

Application of Adaptive Hierarchical Grids to Simulation of Reacting Gas Flows

Vitaly E. Borisov^{1,2}, Sergey E. Yakush²

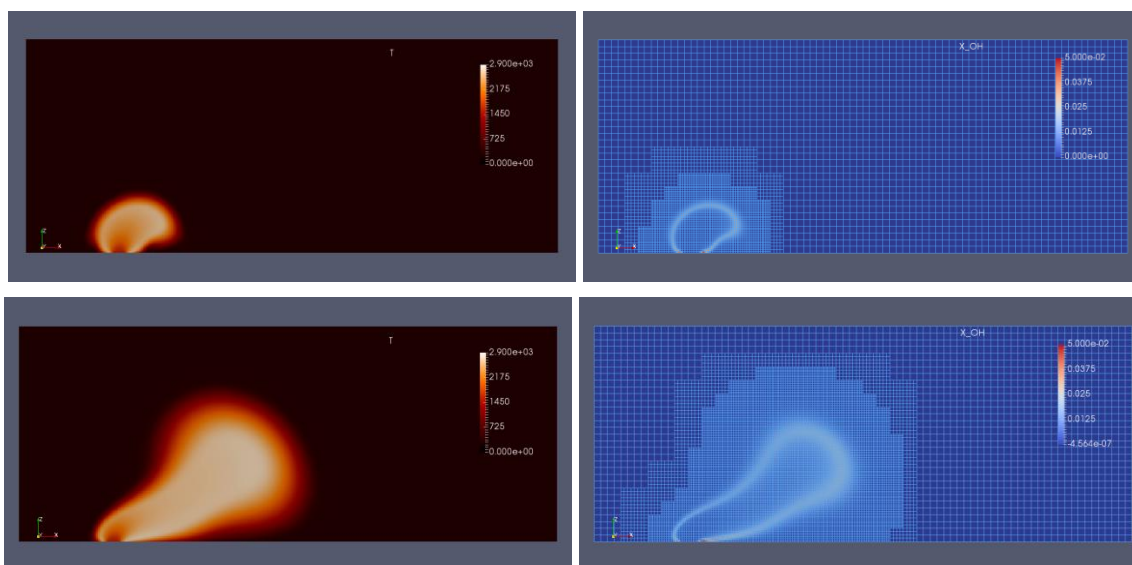
¹ *Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Science, Russia, Moscow*

² *Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences, Russia, Moscow*
narelen@gmail.com, yakush@ipmnet.ru

Abstract

A computational model for reacting gas flows with application of hierarchic adaptively refined meshes for adequate resolution of the reaction zone is presented. The model is based on the Navier–Stokes equations in the small Mach number approximation for multicomponent reacting gas mixture, with the reaction kinetics described either by global or detailed scheme. Transport equations are approximated by a high-order scheme. The model is implemented in a parallel software package ParTCS-3D. Test examples demonstrating efficiency of adaptive mesh refinement in application to combustion problems are presented.

Keywords: computational model, low Mach number combustion, adaptive mesh refinement.



Temperature (left) and OH mole fraction (right) fields upon self-ignition of a hot hydrogen jet in air cross-flow: simulation on three-level block-adaptive mesh

УДК 519.6, 533

Применение адаптивных иерархических сеток для расчета течений реагирующих газов

В.Е. Борисов^{1,2}, С.Е. Якуш²

¹ *Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва*

² *Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва*
narelen@gmail.com, yakush@ipmnet.ru

Аннотация

Представлена вычислительная модель реагирующих газовых течений, основанная на применении иерархических адаптивно измельчаемых сеток для адекватного разрешения зоны реакции. Модель основана на уравнениях Навье – Стокса в приближении существенно дозвуковых течений для многокомпонентной реагирующей газовой смеси, химические реакции описываются глобальной или детальной кинетической схемой. Аппроксимация уравнений переноса осуществляется схемой высокого порядка точности. Модель реализована в виде параллельной вычислительной программы ParTCS-3D. Приведены примеры тестовых расчетов, демонстрирующие эффективность адаптивно измельчаемых сеток для течений с горением.

Ключевые слова: вычислительная модель, дозвуковое горение, адаптивные сетки.

1. Введение

Характерной особенностью задач с горением является наличие в течении выделенных тонких структур (например, фронта пламени), аккуратное разрешение которых в расчете критично с точки зрения качества результатов моделирования [1]. Одним из способов достижения необходимого разрешения при сохранении вычислительной эффективности алгоритма решения термогазодинамических уравнений является использование сеток, динамически «подстраивающихся» под получаемое решение (адаптивных сеток) [2].

В зависимости от применяемого способа аппроксимации определяющих уравнений и используемых сеток (структурированные, неструктурированные), организация адаптивного измельчения в областях высоких градиентов может проводиться различным образом. Так, для неструктурированных сеток возможно простое деление элементарных ячеек на заданное число меньших объемов. Для структурированных (многоблочных) сеток адаптивное измельчение реализуют либо в виде произвольных параллелепипедов, покрывающих необходимые участки сетки, либо путем деления существующих блоков сетки в заданное число раз по всем направлениям. Первый из указанных способов введения структурированных адаптивных сеток обладает большей гибкостью, второй отличается простотой реализации алгоритма. Примерами реализации метода адаптивных сеток служат библиотеки AMRClaw [3], P4EST [4], CHOMBO [5], PEANO [6].

В настоящей работе рассмотрено применение структурированных адаптивных сеток, состоящих из иерархии топологически одинаковых блоков, причем каждый следующий уровень измельчения соответствует уменьшению пространственного шага сетки в два раза. В пределах блока аппроксимация уравнений осуществляется на декартовой сетке с постоянным шагом по каждому пространственному направлению, что обуславливает простоту алгоритма и возможность использования уже существующих вычислительных моделей.

2. Математическая модель

Основными уравнениями гидродинамики для описания существенно дозвуковых течений газовых смесей являются уравнения Навье – Стокса в приближении малых чисел Маха [1, 2]. В таком случае давление p может быть представлено в виде

$$p(x, t) = p_0 + \pi(x, t), \quad (1)$$

где p_0 – среднее (термодинамическое) давление (пространственно постоянное в области), а π – динамическая составляющая давления, не зависящая от термодинамических величин и удовлетворяющая условию $\pi/p_0 \sim O(M^2)$.

Тогда система уравнений Навье – Стокса в общем виде запишется следующим образом:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_m \mathbf{U} = \nabla \cdot \mathbf{F}_m + \dot{\omega}_m, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\rho \mathbf{g} - \nabla \pi + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \rho h \mathbf{U} = \nabla \cdot \mathbf{Q} \quad (4)$$

Здесь m – индекс компонента смеси; ρ – плотность смеси; $\mathbf{U} = (u, v, w)^T$ – вектор скорости смеси; Y_m – относительная массовая концентрация компонента m ; $\dot{\omega}_m$ – приток компонента m за счет химических реакций; $\boldsymbol{\tau}$ – тензор вязких напряжений; h – энтальпия смеси; \mathbf{F}_m – вектор диффузионного потока соответствующей компоненты смеси; \mathbf{Q} – вектор потока тепла для смеси. В указанных условиях выполнены следующие нормировочные соотношения:

$$\sum_m Y_m = 1, \quad \sum_m \dot{\omega}_m = 0, \quad \sum_m \mathbf{F}_m = \mathbf{0} \quad (5)$$

Тензор вязких напряжений $\boldsymbol{\tau}$ имеет вид (μ – динамическая вязкость смеси; \mathbf{I} – единичный тензор)

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[\nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right] \quad (6)$$

Удельная энтальпия смеси h записывается в виде

$$h(T, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T), \quad (7)$$

где h_m – энтальпия компонента m .

Уравнение состояния смеси идеальных газов имеет следующий вид:

$$p = p_0 = \rho R T \sum_m \frac{Y_m}{W_m} \quad (8)$$

Здесь T – температура смеси; R – универсальная газовая постоянная; W_m – молекулярная масса компонента m .

Согласно модели средних по смеси значений [3], используемой в настоящей работе, диффузионные потоки \mathbf{F}_m и вектор потока тепла \mathbf{Q} имеют следующий вид:

$$\mathbf{F}_m = \rho D_{m,mix} \nabla Y_m, \quad (9)$$

$$\mathbf{Q} = \lambda \nabla T + \sum_m h_m \mathbf{F}_m, \quad (10)$$

где λ – коэффициент теплопроводности смеси; $D_{m,mix}$ – средний по смеси коэффициент диффузии компонента m относительно смеси.

Условие на дивергенцию скорости получается из уравнения неразрывности путем замены субстанциональной производной плотности через соответствующие производные температуры и концентраций:

$$\begin{aligned} S \equiv \nabla \cdot \mathbf{U} = & \frac{1}{\rho c_{p,mix} T} \left(\nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \nabla h_m \right) + \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_m \frac{W}{W_m} \left(\nabla \cdot \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \right) + \frac{1}{\rho} \sum_m \left(\frac{W}{W_m} - \frac{h_m}{c_p T} \right) \dot{\omega}_m, \end{aligned} \quad (11)$$

где $c_{p,mix}$ обозначает теплоемкость смеси при постоянном давлении; W – средняя молекулярная масса смеси.

Массовая скорость притока компонента m за счет химических реакций имеет вид

$$\dot{\omega}_m = \sum_n \dot{\omega}_{mn} = W_m \sum_n (v''_{mn} - v'_{mn}) Q_n \quad (12)$$

Здесь n обозначает номер реакции; v''_{mn} и v'_{mn} – стехиометрические коэффициенты компонента m в реакции n , а Q_n – скорость протекания n -й реакции, которая находится согласно детальной кинетической схеме с использованием закона Аррениуса, либо из глобального кинетического уравнения. Более подробно система уравнений приведена в [8, 9].

3. Алгоритм решения на одном сеточном блоке

Для решения задачи в расчетной области, имеющей вид параллелепипеда со сторонами длиной l_x, l_y, l_z , вводится одноблочная ортогональная вычислительная сетка с заданным количеством ячеек сетки по каждому направлению: N_x, N_y, N_z . В целях устойчивости численного алгоритма используется разнесенная разностная сетка: в центрах ячеек рассчитываются $\rho_{i,j,k}, h_{i,j,k}, Y_{m,i,j,k}, \pi_{i,j,k}$; в центрах граней – соответствующие компоненты вектора скорости $u_{i\pm 1/2,j,k}, v_{i,j\pm 1/2,k}, w_{i,j,k\pm 1/2}$.

Алгоритм решения основывается на использовании проекционной схемы типа предиктор-корректор [10], а также методе расщепления по физическим процессам [8]. Для аппроксимации уравнений по времени используется однослойная явная схема Эйлера; для аппроксимации по пространству – метод конечных разностей, записанный на разнесенной сетке, с использованием схемы реконструкции WENO3 [11] значений на гранях ячеек. Схема решения на одном временном шаге (от t^n до t^{n+1}) кратко может быть записана в следующем виде:

1. Вычисление текущего шага по времени Δt .
2. Выполнение блока уравнений реакции-конвекции-диффузии:
 - 2.1. вычисление химических реакций для определения $\dot{\omega}_m^{n+1}(Y_m^n, T^n)$ на Δt ;
 - 2.2. вычисление конвективных членов: $\nabla \cdot (\rho Y_m \mathbf{U})^n, \nabla \cdot (\rho h \mathbf{U})^n, (\mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U})^n$;
 - 2.3. решение уравнений конвекции-диффузии для определения $Y_m^{n+1}, \rho^{n+1}, h^{n+1}$.
3. Вычисление предиктора для вектора скорости \mathbf{U}^* .
4. Выполнение блока проекции:
 - 4.1. вычисление колебательной составляющей давления π^{n+1} ;
 - 4.2. вычисление скорректированного вектора скорости \mathbf{U}^{n+1} .

Рассмотрим основные этапы более подробно.

3.1. Вычисление текущего временного шага

Временной шаг вычисляется из условий устойчивости схемы по числу Куранта:

$$\Delta t = \sigma \min_{m,i,j,k} \left(\frac{\Delta x}{|u_{i,j,k}|}, \frac{\Delta y}{|v_{i,j,k}|}, \frac{\Delta z}{|w_{i,j,k}|}, \sqrt{\frac{2\rho h_N}{|(0,0,-\mathbf{g})^T - (\nabla\pi)_{i,j,k}|}}, \frac{1}{2^N} \frac{\rho h_N^2}{\mu}, \frac{1}{2^N} \frac{h_N^2}{D_{m,mix}} \right), \quad (13)$$

где $h_N = \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ – минимальный шаг сетки, N – размерность задачи, $0 < \sigma < 1$ – число Куранта.

3.2. Интегрирование уравнений химической кинетики

На данном шаге происходит решение системы уравнений химической кинетики, полученной после расщепления уравнений (2)-(4) и имеющей вид [8, 9]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} = \dot{\omega}_m, & m = 1 \dots N_c, \\ \rho C_{p,mix} \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_m \dot{\omega}_m h_m, \end{cases}, \quad (14)$$

где N_c – число компонент. Получающаяся система ОДУ является жесткой, для ее решения используется многошаговый метод интегрирования жестких систем ОДУ [12]. После интегрирования системы и обновления полей ρY_m , пересчитывается поле плотности с использованием соотношения

$$\rho = \sum_m \rho Y_m, \quad (15)$$

Для интегрирования уравнений химической кинетики выбран известный и хорошо зарекомендовавший себя свободно распространяемый пакет VODE (использована его версия с двойной точностью DVODE) [13].

3.3. Интегрирование уравнений законов сохранения

Вычисление конвективных членов уравнений (2) – (4) осуществляется следующим образом:

$$\begin{aligned} [\nabla \cdot (\phi \mathbf{U})]_{i,j,k} &= \frac{u_{i+1/2,j,k} \phi_{i+1/2,j,k} - u_{i-1/2,j,k} \phi_{i-1/2,j,k}}{\Delta x} + \\ &+ \frac{v_{i,j+1/2,k} \phi_{i,j+1/2,k} - v_{i,j-1/2,k} \phi_{i,j-1/2,k}}{\Delta y} + \\ &+ \frac{w_{i,j,k+1/2} \phi_{i,j,k+1/2} - w_{i,j,k-1/2} \phi_{i,j,k-1/2}}{\Delta z}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $\phi = \rho Y_m, \rho h$;

$$\begin{aligned} [\mathbf{U} \cdot \nabla \phi]_{i+1/2,j,k} &= u_{i+1/2,j,k} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2,j,k} + \tilde{v}_{i+1/2,j,k} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{i+1/2,j,k} + \tilde{w}_{i+1/2,j,k} \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_{i+1/2,j,k} \\ \tilde{v}_{i+1/2,j,k} &= \frac{1}{4} (v_{i,j+1/2,k} + v_{i,j-1/2,k} + v_{i+1,j+1/2,k} + v_{i+1,j-1/2,k}), \\ \tilde{w}_{i+1/2,j,k} &= \frac{1}{4} (w_{i,j,k+1/2} + w_{i,j,k-1/2} + w_{i+1,j,k+1/2} + w_{i+1,j,k-1/2}), \end{aligned} \quad (17)$$

где $\phi = u$ для граней с индексами $i \pm 1/2, j, k$; $\phi = v$ для $i, j \pm 1/2, k$; $\phi = w$ для $i, j, k \pm 1/2$; формула для $(\mathbf{U} \cdot \nabla \phi)$ на каждой грани меняется соответствующим образом. Значения ϕ , $\partial \phi / \partial x$, $\partial \phi / \partial y$ и $\partial \phi / \partial z$ на гранях вычисляются согласно схеме WENO3 по значениям в центрах ячеек.

Тепловой и диффузионные потоки аппроксимируются на гранях ячеек стандартным для разнесенной сетки образом по полученным выше значениям первичных (и вычисленных по ним вторичных) переменных [14]. Для того чтобы исключить диффузионный перенос массы через грань (являющийся известной проблемой [15, 16] модели средних по смеси диффузионных потоков) в работе применяется метод коррекции, который состоит в введении специальной поправки \mathbf{V}_c :

$$\rho \mathbf{V}_c = \sum_m \mathbf{F}_m. \quad (18)$$

Скорректированный таким образом диффузионный поток будет иметь вид

$$\Gamma_m = \mathbf{F}_m + \rho Y_m \mathbf{V}_c, \quad \sum_m \Gamma_m = 0. \quad (19)$$

Аппроксимация тензора вязких напряжений $\boldsymbol{\tau}$ и вычисление его дивергенции проводится стандартным для разнесенной сетки образом [14].

После представленных подготовительных вычислений уравнения (2) и (4) интегрируются для нахождения величин $(\rho Y_m)^{n+1}$ и $(\rho h)^{n+1}$:

$$(\rho Y_m)_{i,j,k}^{n+1} = (\rho Y_m)_{i,j,k}^n - \Delta t \nabla \cdot (\rho Y_m \mathbf{U})^n + \Delta t \nabla \cdot \Gamma_m^n, \quad (20)$$

$$(\rho h)_{i,j,k}^{n+1} = (\rho h)_{i,j,k}^n - \Delta t \nabla \cdot (\rho h \mathbf{U})^n + \Delta t \nabla \cdot \left(\lambda^n (\nabla T)^n + \sum_m h_m^n \Gamma_m^n \right), \quad (21)$$

где дивергенция диффузионного и теплового потока, рассчитываемая по значениям в центрах граней и имеющая результат в центрах ячеек, вычисляется аналогично формуле (16). Далее плотность смеси ρ^{n+1} находится по формуле (15).

Аппроксимация по времени для уравнения (3), преобразованного с учетом уравнения неразрывности, записывается следующим образом:

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U})^n = \frac{1}{\rho^n} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n - \frac{1}{\rho^n} \nabla \cdot \boldsymbol{\pi}^{n+1}. \quad (22)$$

Для его решения используется схема типа предиктор-корректор. Предиктор для уравнения скорости имеет вид

$$(\mathbf{U})_{face}^* = (\mathbf{U})_{face}^n - \Delta t \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U})^n + \frac{\Delta t}{\rho_{face}^n} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n. \quad (23)$$

Здесь индекс *face* обозначает соответствующую грань для компонент вектора скорости, т.е. для скорости *u* индекс *face* = $i \pm 1/2, j, k$ и т.д.

Вычисленное согласно формуле (23) поле скорости \mathbf{U}^* не удовлетворяет условию (11) для S^{n+1} [17], поэтому оно должно быть скорректировано с учетом условия на дивергенцию после вычисления $\boldsymbol{\pi}^{n+1}$:

$$(\mathbf{U})_{face}^{n+1} = (\mathbf{U})_{face}^* - \frac{\Delta t}{\rho_{face}^n} \nabla \cdot \boldsymbol{\pi}^{n+1}. \quad (24)$$

Уравнение для давления $\boldsymbol{\pi}^{n+1}$ выводится аналогично случаю несжимаемой жидкости [17]. Для этого необходимо взять дивергенцию от обеих частей (24), и, согласно условию (11), записать $S^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{U}^{n+1}$. Тогда

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho^n} \nabla \boldsymbol{\pi}^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{U}^* - S^{n+1}). \quad (25)$$

Выражение (25) представляет собой уравнение Пуассона относительно π^{n+1} . Аппроксимация операторов, входящих в уравнение, проводится, как и ранее, стандартным для разнесенной сетки образом.

4. Обобщение алгоритма для иерархических блочно-адаптивных сеток

В настоящей работе для автоматического разрешения особенностей решения используются динамические адаптивные блочно-структурированные сетки (AMR) [2]. При таком подходе строится иерархия подсеток, покрывающих всю расчетную область, с пространственным разрешением, варьирующимся в зависимости от локальных особенностей решения. Пример блочно-структурированной сетки, используемой для построения иерархии адаптивных сеток, представлен на рис. 1.

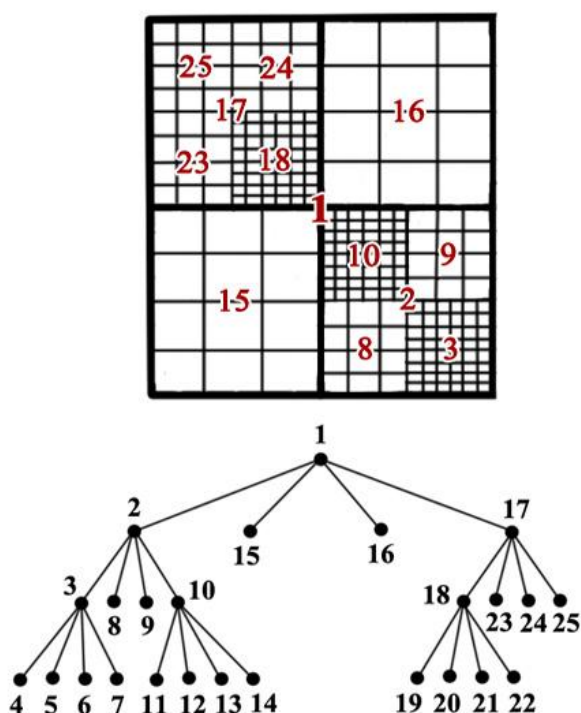


Рис. 1. Представление адаптивной блочно-структурированной сетки в виде логического дерева [7]

Иерархия блоков адаптивной сетки образует дерево. Все блоки сеток имеют идентичную логическую структуру однородной декартовой ортогональной сетки. Любой подблок может, в свою очередь, снова быть измельчен тем же способом. Этот процесс продолжается до тех пор, пока вся поверхность вычислений не будет покрыта блоками нужного пространственного разрешения. Блоки сеток предполагаются логически структурированными, т.е. сетка внутри блока имеет структуру декартовой ортогональной сетки, ячейки которой индексируются тремя целочисленными индексами. При этом физическая геометрия сетки может быть декартовой, цилиндрической, сферической, полярной или любой другой. Каждый блок сеток имеет приписанное число слоев фиктивных ячеек на каждой границе. Эти фиктивные ячейки заполняются данными из соответствующих соседних блоков или вычислением заданных граничных условий, если граница блока совпадает с границей расчетной области.

Степень измельчения определяется локально в соответствие с заданным критерием. В настоящей работе используется следующий критерий для величины D , в качестве которой может выступать температура, плотность и т.д. в зависимости от конкретной задачи:

$$E_{i_x, i_y, i_z} = \left[\frac{\sum_{pq} \left(\frac{\partial^2 D}{\partial x_p \partial x_q} \Delta x_p \Delta x_q \right)^2}{\sum_{pq} \left(\left[\left| \frac{\partial D}{\partial x_p} \right|_{i_p+1/2} + \left| \frac{\partial D}{\partial x_p} \right|_{i_p-1/2} \right] \Delta x_p + \varepsilon \frac{\partial^2 |D|}{\partial x_p \partial x_q} \Delta x_p \Delta x_q \right)^2} \right]^{1/2}, \quad (26)$$

где p и q обозначают координатные направления, $\varepsilon = 0.01$ – некоторый весовой коэффициент, а $\partial^2 |D|$ находится по аналогии со следующей формулой [18]:

$$\left[\frac{\partial^2 |D|}{\partial x \partial y} \right]_{i,j,k} = \frac{|D_{i+1,j+1,k}| + |D_{i+1,j-1,k}| + |D_{i-1,j+1,k}| + |D_{i-1,j-1,k}|}{4\Delta x \Delta y} \quad (27)$$

Реализация параллельной версии программы с использованием блочно-структурированных сеток AMR основана на использовании библиотеки PARAMESH [19]. Достоинством этой библиотеки является то, что она полностью берет на себя ответственность за динамическое измельчение и укрупнение блоков сеток, создание, изменение и поддержку целостности внутренних структур данных программы (в частности, деревьев, определяющие пространственные отношения блоков), динамическое распределение и балансировку данных между потоками исполнения, распределение блоков между доступными для вычисления процессорам, управление всеми межблоковыми и межпроцессорными коммуникациями, а также заполнение массивов фиктивных ячеек.

Решение уравнения Пуассона (25) для коррекции скорости осуществлялось при помощи свободно распространяемого пакета HYPRE [20]. Данный пакет содержит множество процедур для решения систем линейных уравнений и предобуславливателей для них. В настоящей работе для расчетов использовался алгебраический многосеточный метод Boomer AMG.

Представленные в предыдущих разделах уравнения и алгоритмы легли в основу программного комплекса ParTCS-3D (Parallel Turbulent Combustion Simulator), реализованного на языках программирования Fortran и C/C++ с использованием интерфейса параллельного программирования MPI.

5. Результаты расчетов

5.1. Расчет вихрей Тейлора – Грина

Для проверки работоспособности вычислительного ядра рассмотрим сначала результаты моделирования развития вихрей Тейлора – Грина в трехмерной постановке. Данная задача часто используется как средство тестирования программных кодов высокого разрешения, в том числе предназначенных для прямого моделирования турбулентных течений, см., например, [21–23].

Расчеты проводились при числе Рейнольдса $Re = 1600$, использовалась декартова ортогональная расчетная сетка с числом узлов $128 \times 128 \times 128$. В данном случае адаптивное измельчение сетки не применялось.

Расчетная область задавалась в виде $-0.016 \text{ м} \leq x, y, z \leq 0.016 \text{ м}$, $\nu = 1.392 \times 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$.

При обезразмеривании задачи в качестве масштаба длины была выбрана величина $L = L_0/2\pi$, где L_0 – длина ребра расчетной области. Модель течения описывалась уравнения Навье – Стокса для вязкой несжимаемой жидкости. На границе области были заданы периодические граничные условия. Начальные условия для скорости задавались в виде

$$u = u_0 \sin\left(\frac{x}{L}\right) \cdot \cos\left(\frac{y}{L}\right) \cdot \cos\left(\frac{z}{L}\right),$$

$$v = -u_0 \cos\left(\frac{x}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{y}{L}\right) \cdot \cos\left(\frac{z}{L}\right),$$

$$w = 0.$$

На рис. 2 показаны распределения вертикальной компоненты завихренности скорости в моменты времени $t = 0, 8.0 \times 10^{-3}, 1.4 \times 10^{-2}, 2.0 \times 10^{-2}$ с. С течением времени наблюдается потеря устойчивости и разрушение заданных в начальный момент времени крупномасштабных структур, сопровождающаяся перемешиванием. Полученные результаты хорошо согласуются с аналогичными расчетами других авторов, см., например, [21–23].

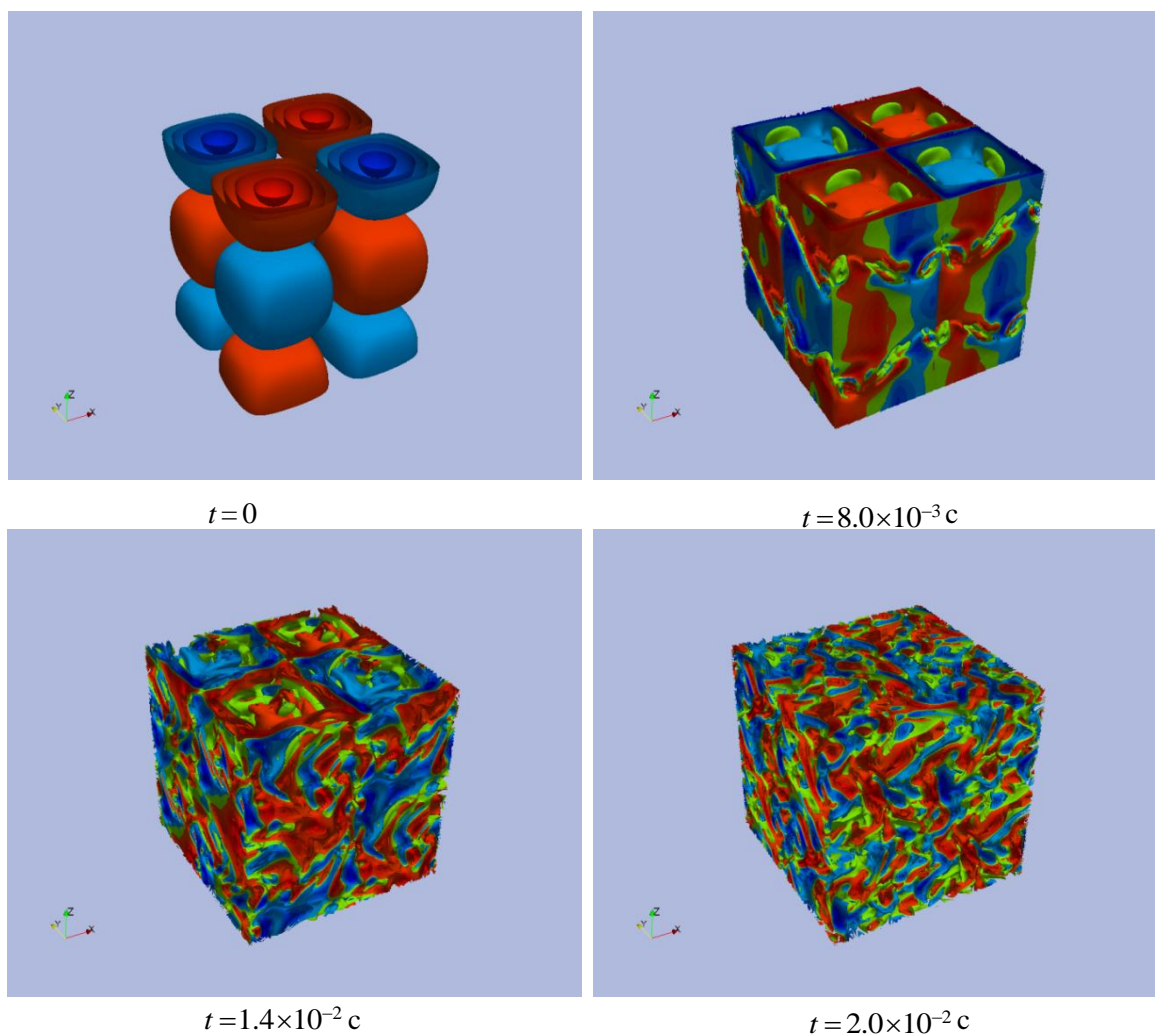


Рис. 2. Вертикальная компонента завихренности в задаче о вихрях Тейлора – Грина

5.2. Расчет диффузионного горения водорода

На основе описанной модели проведены демонстрационные расчеты ламинарного горения при вдуве горячего водорода в поперечный поток воздуха. Водород с температурой 1500 К подавался вертикально из плоской щели шириной 2 мм со скоростью 1 м/с, поперечный поток воздуха имел скорость 0.5 м/с, температура воздуха на входной границе была постоянной и равной 300 К. Расчетная область имела размер $80 \times 40 \times 32$ мм, при этом в направлении y все распределения были однородными, так что задача, фактически, решалась как двумерная.

В расчетной области, представленной на рис. 3, вводилась начальная сетка с размером ячейки 1 мм по направлениям x и z , при этом каждый блок сетки имел размер 4×2×4 ячейки, а число блоков начального уровня составляло 20×1×8.

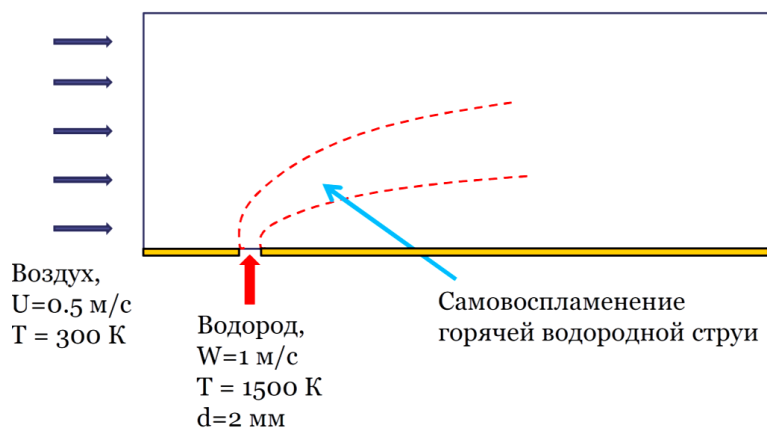


Рис. 3. Схема течения в задаче о диффузионном горении водорода

Расчеты проводились с использованием двух и трех уровней сетки, адаптация осуществлялась по полю плотности, что позволяло разрешать области больших градиентов как температуры, так и концентрации водорода. Для горения водорода использовалась кинетическая схема, содержащая 9 веществ (H_2 , O_2 , H_2O , H , O , OH , HO_2 , H_2O_2 и N_2) и 12 реакций [7] (сравнительный анализ схем горения водорода можно найти, например, в [24]).

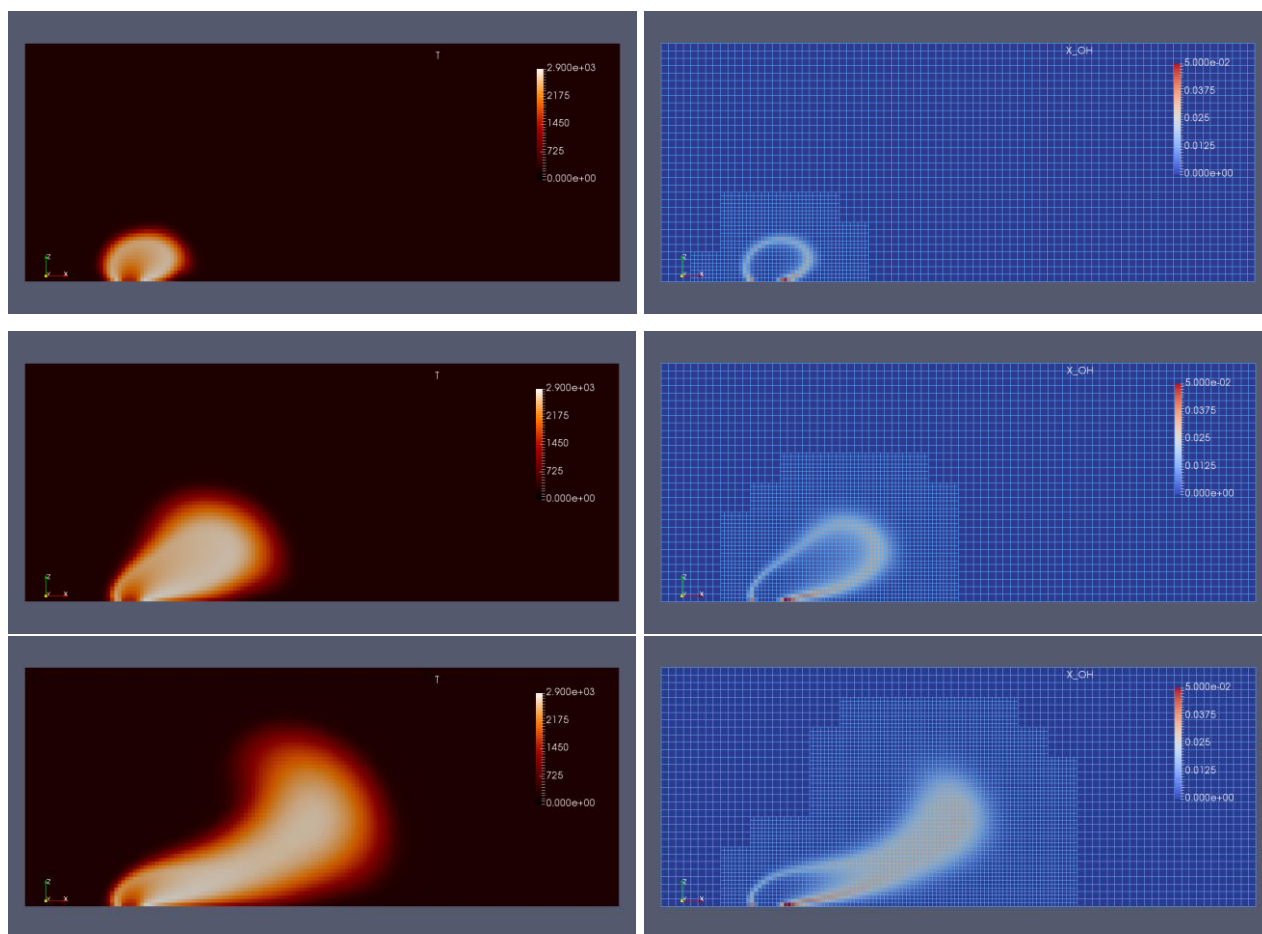


Рис. 4. Поля температуры (слева) и мольной доли радикала OH (справа) в моменты времени $t = 5, 20$ и 40 мс (сверху вниз) при расчете на двухуровневой сетке

На рис. 4 показаны распределения температуры и относительной мольной концентрации радикала ОН в три момента времени при расчете на двухуровневой сетке. Видно, что по мере распространения пламени появляются дополнительные блоки мелкой сетки, отслеживающие область высоких градиентов температуры и концентрации. На рис. 5 представлены результаты аналогичных расчетов, проведенных на трехуровневой сетке.

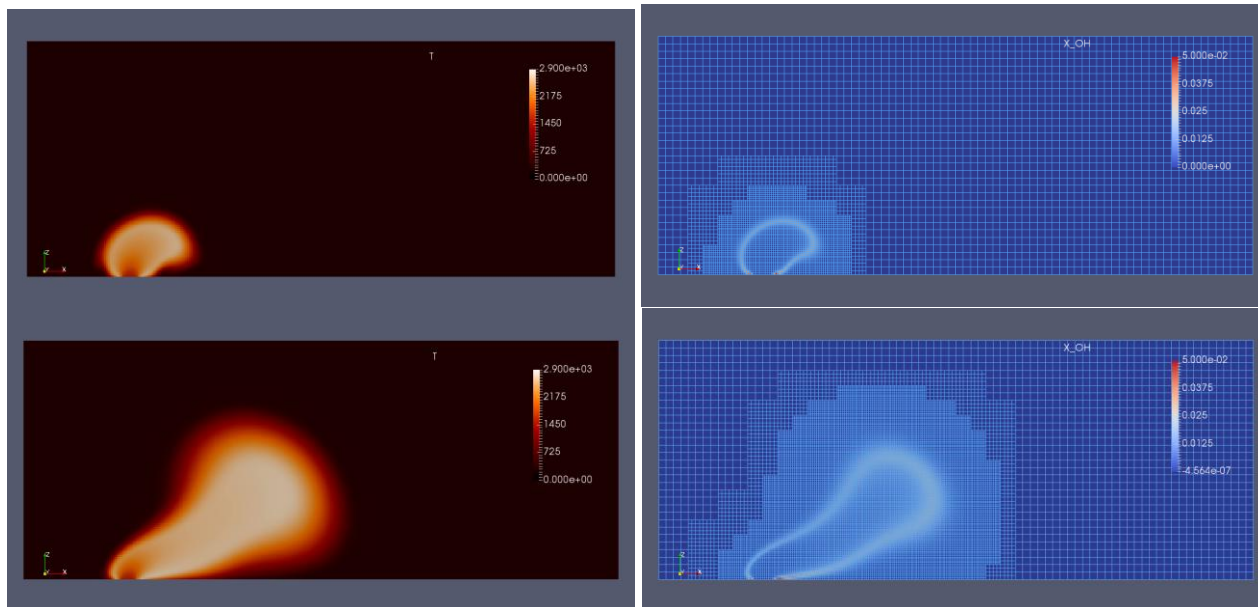


Рис. 5. Поля температуры (слева) и мольной доли радикала ОН (справа) в моменты времени $t = 5$ и 28 мс (сверху вниз) при расчете на трехуровневой сетке

Эффективность использования адаптивных сеток можно охарактеризовать отношением используемых в расчете блоков сетки к максимальному числу блоков самого высокого разрешения, которые необходимы для расчета без использования процедуры AMR. На рис. 6 представлена зависимость этого отношения от времени для двухуровневых и трехуровневых сеток (в последнем случае расчеты ограничены нестационарным участком, для двухуровневой сетки показано изменение числа блоков вплоть до выхода на стационар).

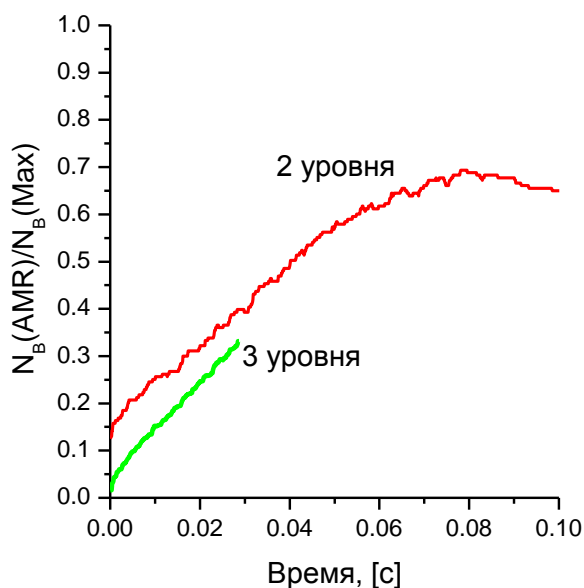


Рис. 6. Отношение числа блоков адаптивной сетки к максимальному числу блоков, необходимому для достижения того же разрешения на фиксированной сетке

Видно, что при используемых в расчете параметрах, по крайней мере, на нестационарном участке удастся в несколько раз снизить объем вычислений за счет использования более грубых сеток вдали от источника вдува и области горения.

Следует отметить, что эффективность применения адаптивных сеток сильно зависит от характера течения, наиболее оправдано их использование при наличии в потоке выраженных особенностей. Кроме того, требуется настройка критериальных параметров, определяющих измельчение и закругление сетки, с тем, чтобы избежать чрезмерного и недостаточного измельчения сетки.

6. Заключение

Приведенные демонстрационные расчеты подтверждают эффективность применения структурированных адаптивных иерархических сеток для расчета реагирующих течений газов, для которых характерно наличие относительно узких зон протекания реакции (фронтов пламени). Дальнейшая работа будет направлена на изучение эффективности параллельной реализации и возможности масштабирования на большое число процессоров.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта № 13-01-12058 офи_м Российского фонда фундаментальных исследований. Расчеты проводились с использованием вычислительных мощностей Межведомственного суперкомпьютерного центра и суперкомпьютера К-100 ИПМ им. М.В.Келдыша РАН.

Литература

1. Лапин Ю.В., Стрелец М.Х. Внутренние течения газовых смесей. М.: Наука, 1989.
2. Bell J., Day M. Adaptive Methods for Simulation of Turbulent Combustion. In: Turbulent Combustion Modeling: Advances, New Trends and perspectives. Volume 95 of Fluid Mechanics and its Applications, Springer London, 2010, pp.201–329.
3. <http://www.clawpack.org/contents.html>
4. <http://www.p4est.org/>
5. <https://commons.lbl.gov/display/chombo/>
6. <http://www.peano-framework.org/home.shtml>
7. Poinot T., Veynante D. Theoretical and Numerical Combustion. 2nd Ed. Philadelphia:Edwards, 2005.
8. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry. // Combust. Theory Modeling, 2000, vol. 4, pp. 535–556.
9. Борисов В.Е., Кулешов А.А., Савенков Е.Б., Якуш С.Е. Программный комплекс TCS 3D: математическая модель // Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша РАН № 6, М.: 2015, 20 с.
10. Bell J.B. and Marcus D.L. A second-order projection method for variable-density flows. J. Comput. Phys., 101:334-348, 1992.
11. Shu C.W. High order weighted essentially non-oscillatory schemes for convection dominated problems // SIAM Review, 2009, v.51, pp. 82–112.
12. Галанин М.П., Савенков Е.Б. Методы численного анализа математических моделей. Москва: Изд – во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010, 591 с.
13. Brown P.N., Byrne G.D., Hindmarsh A.C. VODE: a variable coefficient ODE solver. // SIAM J. Sci. Stat. Comp., 1989, vol. 10, pp. 1038–1051.
14. Ferreira, V.G., Tomé, M.F., Mangiavacchi, N., Castelo, A., Cuminato, J. A., Fortuna, A.O. and McKee, S., High-order upwinding and the hydraulic jump. Int. J. Numer. Meth. Fluids, 2002, 39: 549–583. doi:10.1002/fld.234
15. Coffe T.P., Heimerl J.M. Transport algorithms for premixed laminar steady-state flames. Combust. Flame., 1981, 43, 273.
16. Giovangigli V. Convergent iterative methods for multicomponent diffusion. IMPACT Comput. Sci. Eng., 1991, 3, pp. 244–76.

17. Быков Л.В., Молчанов А.М., Щербаков М.А., Янышев Д.С. Вычислительная механика сплошных сред в задачах авиационной и космической техники. М.: ЛЕНАНД, 2015, 688 с.
18. <http://flash.uchicago.edu/site/flashcode/>
19. http://www.physics.drexel.edu/lson/paramesh-doc/Users_manual/amr.html
20. http://computation.llnl.gov/project/linear_solvers/software.php
21. Brachet M., Meiron D., Orszag S., Nickel B., Morf R., Frisch U. Small-scale structure of the Taylor-Green vortex // *J. Fluid Mech.*, 1983, vol. 130, pp. 411–452.
22. Garnier E., Mossi M., Sagaut P., Comte P., Deville M. On the use of shock-capturing schemes for large-eddy simulation // *J. Computational Physics*, 1999, vol. 153, pp. 273–311.
23. Елизарова Т.Г., Широков И.А. Ламинарный и турбулентный режимы распада вихря Тейлора – Грина. Препринт ИПМ № 63, Москва, 2013.
24. Ибрагимова Л. Б., Смехов Г. Д., Шаталов О. П. Сравнительный анализ констант скоростей химических реакций, описывающих горение водородо-кислородных смесей // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2009. Т. 8. 25с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2009-8/articles/204/>

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2015 г.