**DEVELOPMENT OF SOLVER FOR MODELING COMPRESSIBLE FLOWS using regularised gas dynamic equations (IN THE QUASI-HYDRODYNAMIC APPROXIMATION)**

M. V. Kraposhin1, e.v sMIRNOVA2 , T.G.Elizarova3, M.A.Istomina4

1Institute for System Programming RAS, [os-cfd@yandex.ru](mailto:os-cfd@yandex.ru)

2Institute for System Programming RAS, ev\_smir@mail.ru

3Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS, telizar@mail.ru

4Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS, m\_ist@mail.ru

***Keywords:*** *OpenFOAM, quasi-gas dynamic equations, finite-volume method, unstructural grids.*

**Introduction (взято целиком из тезисов. Можно добавить про использование для задач с турбулентностью и цунами, если есть куда сослаться на англ.)**

In this work we announce the development of a new solver for numerical simulation of viscous compressible flows in the wide range of Mach numbers in the framework of OpenFOAM formalism. The new solver is based on the implementation of regularized, or quasi gas dynamic (QGD) equations. The finite-difference approximation is constructed on unstructured space grids using the inherit in the OpenFOAM complex formalism.

Numerical methods for gas dynamic flow simulations based on QGD equations are known for more than 30 years, see, for example [ссылка на Елизарову], references given in the book, and the subsequent work of the authors. The advantages of the QGD algorithms consist in their uniformity in the modeling of the gas flows in a wide range of Mach numbers including subsonic flows and hypersonic flows with strong shock waves. Computational experience shows that the QGD algorithms are effective for modeling of oscillatory and rapidly varying flows including turbulent flow at low Reynolds numbers. In particular, in the number of problems the laminar-turbulent transition was obtained without the introducing of numerical turbulence models. These features of the QGD algorithms were confirmed by a number of test and practical calculations.

Previously, the QGD numerical algorithms were realized for Cartesian and cylindrical coordinates for rectangular space-grids for three-dimensional flows. There were implementations of algorithms for regular and irregular non-orthogonal grids. A number of programs were implemented on multiprocessor computational systems with MPI standard.

The realised implementation of the QGD algorithms on the basis of OpenFOAM would significantly expand the scope of their application and would give the possibilities to try it by a wide range of users.

**1. Regularised, or quasi gas dynamic equations (из тезисов)**

A special feature of the QGD equations in comparison with the the Navier-Stokes system is the presence of additional terms in the constitutive relations, the contribution of which is determined by the smoothing parameter . These additional terms have a dissipative character and ensure the conditional stability of the algorithm with the Courant time step and the central-difference second order approximation for all space derivatives, including convective terms. For viscous flows QGD equations have the following form:

continuity equation:

(1)

momentum equation:

(2)

total energy equation:

(3)

Here, is the gas density,  is the velocity,  is the pressure, is the temperature,  is the mass flux vector,  is the smoothing parameter, is the step of a space discretization,  is the sound speed,  is the shear stress tensor,  is the unit tensor of the second rank,  is the specific heat ratio (adiabatic index),  is the total energy, is the enthalpy,  is the heat flux vector,  is the heat conductivity coefficient,  is the internal energy.

The system of equations (1)—(3) must be supplemented by an equation of state, as well as the necessary boundary conditions. In this paper we used the equation of state of an ideal polytrophic gas.

**2. Implementation of quasi gas dynamic equations in OpenFOAM**

***2.1. Расчетная схема***

Будем использовать явную конечно-объемную схему со вторым порядком аппроксимации по пространству и первым порядком по времени. Тогда аппроксимация уравнений (1)—(3) будет выглядеть следующим образом:

Уравнение сохранения массы:

где

Уравнение сохранения импульса:

где

Уравнение сохранения энергии:

В представленных выражениях нижний индекс означает, что величина вычисляется в центре конечного объема; — величина вычисляется на грани конечного объема путем интерполяции; — величина находится методом наименьших квадратов. Верхние индексы и указывают, с нового или старого слоя по времени берется величина. Для упрощения выражений величины без верхнего индекса подразумеваются взятыми со старого слоя. Величина является вектором внешней нормали к грани , модуль которого равен площади данной грани.

Заметим, что численная схема, за исключением добавочных слагаемых с параметром регуляризации, повторяет численную схему, реализованную в решателе rhoCentralFOAM. Поэтому решатель квазигазодинамических уравнений реализовывался на основе решателя rhoCentralFOAM.

Следует обратить внимание на величины, отмеченные знаком . Стандартные средства OpenFOAM не позволяют находить производные по пространству на гранях конечных объемов. Однако они могут быть найдены методом наименьших квадратов [ссылка на гайд].

Метод наименьших квадратов заключается в нахождении градиента поля в одной точке по известным значениям этого поля в нескольких точках:

(5)

Здесь  — рассматриваемая скалярная функция, ;  — веса схемы. В рассматриваемом случае градиент функции требуется найти на грани конечного объема , суммирование ведется по соседним к грани ячейкам (рассматривается соседство через вершины грани).

Рассмотрим вычисление градиента двумерного скалярного поля в случае равномерной сетки с шагом по пространству, равным (см. рис. 1).



Figure 1: Template for calculation of the gradient of the field in the center of the face on a uniform two-dimensional grid (сделать надписи на рисунке курсивом).

Для этого необходимо использовать значения поля во всех шести ячейках. Пользуясь формулой вычисления градиента скалярного поля методом наименьших квадратов, в случае равномерной сетки получаем

Здесь — значения функции в центре конечного объема с номером (см. рис. 1). Следует отметить, что подобная аппроксимация производной по координатному направлению отличается от предложенной в [ссылка на Елизарову], однако оба варианта имеют второй порядок точности по пространству. Преимущество данного подхода к вычислению градиентов функций заключается в простоте его использования применительно к неравномерным сеткам.

Метод наименьших квадратов для вычисления градиента скалярного поля реализован в OpenFOAM, однако в данной реализации градиент ищется в центре конечного объема по известным значениям поля в окружающих ячейках. Поэтому необходимо реализовать процедуру для вычисления градиента функции на гранях конечных объемов методом наименьших квадратов.

***2.2 Поиск соседних ячеек. Последовательный режим счета***

Структура хранения данных о сетке, принятая в OpenFOAM, не позволяет получить быстрый доступ к ячейкам, соседним к данной грани через узлы. Однако для каждой грани можно получить список входящих в нее вершин, а для каждой вершины — список ячеек, которым она принадлежит. Исходя из этих данных можно для каждой грани сетки найти список соседних к ней ячеек. Данная процедура проводится один раз в начале расчета (предполагается, что сетка не изменяется на протяжении всего расчета) и позволяет расширить шаблон хранения данных. Она описана в файле extendedFaceStencil.C в процедуре findNeighbours(). После составления списка соседних ячеек в процедуре calculateWeights() вычисляются веса для метода наименьших квадратов.

***2.3. Поиск соседних ячеек. Параллельный режим счета***

Поиск соседних к грани ячеек в случае расчета в последовательном режиме не является сложной задачей. Однако при запуске расчета в параллельном режиме сетка разбивается на подобласти (домены), границы между которыми называются процессорными патчами. Вычисление градиента на внутренних гранях домена происходит так же, как и при последовательном расчете. Однако необходимо вычислить градиент функции на процессорных патчах. Каждый патч состоит из набора граней. Структура данных OpenFOAM позволяет получить доступ к ячейкам, прилегающих к граням патча со стороны каждого домена. Однако даже в простом случае разбиения сетки на подобласти так, как показано на рис. 2, такой структуры данных оказывается недостаточно для вычисления градиента функции на гранях ячеек, принадлежащих патчу.

|  |
| --- |
|  |
| **Рис. 2. Иллюстрация к структуре данных о сетке на патчах.** |

На рис. 2 заштрихованы соседние к грани ячейки, доступ к которым можно получить со стороны домена 1. Точками отмечены ячейки, входящие в шаблон для вычисления градиента функции на грани . Простым решением, устраняющим данную проблему, является нахождение соседних к грани ячеек со стороны каждого домена и передача этих данных соседнему домену.

Однако данное решение неприменимо в случае разбиения области на домены чуть более сложным образом (рис. 3). Структура данных о сетке и патчах позволяет определить, что грань приходится на патч между доменами 1 и 2, но не позволяет узнать о том, что один из узлов этой грани принадлежит домену 3. В связи с этим соседние к грани ячейки, являющиеся верхними ячейками шаблона, невозможно найти, пользуясь исключительно информацией о грани.

|  |
| --- |
|  |
| **Рис. 3. Иллюстрация к структуре данных о сетке на патчах.** |

Самым простым выходом из ситуации видится создание массива длиной, равной количеству узлов в глобальной сетке (в сетке до ее разбиения на подобласти). Каждым элементом массива будет являться список доменов, которым принадлежит этот узел. Далее для каждого узла, принадлежащего более чем одному домену, составляется списки соседних ячеек со стороны каждого домена. Впоследствии эти списки объединяются и хранятся на процессоре, обрабатывающим домен с наименьшим порядковым номером.

Зная список соседних ячеек для каждого узла, принадлежащего процессорному патчу и список узлов, из которого состоит грань, для каждой грани с патчей формируется список соседних ячеек с указанием домена, к которому относится ячейка. Для сокращения объема данных, необходимых для хранения, список соседей для граней с процессорного патча хранится на одном процессоре, имеющем меньший порядковый номер.

Таким образом, подготовлены данные для вычисления градиента функции на гранях процессорного патча методом наименьших квадратов. Веса схемы вычисляются один раз при запуске расчета (полагаем, что сетка, как и границы между доменами, не изменяется на протяжении всего расчета).

Описанный подход позволяет вычислять градиент скалярной функции на гранях конечных объемов. Однако для аппроксимации КГД уравнений требуется находить градиент векторной функции и дивергенцию векторной и тензорной функций. Для нахождения этих величин предлагается для каждой компоненты векторной или тензорной функции вычислять ее градиент, а затем с помощью этих данных покомпонентно находить значения результирующего поля.

**3. Результаты (с тезисов)**

**3.1. Testing of the solver on the Soda tests. Checking the grid convergence**

The solver is tested on one-dimensional Soda problems of the decay of the discontinuities proposed in [2]. Consider the one-dimensional computational domain with a length . Adiabatic index is equal to (the heat capacity at constant pressure is , the heat capacity at constant volume is ). Then, individual gas constant is , so the molar mass must be set equal to 20785. Initial field values are given in table 1.

Table 1. Parameters of test tasks

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Test** |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1 | 1.0 | 0.0 | 1.0 | 2.5 | 0.125 | 0.0 | 0.1 | 2.0 | 0.25 |
| 2 | 1.0 | -2.0 | 0.4 | 1.0 | 1.0 | 2.0 | 0.4 | 1.0 | 0.15 |

To check the grid convergence for test 1, case was solved on computational grids with number of cells 100, 200 and 400, test 2 problem additionally solved on grids with 800, 1600 and 3200 cells. In the first test numerical coefficient in smoothing term is set equal to 0.5, for the test 2 it is equal to 0.1. The comparison of the numerical solution of the test problems with the analytical solutions are shown in fig.2-3. These graphs show the grid convergence of the solution with the decreasing the spatial step. The actual accuracy order for choosing tests is .

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
| Figure 2: Comparison of the numerical solution on grids with 100, 200 and 400 cells with the analytical solution for test 1. | |

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
| **Figure 3: Comparison of the numerical solution on different grids with the analytical solution for test 2.** | |

Можно добавить сравнение с решением из rhoCentralFOAM (напр., таблицу норм ошибок). Вопрос: только для этих задач или посмотреть все 10 из подборки, высланной Марией? Сейчас этими расчетами занимается Мария

3.2. Задача с соплом - ???

**Acknowledgements**

This study was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project no 16-01-00048a and Program of Fundamental Research of the Presidium of the Russian Academy of Sciences, I.33P.

Нужно:

+ дописать про ГУ

+ дописать про выбор шага