



Суперкомпьютерные дни в России
2023

Efficient CFD technologies for high performance combustion modeling in academic research

Yakovenko I.S., Kiverin A.D.



Joint Institute for High Temperatures
Russian Academy of Sciences
Laboratory of Mathematical Modeling

Программный комплекс NRG

Основные цели, преследуемые при создании программного комплекса вычислительной газодинамики для решения фундаментальных задач:

- 1. Модифицируемость.** Программная платформа обеспечивающая простоту добавления дополнительной функциональности (физических моделей, вычислительных алгоритмов, средств параллельных вычислений, обработки данных).
- 2. Универсальность.** Возможность решения широкого круга задач с использованием разных алгоритмов и/или физических моделей на основе единой программной инфраструктуры.
- 3. Низкий порог вхождения.** Возможность предоставления программного кода другим научным коллективам для решения смежных задач и верификации и валидации вычислительных алгоритмов и физико-математических моделей, обучение студентов и новых сотрудников лаборатории.
- 4. Минимальные накладные расходы.** Эффективные и простые средства реализации пользовательского интерфейса для постановки задач, использование сторонних библиотек обработки и визуализации данных.

Вычислительные технологии

GitHub*



Программы - решатели

Газодинамический
решатель по методу
«**крупных частиц**»

Газодинамический
решатель по методу
«**КАБАРЕ**»

Теплопроводность

Вязкость

Диффузия

Химическая кинетика

Уравнения состояния

Интерпретатор
теплофизических и
химических данных в
формате **CHEMKIN**

Теплофизические
свойства

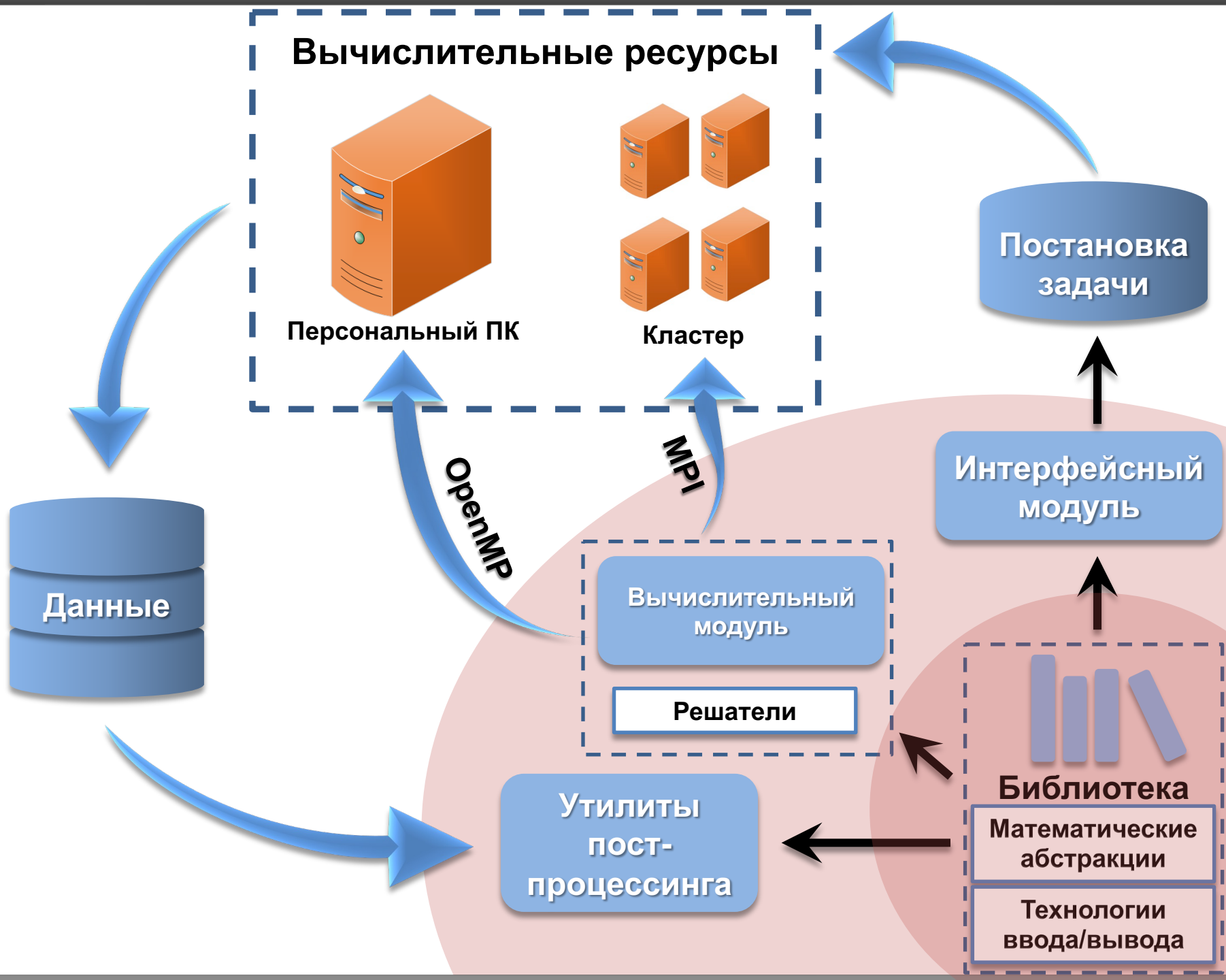
Свойства механизма
химической кинетики

Постпроцессинг в
реальном времени

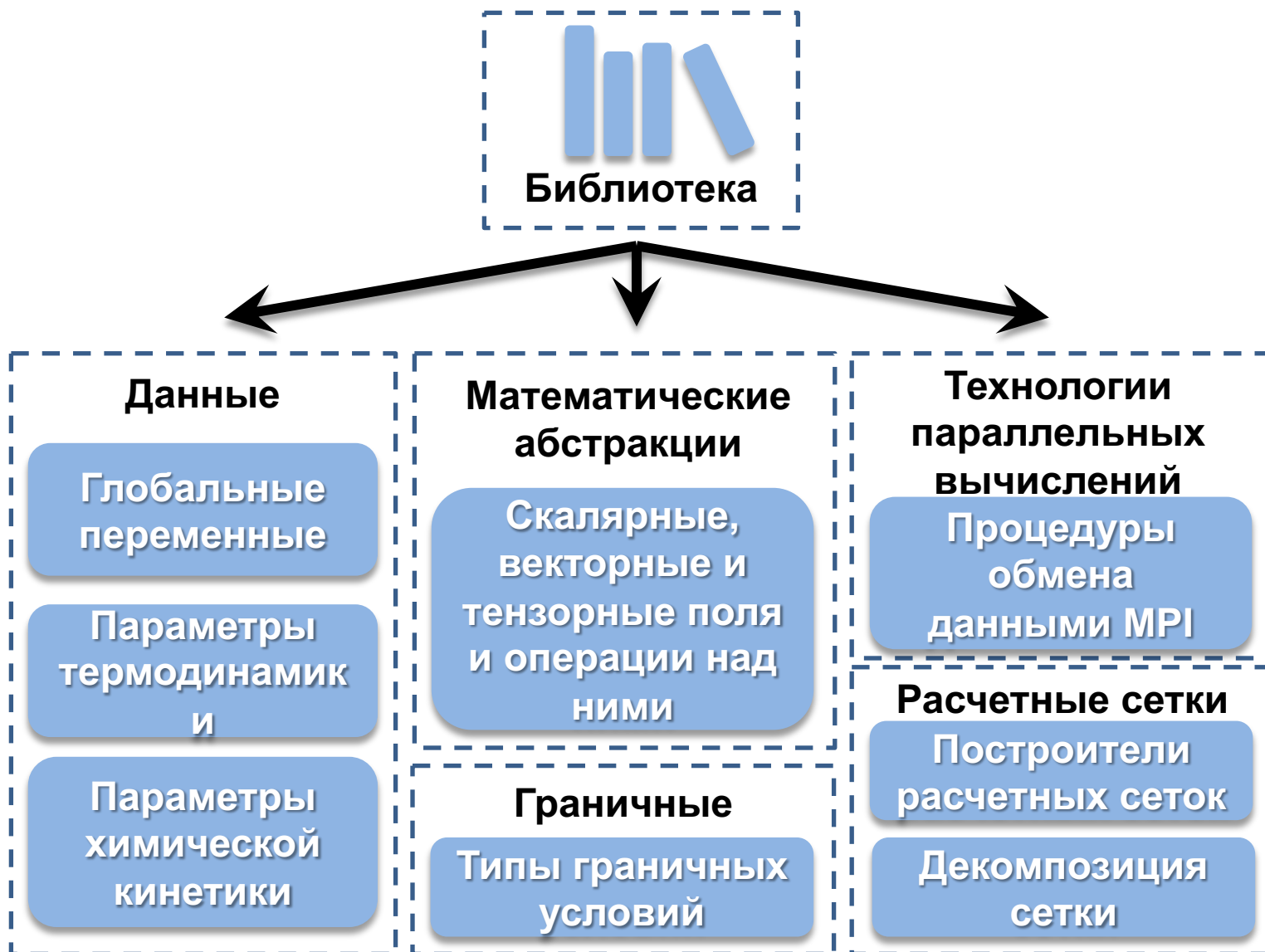
Вывод данных для
обработки в сторонних
графических пакетах



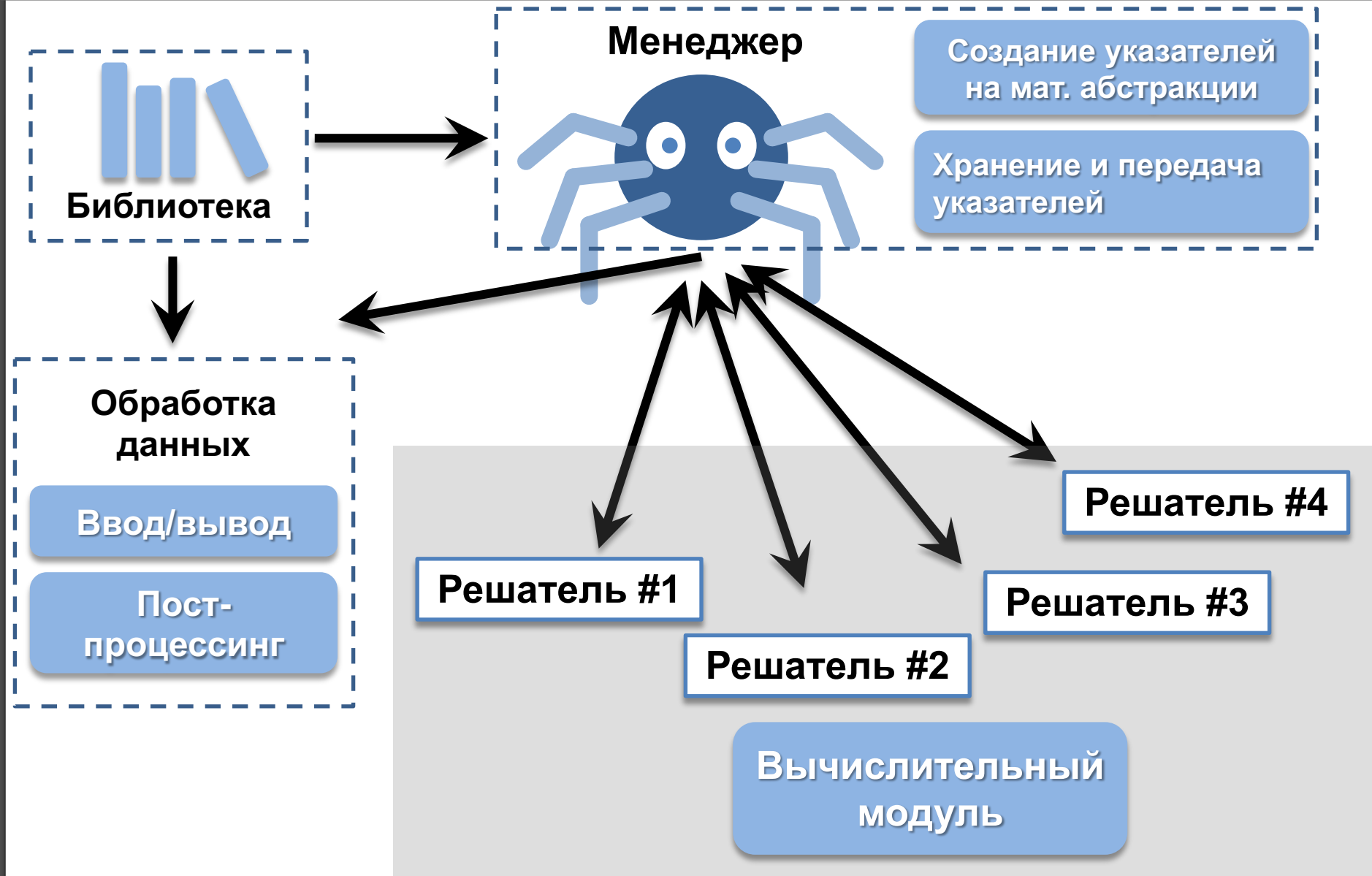
* Программный комплекс NRG: <https://github.com/yakovenko-ivan/NRG>



Структура библиотеки



Взаимодействие решателей между собой



Пользовательские типы данных и элементы ООП в Fortran 2003

```
module field_scalar_class
use global_data
use kind_parameters
use computational_domain_class
use boundary_conditions_class

implicit none

private
public field_scalar, field_scalar_cons,
field_scalar_cons_c

type :: field_scalar
  character(len = 80):: name_long
  character(len = 40):: name_short
end type field_scalar

type, extends(field_scalar):: field_scalar_cons
  real(dkind), dimension(:,:,:), allocatable:: cells
  integer:: dimensions
contains
  ! Data analysis
  procedure:: get_field_max
end type

interface field_scalar_cons_c
  module procedure constructor_cons
end interface
```

Название типа
данных

Напр.
«temperature»

Напр.«Т»

Значения поля в
ячейках

Размерность поля
(1D, 2D, 3D)

Процедура (метод) над
пользовательским типом
данных (field_scalar_cons)

Конструктор (правило по
которому создается
переменная типа field_scalar)

Особенности моделирования горения

- Горение – сложный процесс характеризующийся большим количеством пространственно-временных масштабов.
 - Пространственные масштабы: начиная от ширины фронта горения (доли миллиметра), заканчивая размерами реактора (до нескольких метров). Временные масштабы: начиная от времени индукции смеси (десятки микросекунд) заканчивая полным временем сгорания смеси (минуты и выше).
- Детальное моделирование распространения пламени требует использования полных механизмов химической кинетики. В результате в каждой расчетной ячейке необходимо решать систему обыкновенных дифференциальных уравнений моделирующую химические превращения. Данная система уравнений зачастую является жесткой.
- Наиболее интересными с точки зрения фундаментальных и прикладных задач являются нестационарные режимы горения, в ходе развития которых характеристики течения и термодинамические параметры могут меняться в широком диапазоне.

Математические модели

Многокомпонентная реагирующая газовая смесь с учетом

- Вязкости,
- Многокомпонентной диффузии,
- Теплопереноса
- Химических превращений

Быстрое горение

Медленные, околпредельные пламена

Полная система уравнений Навье-Стокса для реагирующих потоков

Приближение малых чисел Маха



Химия

Детальные схемы химической кинетики или редуцированные схемы.

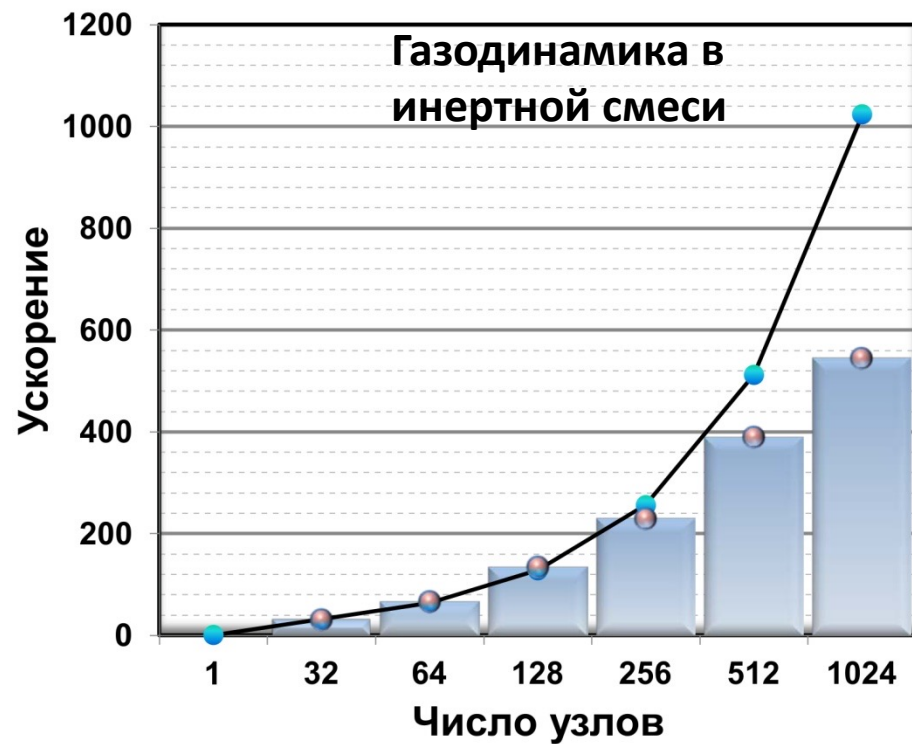
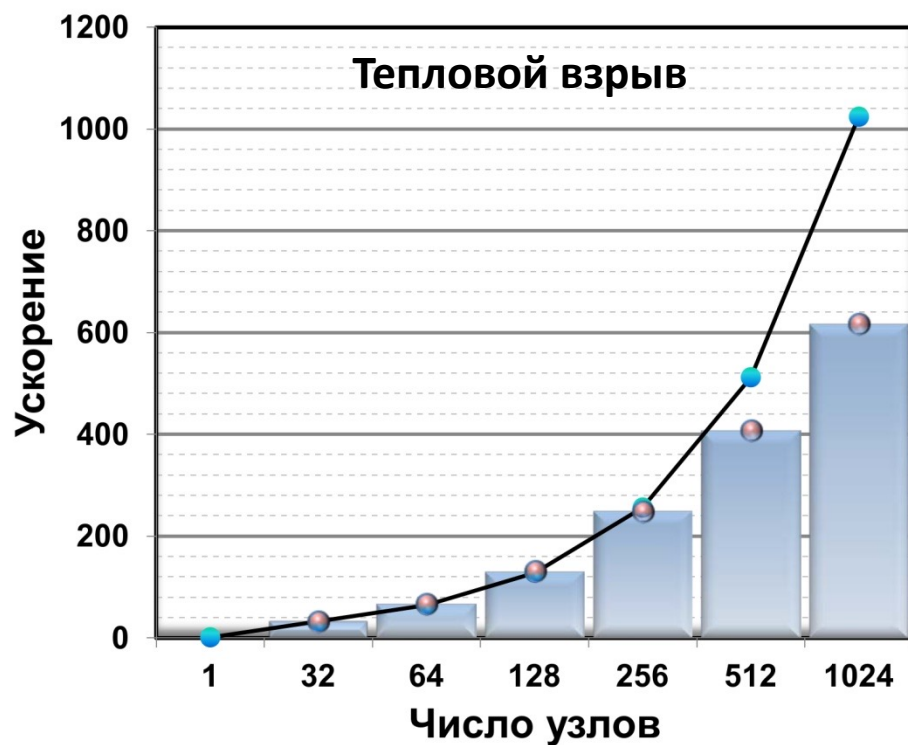
Термодинамика

Уравнения состояния с учетом температурных зависимостей теплоемкостей, коэффициентов переноса и энтальпий образования

Конденсированная фаза

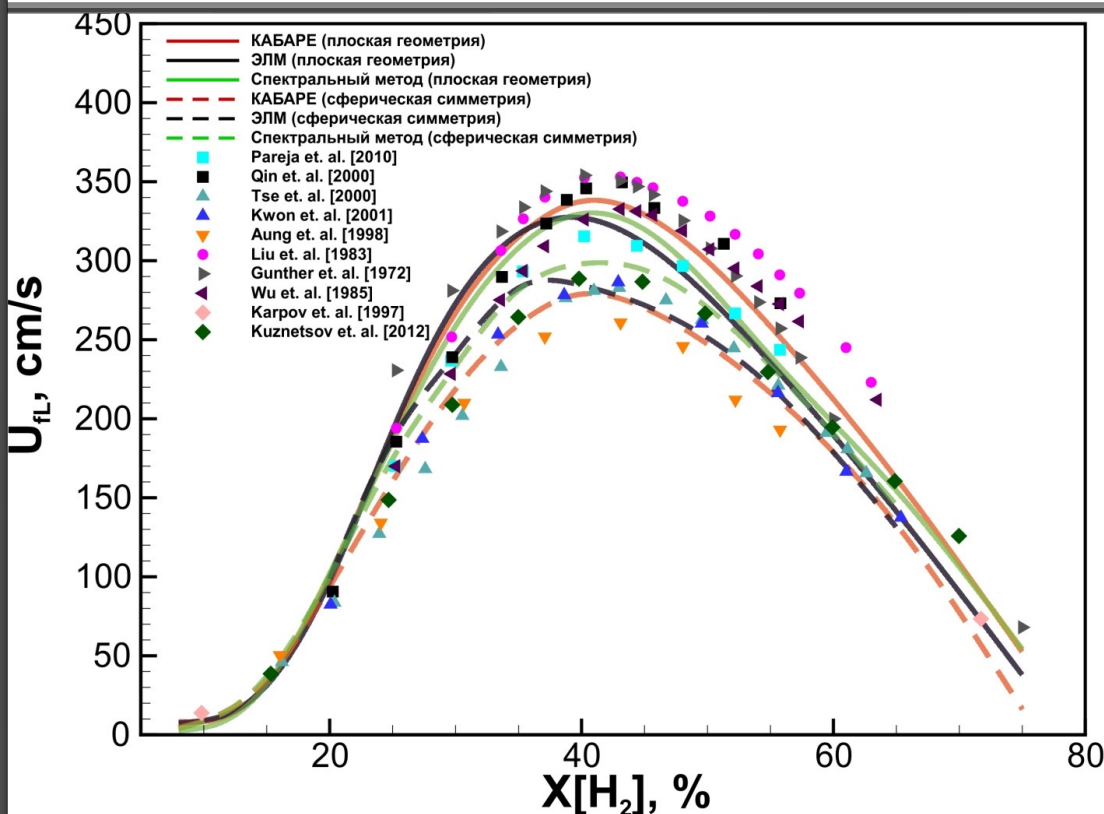
В случае если присутствуют добавки (твердые частицы, жидкие капли) модель дополняется уравнениями динамики дисперсной фазы в континуальном или Лагранжевом приближении.

Вычислительные технологии



Характерной особенностью моделирования процессов горения является сильная неоднородность вычислительной нагрузки. Наиболее трудоемкие процедуры решения уравнений химической кинетики выполняются только подобластях с зонами реакции. Два теста – тепловой взрыв и газодинамика инертной смеси представляют собой экстремальные случаи полного отсутствия химических превращений и протекания реакции во всем объеме.

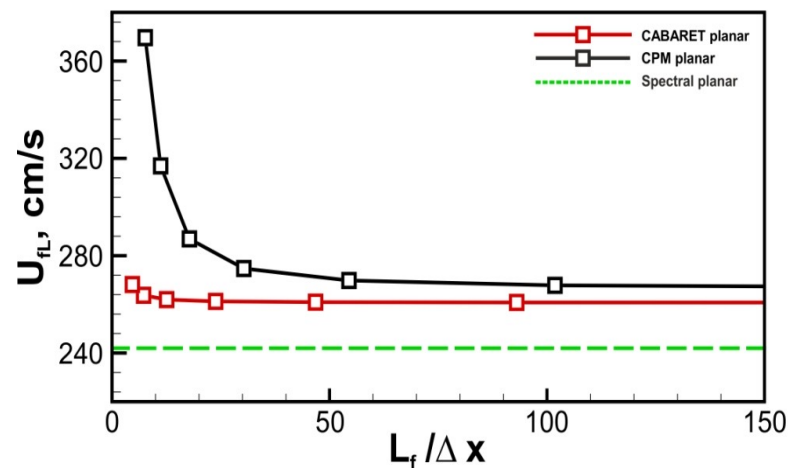
Верификация и валидация вычислительных методик



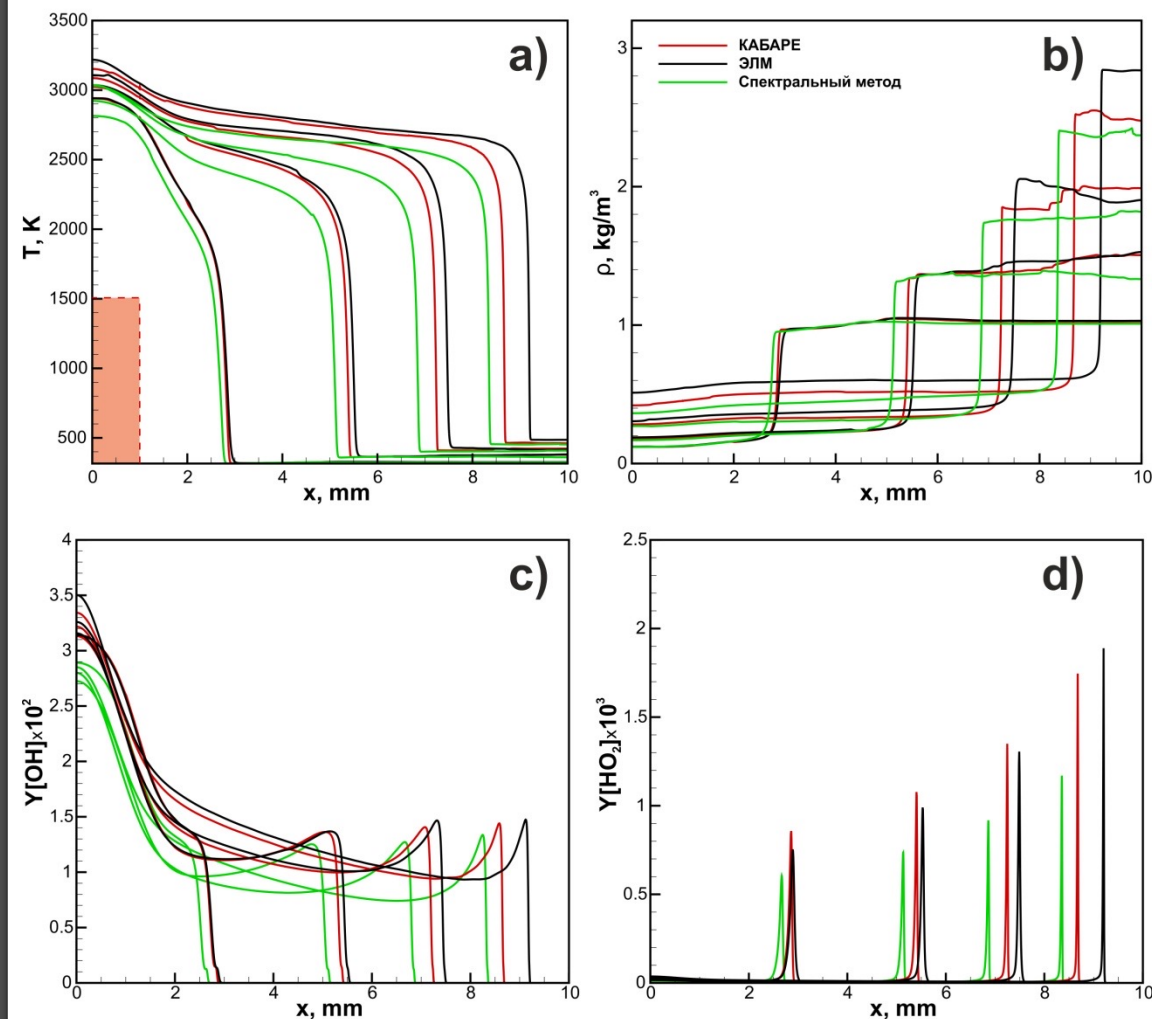
[Bykov, Kiverin, Koksharov, Yakovenko // *Comp. fluids*, 2019, in print]

Ламинарная скорость горения и ширина фронта пламени определяют основные пространственно-временные масштабы процесса. Целесообразно оценивать область сходимости численного алгоритма относительно этих величин.

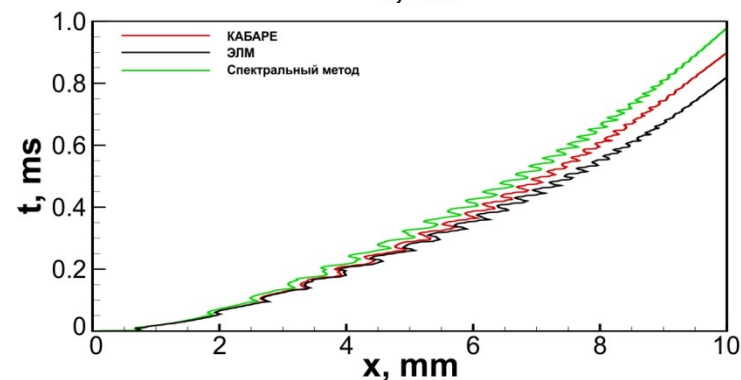
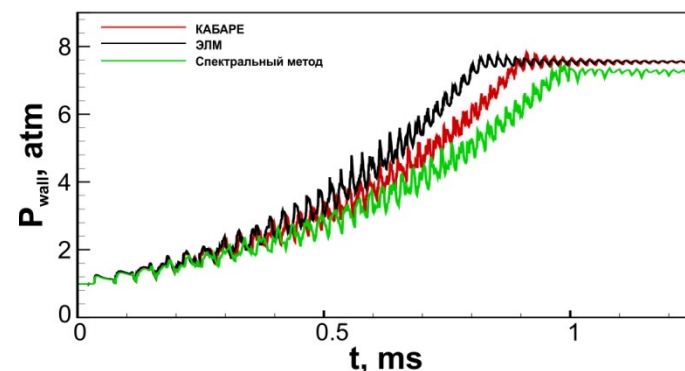
Ламинарная скорость является одним из наиболее важных параметров горения газообразных газовых смесей. Ламинарная скорость горения меняется в широком диапазоне при изменении состава горючей смеси, а также зависит от условий протекания процесса и представляет собой удобную величину для апробации вычислительных методик.



Верификация и валидация вычислительных методик



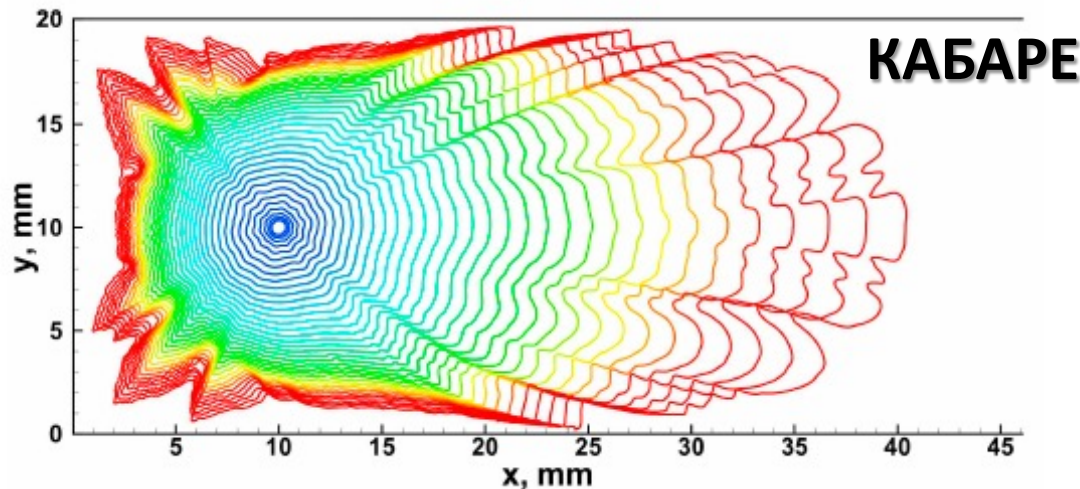
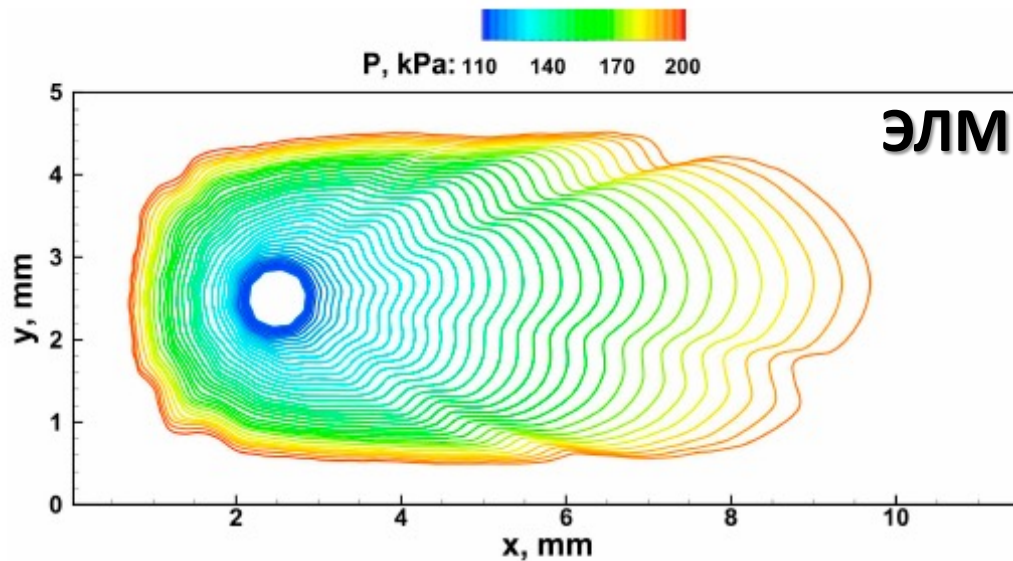
Горение в закрытых резервуарах характеризуется непрерывным ростом давления и взаимодействием между фронтом горения и волнами сжатия



[Bykov, Kiverin, Koksharov, Yakovenko // **Comp. fluids**, 2019, in print]

Дефлаграционное горение в замкнутом объеме, заполненном горючей смесью

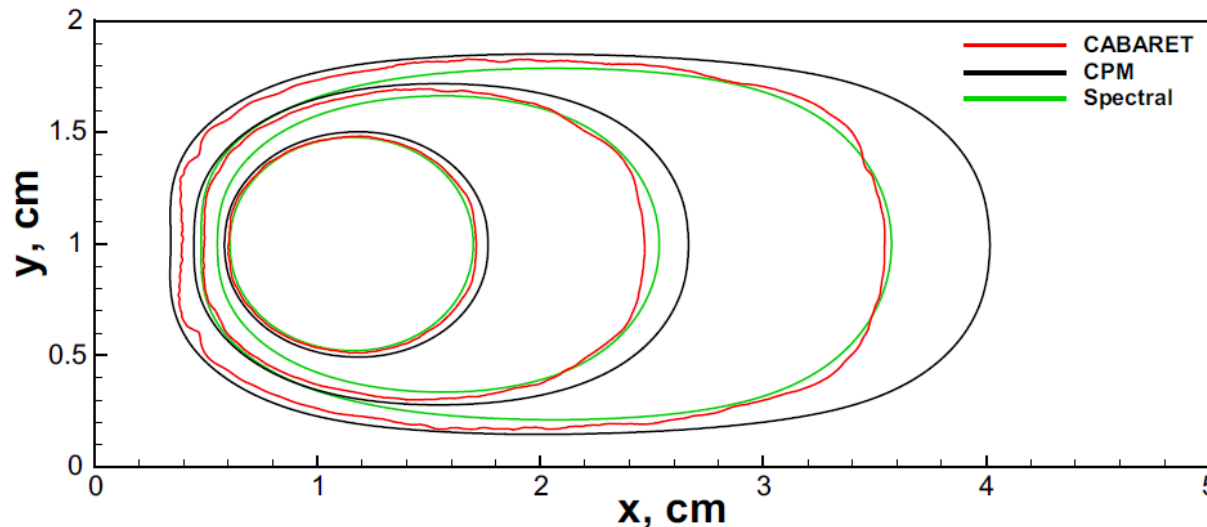
Стехиометрическая смесь $\text{H}_2\text{-O}_2$



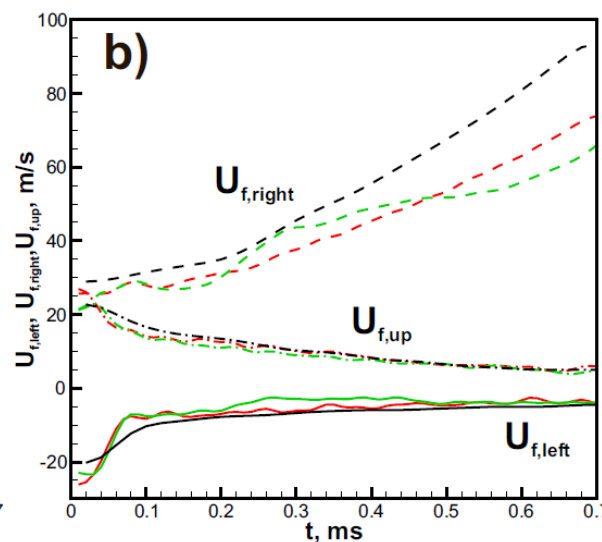
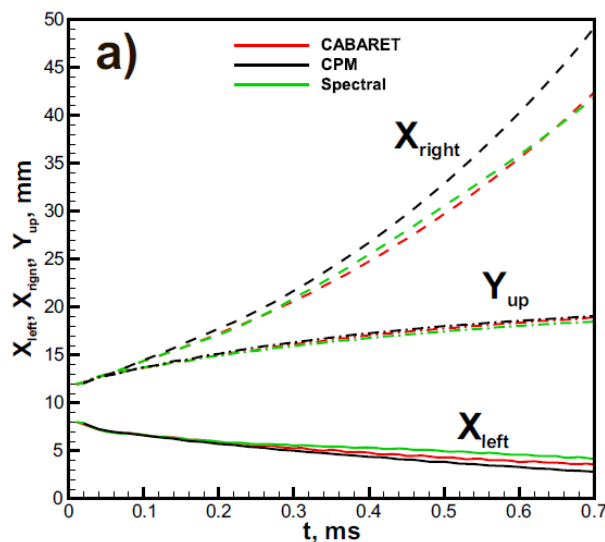
Бездиссипативные методики, такие как КАБАРЕ позволяют воспроизвести спектр акустических возмущений генерируемых фронтом горения в замкнутых объемах, без их искусственного сглаживания.

Дефлаграционное горение в замкнутом объеме заполненной горючей смесью

Стехиометрическая смесь H_2 -Воздух



Современные спектральные методы, такие как к примеру APSEM [Koksharov et. al. // ИЖК 2018, Bykov, et. al. // Comp. fluids, 2019] также представляют большой интерес ввиду того, что точность воспроизведения различных особенностей течения может быть подобрана адаптивно.



Заключение

- Разработанный программный комплекс NRG с открытым исходным кодом, представляет собой эффективное средство решения фундаментальных задач физики горения.
- Единая программная инфраструктура обеспечивает возможность выбора подходящей вычислительной методики для решения различных задач, связанных с эволюцией реагирующих потоков, что является важнейшим этапом процесса математического моделирования горения.
- Иерархическая структура программного комплекса позволяет работать на разных уровнях, начиная от постановки и решения конкретных задач, реализации пользовательских решателей и заканчивая разработкой низкоуровневых средств параллелизма и обработки данных.
- Для точного воспроизведения химических превращений, и следовательно всего процесса горения, необходимо использование детальных механизмов химической кинетики. Это условие определяет высочайшие требования к вычислительным ресурсам и в частности диктует необходимость использования суперкомпьютеров даже для решения фундаментальных задач физики горения и взрыва.

Спасибо за внимание!

