

Е.М. Смирнов, Д.К. Зайцев

МЕТОД КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ В ПРИЛОЖЕНИИ К ЗАДАЧАМ ГИДРОГАЗОДИНАМИКИ И ТЕПЛООБМЕНА В ОБЛАСТЯХ СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Введение

Весьма и весьма динамичная история практического применения методов вычислительной гидрогазодинамики насчитывает всего полвека. За это время многостороннее развитие получил метод конечных разностей (МКР), основы которого были заложены еще до появления быстродействующих ЭВМ, возник и достиг высокого совершенства метод конечных объемов (МКО), сформировалось отдельное направление, связанное с применением к задачам динамики жидкости и газа метода конечных элементов (МКЭ), созданного изначально для решения проблем механики деформируемого твердого тела. Не претендуя на полноту, охарактеризуем различные методы с единственной целью прояснить причины лидирующего положения МКО в разработках вычислительных средств, ориентированных на решение задач гидрогазодинамики и конвективного теплообмена в областях сложной геометрии.

Метод конечных разностей основан на аппроксимации входящих в исходные дифференциальные уравнения производных их дискретными (разностными) аналогами. Несомненными достоинствами МКР являются высокая эффективность и простота реализации, а также наглядность процедуры дискретизации, дающая возможность построения схем высокого порядка точности. Однако эти достоинства реализуются лишь при использовании достаточно «хорошей» регулярной (структурированной) сетки – почти ортогональной и с плавно меняющимися размерами ячеек. Как следствие, подавляющее большинство приложений МКР ограничено случаями сравнительно простых по геометрии расчетных областей.

В определенной степени решение проблемы моделирования течений в областях сложной геометрии было найдено в 1970-х гг., когда для дискретизации уравнений гидродинамики стал широко применяться метод конечных объемов. Отправной точкой МКО является интегральная формулировка законов сохранения массы, импульса, энергии и др. Балансовые соотношения записываются для небольшого контрольного объема; их дискретный аналог получается суммированием по всем граням выделенного

объема потоков массы, импульса и т.д., вычисленных по каким-либо квадратурным формулам. Поскольку интегральная формулировка законов сохранения не накладывает ограничений на форму контрольного объема, МКО пригоден для дискретизации уравнений гидрогазодинамики как на структурированных, так и на неструктурированных сетках с различной формой ячеек, что, в принципе, полностью решает проблему сложной геометрии расчетной области.

Следует заметить, однако, что использование неструктурированных сеток является довольно сложным в алгоритмическом отношении, трудоемким при реализации и ресурсоемким при проведении расчетов, в особенности при решении трехмерных задач. Это связано как с многообразием возможных форм ячеек расчетной сетки, так и с необходимостью применения более сложных методов для решения системы алгебраических уравнений, не имеющей определенной структуры. Практика последних лет показывает, что развитые разработки вычислительных средств, базирующихся на использовании неструктурированных сеток, по силам лишь достаточно крупным компаниям, имеющим соответствующие людские и финансовые ресурсы. Гораздо более экономичным оказывается использование блочно-структурированных сеток, предполагающее разбиение области течения на несколько подобластей (блоков) относительно простой формы, в каждой из которых строится своя расчетная сетка. В целом такая составная сетка не является структурированной, однако внутри каждого блока сохраняется обычная индексная нумерация узлов, что позволяет использовать эффективные алгоритмы, разработанные для структурированных сеток. Фактически, для перехода от одноблочной сетки к многоблочной необходимо лишь организовать стыковку блоков, т.е. обмен данными между соприкасающимися подобластями для учета их взаимного влияния. Заметим также, что разбиение задачи на отдельные относительно независимые блоки естественным образом вписывается в концепцию параллельных вычислений на кластерных системах с обработкой отдельных блоков на разных процессорах (компьютерах). Все это делает использование блочно-структурированных сеток в сочетании с МКО сравнительно простым, но чрезвычайно эффективным средством расширения геометрии решаемых задач, что исключительно важно для небольших университетских групп, разрабатывающих собственные программы в области гидрогазодинамики.

Особенно широко используемый в механике деформируемого твердого тела метод конечных элементов опирается на вариационную задачу о минимуме

ошибки аппроксимации искомого решения базисными функциями, а не непосредственно на исходные «физические» уравнения. Видимо, именно эта дополнительная математическая нагрузка, делающая МКЭ более сложным для понимания и внесения порой требующихся модификаций, наряду с отсутствием явных преимуществ по сравнению с МКО и трудностями обеспечения необходимой точности описания тонких пограничных слоев является причиной относительно низкой популярности МКЭ в вычислительной гидрогазодинамике.

Лидирующее положение МКО по отношению к другим способам дискретизации уравнений гидрогазодинамики подтверждается тенденциями современного рынка программного обеспечения. Достаточно заметить, что МКО используется в таких всемирно известных гидродинамических пакетах, как *FLUENT*, *CFX*, *STAR-CD*, *FINE (NUMECA)*, *CFD-ACE* и др., причем первые версии всех этих пакетов базировались на использовании блочно-структурированных сеток, и лишь по мере накопления опыта и финансовой мощи компании-разработчики перешли (переходят) к использованию неструктурированных сеток. Применение МКЭ для моделирования течений жидкости естественным образом возникло в гидродинамических приложениях к разветвленным конечно-элементным программам, разработанным для упруго-термомеханического анализа конструкций; среди наиболее известных можно назвать *ANSYS Flotran* и *COSMOS FloWorks*. Однако и в этой области заметен интерес разработчиков к МКО как более гибкому и технологичному способу дискретизации задач гидрогазодинамики; в этой связи симптоматичен выход в 2002 г. первой версии нового пакета *STAR-Works*, объединившего последние достижения гидродинамического пакета *STAR-CD* и системы проектирования *SolidWorks*.

Отмеченные выше достоинства МКО послужили основанием к тому, что в начале 1990-х гг. именно этот подход с ориентацией на использование блочно-структурированных сеток был выбран авторами в качестве основы для разработки собственного пакета программ широкого профиля для задач гидрогазодинамики и конвективного теплообмена. Время подтвердило правильность такого выбора: всего за 10 лет пакет *SINF*, развиваемый силами небольшой научной группы, принял вид современного программного комплекса, поддерживающего моделирование сопряженного тепло- и массообмена, сверхзвуковых и двухфазных течений, включающего широкий спектр моделей турбулентности, использующего высокоточные численные

схемы, эффективные алгоритмы, возможности параллельных вычислений и практически не имеющего ограничений по геометрии расчетной области.

Ниже дано детальное описание МКО, рассмотрены основные возможности и особенности программной реализации пакета *SINF*, приводятся примеры его применения для решения практических задач гидрогазодинамики в областях сложной геометрии.

Метод конечных объемов

Основные положения МКО удобно излагать, рассматривая «стандартное» уравнение баланса некой величины ϕ в контрольном объеме Ω , ограниченном поверхностью $S = \sum S_k$ с внешней нормалью \vec{n} :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} d\Omega + \sum_k \int_{S_k} \vec{n} \cdot \vec{q} ds = \int_{\Omega} Q d\Omega, \quad \vec{q} = \rho \vec{V} \phi - \alpha \nabla \phi \quad (1)$$

Здесь \vec{q} – вектор плотности потока величины ϕ , включающий конвективную и диффузионную составляющие, Q – плотность распределения объемных источников, \vec{V} – вектор скорости, ρ – плотность среды, α – коэффициент диффузии. В качестве ϕ может фигурировать, например, внутренняя энергия текущей среды, концентрация примеси, кинетическая энергия турбулентности и т.д. В пределе, при стягивании объема в точку, можно на основании формулы Остроградского-Гаусса переписать это уравнение в дифференциальной форме: $\partial \rho \phi / \partial t + \nabla \cdot \vec{q} = Q$. Отметим, что последняя, в силу более частого использования в литературе, иногда считается первичной, а интегральная формулировка закона сохранения (1) «выводится» из дифференциальной путем интегрирования по объему.

Согласно МКО пространственная дискретизация задачи осуществляется путем разбиения расчетной области на небольшие соприкасающиеся объемы, для каждого из которых записывается балансовое соотношение (1). Внутри каждого контрольного объема находится одна (и только одна) точка «привязки» искомого сеточного решения. В большинстве разработок, ориентированных на решение трехмерных задач для областей сложной геометрии, в качестве контрольного объема используются ячейки расчетной сетки: узлы сетки располагаются в вершинах многогранника (для структурированных сеток – гексаэдра, см. рис.1), сеточные линии идут вдоль его ребер, а значения искомых величин приписываются геометрическому центру ячейки. Альтернативные

варианты (например, построение контрольного объема вокруг узла сетки или введение различных контрольных объемов для разных переменных) встречаются реже и в рамках настоящей статьи рассматриваться не будут.

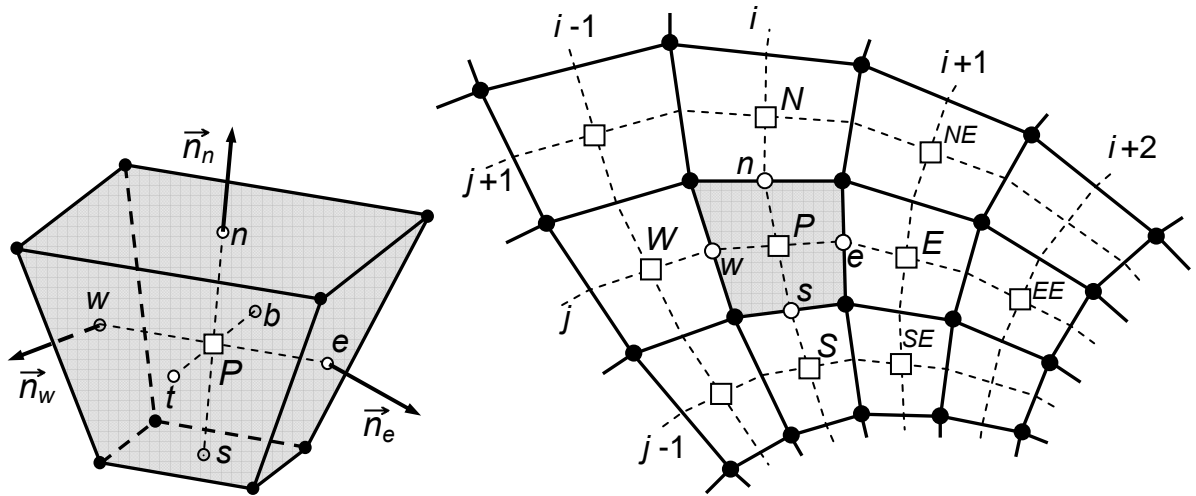


Рис.1. Структурированная сетка контрольных объемов с «привязкой» переменных к центру ячеек: ● – узел сетки, □ – центр ячейки, ○ – центр грани

Для получения дискретного аналога балансового уравнения в выбранной ячейке необходимо вычислить интегралы, входящие в (1), используя какие-либо квадратурные формулы. При этом крайне важно, чтобы для соприкасающихся ячеек поверхностный интеграл по их общей грани S_k вычислялся идентично. Последнее требование, легко реализуемое при составлении компьютерной программы, обеспечивает консервативность численной схемы, т.е. точное (в рамках принятого способа вычисления интегралов) соблюдение баланса ϕ согласно уравнению (1) для всей области течения. Это свойство МКО выгодно отличает его от МКР и МКЭ, в которых реализация строгой консервативности схемы является скорее исключением, чем правилом.

Способ аппроксимации интегралов влияет на такие важные свойства численной схемы, как точность, устойчивость, монотонность и др. Рассмотрим наиболее популярные варианты аппроксимации, ориентируясь, главным образом, на структурированные сетки и используя принятую в таких случаях «географическую» систему обозначений (см. рис.1): центр текущего контрольного объема (i,j,k) помечается как P (pole), центры соприкасающихся с ним объемов – как E (east; $i+1,j,k$), N (north; $i,j+1,k$), W (west; $i-1,j,k$) и т.д., центры их общих граней – соответствующими строчными буквами ($e, n, w...$). Поскольку для всех граней ячейки поверхностные интегралы в уравнении (1) вычисляются по одним и тем же правилам, рассмотрим для примера лишь «восточную» грань S_e .

Самые простые и широко используемые в МКО квадратурные формулы второго порядка точности непосредственно следуют из теоремы о среднем значении:

$$\int_{S_e} \vec{n} \cdot \vec{q} ds \approx \vec{S}_e \cdot \vec{q}_e, \quad \int_{\Omega} Q d\Omega \approx Q_p \Omega \quad (2)$$

Здесь $\vec{S}_e \equiv S_e \vec{n}_e$ – условный вектор площади грани, вычисляемый как векторное произведение ее диагоналей, \vec{q}_e – вектор плотности потока ϕ в центре грани. Если значение \vec{q}_e вычислено со вторым порядком точности, то формулы (2) обеспечивают второй порядок аппроксимации уравнения (1). Понижение точности вычисления \vec{q}_e немедленно сказывается на порядке точности численной схемы в целом. Для обеспечения же порядка аппроксимации строго выше второго потребовалось бы не только улучшить точность вычисления \vec{q}_e , но и использовать вместо (2) более точные квадратурные формулы, учитывающие изменение \vec{q} вдоль поверхности (то же относится и к вычислению интегралов по объему). Это сопряжено как со значительным усложнением вычислений так и с расширением шаблона аппроксимации, вследствие чего схемы повышенного порядка точности не находят широкого практического применения. Иными словами, в рамках МКО, в отличие от МКР, весьма затруднительно построить численную схему с порядком точности строго выше второго, что, впрочем, и не требуется для большинства практических приложений.

С учетом сказанного, примем за основу квадратурную формулу (2) и обратимся к вопросу вычисления \vec{q}_e . Начнем с конвективной составляющей. Как правило (если речь не идет о расчете сверхзвуковых течений), массовый расход жидкости через грань ячейки, $g_e = \vec{S}_e \cdot (\rho \vec{V})_e$, вычисляется при аппроксимации уравнения неразрывности и затем используется для всех остальных уравнений. При известном расходе вопрос расчета конвективной составляющей потока ϕ через грань сводится к определению ϕ_e . Достаточную (согласованную) точность обеспечивает линейная интерполяция; обычно используется ее простейший квази-одномерный вариант – интерполяция вдоль сеточной линии по двум узловым значениям, ϕ_P и ϕ_E , с учетом расстояний Pe и eE . Оказывается однако, что полученная таким способом численная схема в известном смысле эквивалентна центрально-разностной схеме МКР (для случая

равномерной декартовой сетки схемы МКО и МКР совпадают), которая в условиях малой величины физической диффузии неустойчива [10].

Способ борьбы с неустойчивостью центрально-разностной схемы хорошо известен – это аппроксимация конвективных производных односторонними разностями «против потока», что можно трактовать как приоритетный учет информации о значениях искомой функции в узлах, расположенных вдоль сеточной линии выше по потоку от текущей точки. Применительно к МКО принцип приоритета информации сверху по потоку означает, что для случая $g_e > 0$ (жидкость течет от P к E , см. рис.1) при вычислении ϕ_e следует использовать значения ϕ_P и ϕ_W , а для случая $g_e < 0$ – значения ϕ_E и ϕ_{EE} . Линейная экстраполяция по двум узлам обеспечит второй порядок аппроксимации (эквивалент противопоточной схемы МКР второго порядка), а простой снос по потоку значения ϕ из ближайшего узла (P или E) на грань соответствует противопоточной схеме МКР первого порядка точности.

Приоритет информации сверху по потоку можно трактовать и более широко, обеспечивая при интерполяции на грань не исключительное, а лишь преимущественное использование верхнепоточных узловых значений наряду с нижнепоточными. В этой связи особого упоминания заслуживает так называемая *QUICK* схема Леонарда [20], в которой для вычисления ϕ_e используется квадратичная интерполяция по трем узлам (W , P и E при $g_e > 0$); хотя из-за упоминавшихся ограничений квадратурной формулы (2) схема Леонарда обеспечивает лишь второй порядок аппроксимации, использование высокоточной интерполяции делает ее одной из наименее диссипативных среди схем второго порядка.

Данные варианты интерполяции можно рассматривать как частные случаи схемы с регулируемой (взвешенной) степенью противопоточности. В несколько упрощенном виде (без учета изменения размеров ячеек) противопоточная схема второго порядка точности может быть представлена следующим образом:

$$\phi_e \approx \bar{\phi}_e - \varepsilon \cdot \delta_e, \quad \delta_e = \begin{cases} (\phi_W - 2\phi_P + \phi_E)/2, & g_e > 0 \\ (\phi_P - 2\phi_E + \phi_{EE})/2, & g_e < 0 \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $\bar{\phi}_e$ – «центральное» значение, получаемое путем линейной интерполяции, а δ_e – противопоточная поправка, вводимая с регулируемым весом ε . При $\varepsilon = 1$ имеем полностью противопоточную схему, $\varepsilon = 0.25$ отвечает *QUICK* схеме Леонарда, $\varepsilon = 0$ – центрально-разностной схеме (что объясняет название $\bar{\phi}_e$).

Отметим, что поправка δ_e может учитывать изменение ϕ не только вдоль индексной линии i , но также вдоль направлений j и k , как в обобщенной схеме Леонарда [20]. Семейству взвешенных противопоточных схем первого порядка точности отвечает поправка следующего вида ($\varepsilon = 1$ дает полностью противопоточную схему):

$$\delta_e = \begin{cases} (\phi_E - \phi_P) / 2, & g_e > 0 \\ (\phi_P - \phi_E) / 2, & g_e < 0 \end{cases} \quad (3a)$$

В принципе, стабилизирующая поправка δ_e может быть и не противопоточной, как, например, в схеме искусственной диссипации 4-го порядка [6]:

$$\delta_e = (\phi_W - 3\phi_P + 3\phi_E - \phi_{EE}) / 4 \quad (3б)$$

Уместно заметить также, что при реализации схем второго порядка точности на неструктурированной сетке поиск дополнительных (верхнепоточных) узлов для интерполяции является отнюдь не тривиальной задачей; дополнительные усложнения вносит и процедура многоточечной интерполяции.

Аппроксимация диффузионной составляющей потока, в отличие от конвективной, не требует каких-либо мер для обеспечения устойчивости схемы. Некоторую сложность представляет лишь вычисление производной $\vec{n} \cdot \nabla \phi \equiv \partial \phi / \partial n$ в центре грани. Существуют, по крайней мере, две возможности. Первая – рассчитать значения $\nabla \phi$ в центрах ячеек, используя интегральное представление градиента:

$$\int_{\Omega} \nabla \phi d\Omega = \int_S \vec{n} \phi ds \quad \Rightarrow \quad (\nabla \phi)_P \approx \frac{1}{\Omega} \sum_k \vec{S}_k \phi_k, \quad (4)$$

после чего применить обычную процедуру линейной интерполяции для расчета значения $\nabla \phi$ на грани ячейки. Другой способ – аппроксимировать конечными разностями саму производную $\partial \phi / \partial n$ на грани, переходя, как это принято в МКР, в локальную индексную систему координат (фактически, используя формулы перехода к криволинейным обобщенным координатам). Второй подход требует меньше вычислений и обеспечивает меньшую погрешность аппроксимации на равномерной сетке (в рамках второго порядка точности), но применим только для структурированных сеток.

Рассмотренные подходы к аппроксимации скалярного уравнения применимы и к уравнениям движения жидкости с той лишь разницей, что при

вычислении диффузионной составляющей потока импульса через грань ячейки приходится иметь дело с тензором напряжений, а вклад градиента давления в баланс импульса учитывается в соответствии с интегральным представлением (4). Аппроксимация уравнения неразрывности, казалось бы, еще проще – нужно лишь просуммировать расходы жидкости по всем граням ячейки, используя простейшую квадратуру $g_e = \vec{S}_e \cdot (\rho \vec{V})_e$ в сочетании с одной из рассмотренных интерполяционных схем для определения плотности и скорости в центре грани. Однако при этом могут возникать так называемые четно-нечетные пространственные осцилляции поля давления, что особенно характерно для низкоскоростных потоков газа и течений несжимаемой жидкости (речь не идет об использовании разнесенных сеток с «привязкой» скорости и давления к разным точкам). Для подавления этих нефизичных осцилляций широко используется корректирующая процедура [22], вводящая в выражение для расхода g_e специальную стабилизирующую поправку. В несколько упрощенном виде данная поправка может быть представлена следующим образом:

$$g_e = \bar{g}_e - \frac{C}{A_e} \left[p_E - p_P - \frac{1}{2} \left(\frac{p_E - p_W}{2} + \frac{p_{EE} - p_P}{2} \right) \right] \quad (5)$$

Здесь $C < 1$ – весовой множитель, A_e – коэффициент, зависящий от геометрии ячеек и от способа аппроксимации уравнений движения. Как нетрудно видеть, вводимая поправка (5) реагирует на отклонение «индексной» производной $(\partial p / \partial i)_e = p_E - p_P$ от ее среднего значения $[(\partial p / \partial i)_P + (\partial p / \partial i)_E] / 2$, обеспечивая эффективное подавление пульсаций; в случае гладкого (неосциллирующего) поля поправка пропорциональна $\partial^3 p / \partial i^3$ и имеет третий порядок малости.

Программный комплекс *SINF*

Описанные подходы к пространственной дискретизации уравнений гидрогазодинамики в рамках МКО реализованы в программном комплексе *SINF* (*Supersonic-to-INcompressible Flows*). Первая версия *SINF*, разработанная одним из авторов статьи в течение полугода в рамках акции *Research in Brussels* [24], позволяла рассчитывать ламинарные и турбулентные потоки несжимаемой жидкости и дозвуковые течения газа (включая процессы конвективного теплообмена) как в неподвижной, так и во вращающейся системе отсчета в областях достаточно сложной геометрии (в пределах возможностей одноблочной структурированной сетки). Для моделирования турбулентности

были реализованы популярные k - ϵ модели – низкорейнольдсовая [18] и «стандартная» высокорейнольдсовая [19]; в последнем случае при постановке граничных условий был применен метод пристенных функций, позволяющий существенно сократить количество расчетных ячеек [23].

В последующие годы силами научной группы, работающей на кафедре гидроаэродинамики СПбГПУ, возможности физического моделирования программного комплекса *SINF* систематически наращивались при одновременной доработке математической части программы (уточнение аппроксимаций и снижение требований к качеству сетки, внедрение более совершенных алгоритмов и др.). Так, в 1995-97гг. был осуществлен переход к использованию блочно-структурированных сеток, в 1997-99гг. добавлена возможность моделирования нестационарных течений и сопряженного теплообмена, в 2001г. на основе [16] разработан обобщенный трехмерный вариант *HCUSP* схемы для расчета сверхзвуковых и трансзвуковых потоков с высоким качеством разрешения ударных волн [5], в 2002г. реализованы возможности параллельных вычислений на базе технологии *MPI* [26]. В 1996г. в состав комплекса *SINF* вошел относительно независимый модуль расчета поведения ансамбля твердых частиц в турбулентном потоке [2, 33], в котором турбулентная диффузия частиц моделируется согласно [15], а обратное влияние дисперсной фазы на несущий поток – по методу *PSI (Particle Source in Cell)* [13]. Существенно обогатился также спектр реализованных моделей турбулентности, среди которых: модель эффективной вязкости Спаларта-Алмараса [27], k -модель Вольфштейна [31], семейство k - ω моделей Уилкокса [29, 30] и зональная *SST* модель Ментера [21], k - ϵ модель Чена [12] и *RNG* [32], несколько вариантов «подсеточных» моделей для метода моделирования крупных вихрей (*LES*) и метода моделирования отсоединенных вихрей (*DES*).

Для отыскания решения системы алгебраических уравнений, получаемых в результате пространственной дискретизации исходной задачи, в *SINF* используется разновидность итерационной процедуры – метод установления [10]. При решении стационарной задачи организуется некий фиктивный нестационарный процесс, конечный (установившийся) результат которого есть искомое решение; в случае нестационарной задачи процесс установления организуется на каждом шаге по физическому времени (для аппроксимации нестационарных членов в уравнении используется неявная трехслойная схема второго порядка точности).

Основные идеи метода установления можно проиллюстрировать на примере уже рассматривавшегося уравнения переноса величины ϕ . Вводя в уравнение (1) фиктивную производную по псевдовремени $\partial\phi/\partial\tau$ и используя для ее аппроксимации неявную схему первого порядка, эволюционную задачу установления можно записать в следующем виде:

$$\rho \frac{\phi^{m+1} - \phi^m}{\tau} + \Lambda(\phi^{m+1}) = 0, \quad \Lambda(\phi) \Leftrightarrow \frac{\partial\rho\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V}\phi - \alpha\nabla\phi) - Q \quad (6)$$

Здесь τ – шаг по псевдовремени (времени установления), индексы m и $m+1$ обозначают текущий (известный) и следующий слой соответственно, $\Lambda(\phi)$ – оператор, отвечающий аппроксимации исходной задачи в рамках МКО (для простоты вместо интегральной формы записи использован ее дифференциальный эквивалент). При $\partial\phi/\partial\tau = 0$ (установившийся режим) решение уравнения (6) есть, очевидно, искомое решение задачи (1).

Оператор $\Lambda(\phi)$ является, вообще говоря, нелинейным, т.к. величина ϕ (в зависимости от ее смысла) может влиять и на плотность ρ , и на коэффициент диффузии α , и на источник Q . Вводя в рассмотрение малое приращение $\phi' \equiv \phi^{m+1} - \phi^m$, уравнение (6) можно линеаризовать:

$$\rho\phi'/\tau + L\phi' = -R, \quad L \approx \partial\Lambda/\partial\phi, \quad R \equiv \Lambda(\phi^m) \quad (7)$$

Здесь R – невязка уравнения (1), характеризующая уровень погрешности текущего решения (точность выполнения дискретизированных уравнений сохранения), L – линейный оператор перехода со слоя m на $m+1$.

Главным достоинством линеаризованного уравнения (7) по сравнению с исходной эволюционной задачей (6) является относительная свобода выбора и аппроксимации оператора L . Действительно, вне зависимости от того, учтены ли при дифференцировании оператора $\Lambda(\phi)$ все нелинейности (или даже просто положено $\partial\Lambda/\partial\phi \approx 0$, что равносильно явной аппроксимации производной $\partial\phi/\partial\tau$), записан ли оператор L в консервативной или неконсервативной форме, использована ли при его аппроксимации схема первого или второго порядка точности – в любом случае установившееся решение ($\phi' = 0$; $\phi^{m+1} = \phi^m = \phi$) удовлетворяет уравнению $\Lambda(\phi) = 0$, т.е. является решением исходной задачи (1).

Обычно при выборе оператора L исходят из соображений эффективности алгоритма: удобства решения системы уравнений для приращений, объема сопутствующих вычислений, возможности использования большого шага по

псевдовремени и др. Конечно, перечисленные составляющие эффективности противоречивы: самой простой является явная схема ($L = 0$), однако для ее устойчивости требуется крайне малый шаг τ ; напротив, точный учет всех производных $\partial\Lambda/\partial\phi$ и их аккуратная аппроксимация, обеспечивающие возможность использования больших временных шагов, могут быть слишком сложны. С учетом ряда обстоятельств в комплексе *SINF* реализован компромиссный вариант (8), в котором дифференцирование оператора $\Lambda(\phi)$ выполнено по следующим правилам: а) «заморожены» коэффициенты при пространственных производных; б) для нестационарной задачи учтен вклад производной по физическому времени $\partial\rho\phi/\partial t$ (подразумевается использование неявной схемы второго порядка точности $\partial f / \partial t \approx (3f - 4f^{M-1} + f^{M-2}) / 2\Delta t$; индекс M текущего временного слоя всюду опущен); в) учтены только те слагаемые в источнике Q , которые усиливают диагональное преобладание оператора L .

$$\begin{aligned} \rho\phi' / \tau^* + L^*\phi' = -R^*, \quad L^*\phi' \Leftrightarrow \rho\vec{V} \cdot \nabla\phi' - \nabla \cdot (\alpha\nabla\phi') \\ \frac{\rho}{\tau^*} = \frac{\rho}{\tau} + \frac{3\rho}{2\Delta t} - \min\left(0, \frac{\partial Q}{\partial\phi}\right), \quad R^* = R - \phi R_C \end{aligned} \quad (8)$$

Конвективная часть оператора L^* записана в неконсервативной форме; соответственно скорректирована правая часть уравнения (8) с учетом невязки уравнения неразрывности R_C . Аппроксимация оператора L^* выполняется по упрощенной противопоточной схеме первого порядка в предположении «почти» ортогональной сетки (отбрасываются смешанные производные, обусловленные неортогональностью). Для ускорения процесса установления реализован локальный выбор шага по псевдовремени, учитывающий размер обрабатываемой ячейки и местные скорости конвективного и диффузионного переноса.

Предложенная в [11] приближенная факторизация системы алгебраических уравнений (8) подразумевает разбиение трехмерного оператора L (для краткости индекс $*$ здесь и далее опускается) на три одномерных, содержащих производные лишь вдоль одного индексного направления: $L = L_1 + L_2 + L_3$. Далее, в предположении достаточной малости шага по псевдовремени, сумма операторов приближенно заменяется произведением ($\tilde{\tau} \equiv \tau/\rho$):

$$\phi' + \tilde{\tau}(L_1 + L_2 + L_3)\phi' \cong (1 + \tilde{\tau}L_1)(1 + \tilde{\tau}L_2)(1 + \tilde{\tau}L_3)\phi' = -\tilde{\tau}R, \quad (9)$$

что равносильно переходу от трехмерной задачи к последовательности трех одномерных:

$$\begin{cases} (1 + \tilde{\tau}L_1)\phi''' = -\tilde{\tau}R \\ (1 + \tilde{\tau}L_2)\phi'' = \phi''' \\ (1 + \tilde{\tau}L_3)\phi' = \phi'' \end{cases} \quad (9a)$$

Каждое из этих уравнений содержит производные вдоль одного индексного направления и аппроксимировано на трехточечном шаблоне, что позволяет применить для их решения эффективный алгоритм прогонки (для уравнений движения используется матричная прогонка). В ряде задач, например, при расчете течения в длинном канале [25], более эффективным оказывается метод Гаусса-Зейделя с релаксацией по линиям или плоскостям.

В случае течений несжимаемой жидкости или низкоскоростных потоков газа возникает известная проблема: поле давления должно быть таким, чтобы удовлетворялось уравнение неразрывности, в котором, однако, давление отсутствует. Основным подходом к решению этой проблемы в программном комплексе *SINF* является использование хорошо известного метода искусственной сжимаемости (см., например, [6]), т.е. введение в уравнение неразрывности фиктивной производной от давления: $\beta^{-1} \cdot \partial p / \partial \tau$ (коэффициент β пропорционален квадрату характерной скорости потока). В процессе установления ненулевая невязка уравнения неразрывности (т.е. несоблюдение баланса массы) приводит к возмущению поля давления, которое в свою очередь, через уравнения движения, воздействует на поле скорости. При $\partial p / \partial \tau = 0$ (установившееся решение) вклад искусственно введенной поправки исчезает и выполняется исходное уравнение неразрывности. Такой подход позволяет в рамках единого алгоритма рассматривать течения как сжимаемой, так и несжимаемой жидкости. В комплексе *SINF* реализован также *SIMPLEC* алгоритм коррекции давления на основании решения вспомогательного уравнения Пуассона [28], точнее, его вариант, предполагающий решение уравнений для приращений искомых переменных [1].

При использовании блочно-структурированной сетки на каждом шаге по псевдовремени задача определения приращений всех величин по предварительно вычисленному полю невязок соответствующих уравнений решается независимо в каждом блоке. После этого выполняется стыковка блоков, т.е. обмен данными между соприкасающимися блоками для учета их взаимного влияния, и делается очередной шаг по псевдовремени вплоть до

установления. В комплексе *SINF* для проведения стыковки организуется вспомогательный «виртуальный» блок, состоящий из двух приграничных слоев ячеек каждого из стыкуемых «реальных» блоков. Все вычисления, связанные с определением потоков на интерфейсе стыковки, проводятся внутри виртуального блока по тем же правилам, что и в обычных блоках (кроме случая сопряженного теплообмена); при необходимости выполняется дополнительная обработка данных (поворот векторов для обеспечения условий вращательной периодичности, переинтерполяция в случае нестыкующихся сеток и др.). Затем сосчитанные потоки вместе со значениями переменных на интерфейсе передаются в стыкуемые блоки и используются для расчета невязок. Тем самым гарантируется сохранение консервативных свойств численной схемы и обеспечивается полная «прозрачность» межблочных границ.

В однопроцессорной версии комплекса *SINF* все вычисления проводятся последовательно – блок за блоком, стыковка за стыковкой. В «параллельной» версии, предназначенной для вычислений на кластерах, состоящих из нескольких связанных сетью компьютеров (процессоров), отдельные блоки сетки, как и стыковки, обрабатываются на разных процессорах, а межблочный обмен осуществляется с использованием технологии *MPI* (*Message Passing Interface*). Для повышения эффективности обмена создается промежуточная копия приграничных слоев ячеек каждого блока вдоль интерфейса стыковки [26]. Как показал опыт решения больших задач (0,6...2,4 миллиона ячеек) на кластерах, включающих до 24 процессоров, использованные в *SINF* алгоритмы обеспечивают эффективность параллелизации не менее 0,8.

Примеры расчетов

За свою десятилетнюю историю программный комплекс *SINF* с успехом применялся для решения многочисленных методических и практических задач, таких как: моделирование сложных нестационарных процессов турбулентной термоконвекции [7] и струйной защиты [9], исследование тепло- и массообмена в задачах выращивания кристаллов [4], расчет турбулентных течений и определение потерь давления в элементах проточных частей турбомашин (лопаточные аппараты, входные и выходные патрубки, клапаны, системы охлаждения и др., см. [8]), а также в котлах, теплообменниках, завихрителях [3] и других промышленных устройствах сложной геометрии.

Остановимся лишь на двух примерах. Первый из них охватывает полученные недавно авторами настоящей статьи совместно с Э. Л. Китаниным

и В. В. Рисом результаты численного моделирования смешанной конвекции в ячейке камеры хранения отработанного ядерного топлива (ОЯТ). Как известно, одним из важнейших условий безопасного хранения ОЯТ является обеспечение допустимой температуры тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ) и гнезд их хранения. В обсуждаемом варианте хранилища пеналы со сборками ТВЭЛ помещаются в вертикальные цилиндрические гнезда, охлаждение которых обеспечивается естественной конвекцией воздуха в камере хранения ОЯТ (рис.2); охлаждающий воздух поступает в камеру через отверстия в полу и отводится через сборный коллектор в верхней части помещения (на схеме не показан).

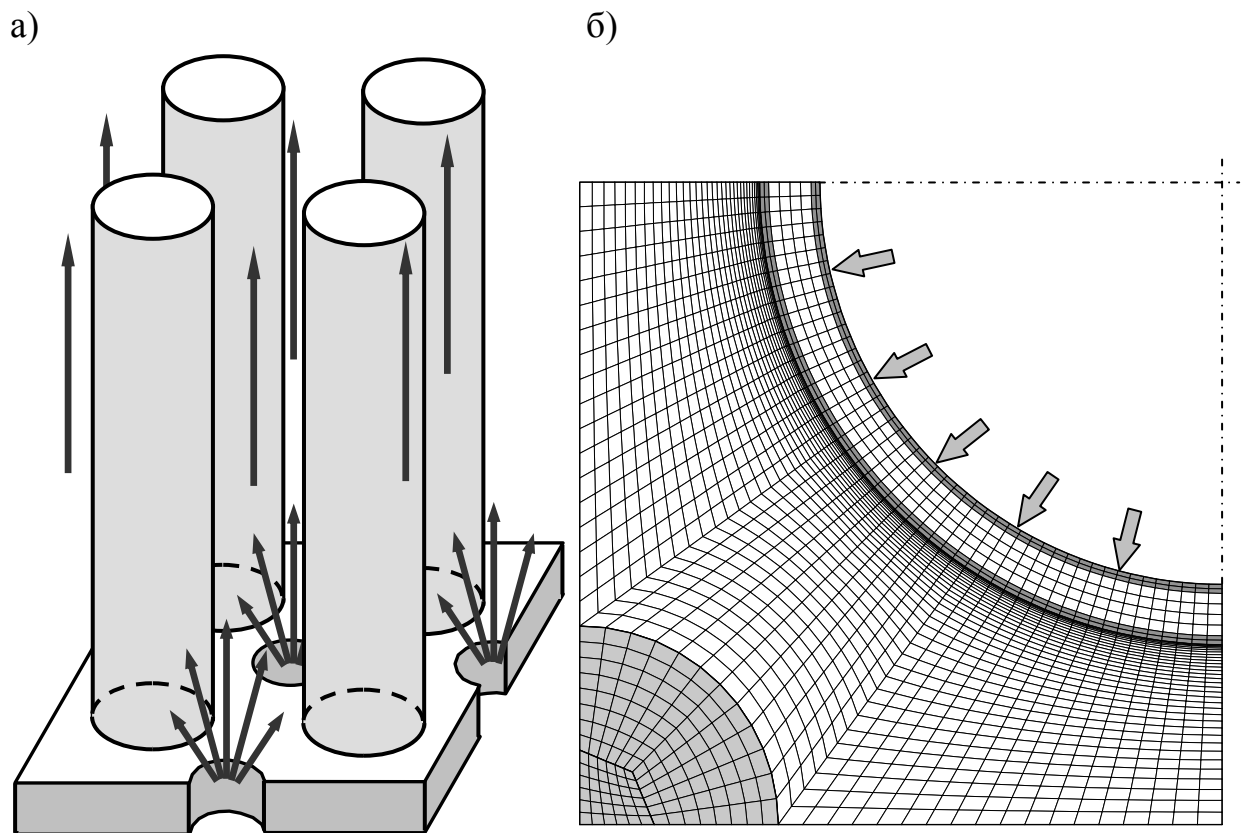


Рис.2. Схема расположения гнезд и подвода охлаждающего воздуха в камере хранения ОЯТ (а).
Сечение расчетной сетки (б): 1 – стенка пенала, 2 – стенка гнезда, 3 – область подвода охлаждающего воздуха

Главной задачей численного моделирования являлось исследование структуры течения охлаждающего воздуха в камере хранения ОЯТ, а также определение теплового состояния гнезда хранения, коэффициента теплоотдачи с его поверхности, гидравлического сопротивления тракта и др. Для того, чтобы учесть влияние потока воздуха на тепловое состояние гнезда хранения, а также обратное влияние (за счет сил плавучести) температуры стенки на поток, решалась задача сопряженного теплообмена. Основными входными данными для расчета были: изменяющийся по высоте тепловой поток, поступающий от

сборки ТВЭЛ к стенке пенала, и расход охлаждающего воздуха. Эффективное тепловое сопротивление тонкой воздушной прослойки между стенками пенала и гнезда хранения ОЯТ (с учетом излучения и свободной конвекции воздуха в зазоре) оценивалось по приближенной методике. Для моделирования турбулентности использовалась низкорейнольдсовая модель эффективной вязкости Спаларта-Аллмараса [27]. Сечение расчетной сетки показано на рис.2,б; серым цветом выделены стенки гнезда хранения ОЯТ и пенала с ТВЭЛ, а также зона подвода охлаждающего воздуха (входное отверстие); благодаря сгущению сетки около стенки хорошее разрешение вязкого подслоя.

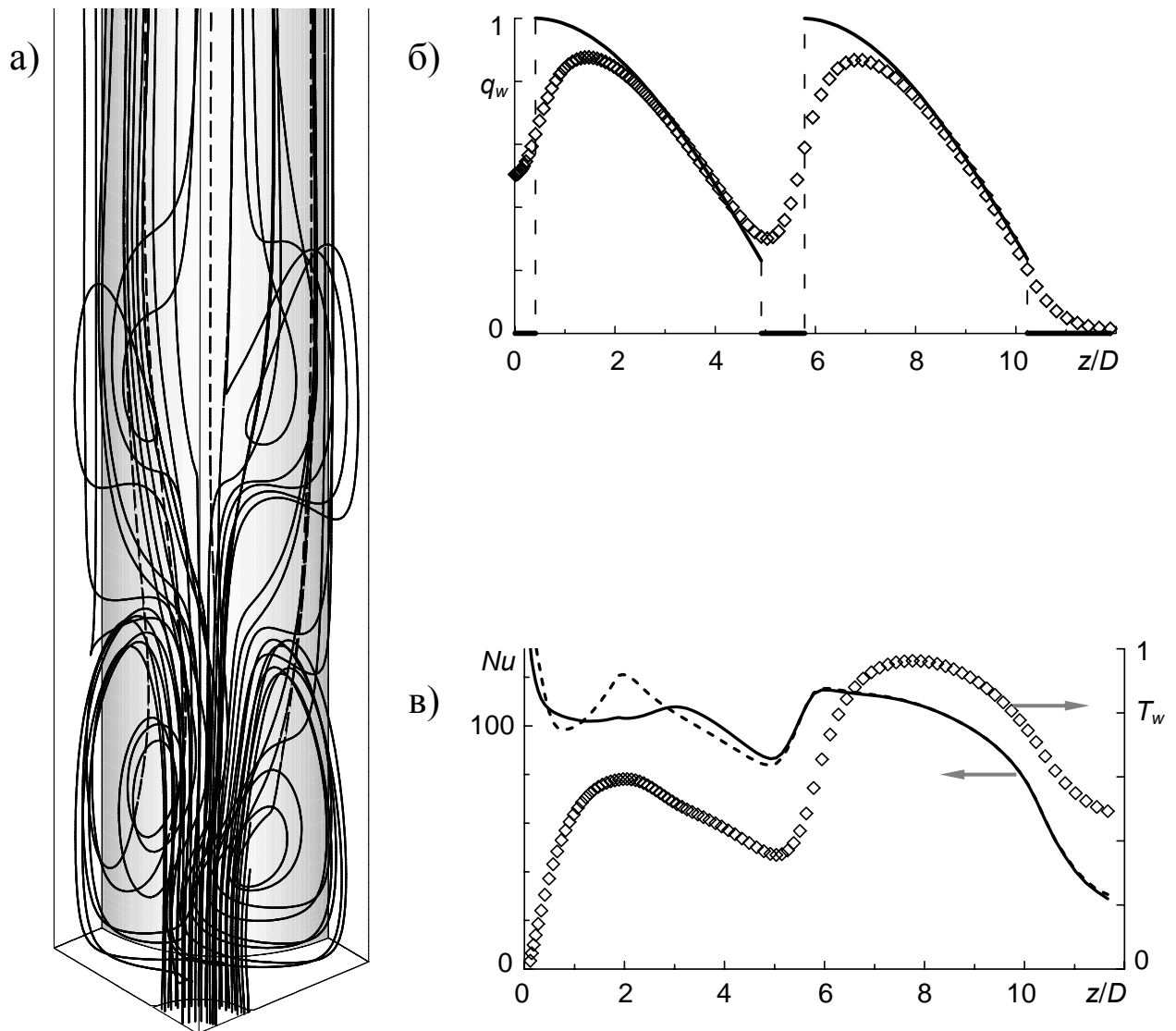


Рис.3. Линии тока охлаждающего воздуха в нижней части ячейки хранения ОЯТ (а); распределение по высоте ячейки теплового потока (б), температуры стенки гнезда и коэффициента теплоотдачи (в)

Отдельные результаты расчета приведены на рис.3. Картина линий тока (рис.3,а) дает представление о чрезвычайно сложном пространственном

течении охлаждающего воздуха в нижней части ячейки хранения ОЯТ; хорошо видны зоны рециркуляции воздуха и сложные поперечные токи. На рис.3,б показано распределение тепловых потоков по высоте ячейки: сплошная линия отвечает задаваемому модельному распределению на внутренней поверхности пенала со сборками ТВЭЛ; символами показан тепловой поток на наружной поверхности гнезда хранения ОЯТ, рассчитанный с учетом перераспределения тепла вдоль стенки и ее охлаждения потоком воздуха. Наконец, рис.3,в иллюстрирует изменение по высоте относительной температуры стенки гнезда (символы) и безразмерного локального коэффициента теплоотдачи (числа Нуссельта, построенного по диаметру гнезда) вдоль двух образующих.

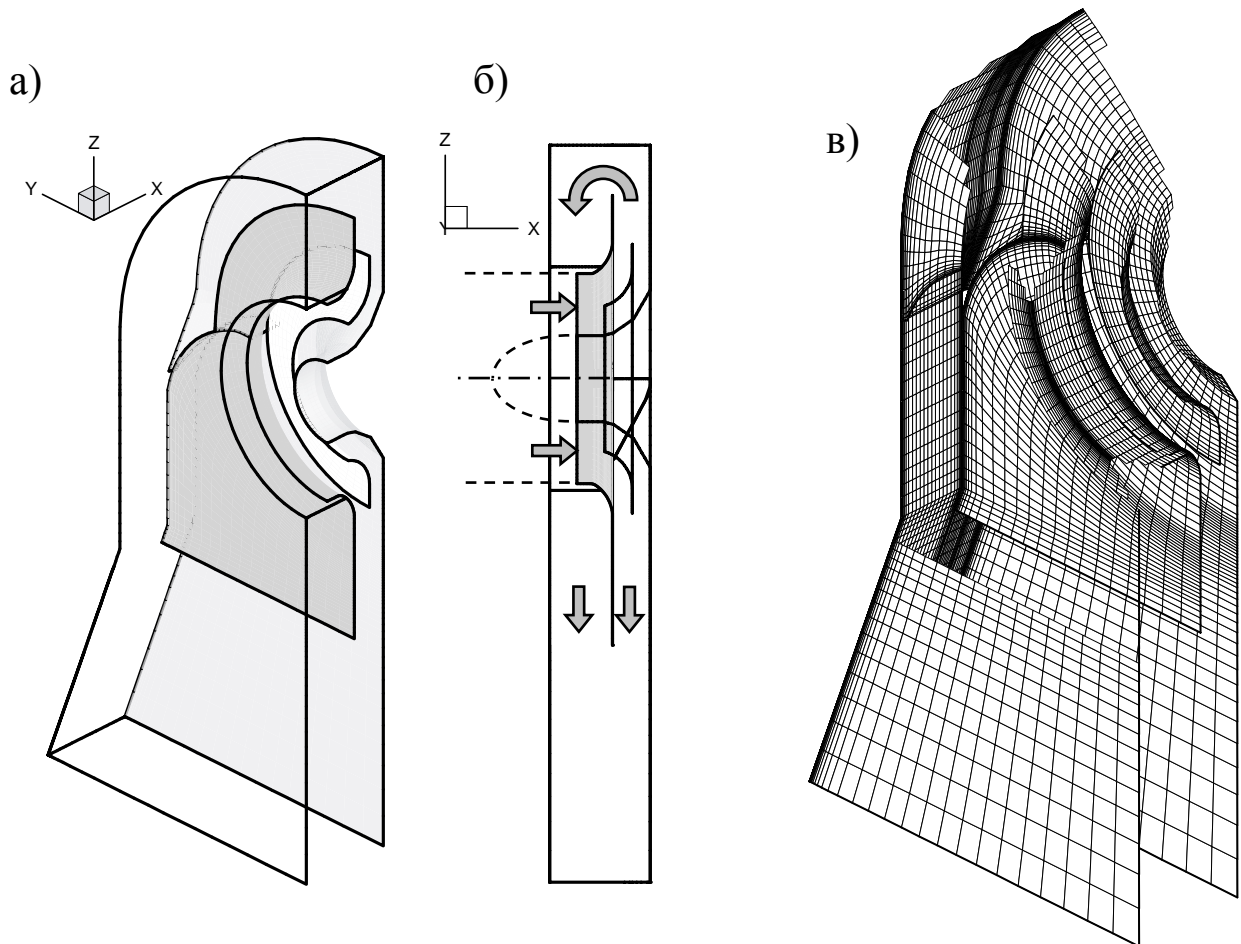


Рис.4. Схема выхлопного патрубка цилиндра низкого давления паровой турбины (а,б) и расчетная сетка (в)

Примером моделирования сложного трансзвукового потока газа может служить расчет турбулентного течения воздуха в модели выхлопного патрубка цилиндра низкого давления паровой турбины [14]. Схема патрубка с дефлектором в осерадиальном диффузоре и вертикальной разделительной перегородкой в сборной камере показана на рис.4,а. Рис.4,б поясняет

организацию потока в патрубке. Рис.4,в дает представление об использованной расчетной сетке, состоящей из 14 блоков и содержащей около 240,000 ячеек. Для моделирования турбулентности использовалась «стандартная» k - ϵ модель с поправкой, препятствующей нефизичной генерации турбулентности в потенциальном ядре потока [17].

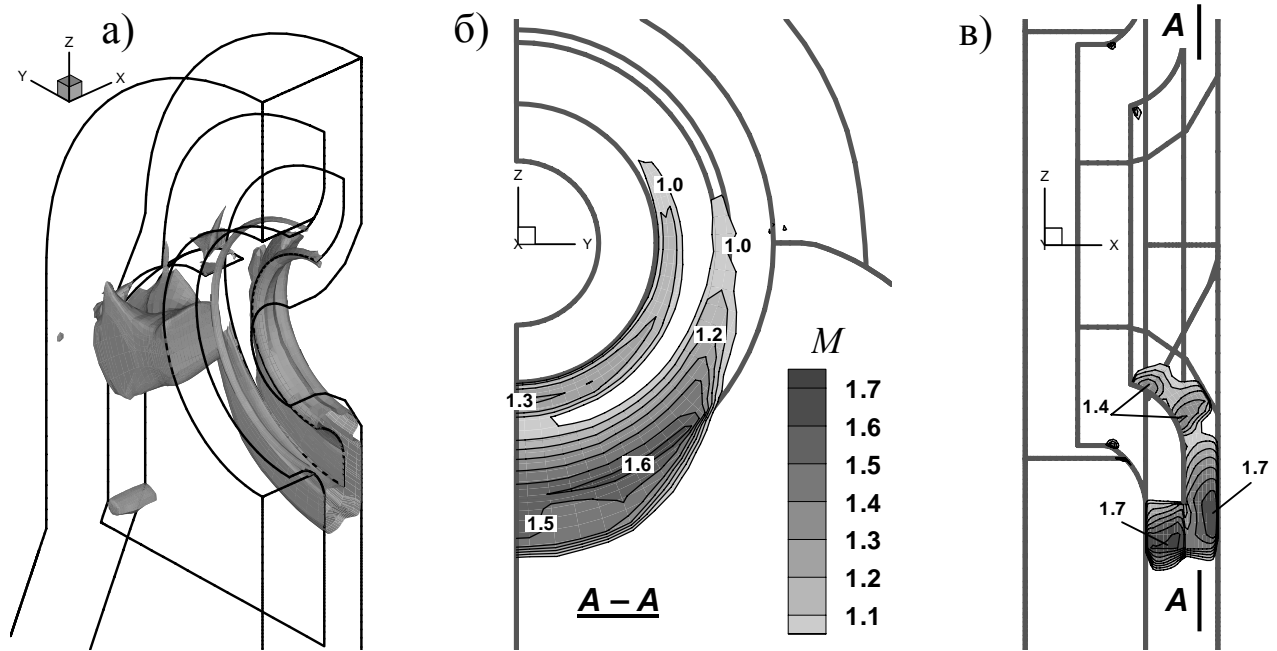


Рис.5. Область сверхзвукового течения в модели выхлопного патрубка: изоповерхность $M = 1$ (а) и распределение числа Маха (б,в)

Расчеты проводились для нескольких вариантов геометрии патрубка при различных режимных параметрах. В качестве иллюстрации чрезвычайно сложного пространственного характера течения в патрубке, на рис.5 показана конфигурация сверхзвуковой области и распределение в ней числа Маха; число Рейнольдса, построенное по параметрам потока на входе в диффузор, составляло $0.6 \cdot 10^6$, число Маха в том же сечении – 0.63. Видно, что сверхзвуковое течение имеет место, главным образом, на выходе из осерадиального диффузора в его нижней части, тогда как в верхней части диффузора поток дозвуковой. Надлежащее изменение формы дефлектора позволило перераспределить поток между верхней и нижней частями диффузора, уменьшить интенсивность скачков и, соответственно, снизить потери напора в патрубке. Рассчитанные значения коэффициента потерь

оказались весьма близки к результатам измерений в лаборатории Ленинградского Металлического завода [8, 14].

Заключение

В современной вычислительной гидрогазодинамике МКО является самым популярным способом пространственной дискретизации уравнений, что связано с его гибкостью в отношении используемых сеток, технологичностью программной реализации, физической ясностью основных принципов.

Использование блочно-структурированных сеток является сравнительно простым и, вместе с тем, эффективным средством решения проблемы моделирования течений в областях сложной геометрии. Применение неструктурированных сеток открывает более широкие возможности и является более удобным для пользователя, но требует больших дополнительных затрат на разработку программного обеспечения, что доступно лишь достаточно крупным компаниям.

Благодаря ориентации на применение МКО и блочно-структурированных сеток, относительно небольшой научной группе на кафедре гидроаэродинамики СПбГПУ удалось в короткие сроки разработать собственный гидродинамический программный комплекс широкого профиля *SINF*, обеспечивающий моделирование до- и сверхзвуковых, ламинарных и турбулентных, стационарных и нестационарных течений в областях сложной геометрии с учетом сил плавучести, в условиях сопряженного тепло- и массообмена, во вращающейся и неподвижной системе отсчета. В комплексе *SINF* доступен широкий спектр моделей турбулентности, использованы высокоточные численные схемы и эффективные алгоритмы, реализованы возможности параллельных вычислений, что позволяет ему по ряду позиций успешно конкурировать с современными коммерческими программами.

Программный комплекс *SINF* опробован на большом числе тестовых и модельных задач и с успехом применяется для расчета сложных течений в промышленных и энергетических устройствах с учетом их реальной геометрии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Белов И.А., Исаев С.А., Коробков В.А.** Задачи и методы расчета отрывных течений несжимаемой жидкости. Л.: Судостроение, 1989, 256с.

2. **Зайцев Д.К.** Метод пробных частиц в приложении к расчету течений газа с частицами // В кн.: Внутрикамерные процессы, горение и динамика дисперсных систем. Сборник материалов 2-й международной школы-семинара, С.-Петербург, 30 июня – 5 июля 1997г. – СПб.: БГТУ, 1997, 190с., с.107-109.

3. **Зайцев Д.К., Смирнов Е.М.** Окружные неоднородности в турбулентном закрученном течении по кольцевому каналу: завихрители с тангенциальным входом // В кн.: Закрутка потока для повышения эффективности теплообменников. Тезисы докладов всероссийской конференции, Москва, 9-11 апреля 2002г. – М.: ОИВТ РАН, 2002, 48с., с.31-32.

4. **Иванов Н.Г., Смирнов Е.М.** Численное моделирование трехмерной нестационарной конвекции расплава кремния в емкости, типичной для установок метода Чохральского // ИФЖ, 2002, Т.75, №3, с.63-69.

5. **Николаев М.А.** Сочетание CUSP схемы с методом масштабирования сжимаемости при расчете транзвуковых течений в областях сложной геометрии // В кн.: Физические основы экспериментального и математического моделирования процессов газодинамики и теплообмена в энергетических установках. Тр. XIII школы-семинара под руководством акад. А.И. Леонтьева, С.-Петербург, 20-25 мая 2001г. – М.: МЭИ, 2001, Т.1, 448с., с.108-111.

6. **Роуч П.** Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980, 616с.

7. **Смирнов Е.М., Абрамов А.Г., Иванов Н.Г., Корсаков А.Б.** Прямое численное моделирование и метод моделирования крупных вихрей в нестационарных задачах турбулентной термоконвекции // Научно-технические ведомости СПбГПУ, настоящий выпуск.

8. **Смирнов Е.М., Кириллов А.И., Рис В.В.** Опыт и перспективы численного анализа турбулентных течений в турбомашинах // Научно-технические ведомости СПбГПУ, настоящий выпуск.

9. **Смирнов П.Е.** Тестирование одно- и двухпараметрических моделей турбулентности на трехмерной задаче, типичной для организации пленочного охлаждения // В кн.: Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках. Тр. XIV школы-семинара под руководством акад. А.И. Леонтьева, Рыбинск, 26-30 мая 2003г. – М.: МЭИ, 2003, Т.1, 462с., с.125-128.

10. **Флетчер К.** Вычислительные методы в динамике жидкости. – М.: Мир, 1991, Т.1. 502с., Т.2. 552с.

11. **Beam R.M., Warming R.F.** An implicit factorized scheme for the compressible Navier-Stokes equations // *AIAA Journal*, 1978, Vol.16, pp.393-402.
12. **Chien K.Y.** Predictions of channel and boundary-layer flows with a low-Reynolds-number turbulence model // *AIAA Journal*, 1982, Vol.20, No.1, pp.33-38.
13. **Crowe C.T., Sharma M.P., Stock D.E.** The Particle-Source-In Cell (PSI-CELL) model for gas-droplet flows // *ASME Journal of Fluids Engineering*, 1977, Vol.99, No.2, pp.325-332 (перевод: Теор. основы инж. расчетов, 1977, №2, с.150-159).
14. **Epiphanov V.K., Kirillov A.I., Nikolaev M.A., Smirnov E.M., Zajtsev D.K.** Effect of deflector vane geometry on performance of large-scale turbine exhaust hood at transonic flow conditions: air-test experiments and 3D numerical simulation // Proc. 5th European Conference on Turbomachinery, Praha, March 17-22, 2003, pp.803-812.
15. **Gosman A.D., Ioannides E.** Aspects of computer simulation of liquid-fuelled combustors // *AIAA Paper 81-0323*, 1981 (также: *J. Energy*, 1983, Vol.7, No.6, pp.482-490)
16. **Jameson A.** Positive schemes and shock modelling for compressible flows // *Int. J. Num. Methods in Fluids*, 1995, Vol.20, pp.743-776.
17. **Kato M., Launder B.E.** The modelling of turbulent flow around stationary and vibrating square cylinders // Proc. 9th Symposium on Turbulent Shear Flows, Kyoto, Japan, Aug. 16-18, 1993, pp. 10.4.1-10.4.6.
18. **Launder B.E., Sharma B.I.** Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disk // *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1974, Vol.1, pp.131-138.
19. **Launder B.E., Spalding D.B.** The numerical computation of turbulent flows // *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 1974, Vol.3, No.1, pp.269-289.
20. **Leonard B.P.** A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation // *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 1979, Vol.19, pp.59-98.
21. **Menter F.R.** Zonal two equation $k-\omega$ turbulence models for aerodynamic flows // *AIAA Paper 93-2906*, 1993.
22. **Rhie C.M., Chow W.L.** A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation // *AIAA Journal*, 1983, Vol.21, pp.1525-1532.
23. **Rodi W.** *Turbulence Models and Their Application in Hydraulics.* – Delft, Netherlands: International Association for Hydraulic Research (IAHR), 1980.

24. **Smirnov E.M.** Numerical simulation of turbulent flow and energy loss in passages with strong curvature and rotation using a three-dimensional Navier-Stokes solver // Report, “Research in Brussels” Actions, Dept. Fluid Mech., Vrije Universiteit Brussel, 1993.

25. **Smirnov E.M.** Solving the full Navier-Stokes equations for very-long-duct flows using the artificial compressibility method // Proc. ECCOMAS'2000 Conference, Barcelona, Sept. 11-14, 2000, CD-ROM Proceedings, 16p.

26. **Smirnov E.M., Abramov A.G., Ivanov N.G., Smirnov P.E., Yakubov S.A.** DNS and RANS/LES-computations of complex geometry flows using a parallel multiblock finite-volume code // In: Parallel CFD (May 13-15, 2003, Moscow). Book of abstracts, 357p., pp.132-135.

27. **Spalart P.R., Allmaras S.R.** A one-equation turbulence model for aerodynamic flows // La Recherche Aerospaciale, 1994, No.1, pp.5-21.

28. **Van Doormal J.P., Raithby G.D.** Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows // Num. Heat Transfer, 1984, Vol.7, pp.147-163.

29. **Wilcox D.C.** Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models // AIAA Journal, 1988, Vol.26, No.11, pp.1299-1310.

30. **Wilcox D.C.** Turbulence modeling for CFD. – DCW Industries, 1993.

31. **Wolfstein M.** The velocity and temperature distribution of one-dimensional flow with turbulence augmentation and pressure gradient // Int. J. Heat Mass Transfer, 1969, Vol.12, pp.301-318.

32. **Yakhov V., Orszag S.A., Thangam S., Gatski T.B., Speziale C.G.** Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique // Phys. Fluids, 1992, A4, No.7, pp.1510–1520.

33. **Zaitsev D.K.** Numerical simulation of turbulent particle laden flows using Lagrangian modelling of dispersed phase behaviour // Report, “Research in Brussels” Actions. Vrije Universiteit Brussel, Dienst Stromingsmechanica, 1996.