентной смеси, дополненная уравнением однопараметрической модели турбулентности Спаларта-Аллмараса (SA) [1]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_{i}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_{i} \vec{U}\right) = \nabla \cdot \left(\rho \vec{I}_{i}\right), \\ \frac{\partial \left(\rho \vec{U}\right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{U} \vec{U}\right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_{m} + \boldsymbol{\tau}_{t}\right), \\ \frac{\partial \left(\rho E\right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\left(\rho E + p\right) \vec{U}\right) = \nabla \cdot \left[\vec{U} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_{m} + \boldsymbol{\tau}_{t}\right) + \left(\vec{\zeta}_{m} + \vec{\zeta}_{t}\right)\right] + \nabla \cdot \left(\rho \sum_{i} H_{i} \vec{I}_{i}\right), \\ \frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\tilde{v} \vec{U}\right) = \nabla \cdot \left(\frac{1}{\sigma_{v}} \left(v + \tilde{v}\right) \nabla \tilde{v}\right) + P^{v} - D^{v} + \frac{c_{b2}}{\sigma_{v}} \left[\left(\nabla \tilde{v}\right) \cdot \left(\nabla \tilde{v}\right)\right], \\ (1.1.1) \end{cases}$$

которая записывается относительно вектора консервативных переменных  $\vec{q} = (\rho_1, ..., \rho_n, \rho U_x, \rho U_y, \rho U_z, \rho E, \tilde{v})$ , где  $\rho_i$  – плотность *i*-го компонента,  $\rho = \sum \rho_i$  – плотность смеси, p – давление,  $\vec{U} = (U_x, U_y, U_z)$  – вектор скорости, E – удельная полная энергия газа, H – удельная полная энтальпия газа,  $H_i$  – энтальпия *i*-го компонента,  $\vec{I}_i = (I_{i,x}, I_{i,y}, I_{i,z})$  – диффузионный поток *i*-го компонента,  $\vec{\zeta}_m, \vec{\zeta}_t$  – молекулярная и турбулентная компоненты тензора вязких напряжений,  $\vec{\zeta}_m, \vec{\zeta}_t$  – молекулярная и турбулентная составляющие вектора плотности теплового потока,  $\tilde{v}$  – модифицированная турбулентная кинематическая вязкость,  $v = \mu_m / \rho$  – молекулярная кинематическая вязкость,  $P^v, D^v$  – выражения, отвечающие за генерацию и диссипацию турбулентной вязкости в SA модели,  $\sigma_v, c_{b2}$  – константы SA модели.

Молекулярная динамическая вязкость вычисляется по закону Сазерленда для многокомпонентной смеси:

$$\mu = \sum_{i} X_{i} \mu_{0,i} \frac{T_{0,i} + C_{i}}{T + C_{i}} \left(\frac{T}{T_{0,i}}\right)^{3/2}, \qquad (1.1.2)$$

где  $X_i = \rho_i / M_i$  – мольная доля *i*-го компонента в смеси,  $M_i$  – мольная масса. Коэффициенты теплопроводности вычисляются по аналогии Рейнольдса:

$$\lambda = \frac{C_p \mu}{\Pr}, \lambda_t = \frac{C_p \mu_t}{\Pr_t}.$$
(1.1.3)

Число Прандтля и его турбулентный аналог полагаются постоянными.

Для расчета диффузионных потоков применяется закон Фика:

$$I_{i,x_j} = -D\frac{\partial Y_i}{\partial x_j}, D = \frac{\mu}{\mathrm{Sc}} + \frac{\mu_t}{\mathrm{Sc}_t}, \qquad (1.1.4)$$

где  $Y_i = \rho_i / \rho$  – концентрация компонента, D – коэффициент диффузии.

Так же как и числа Прандтля, числа Шмидта полагаются постоянными.

Теплоемкость и энтальпия компонентов имеют полиномиальную зависимость от температуры:

$$\frac{C_p}{R} = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4, 
\frac{H}{RT} = -a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} \ln(T) + a_3 + \frac{a_4}{2} T + \frac{a_5}{3} T^2 + \frac{a_6}{4} T^3 + \frac{a_7}{5} T^4 + \frac{a_8}{T},$$
(1.1.5)

где коэффициенты *a*<sub>*k*</sub> взяты из базы [2].

Более подробно описание газодинамической модели приводится в работах [3, 4].

#### 1.2. Моделирование химических реакций

В качестве кинетической системы уравнений в программном комплексе используется система, состоящая из уравнения изменения концентраций компонент и уравнения изменения температуры смеси в результате химических реакций:

$$\frac{\partial X_{i}}{\partial t} = M_{i} \sum_{r=1}^{N_{r}} \left( b_{i,r} - f_{i,r} \right) \left[ K_{r}^{f} \prod_{i} \left( \frac{\rho_{i}}{M_{i}} \right)^{f_{i,r}} - K_{r}^{b} \prod_{i} \left( \frac{\rho_{i}}{M_{i}} \right)^{b_{i,r}} \right],$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\sum_{i} \left( \frac{\partial X_{i}}{\partial t} \left( RT - H_{i} \right) \right)}{\sum_{i} \left( X_{i} C v_{i} \right)},$$
(1.2.1)

где  $N_r$  – количество реакций,  $f_{i,r}$  и  $b_{i,r}$  – стехиометрические коэффициенты для *i*-го компонента в прямой и обратной реакции соответственно, а  $K_r^f$  и  $K_r^b$  – константы скоростей реакций.

Количество уравнений изменения концентраций в системе (1.2.1) зависит от программном используемого кинетического механизма. В комплексе глобальных проводились расчеты с использованием одностадийных кинетических механизмов для метан-кислородных, пропан-кислородных и водород-кислородных смесей, редуцированных механизмов ДЛЯ метанкислородных и пропан-кислородных смесей [5], а также более сложного детального механизма горения водородо-воздушных смесей [6].

Константы скоростей химических реакций для всех кинетических механизмов определяются по закону Аррениуса.

## 2. Численный метод

#### 2.1. Дискретизация по пространству

Пространственная дискретизация системы (1.1.1) основывается на методе конечных объемов. Расчетная область разбивается на множество непересекающихся многогранников, каждая грань  $\sigma$  которых является плоской и характеризуется площадью  $s_{\sigma}$  и единичной внешней нормалью  $\vec{n}_{\sigma}$ . Многогранники (расчетные ячейки) в свою очередь нумеруются индексом *i* и характеризуется объемом  $V_i$ . Значения вектора переменных  $\vec{q}$  задаются в центре ячеек (см. Рис. 1).



Рис. 1. Метод конечных объемов

Тогда система (1.1.1) может быть записана через поверхностный интеграл по площади грани  $\sigma$ :

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t}V_i + \sum_{\sigma} \iint_{S_{\sigma}} \left(\vec{F} - \vec{G}\right) \cdot \vec{n}_{\sigma} ds = \vec{S}_i V_i, \qquad (2.1.1)$$

где  $\vec{F} = \{\vec{F}_x, \vec{F}_y, \vec{F}_z\}$  – векторы конвективных потоков,  $\vec{G} = \{\vec{G}_x, \vec{G}_y, \vec{G}_z\}$  – векторы вязких потоков,  $\vec{S}$  – вектор источников.

#### 2.2. Дискретизация по времени

Путем введения обозначения нормальных потоков через грань  $\sigma$  как  $\vec{F}_{\sigma} = F_{k,\sigma}n_k$ ,  $\vec{G}_{\sigma} = G_{k,\sigma}n_k$  и перехода к разностной аппроксимации производной по времени система (2.1.1) записывается в виде:

$$\vec{q}_i^{n+1} = \vec{q}_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{\sigma} s_{\sigma} \left( \vec{F}_{\sigma} - \vec{G}_{\sigma} \right) + \vec{S}^n \Delta t.$$
(2.2.1)

Данная система может быть проинтегрирована по времени с использованием двух гибридных схем: явно-неявной схемы Меньшова-Накамуры [7] вида предиктор-корректор:

$$\vec{q}_{i}^{*} = \vec{q}_{i}^{\omega_{i}} - \frac{\Delta t}{2V_{i}} \omega_{i} \sum_{\sigma} \left(\vec{F}_{\sigma}^{\omega_{i}} - \vec{G}_{\sigma}^{\omega_{i}}\right) s_{\sigma},$$

$$\vec{q}_{i}^{n+1} = \vec{q}_{i}^{n} - \frac{\Delta t}{V_{i}} \sum_{\sigma} \left(\vec{F}_{\sigma}^{*} - \vec{G}_{\sigma}^{*}\right) s_{\sigma} + \Delta t \vec{S}_{i}^{*},$$
(2.2.2)

и модифицированной схемы Кранка-Николсон, переходящей вблизи стенок в неявную схему Эйлера

$$\vec{q}_{i}^{n+1} = \vec{q}_{i}^{n} - \frac{\Delta t}{V_{i}} \left[ \frac{1}{2} (1+\theta) \vec{R} (\vec{q}_{i}^{n+1}) + \frac{1}{2} (1-\theta) \vec{R} (\vec{q}_{i}^{n}) \right],$$

$$\vec{R} (\vec{q}_{i}) = \sum_{\sigma} (F_{\sigma} - G_{\sigma}) s_{\sigma} - V_{i} S_{i}.$$
(2.2.3)

Основной является гибридная явно-неявная схема. Алгоритмы программного комплекса строились под реализацию данной схемы. Реализация добавленной позднее гибридной схемы Кранка-Николсон основана на небольшой модификации алгоритмов явно-неявной схемы – отключении предиктора, установке фиксированного значения  $\omega_i = 0.5$  во всех ячейках и активации функции  $\theta$ , которая тождественно равна нулю для явно-неявной схемы.

Гибридная схема (2.2.2) является неявной во всех случаях, кроме случая когда  $\omega = 1$  во всех расчетных ячейках. Для ее решения вводится итерационный параметр  $\tau$ , называемый псевдовременем, и на каждом расчетном шаге выполняется поиск решения методом установления [8].

Более подробно используемые схемы интегрирования по времени описаны в работах автора [3, 9].

#### 2.3. Интерполяция

Порядок аппроксимации по пространству зависит от того, какие значения вектора консервативных переменных  $\vec{q}$  используются для расчета потоков через грань  $\sigma$ . Если значения берутся непосредственно из центров ячеек, то такая схема будет иметь только первый порядок. Для повышения порядка используется интерполяционная схема. Значения слева и справа от грани  $\sigma$  вычисляются по схеме ван Лира, обобщающей использование MUSCL схемы на неравномерные сетки [10, 11, 12], адаптированной для расчета на неструктурированных сетках [13]:

$$\vec{q}_{i}^{\pm} = \vec{q}_{i} \pm 0.5\delta^{\pm} \Big[ \Big( 1 - k^{\pm} \Big) \Delta^{\mp} + \Big( 1 - k^{\pm} \Big) \Delta^{\pm} \Big],$$
  
$$\vec{q}_{\sigma,l} = \vec{q}_{i}^{+}, \vec{q}_{\sigma,r} = \vec{q}_{j}^{-},$$
(2.3.1)

где  $\Delta^+ = \vec{q}_{i+1} - \vec{q}_i$ ,  $\Delta^- = \vec{q}_i - \vec{q}_{i-1}$  – конечные разности между соседними ячейками,  $\delta^+ = h_i / (h_i + h_{i+1})$ ,  $\delta^- = h_i / (h_i + h_{i-1})$  – параметры неравномерности сетки,  $h_i$  – расстояние между центрами *i* -й и *j* -й ячеек. Здесь и далее считается, что ячейки *i* и *j* разделены гранью  $\sigma$  так, что нормаль направлена из ячейки *i* в ячейку *j*.

Для предотвращения возникновения развития нефизичных осцилляций разности  $\Delta^{\pm}$  модифицируются с использованием ограничителей потока [3].

#### 2.4. Вычисление потоков

Основным методом для вычисления конвективных потоков является метод Годунова, основанный на решении задачи Римана о распаде разрыва на грани  $\sigma$ . Также для расчета конвективных потоков может быть использован гибридный низкодиссипативный метод, основанный на смешении потоков Русанова и центрально-разностной аппроксимации:

$$\vec{f}_{hyb} = \vec{f}_{CD} - \frac{1}{2}\varphi \rho_{\sigma} \left( \vec{q}_{\sigma,r} - \vec{q}_{\sigma,l} \right), \qquad (2.4.1)$$

где  $\rho_{\sigma}$  – спектральный радиус матрицы Якоби системы уравнений,  $\varphi$  – коэффициент гибридности. Механизм расчета данного коэффициента приводится в [3].

Для вычисления вязких потоков применяется обобщенный метод центральных разностей.

#### 2.5. LU-SGS

В качестве основного численного метода для решения системы линейных уравнений в программном комплексе используется безматричная модификация метода LU-SGS (Lower-Upper Symmetric Gauss-Seidel). Применение данной модификации позволяет получить экономию как в вычислительных ресурсах, так и в ресурсах памяти.

Формулировка метода LU-SGS в терминах приращения вектора консервативных переменных может быть представлена в виде прямого и обратного обходов ячеек [14, 15]:

$$\begin{cases} \delta \vec{q}_{i}^{s,*} = -\frac{1}{\left(\frac{\Delta t}{\Delta \tau} + 1\right) + \vec{d}_{i} \boldsymbol{I}} \left[ \vec{R}_{i}^{s} + \sum_{\sigma(i): j < i} \vec{G}_{\sigma} \left(\delta \vec{q}_{j}^{s,*}\right) \right], \\ \delta \vec{q}_{i}^{s} = \delta \vec{q}_{i}^{s,*} - \frac{1}{\left(\frac{\Delta t}{\Delta \tau} + 1\right) + \vec{d}_{i} \boldsymbol{I}} \left[ \sum_{\sigma(i): j > i} \vec{G}_{\sigma} \left(\delta \vec{q}_{j}^{s}\right) \right], \end{cases}$$

$$\vec{G}_{\sigma} \left(\delta \vec{q}_{j}^{s}\right) = 0.5 \frac{\Delta t}{V_{i}} s_{\sigma} \left(1 - \omega_{j}\right) \left[ \boldsymbol{T}_{j}^{-1} \delta \vec{f}_{j}^{s} - \left(\rho_{\sigma} - 2 \bar{v}_{\sigma}\right) \delta \vec{q}_{j}^{s} \right], \qquad (2.5.1)$$

где  $\Delta t$  – шаг по времени,  $\Delta \tau$  – итерационный параметр «псевдовремя»,  $\vec{R}_i^s$  – вектор невязки, *s* – номер итерации по псевдовремени, *T* – матрица перехода к ортонормированному базису, связанному с гранью ячейки  $\sigma$ ,  $\rho_{\sigma}$  – спектральный радиус матрицы Якоби,  $\bar{v}_{\sigma}$  – вектор, состоящий из модифицированных диагональных элементов матрицы, мажорирующей якобиан вязкости [15].

Вектор  $\vec{d}_i$  записывается как

$$\vec{d}_i = 0.5 \frac{\Delta t}{\Delta \tau} (1 - \omega_i) \sum_{\sigma} s_{\sigma} (\rho_{\sigma} - 2\overline{\nu}_{\sigma}).$$
(2.5.2)

# 3. Схема работы программного комплекса

#### 3.1. Общая информация

Рассматриваемый программный комплекс разрабатывается в отделе вычислительной математики ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН и предназначен для проведения предсказательного моделирования физико-химических процессов в пространственных течениях вязкого теплопроводного многокомпонентного газа. Комплекс написан на языке программирования СИ++, является параллельным и используется для расчетов с использованием высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных систем. Параллельная реализация функционала программного комплекса основывается на декомпозиции расчетной области (сетки) и обеспечении параллельной работы функций и взаимодействия между процессорами. Для параллельной реализации функций и коммуникации между процессорами применяется интерфейс MPI (Message Passing Interface) [16].

#### 3.2. Устройство внешнего модуля

Устройство программного комплекса может быть схематично разделено на три части: газодинамический расчетный модуль, модуль расчета химической кинетики, а также «внешний» модуль – совокупность функций, отвечающих за

работу с памятью, конфигурацию расчета, чтение и запись файлов, сохранение решения и т.д.

Работа программного комплекса начинается с «внешнего» модуля. Для старта расчета в директории требуется наличие двух файлов: конфигурационного файла *config* и файла расчетной сетки *geom.cgns*, а также дополнительно файлов *checkpoint-link* и *solution.chk* в случае продолжения расчета. Алгоритм работы данного модуля представлен в виде блок-схемы на Рис. 3.

#### 3.3. Конфигурационный файл

Конфигурационный файл config записан в JSON [17] формате и разделен на секции. Обязательными секциями являются task – конфигурация и основные параметры расчета, такие как название задачи, используемая схема интегрирования по времени, используемая модель турбулентности, используемый численный метод, величина шага по времени  $\Delta t$ , величина итерационного параметра  $\Delta \tau$ , параметры изменения числа cfl, максимальное количество итераций метода Ньютона на расчетном шаге и т.д.; constants основные константы pacчета; gas\_parameters – физические и химические свойства газовых компонент, участвующих в расчете; regions - начальные условия расчета; boundaries - граничные условия. Также в файле могут присутствовать дополнительные секции, необходимые для работы конкретных алгоритмов (к примеру, периодических граничных условий).

### 3.4. Система управляющих файлов

Большинство параметров, задаваемых в файле, не подлежат изменению в процессе расчета, однако для некоторых величин «горячая» смена значений доступна и реализована через систему управляющих файлов. Данная система представляет набор файлов, имеющих специальные названия и содержание, которые создаются пользователем в директории расчета. Каждый расчетный шаг алгоритм считывает наличие данных файлов в директории расчета и при необходимости вносит изменение в параметры расчета.

На данный момент в системе доступны следующие файлы:

- *dump\_chk* внеочередное сохранение файла решения после текущего расчетного шага,
- *step\_period\_chng* изменение количества расчетных шагов, через которое происходит сохранение файла решения,
- *dt\_chng* изменение величины шага по времени,
- *dtps\_chng* изменение величины итерационного параметра «псевдовремя»,
- *cfl\_chng* изменение текущего значения *cfl*,
- *max\_cfl\_chng* изменение параметра *max\_cfl*,
- *cfl\_step\_chng* изменение параметра *cfl\_step*,

- *cfl\_factor\_chng* изменение параметра *cfl\_factor*,
- *maxiter\_chng* изменение максимального количества итераций метода Ньютона на расчетном шаге.

Параметры  $cfl,max_cfl,cfl\_step,cfl\_factor$  используются для динамического расчета значения итерационного параметра  $\Delta \tau$ .

Файлы, заканчивающиеся на *\_chng*, должны содержать новое значение параметра для успешного обновления. На каждом расчетном шаге считываются все контрольные файлы, находящиеся в директории, и обновляются все параметры, для которых они найдены.

При проведении многопроцессорных расчетов контрольные файлы считываются и обрабатываются процессором с наименьшим рангом, а затем происходит рассылка обновленных значений параметров на остальные процессоры.

#### 3.5. Расчетная сетка

Для расчетов используются многоблочные неструктурированные сетки, записанные в формате CGNS [18]. При проведении расчетов на высокопроизводительных многопроцессорных системах после считывания сетки осуществляется ее декомпозиция между процессорами. Для этого используется пакет PARMETIS [19]. Пример декомпозиции расчетной области показан на Рис. 2.



Рис. 2. Пример декомпозиции расчетной области

На этапе считывания сетки также выполняется алгоритм вычисления расстояния до стенки  $d_w$  для каждой расчетной ячейки, а также единичного вектора, указывающего направление из центра ячейки в сторону ближайшей стенки, который в дальнейшем используется для вычисления величины  $h_{wn}$  (см. [3]). Величины  $d_w$  и  $h_{wn}$  необходимы для алгоритмов моделирования турбулентности. Для работы данного алгоритма используется библиотека ANN (Approximate Nearest Neighbor) [20], реализующая построение kd-деревьев и поиск по ним (kd-дерево – дерево для хранения точек из  $\Box^k$ ). Дерево для поиска

формируется из точек, являющихся центрами граней, лежащих на границе расчетной области.

#### 3.6. Структура хранения данных

В структуре данных, связанной с каждой расчетной ячейкой, хранится вся информация, необходимая для проведения расчета. Структура разделена на три части. В первой части хранятся сведения о геометрии ячейки – координаты ее центра, объем, координаты центров граней и т.д. Во второй части содержится информация, касающаяся непосредственно расчетной сетки – индексы соседей ячейки по каждой грани в случае, если грань является внутренней, или тип граничных условий на грани, если грань внешняя. Также в данной части хранится идентификатор процессора, на котором находится ячейка.

Третья часть структуры данных содержит вектор данных в ячейке. Длина вектора данных является переменной и зависит от конфигурации расчета. Данные, которые обязательно содержатся в векторе:

- Вектор решения на предыдущем шаге  $\vec{q}^n$ ,
- Вектор решения на текущей итерации метода Ньютона  $\vec{q}^{n+1,s}$ ,
- Вектор смещения решения  $\delta \vec{q}^s$ ,
- Вектор невязки  $\vec{R}(\vec{q}^{n+1,s}),$
- Вектор предиктора текущей итерации метода Ньютона  $\vec{q}^*$ ,
- Три вектора производных вектора решения по направлениям  $\frac{\partial \vec{q}^{n+1,s}}{\partial x}, \frac{\partial \vec{q}^{n+1,s}}{\partial y}, \frac{\partial \vec{q}^{n+1,s}}{\partial z},$
- Вектор элементов *d* (2.5.2),
- Т-температура,
- *МАХР* максимальное давление, достигнутое в ячейке, за время расчета,
- gamma показатель адиабаты,
- *w*-параметр гибридности,
- $\Delta \tau$  величина итерационного параметра «псевдовремя».

Параметр *MAXP* используется для визуализации поля постоянного давления, являющегося численным аналогом шлирен-фотографии, что необходимо при исследовании структуры детонационной волны.

При различных настройках расчета в вектор данных могут добавляться дополнительные поля. К примеру, в случае выбора в качестве схемы интегрирования по времени модифицированной схемы К-Н, в вектор данных добавляется вектор невязки на предыдущем временном слое  $\vec{R}(\vec{q}^n)$ , а в случае расчета с использованием модели турбулентности вектор данных хранит также данные о молекулярной и турбулентной вязкости, трении на стенке и т.д.

Как уже неоднократно отмечалось, система уравнений (1.1.1) записывается относительно вектора консервативных переменных  $\vec{q}$ . Однако для удобства вывода распределения параметров в файл решения с целью дальнейшей визуализации векторы решения  $\vec{q}^n$ ,  $\vec{q}^{n+1,s}$  и вектор предиктора  $\vec{q}^*$  записываются в элементарных переменных

$$\vec{q} = \left(\rho_1, \cdots, \rho_n, U_x, U_y, U_z, p, \tilde{v}\right).$$
(3.6.1)

Для перевода вектора из примитивных переменных в консервативные используются специальные функции. Конвертация в консервативные переменные происходит путем вычисления. При конвертации обратно из величины  $\rho E$ , плотности и вектора скорости производится расчет внутренней энергии e, далее по методу Ньютона выполняется вычисление температуры и затем давления через уравнение состояния.

#### 3.7. Файлы решения

Файлы решения, используемые программным комплексом, имеют бинарный формат и разделены на две части. Основная часть файла содержит распределение параметров в расчетной области, а в заголовке записывается информация о том, какому расчетному шагу и какому моменту по времени соответствует данный файл решения, а также с каким шагом по времени  $\Delta t$  выполнялся расчет до записи данного файла. Также в случае, если решение содержит осреднённые по времени величины, в файл записывается период, за который выполнялось осреднение.

Как уже было отмечено в предыдущем пункте, в каждой расчетной ячейке хранится вектор переменных, которые подразделяются на обязательные, которые присутствуют всегда, и дополнительные, набор которых является гибким и зависит от конфигурации расчета. В конфигурационном файле задается список переменных, которые должны записываться в файлы решения, что в случае надобности позволяет сократить объем файлов решения. Однако если в файл не будут записаны переменные, необходимые для продолжения расчета, выполнить старт с такого файла будет невозможно, о чем будет выдано предупреждение при сохранении файла. Необходимыми для рестарта переменными являются основной вектор переменных  $\vec{q}$ , а также максимальное значение давления, достигнутое в ячейке за время расчета *MAXP*.

Для визуализации и обработки решения после расчета используется программа-конвертер, позволяющая из файла сетки и файлов решения получить файл в формате plt для обработки в программе Tecplot [21].

#### 3.8. Модуль расчета химической кинетики

Для моделирования химических реакций между компонентами газовой смеси в программном комплексе используется расчетный модуль, задачей которого является решение системы уравнений химической кинетики (ссылка).

В соответствии с п. 2.2. система решается с помощью ФДН-методов Гира. Центром данного модуля является интегратор DLSODE [24], написанный на языке программирования *fortran*77. Данная реализация была выбрана, так как по результатам тестов она показала хороший уровень быстродействия. Взаимодействие между интегратором и остальным программным комплексом обеспечивается специальной библиотекой совместимости.

Интегратор DLSODE обладает широким функционалом и позволяет использовать методы Гира с порядком интегрирования вплоть до 5-го, однако, так как используемые в газодинамическом модуле схемы интегрирования по времени обладают вторым порядком аппроксимации, работа интегратора также ограничена вторым порядком. DLSODE способен автоматически осуществлять дробление внешнего шага интегрирования ( $\Delta t$ ) для ведения устойчивого счета, а также заменять интегрирование линейной экстраполяцией в случае если модуль градиента переменной мал. Такая замена позволяет существенно ускорять расчет в областях, где реакции идут очень медленно.

На вход модуль расчета химической кинетики принимает вектор элементарных переменных  $\vec{q} = (\rho_1, ..., \rho_n, U_x, U_y, U_z, p)$ , по которому вычисляется вектор  $\vec{y} = (X_1, ..., X_n, T)$ , где  $X_k$  – мольная доля компонента, и подает его на вход интегратора. Интегратор в свою очередь выдает обратно вектор  $\vec{y}' = (X_1', ..., X_n', T')$  с измененными в процессе химических реакций за время  $\Delta t$ концентрациями и температурой. Далее выполняется обратный пересчет плотностей и давления в векторе элементарных переменных.

#### 3.9. Расчетный шаг алгоритма

Газодинамический модуль и модуль расчета химической кинетики работают внутри расчетного шага алгоритма программного комплекса. Первый из них решает дискретный аналог осредненных уравнений Навье-Стокса для многокомпонентных смесей (1.1.1), а второй – систему кинетических уравнений (1.2.1). Модуль расчета химической кинетики может запускаться как на каждом расчетном шаге газодинамического алгоритма при расчете в нестационарном режиме (число Куранта по физическому времени конечно), так и на каждой итерации метода Ньютона при расчете в квазистационарном режиме. Более подробно взаимодействие модулей будет рассмотрено далее.

Расчетный шаг алгоритма начинается с проверки наличия контрольных файлов, изменяющих непосредственно параметры расчета (файлы за исключением первых двух в списке п. 3.4.). В случае наличия данных файлов выполняется обновление параметров, и текущий шаг выполняется с обновленными значениями.

Далее выполняются итерации метода Ньютона, максимальное количество которых определяется параметром *maxiter*, задаваемым в конфигурационном файле. Каждая итерация представляет последовательность обходов по ячейкам.

На каждой расчетной итерации происходит вычисление вектора смещения  $\delta \vec{q}_i^s$  и обновление вектора переменных в расчетной ячейке в соответствии с формулой

$$\vec{q}_i^{n+1,s+1} = \vec{q}_i^{n+1,s} + \delta \vec{q}_i^s, \qquad (3.9.1)$$

где *s*-номер итерации, а также вычисление вектора невязки. В конфигурационном файле может быть задано абсолютное и относительное значение невязки, по достижении которого итерации метода Ньютона на текущем расчетном шаге завершаются до достижения максимального количества *maxiter*.

По завершении итераций полученный вектор переменных  $\vec{q}_i$  считается газодинамическим решением на n+1 временном слое.

В случае проведения нестационарного расчета с учетом химических реакций применяется принцип разделения по процессам, и модуль расчета химических реакций запускается после всех газодинамических итераций. Входными данными для модуля служит вектор  $\vec{q}_i$ , а выходными – преобразованный вектор  $\vec{q}_i$ ' с измененными в результате реакций плотностями компонент и давлением. Данный вектор является решением на n+1 шаге.

В конце расчетного шага решение копируется в вектор  $\vec{q}_i^n$  для подготовки к следующему расчетному шагу. После обновления вектора решения происходит пересчет дополнительных параметров.

При расчетах нестационарных турбулентных течений с применением вихреразрешающего подхода возникает необходимость получения не только мгновенных, но и осредненных по времени величин. В этом случае после выполнения расчётного шага запускается процедура осреднения по принципу получения мгновенного среднего

$$f_{av}^{n+1} = \frac{f_{av}^{n} \cdot t^{n} + f^{n+1} \cdot \Delta t^{n+1}}{t^{n} + \Delta t^{n+1}},$$
(3.9.2)

где  $f_{av}^{n}$  – среднее значение величины f за n шагов алгоритма,  $\Delta t^{n+1}$  – величина n+1-го шага по времени, а  $t^{n} = \sum_{i=1}^{n} \Delta t^{i}$  – время, прошедшее с начала процедуры

осреднения.

Алгоритм работы газодинамического модуля и модуля расчета химической кинетики представлен на блок-схеме на Рис. 4 и 5

#### 3.10. Начало расчетной итерации

На первом обходе итерации метода Ньютона выполняется вычисление параметра гибридности  $\omega$ , а также величины итерационного параметра  $\Delta \tau$  в расчетных ячейках. Для этого определяется шаг по времени для явной схемы в

ячейке Δ*t*<sub>*ext*</sub> на основе локального критерия устойчивости. Параметр гибридности является отношением шага по явной схеме к выбранному:

$$\omega_i = \frac{\Delta t_{ext}}{\Delta t},\tag{3.10.1}$$

что соответствует обратному числу Куранта-Фридрихса-Леви (1/cfl) по физическому времени. В случае использования для расчета гибридной явнонеявной схемы интегрирования по времени значение  $\omega_i$  в ячейках заполняется, а в случае применения модифицированной схемы К-Н параметру гибридности присваивается фиксированное значение  $\omega_i = 0.5$ .

Значение итерационного параметра  $\Delta \tau$  может быть как задано постоянным из конфигурационного файла, так и вычисляться в каждой расчетной ячейке на основе шага по критерию устойчивости и заданного числа  $cfl: \Delta \tau = cfl \cdot \Delta t_{ext}$ . Число cfl также может быть как задано постоянным, так и динамически увеличиваться в процессе расчета, что необходимо для формирования «разгонного участка» на первых шагах расчета. Для этого необходимо задать четыре параметра *init\_cfl, max\_cfl, cfl\_step, cfl\_factor*. В начале расчета значение *cfl* устанавливается равным *init\_cfl*. Далее через каждые *cfl\_step* итераций текущее значение *cfl* умножается на величину *cfl\_factor* до тех пор, пока значение не достигнет *max\_cfl* 

$$cfl = \min(max_cfl, cfl \times cfl_step).$$
(3.10.2)

Затем, на втором обходе, в ячейках вычисляются производные по методу наименьших квадратов путем решения системы

$$\vec{Aq} = \vec{B}, \tag{3.10.3}$$

где

$$\vec{\dot{q}} = \left(\frac{\partial \vec{q}_i^{n+1,s}}{\partial x}, \frac{\partial \vec{q}_i^{n+1,s}}{\partial y}, \frac{\partial \vec{q}_i^{n+1,s}}{\partial z}\right), A_{\alpha\beta} = \sum_{\sigma(i)} \frac{r_\alpha \cdot r_\beta}{\left|\vec{r}\right|^2}, B_\alpha = \sum_{\sigma(i)} \frac{r_\alpha \cdot \delta q_{ij}}{\left|\vec{r}\right|^2}, \quad (3.10.4)$$

 $\sigma(i)$  – набор граней *i*-й ячейки,  $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z)$  – вектор, соединяющий центр *i*-й ячейки с центром *j*-й ячейки в случае если  $\sigma$  – внутренняя грань и с центром грани  $\sigma$ , если  $\sigma$  – граница расчетной области,  $\delta q_{ij} = q_j - q_i$ ,  $q_j$  – значение в соседней ячейке или на грани  $\sigma$  в зависимости от вида грани.

После расчета производных в случае использования гибридной явнонеявной схемы выполняется расчет вектора предиктора  $\vec{q}^*$  в соответствии с первым уравнением (2.2.2). Полученные значения предиктора используются при расчете конвективных потоков на прямом обходе LU-SGS алгоритма. В случае использования схемы К-Н в значения предиктора записываются значения  $\vec{q}^{n+1,s}$  с предыдущей итерации по псевдовремени.

#### 3.11. Прямой и обратный обходы алгоритма LU-SGS

Основной частью итерации являются прямой и обратный обходы ячеек в рамках работы LU-SGS алгоритма (см. (2.5.1)), в процессе которых происходит расчет вектора приращения  $\delta \vec{q}^{n+1,s}$ .

Перед прямым обходом выполняется расчет вектора источников для основной газодинамической системы уравнений. При проведении нестационарных расчетов источник отличен от нуля только для последней компоненты вектора  $\vec{q}$  – модифицированной турбулентной вязкости  $\tilde{v}$ :

$$\vec{S} = \left(0, \dots, 0, 0, 0, 0, 0, 0, P^{\nu} - D^{\nu} + \frac{c_{b2}}{\sigma} \left[ \left(\nabla \tilde{\nu}\right) \cdot \left(\nabla \tilde{\nu}\right) \right] \right), \quad (3.11.1)$$

однако при расчете стационарных задач, что достигается выполнением одного квазибесконечного  $(\Delta t \approx 10^{25} c)$  шага по физическому времени с выполнением большого количества итераций метода Ньютона, рассматривающих химические реакции между компонентами, на каждой итерации запускается модуль расчета химической кинетики, а результат его работы подставляется в качестве источника по плотности и энергии в газодинамическую систему. Это происходит следующим образом: как уже отмечалось ранее, модуль расчета химической кинетики принимает на вход вектор параметров  $\vec{q}$ , а выдает измененный вектор  $\vec{q}$ . Произведя вычитание начального вектора из конечного и деление разности на величину шага по времени, мы получаем вектор

$$\left(\frac{\partial \vec{q}_i}{\partial t}\right)_{chem} = \frac{\vec{q}_i' - \vec{q}_i}{\Delta t},$$
(3.11.2)

который используется в качестве источника в ячейке. Это возможно, так как модуль расчета химической кинетики не имеет ограничения на величину шага по времени и при необходимости производит его разбиение для учета характерных скоростей всех реакций. Тогда вектор источников  $\vec{S}$  будет иметь следующий вид:

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \rho_1}{\partial t}\right)_{chem}, \dots, \left(\frac{\partial \rho_n}{\partial t}\right)_{chem}, 0, 0, 0, \left(\frac{\partial (\rho E)}{\partial t}\right)_{chem}, \\ P^{\nu} - D^{\nu} + \frac{c_{b2}}{\sigma} \left[ \left(\nabla \tilde{\nu}\right) \cdot \left(\nabla \tilde{\nu}\right) \right] \end{pmatrix}.$$
(3.11.3)

После вычисления вектора источников выполняются непосредственно прямой и обратный обходы LU-SGS алгоритма. При проведении расчетов в

многопроцессорном режиме для данных обходов используется измененная схема прохода по ячейкам с обменами значениями на границе процессоров в процессе обхода. Во всех других случаях каждый из процессоров независимо осуществляет обход своего набора ячеек, и после этого производится обмен. Изменение последовательности обхода необходимо для оптимальной работы параллельного алгоритма, так как для расчета значения в *i*-й расчетной ячейки, ее соседи, имеющие индекс меньше *i* при прямом обходе и больше *i* при обратном, должны содержать уже обновленные значения.

Для каждой расчетной ячейки выполняется обход по набору граней  $\sigma(i)$ . Специальный флаг позволяет контролировать последовательность действий для каждой грани в зависимости от типа грани и индекса соседа текущей ячейки, через рассматриваемую грань.

Во время прямого обхода алгоритма доступно три варианта:

- Соседняя ячейка j еще не обходилась алгоритмом (flag=0). В этом случае вычисляются конвективные и диффузионные потоки через грань  $\sigma$  и учитываются в расчете невязки как для i-й, так и для j-й ячейки (с противоположными знаками). Также вместе с потоками вычисляются величины  $\rho_{\sigma}$  и  $\bar{v}_{\sigma}$ , которые используются для расчета  $\vec{d}_i$  и  $\vec{d}_i$  (2.5.2).
- Грань σ является внешней (*flag*≥2). В этом случае выполняется расчет вектора *q*<sub>σ</sub> на грани в соответствии с граничными условиями. После этого происходит вычисление потоков аналогично предыдущему варианту за исключением того, что вектор невязки и вектор *d* модифицируются только для *i*-й ячейки.
- Соседняя ячейка *j* уже обходилась алгоритмом (*flag=1*). В случае расчета ячейки *j* по явной схеме ( $\omega_j = 1$ ) данная грань пропускается так как вклад в невязку от ячейки *j* уже был посчитан. В противном случае производится вычисление вектора  $\vec{G}_{\sigma}(\delta \vec{q}_{j}^{s,*})$  (2.5.1).

После прямого обхода формируется промежуточный вектор смещения  $\delta \vec{q}_i^{s,*}$ .

Обратный обход выполняется с проходом по ячейкам в обратную сторону и в процессе него обрабатывается только третий случай из описанных выше. В других случаях грани пропускаются. По итогу производится вычисление конечного вектора приращения  $\delta \vec{q}_i^{n+1,s}$ , который используется для обновления значений в ячейке.



Рис. 3. Схема работы внешней части алгоритма



Рис. 4. Схема расчетного шага алгоритма

21



Рис. 5. Схема расчетного шага алгоритма (продолжение)

22

# 4. Результаты расчетов

Реализация алгоритмов, описанных в данной работе, валидировалась автором в работах [3, 4, 9].

В данной главе приводятся выборочные результаты расчетов, полученные с использованием описанного программного комплекса.

#### 4.1. Расчет задержек самовоспламенения водородновоздушной смеси

Рассматриваются две серии расчетов в 0D постановке при различных начальных параметрах смеси (давление, температура, коэффициент избытка топлива).

В первой серии расчетов использовалась смесь водорода с кислородом с коэффициентом избытка топлива  $\varphi = 0.5$ , дополнительно разбавленная 1:5 азотом. Расчет проводился для давлений 1, 4 и 16 бар в диапазоне температур 1000-2000 К с использованием 22-стадийного кинетического механизма [6].

Сравнение выполнялось с данными об измеренных задержках воспламенения, полученными в DLR (Германия) и приведёнными в работе [6]. Задержка рассчитывалась по максимальной концентрации радикала OH.

Вторая серия расчетов была выполнена для стехиометрической смеси  $\varphi = 1$  при давлении 2 атм. Температура варьировалась в диапазоне 910-1250 К. Результаты сравнивались с экспериментальными данными из работы [22].

Результаты сравнения для обеих серий приводятся на рис. 6.



Рис. 6. Результаты сравнения для первой (слева) и второй (справа) серий расчетов

# 4.2. Расчет процессов смешения и горения в модельной камере сгорания Барроуса-Куркова

Рассматривается процесс смешения параллельных потоков технического воздуха M = 2.44 и водорода M = 1.0 в модельной камере сгорания Барроуса-Куркова [23]. Геометрия камеры, газодинамические параметры потоков и массовый состав потока технического воздуха приводятся в работе автора [4].

Задача решалась в 3D с использованием RANS подхода к моделированию турбулентности. Размер расчетной сетки – 8.8 млн ячеек. Размер пристеночной ячейки составлял  $5 \cdot 10^{-6}$  м, что соответствует  $y^+ = 2$ .

На рис. 7 приводится распределение массовой доли радикала ОН в зоне вдоль центрального продольного сечения камеры, а на Рисунке 8 – аналогичное распределение индекса пламени  $G_f$ , выведенного в зоне, где величина среднего тепловыделения превышает 0.1% от максимального.

$$G_{f} = \frac{\left(\nabla Y_{O_{2}} \cdot \nabla Y_{H_{2}}\right)}{\left|\nabla Y_{O_{2}} \cdot \nabla Y_{H_{2}}\right|},$$
(4.2.1)

с дополнительно нанесенной изолинией T = 2250 K, схематично обозначающую зону пламени. Индекс пламени показывает реализуемый режим горения. Он стремится к -1 в случае неперемешанной смеси и к 1 – в случае перемешанной смеси.



Рис. 7. Распределение массовой доли радикала ОН в центральном продольном сечении



Рис. 8. Распределение индекса пламени в центральном продольном сечении

# 4.3. IDDES расчет пограничного слоя на периодической плоской пластине

Рассматривается турбулентное течение инертного газа на плоской пластине. Скорость в ядре потока 1720 м/с, давление 96 кПа, температура 1130 К.

Расчет проводился в 3D. Размер сетки 2.5 млн ячеек, размер пристеночной ячейки 5 · 10<sup>-6</sup> м. Пластина адиабатическая. На границах вход-выход и боковых границах установлены периодические граничные условия.

Используемый шаг по времени  $\Delta t = 10$  нс.

На рис. 9 приводятся распределение продольной скорости [км/с] (слева), а также визуализация турбулентных структур с помощью Q-критерия (справа).



Рис. 9. Распределение продольной скорости (слева) и изоповерхность Q=100 в расчете течения на плоской пластине (справа)

# Заключение

В работе приводятся описание и схема работы программного комплекса для моделирования пространственных турбулентных реагирующих течений с учетом вязкости, теплопроводности и диффузии. Принцип работы комплекса описывается в виде блок-схем с указанием используемых алгоритмов, пакетов и модулей. Приводится краткое описание математической модели, используемой для моделирования турбулентных течений, применяемых в работе программного комплекса численных методов и алгоритмов. Демонстрируются результаты работы программного комплекса на примере численного решения некоторых модельных задач внутренней газодинамики.

# Список литературы

1. Spalart P.R., and Allmaras S.R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows // AIAA Paper 1992-0439. 23 p., <u>doi:10.2514/6.1992-439</u>

- 2. Burcat, A. and Ruscic B. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with updates from Active Thermochemical Tables. ANL-05/20 and TAE 960 Technion-IIT // Aerospace Engineering, and Argonne National Laboratory, Chemistry Division. 2005.
- 3. Соломатин Р.С. О моделировании формирования нестационарного турбулентного пограничного слоя в рамках SA-IDDES подхода // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, № 33, 2022. 34 с. doi:10.20948/prepr-2022-33
- 4. Solomatin, R.S. and Semenov I.V. Modelling of hydrogen-air supersonic mixing and combustion in near-wall region // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, vol. 36, no. 2. 2021. Pp. 101-115. <u>doi:10.1515/rnam-2021-0009</u>
- 5. Басевич В.Я. Фролов С.М Глобальные кинетические механизмы, использующиеся при моделировании многостадийного воспламенения углеводородов в реагирующих течениях // Химическая физика. Т 25, №6. 2006. С. 54 62. <u>https://doi.org/10.7868/S0207401X18060067</u>
- 6. Keromnes A. et al. An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures // Combustion and Flame 160. 2013. Pp. 995–1011. doi:10.1016/j.combustflame.2013.01.001
- Menshov I. and Nakamura Y. Hybrid explicit-implicit, unconditionally stable scheme for unsteady compressible flows // AIAA Journal, 42(3), 2004, pp. 551-559. doi:10.2514/1.9109
- Luo H., Baum J.D., Lohner R. An accurate, fast, matrix-free implicit method for computing unsteady flows on unstructured grids // Computers and Fluids 30, 2001, pp. 137-159, 2000. <u>doi:10.1016/S0045-7930(00)00011-6</u>
- 9. Соломатин Р.С., Семенов И.В., Меньшов И.С. К расчету турбулентных течений на основе модели Спаларта-Аллмараса с применением LU-SGS– GMRES алгоритма // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, № 119. 2018. 30 с. <u>doi:10.20948/prepr-2018-119</u>
- Anderson W.K., Thomas J.L. and Van Leer B. Comparison of Finite Volume Flux Vector Splittings for the Euler Equations. AIAA Journal, vol. 24, № 9. 1986. Pp. 1453–1460. doi:10.2514/3.9465
- Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V A secondorder sequel to Godunov's method // Journal of Computational Physics. V. 32. 1974. Pp. 101-136. doi:10.1016/0021-9991(79)90145-1
- 12. Van Leer B., and Nishikawa H. Towards the Ultimate Understanding of MUSCL: Pitfalls in Achieving Third-Order Accuracy // J. Computational Phys. 2021. 30 p.
- Меньшов И.С., Павлухин П.В. Эффективный параллельный метод сквозного счета задач аэродинамики на несвязных декартовых сетках // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. Т 56, № 9. 2016. С. 1677–1691. doi:10.7868/S0044466916090143

- 14. Men'shov I.S., Nakamura Y. Implementation of the LU–SGS method for an arbitrary finite volume discretization // Proc. of 9th Conference on CFD, Tokyo, 1995, p. 123.
- 15. Men'shov I.S., Nakamura Y. On implicit Godunov's method with exactly linearized numerical flux // Computers & Fluids 29, 2000, pp. 595-616. doi:10.1016/S0045-7930(99)00020-1
- 16. MPI. <u>https://www.mpi-forum.org/docs/mpi-4.0/mpi40-report.pdf</u>
- 17. JSON. Электронный pecypc. URL: <u>https://www.json.org/json-en.html</u>
- 18. CFD General Notation System. Электронный ресурс. URL: <u>https://cgns.github.io/index.html</u>
- LaSalle, D. and G. Karypis. Multi-Threaded Graph Partitioning. 27<sup>th</sup> IEEE International Parallel & Distributed processing Symposium. 2013. 12 p. doi:10.1109/IPDPS.2013.50
- Mount, D.M., and S. Arya. ANN: A Library for Approximate Nearest Neighbor Searching [Электронный ресурс]. 2010. URL: http://www.cs.umd.edu/~mount/ANN/
- 21. Tecplot. URL: https://www.tecplot.com
- Bezgin L.V., Kopchenov V.I., Sharipov A.S., Titova N.S. and Starik A.M. Evaluation of Prediction Ability of Detailed Reaction Mechanisms in the Combustion Performance in Hydrogen/Air Supersonic Flows // Combustion Science and Technology. 185:1. 2013. Pp. 62-94. doi:10.1080/00102202.2012.709562
- 23. Burrows, M.C., and Kurkov A.P. Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Air Stream Using Stepped-wall Injection // NASA-TM-67840. 1971. 15 p.
- 24. Radhakrishnan K., and Hindmarsh A.C. Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations. Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-113855. 1993.

#### Оглавление

Введение	
1. Математическая модель	
1.1.	Система определяющих уравнений 4
1.2.	Моделирование химических реакций 6
2. Чи	сленный метод7
2.1.	Дискретизация по пространству7
2.2.	Дискретизация по времени7
2.3.	Интерполяция8
2.4.	Вычисление потоков
2.5.	LU-SGS
3. Cx	ема работы программного комплекса10
3.1.	Общая информация10
3.2.	Устройство внешнего модуля10
3.3.	Конфигурационный файл11
3.4.	Система управляющих файлов11
3.5.	Расчетная сетка
3.6.	Структура хранения данных13
3.7.	Файлы решения14
3.8.	Модуль расчета химической кинетики14
3.9.	Расчетный шаг алгоритма15
3.10.	Начало расчетной итерации16
3.11.	Прямой и обратный обходы алгоритма LU-SGS 18
4. Результаты расчетов	
4.1.	Расчет задержек самовоспламенения водородно-воздушной смеси 23
4.2. Барр	Расчет процессов смешения и горения в модельной камере сгорания оуса-Куркова
4.3.	IDDES расчет пограничного слоя на периодической плоской пластине 25
Заклю	чение
Список литературы	