Эффективное моделирование сильнонелинейной динамики распространения фронтов пламен с помощью оболочечного подхода

к.ф.-м.н. ассистент О.Г. Харланов,
к.ф.-м.н. доцент К.А. Казаков

МГУ имени М.В.Ломоносова, физический фак-т, каф. теоретической физики

Семинар “Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности”

НОЦ “Суперкомпьютерные технологии” МГУ, 16 октября 2017 г.

Начнем издалека

Численно-аналитический подход:

- нетривиальные (точные и асимптотические) аналитические методы $+$ численные или символьные вычислительные методы

Начнем издалека

Численно-аналитический подход:

- нетривиальные (точные и асимптотические) аналитические методы + численные или символьные вычислительные методы

DFT — ЧАП на $\frac{1}{2}$ Нобеля (W.Kohn, 1998):

Начнем издалека

Численно-аналитический подход:

- нетривиальные (точные и асимптотические) аналитические методы + численные или символьные вычислительные методы

DFT — ЧАП на $\frac{1}{2}$ Нобеля (W.Kohn, 1998):

- 196x: Метод нахождения основного состояния квантовой системы многих тел $\rightsquigarrow$ e^{-} структура
- сегодня: VASP, Gaussian, Quantum Espresso, Firefly, ...

Начнем издалека

Численно-аналитический подход:

- нетривиальные (точные и асимптотические) аналитические методы + численные или символьные вычислительные методы

DFT — ЧАП на $\frac{1}{2}$ Нобеля (W.Kohn, 1998):

- 196x: Метод нахождения основного состояния квантовой системы многих тел $\rightsquigarrow$ e^- структура
- сегодня: VASP, Gaussian, Quantum Espresso, Firefly, ...
- основан на точных теоремах Хоэнберга–Кона и асимптотически выведенных $E_{xc}[n]$
- "переводит" уравнения КМ с языка $\Psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N)$ на язык $n(\boldsymbol{x})$

Начнем издалека

Численно-аналитический подход:

- нетривиальные (точные и асимптотические) аналитические методы + численные или символьные вычислительные методы

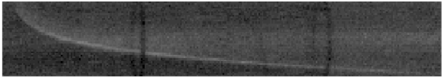
DFT — ЧАП на $\frac{1}{2}$ Нобеля (W.Kohn, 1998):

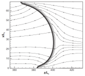
- 196x: Метод нахождения основного состояния квантовой системы многих тел $\rightsquigarrow$ e^- структура
- сегодня: VASP, Gaussian, Quantum Espresso, Firefly, ...
- основан на точных теоремах Хоэнберга–Кона и асимптотически выведенных $E_{xc}[n]$
- "переводит" уравнения КМ с языка $\Psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N)$ на язык $n(\boldsymbol{x})$

► Мы будем использовать ЧАП для описания распространения фронтов пламен в трубах

Горение смесей в трубах

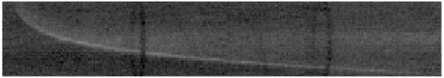
Движение газа в трубе для поджига приводит к возникновению фронта

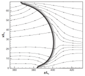




Горение смесей в трубах

Движение газа в трубе для поджига приводит к возникновению фронта



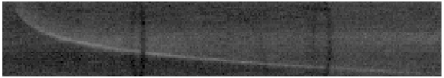


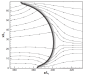
Зачем это изучают:

- Горение обедненных смесей $\rightsquigarrow$ экологичная энергетика
- Общие механизмы горения, перехода в детонацию и т.д.

Горение смесей в трубах

Движение газа в трубе для поджига приводит к возникновению фронта





Зачем это изучают:

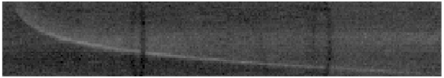
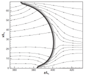
- Горение обедненных смесей $\rightsquigarrow$ экологичная энергетика
- Общие механизмы горения, перехода в детонацию и т.д.

Методы изучения распространения фронтов пламен:

- DNS: газодинамика + хим. кинетика

Горение смесей в трубах

Движение газа в трубе для поджига приводит к возникновению фронта

Зачем это изучают:

- Горение обедненных смесей $\rightsquigarrow$ экологичная энергетика
- Общие механизмы горения, перехода в детонацию и т.д.

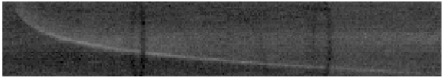
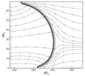
Методы изучения распространения фронтов пламен:

- DNS: газодинамика + хим. кинетика
- LD: неустойчивость плоского фронта, $\sigma(k) \propto k(1 - k\lambda_c)$
- Сивашинский(–Клавен): уравнение для фронтов с $|f'| \ll 1$:

$$\frac{\theta}{2} f'^2 - \frac{\theta + 1}{2}(U - 1) = \frac{\theta - 1}{2}\left(\frac{\lambda_c}{2\pi} f''(x) - \frac{1}{\pi}\mathrm{v.p.}\int \frac{f(y)\mathrm{d}y}{y - x}\right)$$

Горение смесей в трубах

Движение газа в трубе для поджига приводит к возникновению фронта

Зачем это изучают:

- Горение обедненных смесей $\rightsquigarrow$ экологичная энергетика
- Общие механизмы горения, перехода в детонацию и т.д.

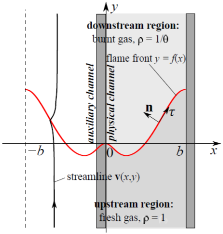
Методы изучения распространения фронтов пламен:

- DNS: газодинамика + хим. кинетика
- LD: неустойчивость плоского фронта, $\sigma(k) \propto k(1 - k\lambda_c)$
- Сивашинский(–Клавен): уравнение для фронтов с $|f'| \ll 1$:

$$\frac{\theta}{2} f'^2 - \frac{\theta+1}{2}(U-1) = \frac{\theta-1}{2}\left(\frac{\lambda_c}{2\pi} f''(x) - \frac{1}{\pi}\mathrm{v.p.}\int \frac{f(y)\mathrm{d}y}{y-x}\right)$$

- Оболочечный (on-shell) подход (Казаков, 2005): сведение к движению поверхности разрыва — фронта — и уравнениям, включающим только значения неизвестных функций на нем

DNS vs on-shell



$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j + \delta_{ij} P - \tau_{ij}) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho e + \frac{1}{2}\rho u_j u_j\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_i h + \frac{1}{2}\rho u_i u_j u_j - q_i - u_j \tau_{ij}\right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_i Y - \frac{\mu}{Sc}\frac{\partial Y}{\partial x_i}\right) = -\frac{\rho Y}{\tau_R}\exp\left(-\frac{E}{RT}\right),$$

$$\tau_{ij} = \mu\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \mu\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\mu\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial x_k},$$

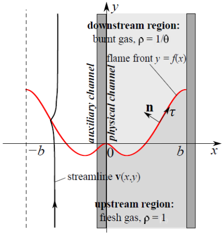
$$q_i = C_P\frac{\mu}{Pr}\frac{\partial T}{\partial x_i} + Q\frac{\mu}{Sc}\frac{\partial Y}{\partial x_i},$$

$$P = \frac{R}{m}\rho T$$

$$e = QY + C_V T$$

$$h = QY + C_P T$$

DNS vs on-shell



$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j + \delta_{ij} P - \tau_{ij}) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho e + \frac{1}{2}\rho u_j u_j\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_i h + \frac{1}{2}\rho u_i u_j u_j - q_i - u_j \tau_{ij}\right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_i Y - \frac{\mu}{Sc}\frac{\partial Y}{\partial x_i}\right) = -\frac{\rho Y}{\tau_R}\exp\left(-\frac{E}{RT}\right),$$

$$\tau_{ij} = \mu\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \mu\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\mu\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial x_k},$$

$$q_i = C_P\frac{\mu}{Pr}\frac{\partial T}{\partial x_i} + Q\frac{\mu}{Sc}\frac{\partial Y}{\partial x_i},$$

$$P = \frac{R}{m}\rho T$$

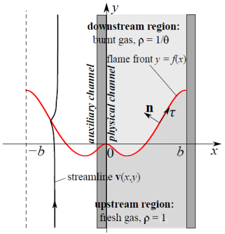
$$e = QY + C_V T$$

$$h = QY + C_P T$$

DNS:

- ⊕ более простые уравнения
- ⊖ многомасштабная структура $\Rightarrow$ проблемы с сеткой
- ⊖ плохо разрешается стр-ра фронта
- ⊖ не универсален (много параметров)

DNS vs on-shell



$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j + \delta_{ij} P - \tau_{ij}) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho e + \frac{1}{2}\rho u_j u_j\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_i h + \frac{1}{2}\rho u_i u_j u_j - q_i - u_j \tau_{ij}\right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_i Y - \frac{\mu}{Sc}\frac{\partial Y}{\partial x_i}\right) = -\frac{\rho Y}{\tau_R}\exp\left(-\frac{E}{RT}\right),$$

$$\tau_{ij} = \mu\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \mu\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\mu\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial x_k},$$

$$q_i = C_P\frac{\mu}{Pr}\frac{\partial T}{\partial x_i} + Q\frac{\mu}{Sc}\frac{\partial Y}{\partial x_i},$$

$$P = \frac{R}{m}\rho T$$

$$e = QY + C_V T$$

$$h = QY + C_P T$$

DNS:

- ⊕ более простые уравнения
- ⊖ многомасштабная структура $\Rightarrow$ проблемы с сеткой
- ⊖ плохо разрешается стр-ра фронта
- ⊖ не универсален (много параметров)

On-shell:

- ⊖ сложные уравнения
- ⊕ оперирует только наблюд. в эксперименте величинами
- ⊕ 4 параметра: $\theta, \mathcal{L}_{c,s,\sigma}$
- ⊕ стр-ра фронта – уже в них!

On-shell стратегия

Численно-аналитический подход:

1. вывод on-shell уравнений из газодинамики+кинетики

On-shell стратегия

Численно-аналитический подход:

1. вывод on-shell уравнений из газодинамики+кинетики
2. анализ асимптотик ($\theta - 1 \to 0$, $|f'| \to \infty$)

On-shell стратегия

Численно-аналитический подход:

1. вывод on-shell уравнений из газодинамики+кинетики
2. анализ асимптотик ($\theta - 1 \to 0$, $|f'| \to \infty$)
3. разработка численного метода для решения уравнений для реальных пламен

On-shell стратегия

Численно-аналитический подход:

1. вывод on-shell уравнений из газодинамики+кинетики
2. анализ асимптотик $(\theta - 1 \to 0,\ |f'| \to \infty)$
3. разработка численного метода для решения уравнений для реальных пламен
4. сравнение с DNS

On-shell стратегия

Численно-аналитический подход:

1. вывод on-shell уравнений из газодинамики+кинетики
2. анализ асимптотик $(\theta - 1 \to 0, |f'| \to \infty)$
3. разработка численного метода для решения уравнений для реальных пламен
4. сравнение с DNS
5. выводы о механизмах горения, уточнение теории

On-shell: идея вывода

On-shell: идея вывода

К.А. Казаков [PRL **94**, 094501 (2005)] — переход к on-shell описанию всей системы только в терминах происходящего на фронте:

- газ несжимаем ($\partial_i v_i = 0$) везде кроме фронта

On-shell: идея вывода

К.А. Казаков [PRL **94**, 094501 (2005)] — переход к on-shell описанию всей системы только в терминах происходящего на фронте:

- газ несжимаем ($\partial_i v_i = 0$) везде кроме фронта
- вязкость — медленный эффект по сравнению с U

On-shell: идея вывода

К.А. Казаков [PRL **94**, 094501 (2005)] — переход к on-shell описанию всей системы только в терминах происходящего на фронте:

- газ несжимаем ($\partial_i v_i = 0$) везде кроме фронта
- вязкость — медленный эффект по сравнению с U
- турбулентность на фронте велика, но $\mathrm{Re} = \rho U l_{\mathrm{f}}/\mu$ дост. мало

On-shell: идея вывода

К.А. Казаков [PRL **94**, 094501 (2005)] — переход к on-shell описанию всей системы только в терминах происходящего на фронте:

- газ несжимаем ($\partial_i v_i = 0$) везде кроме фронта
- вязкость — медленный эффект по сравнению с U
- турбулентность на фронте велика, но $\mathrm{Re} = \rho U l_{\mathrm{f}}/\mu$ дост. мало
- $v_i = \partial_i \phi(\boldsymbol{x}) + v_i^{(v)}(\boldsymbol{x})$; $\omega^{(\mathrm{p})}(x + \mathrm{i}y) \equiv v_x^{(\mathrm{p})} + \mathrm{i} v_y^{(\mathrm{p})}$ — аналит.
- [Томсон] завихренность $\sigma = \epsilon_{ij}\partial_i v_j = \mathrm{const}$ вдоль линии тока

On-shell: идея вывода

К.А. Казаков [PRL **94**, 094501 (2005)] — переход к on-shell описанию всей системы только в терминах происходящего на фронте:

- газ несжимаем ($\partial_i v_i = 0$) везде кроме фронта
- вязкость — медленный эффект по сравнению с U
- турбулентность на фронте велика, но $\mathrm{Re} = \rho U l_{\mathrm{f}}/\mu$ дост. мало
- $v_i = \partial_i \phi(\boldsymbol{x}) + v_i^{(v)}(\boldsymbol{x})$; $\omega^{(\mathrm{p})}(x + \mathrm{i}y) \equiv v_x^{(\mathrm{p})} + \mathrm{i} v_y^{(\mathrm{p})}$ — аналит.
- [Томсон] завихренность $\sigma = \epsilon_{ij}\partial_i v_j = \mathrm{const}$ вдоль линии тока
- после записи интегрального выражения для скорости газа через функции Грина получается отынтегрировать два полупространства $\rightsquigarrow$ мастер-уравнение

$$2\omega'_- + (1 + \mathrm{i}\hat{\mathcal{H}})\left\{[\omega]' - \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+}{v_+^2} + \frac{1 + \mathrm{i}f'}{2}\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x' \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+(x')}{v_+^2(x')}\right\} = 0,$$

$$(\hat{\mathcal{H}}a)(x) \equiv \frac{1 + \mathrm{i}f'(x)}{2}\ \mathrm{v.p.}\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\xi\ \cot\left\{\frac{\pi}{2b}(\xi - x + \mathrm{i}[f(\xi) - f(x)])\right\} a(\xi).$$

On-shell: идея численного алгоритма

$$2\omega_-' + \left(1 + \mathrm{i}\hat{\mathfrak{H}}\right)\left\{[\omega]' - \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+}{v_+^2} + \frac{1+\mathrm{i}f'}{2}\int_{-1}^{+1} d\xi\, \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+(\xi)}{v_+^2(\xi)}\right\} = 0,$$

$$[\omega] = (\theta - 1)\frac{1-\mathrm{i}f'}{N} v_-^n$$

$$v_-^n = 1 - S(f', \omega_-), \quad S = \mathcal{L}_c \frac{f''}{N^3} + \mathcal{L}_s \frac{(v_-^\tau)'}{N}$$

$$\sigma_+ = -\frac{1}{N v_-^n}\left\{\frac{\theta-1}{2\theta}(v_-^\tau)^2 + \frac{\theta-1}{2}(v_-^n)^2 + 2\mathcal{L}_\sigma \frac{f''}{N^3}\right\}'$$

$$\left(\hat{\mathfrak{H}}a\right)(x) = \frac{1+\mathrm{i}f'(x)}{2} \fint_{-1}^{+1} d\xi \cot\left\{\frac{\pi}{2}(\xi - x + \mathrm{i}[f(\xi) - f(x)])\right\} a(\xi)$$

On-shell: идея численного алгоритма

$$2\omega_-' + \left(1 + \mathrm{i}\hat{\mathfrak{H}}\right)\left\{[\omega]' - \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+}{v_+^2} + \frac{1 + \mathrm{i}f'}{2}\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\xi\, \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+(\xi)}{v_+^2(\xi)}\right\} = 0,$$

$$[\omega] = (\theta - 1)\frac{1 - \mathrm{i}f'}{N} v_-^n$$

$$v_-^n = 1 - S(f', \omega_-), \quad S = \mathcal{L}_c \frac{f''}{N^3} + \mathcal{L}_s \frac{(v_-^\tau)'}{N}$$

$$\sigma_+ = -\frac{1}{N v_-^n}\left\{\frac{\theta - 1}{2\theta}(v_-^\tau)^2 + \frac{\theta - 1}{2}(v_-^n)^2 + 2\mathcal{L}_\sigma \frac{f''}{N^3}\right\}'$$

$$\left(\hat{\mathfrak{H}} a\right)(x) = \frac{1 + \mathrm{i}f'(x)}{2}\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\xi \cot\left\{\frac{\pi}{2}(\xi - x + \mathrm{i}[f(\xi) - f(x)])\right\} a(\xi)$$

Решение — через fixed-point iterations [K.A. Kazakov and O.G. Kharlanov, arXiv:1708.09346[physics.flu-dyn] (2017)]:

1. для фикс. $f(x), u_0 \equiv \omega_-(0)$ найти $\omega_-(x)$, итерируя мастер-уравнение
2. подставив $\omega_-(x)$ в ур-е эволюции, найти новое u_0, совместимое с двумя г.у. $f'(0) = f'(1) = 0 \rightsquigarrow$ новые $f(x)$, u_0 (метод стрельбы/дихотомия)
3. Вернуться на шаг 1, если $\|f_{\text{new}} - f\| > \epsilon$

On-shell: идея численного алгоритма

$$2\omega_-' + \left(1 + \mathrm{i}\hat{\mathfrak{H}}\right)\left\{[\omega]' - \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+}{v_+^2} + \frac{1 + \mathrm{i}f'}{2}\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\xi\, \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+(\xi)}{v_+^2(\xi)}\right\} = 0, \qquad [\omega] = (\theta - 1)\frac{1 - \mathrm{i}f'}{N} v_-^n$$

$$v_-^n = 1 - S(f', \omega_-), \quad S = \mathcal{L}_{\mathrm{c}}\frac{f''}{N^3} + \mathcal{L}_{\mathrm{s}}\frac{(v_-^\tau)'}{N} \qquad \sigma_+ = -\frac{1}{N v_-^n}\left\{\frac{\theta - 1}{2\theta}(v_-^\tau)^2 + \frac{\theta - 1}{2}(v_-^n)^2 + 2\mathcal{L}_\sigma \frac{f''}{N^3}\right\}'$$

$$\left(\hat{\mathfrak{H}}a\right)(x) = \frac{1 + \mathrm{i}f'(x)}{2} \fint_{-1}^{+1} \mathrm{d}\xi \cot\left\{\frac{\pi}{2}(\xi - x + \mathrm{i}[f(\xi) - f(x)])\right\} a(\xi)$$

Решение — через fixed-point iterations [K.A. Kazakov and O.G. Kharlanov, arXiv:1708.09346[physics.flu-dyn] (2017)]:

1. для фикс. $f(x)$, $u_0 \equiv \omega_-(0)$ найти $\omega_-(x)$, итерируя мастер-уравнение
2. подставив $\omega_-(x)$ в ур-е эволюции, найти новое u_0, совместимое с двумя г.у. $f'(0) = f'(1) = 0 \rightsquigarrow$ новые $f(x)$, u_0 (метод стрельбы/дихотомия)
3. Вернуться на шаг 1, если $\|f_{\mathrm{new}} - f\| > \epsilon$

▶ Все не так уж просто: жесткое/неустойчивое сильнонелинейное ОДУ, сингулярный интегральный оператор, …

On-shell: идея численного алгоритма

$$2\omega_-' + \left(1 + \mathrm{i}\hat{\mathfrak{H}}\right)\left\{[\omega]' - \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+}{v_+^2} + \frac{1+\mathrm{i}f'}{2}\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\xi\, \frac{N v_+^n \sigma_+ \omega_+(\xi)}{v_+^2(\xi)}\right\} = 0,$$

$$[\omega] = (\theta - 1)\frac{1-\mathrm{i}f'}{N} v_-^n$$

$$v_-^n = 1 - S(f', \omega_-), \quad S = \mathcal{L}_c \frac{f''}{N^3} + \mathcal{L}_s \frac{(v_-^\tau)'}{N}$$

$$\sigma_+ = -\frac{1}{N v_-^n}\left\{\frac{\theta-1}{2\theta}(v_-^\tau)^2 + \frac{\theta-1}{2}(v_-^n)^2 + 2\mathcal{L}_\sigma \frac{f''}{N^3}\right\}'$$

$$\left(\hat{\mathfrak{H}}a\right)(x) = \frac{1+\mathrm{i}f'(x)}{2} \fint_{-1}^{+1} \mathrm{d}\xi \cot\left\{\frac{\pi}{2}(\xi - x + \mathrm{i}[f(\xi) - f(x)])\right\} a(\xi)$$

Решение — через fixed-point iterations [K.A. Kazakov and O.G. Kharlanov, arXiv:1708.09346[physics.flu-dyn] (2017)]:

1. для фикс. $f(x), u_0 \equiv \omega_-(0)$ найти $\omega_-(x)$, итерируя мастер-уравнение
2. подставив $\omega_-(x)$ в ур-е эволюции, найти новое u_0, совместимое с двумя г.у. $f'(0) = f'(1) = 0 \rightsquigarrow$ новые $f(x)$, u_0 (метод стрельбы/дихотомия)
3. Вернуться на шаг 1, если $\|f_{\text{new}} - f\| > \epsilon$

▶ Все не так уж просто: жесткое/неустойчивое сильнонелинейное ОДУ, сингулярный интегральный оператор, ...

- ⊕ скорость, параллелизм, объем данных, универсальность
- ⊖ сложная система с *a priori* непонятными свойствами

On-shell: детали численного алгоритма [1]

On-shell: детали численного алгоритма [1]

- мастер-уравнение после интегрирования по x действительно принимает вид условия на неподв. точку:

$$\omega_-(x) = u_0 + \int_0^x \mathrm{d}x' \, K[\omega_-, f](x')$$

- соотв. итерации сходятся быстро для практически любых начальных профилей скорости $\omega^{(0)}(x)$ и реалистичных фронтов $f(x)$

On-shell: детали численного алгоритма [1]

- мастер-уравнение после интегрирования по x действительно принимает вид условия на неподв. точку:

$$\omega_-(x) = u_0 + \int_0^x \mathrm{d}x'\ K[\omega_-, f](x')$$

- соотв. итерации сходятся быстро для практически любых начальных профилей скорости $\omega^{(0)}(x)$ и реалистичных фронтов $f(x)$
- $\hat{\mathcal{H}} \cdot (1 + \mathrm{i}f') = 0$, что позволяет избавиться от сингулярного ядра

On-shell: детали численного алгоритма [1]

- мастер-уравнение после интегрирования по x действительно принимает вид условия на неподв. точку:

$$\omega_-(x) = u_0 + \int_0^x \mathrm{d}x' \; K[\omega_-, f](x')$$

- соотв. итерации сходятся быстро для практически любых начальных профилей скорости $\omega^{(0)}(x)$ и реалистичных фронтов $f(x)$
- $\hat{\mathcal{H}} \cdot (1 + \mathrm{i}f') = 0$, что позволяет избавиться от сингулярного ядра
- в уравнении эволюции u_0 находится из склейки решений с правым и левым г.у.; точка склейки x^* сильно влияет на точность

On-shell: детали численного алгоритма [1]

- мастер-уравнение после интегрирования по x действительно принимает вид условия на неподв. точку:

$$\omega_-(x) = u_0 + \int_0^x \mathrm{d}x'\; K[\omega_-, f](x')$$

- соотв. итерации сходятся быстро для практически любых начальных профилей скорости $\omega^{(0)}(x)$ и реалистичных фронтов $f(x)$
- $\hat{\mathcal{H}} \cdot (1 + \mathrm{i}f') = 0$, что позволяет избавиться от сингулярного ядра
- в уравнении эволюции u_0 находится из склейки решений с правым и левым г.у.; точка склейки x^* сильно влияет на точность
- схемы: локально-адаптивная 4 порядка, Розенброка, ...

On-shell: детали численного алгоритма [1]

- мастер-уравнение после интегрирования по x действительно принимает вид условия на неподв. точку:

$$\omega_-(x) = u_0 + \int_0^x \mathrm{d}x' \; K[\omega_-, f](x')$$

- соотв. итерации сходятся быстро для практически любых начальных профилей скорости $\omega^{(0)}(x)$ и реалистичных фронтов $f(x)$
- $\hat{\mathcal{H}} \cdot (1 + \mathrm{i} f') = 0$, что позволяет избавиться от сингулярного ядра
- в уравнении эволюции u_0 находится из склейки решений с правым и левым г.у.; точка склейки x^* сильно влияет на точность
- схемы: локально-адаптивная 4 порядка, Розенброка, ...
- поиск следующих $u_0, f(x)$ осуществляется методами Пикара или Андерсона

On-shell: детали численного алгоритма [2]

On-shell: детали численного алгоритма [2]

Поиск неподвижной точки $\mathcal{I}[\varphi] = \varphi, \quad \varphi \equiv (u_0, f)$:

- метод Пикара: $\varphi_{n+1} = (1-\beta)\mathcal{I}[\varphi_n] + \beta\varphi_n, \quad \beta \in (0,1)$

On-shell: детали численного алгоритма [2]

Поиск неподвижной точки $\mathcal{I}[\varphi] = \varphi, \quad \varphi \equiv (u_0, f)$:

- метод Пикара: $\varphi_{n+1} = (1-\beta)\mathcal{I}[\varphi_n] + \beta\varphi_n, \quad \beta \in (0,1)$
  - $\mathcal{I}$ должен быть сжимающим около решения $\varphi = \varphi^\star$
  - сложно добавить условия на φ

On-shell: детали численного алгоритма [2]

Поиск неподвижной точки $\mathcal{I}[\varphi] = \varphi, \quad \varphi \equiv (u_0, f)$:

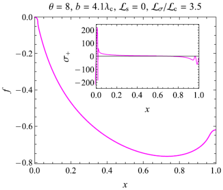
- метод Пикара: $\varphi_{n+1} = (1-\beta)\mathcal{I}[\varphi_n] + \beta\varphi_n, \quad \beta \in (0,1)$
    - $\mathcal{I}$ должен быть сжимающим около решения $\varphi = \varphi^\star$
    - сложно добавить условия на φ
- метод Андерсона (глубина $d \geq 1$):
  $\varphi_{n+1} = \alpha_{n,1}\varphi_n + \alpha_{n,2}\varphi_{n-1} + \ldots \alpha_{n,d}\varphi_{n-d+1}, \quad \sum_{p=1}^{d} \alpha_{n,p} = 1,$
  с требованием минимизации нормы невязки $\|\mathcal{I}[\varphi_{n+1}] - \varphi_{n+1}\|$.

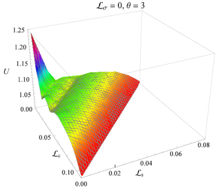
On-shell: детали численного алгоритма [2]

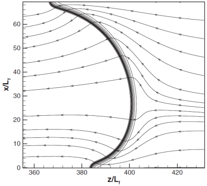
Поиск неподвижной точки $\mathcal{I}[\varphi] = \varphi, \quad \varphi \equiv (u_0, f)$:

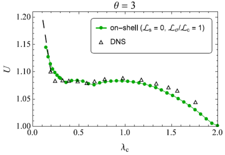
- метод Пикара: $\varphi_{n+1} = (1-\beta)\mathcal{I}[\varphi_n] + \beta\varphi_n, \quad \beta \in (0,1)$
    - $\mathcal{I}$ должен быть сжимающим около решения $\varphi = \varphi^\star$
    - сложно добавить условия на φ
- метод Андерсона (глубина $d \geq 1$):
  $\varphi_{n+1} = \alpha_{n,1}\varphi_n + \alpha_{n,2}\varphi_{n-1} + \ldots \alpha_{n,d}\varphi_{n-d+1}, \quad \sum_{p=1}^{d} \alpha_{n,p} = 1,$
  с требованием минимизации нормы невязки $\|\mathcal{I}[\varphi_{n+1}] - \varphi_{n+1}\|$.
    - сводится к задаче о наименьших квадратах
    - линейные условия на φ, такие как $g_1 < f'(0) < g_2$, легко включаются в МНК $\rightsquigarrow$ разделение различных ветвей решений
    - может сходиться к седловым точкам

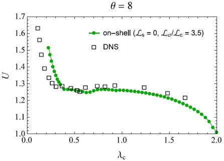
On-shell: результаты численных расчетов [1]

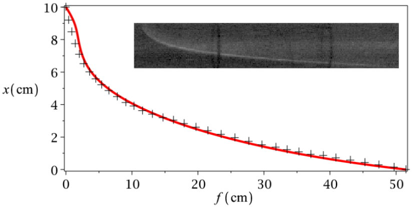




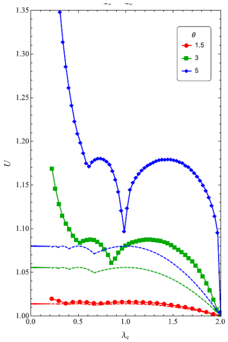


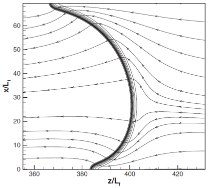




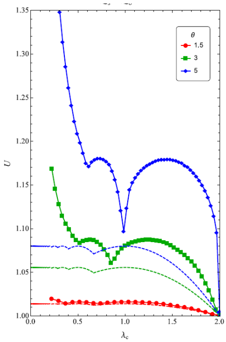


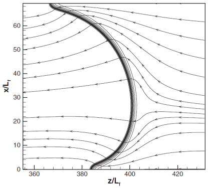
On-shell: результаты численных расчетов [2]





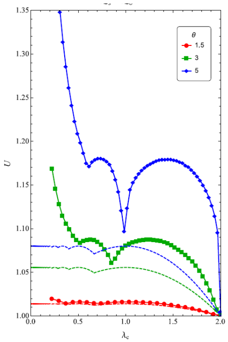
On-shell: результаты численных расчетов [2]

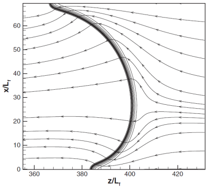




- DNS плохо разрешает структуру фронта, отсюда — ошибки при больших θ

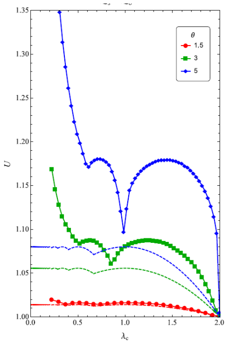
On-shell: результаты численных расчетов [2]

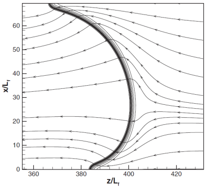




- DNS плохо разрешает структуру фронта, отсюда — ошибки при больших θ
- On-shell гораздо быстрее DNS и дает то, что и видят в эксперименте

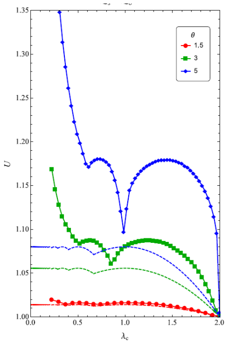
On-shell: результаты численных расчетов [2]

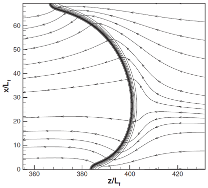




- DNS плохо разрешает структуру фронта, отсюда — ошибки при больших θ
- On-shell гораздо быстрее DNS и дает то, что и видят в эксперименте
- On-shell лучше распараллеливается

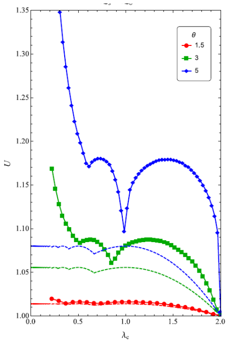
On-shell: результаты численных расчетов [2]

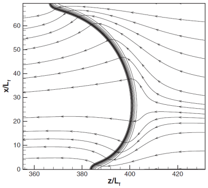




- DNS плохо разрешает структуру фронта, отсюда — ошибки при больших θ
- On-shell гораздо быстрее DNS и дает то, что и видят в эксперименте
- On-shell лучше распараллеливается
- Слабонелинейное приближение не годится для реальных пламен

On-shell: результаты численных расчетов [2]





- DNS плохо разрешает структуру фронта, отсюда — ошибки при больших θ
- On-shell гораздо быстрее DNS и дает то, что и видят в эксперименте
- On-shell лучше распараллеливается
- Слабонелинейное приближение не годится для реальных пламен
- [ext.] Вблизи стенки необходимы обобщения модели

Заключение: АЧП и пламена

Заключение: АЧП и пламена

- разработан эффективная схема сведения гидродинамических уравнений к уравнениям на фронте пламени — on-shell уравнениям

Заключение: АЧП и пламена

- разработан эффективная схема сведения гидродинамических уравнений к уравнениям на фронте пламени — on-shell уравнениям
- оптимизация кода “достигается” аналитически (аналогично DFT)

Заключение: АЧП и пламена

- разработан эффективная схема сведения гидродинамических уравнений к уравнениям на фронте пламени — on-shell уравнениям
- оптимизация кода “достигается” аналитически (аналогично DFT)
- результаты хорошо согласуются с DNS и известными асимптотиками

Заключение: АЧП и пламена

- разработан эффективная схема сведения гидродинамических уравнений к уравнениям на фронте пламени — on-shell уравнениям
- оптимизация кода “достигается” аналитически (аналогично DFT)
- результаты хорошо согласуются с DNS и известными асимптотиками
- дальнейшие расчеты включают учет гравитации (уже частично проведено), а также нетривиальных процессов вблизи стенок трубы

Спасибо за внимание!

Контакты: `okharl@mail.ru, k_kazakov@hotmail.com`

[1] K. A. Kazakov and O. G. Kharlanov, *Numerical study of strongly-nonlinear regimes of steady premixed flame propagation. The effect of thermal gas expansion and finite-front-thickness effects*, e-Print arXiv:1708.09346 [physics.flu-dyn].

[2] K. A. Kazakov, *Exact equation for curved stationary flames with arbitrary gas expansion*, Phys. Rev. Lett. **94**, 094501 (2005); *On-shell description of stationary flames*, Phys. Fluids **17**, 032107 (2005).