



**Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
кафедра высокопроизводительных вычислений**

Смирнов Н.Н., Никитин В.Ф.

**Программа моделирования одномерного движения
турбулентного реагирующего газа, вызванного
поршнем.**

методическое пособие

МОСКВА, 2010

0. Введение.

В данном методическом пособии описана работа с программой Piston, которая реализует математическую модель одномерного движения турбулентного реагирующего газа, вызванного движущимся поршнем.

Модель состоит из пяти уравнений (уравнение баланса массы компонент газовой смеси, уравнение импульса, уравнение энергии, уравнение динамики турбулентной энергии и уравнение динамики турбулентной диссипации). В системе учитываются химические превращения - необратимая реакция, в которой участвуют четыре компонента: нейтральная, горючее, окислитель и продукты. Смесь заключена в закрытом цилиндре, в котором движется поршень. Его скорость можно сделать положительной (вдвигание поршня в цилиндр), отрицательной (выдвигание) и нулевой (поршень является торцом поршня). Поршень может подогреваться (поток тепла с поршня положительный) или охлаждаться (поток отрицательный). Меняя параметры модели, пользователь может наблюдать различные эффекты, такие как волны горения и детонации.

1. Подготовка вычислений.

Прежде всего, следует задать параметры расчета в управляющем файле **config.txt**. Это обычный текстовый файл, который можно редактировать в любом текстовом редакторе (например, в Блокноте). Он состоит из набора строк вида:

значение параметра название параметра.

Имеются следующие параметры (всюду, где написано *больше* подразумевается *строго больше*; в колонке "Ограничения" даны буквенные обозначения параметров, используемые в дальнейшем):

Параметр в config.txt	Описание	Ограничения на параметр
Cells number	количество узлов сетки по пространству	$N > 2$
Well initial length, cm	длина отрезка, на котором идет расчет	$L > 0$
Piston velocity (1), m/s	скорость поршня на первом временном интервале	$-10^3 \leq V_{p1} \leq 2 \cdot 10^3$
Piston velocity (2), m/s	скорость поршня на втором временном интервале	$-10^3 \leq V_{p2} \leq 2 \cdot 10^3$
Piston velocity change moment, ms	момент изменения скорости	$t_{12} > 0$
Piston temperature set up	нужно ли задавать температуру поршня	0 - температура не задается 1 - температура задается
Piston temperature, K	температура поршня	$10 \leq T_p \leq 10^4$
Heat flux from piston, W/cm2	поток тепла от поршня	$q_p \geq -300$
Initial temperature, K	начальная температура	$10^2 \leq T_0 \leq 10^3$
Initial pressure, bar	начальное давление	$10^{-2} \leq P_0 \leq 10^3$
Initial oxidizer molar share	молярная доля окислителя в начальный момент времени	$C_o \geq 0$
Initial fuel molar share	молярная доля топлива в начальный момент времени	$C_f \geq 0$
Initial product molar share	начальная молярная доля продуктов реакции	$C_p \geq 0$

Initial neutral molar share	начальная молярная доля нейтральной компоненты	$C_N \geq 0$
Oxidizer molar mass, g/mol	молярная масса окислителя	$W_O \geq 0.01$
Oxidizer capacity ratio	отношение теплоемкостей для окислителя	$1.01 \leq \gamma_O$
Fuel molar mass, g/mol	молярная масса топлива	$W_F \geq 0.01$
Fuel capacity ratio	отношение теплоемкостей для горючей компоненты	$1.01 \leq \gamma_F$
Product molar mass, g/mol	молярная масса продукта реакции	$W_P \geq 0.01$
Product capacity ratio	отношение теплоемкостей для продукта реакции	$1.01 \leq \gamma_P$
Neutral molar mass, g/mol	молярная масса нейтральной компоненты	$W_N \geq 0.01$
Neutral capacity ratio	отношение теплоемкостей для нейтральной компоненты	$1.01 \leq \gamma_N$
Dynamical viscosity, Pa*s	динамическая вязкость	$0 < \eta \leq 1$
Prandtl number	число Прандтля	$Pr > 0$
Schmidt number	число Шмидта	$Sc > 0$
Reaction heat, kJ/mol	количество теплоты, выделяемое во время реакции	$Q_R \geq 0$
Oxidizer stoichiometry coefficient	стехиометрический коэффициент при окислителе	$\nu_O \geq 0.01$
Pre-exponential factor	предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса	$A_R > 0$
Activation temperature, K	температура активации	$T_A \geq 1000$
Threshold temperature, K	пороговая температура	$T_M > 300$
Initial turbulent energy, J/kg	начальная энергия турбулентности	$10^{-5} \leq K_0 \leq 10^5$
Initial mixing length, cm	начальная длина турбулентного смешения	$\ell_0 > 0$
CFL criterion factor	коэффициент в критерии CFL (множитель Куранта)	$0 < \sigma_c \leq 0.3$
Number of spatial outputs	количество промежуточных профилей, которые будут сохранены в [root]_s.sce	$1 \leq \chi_{is} \leq 10$
Calculation time, s	интервал времени, на котором ведется расчет	$t_{calc} \geq 0$

Output files root	root - изменяемая часть названия выходных файлов программы; результаты расчетов записываются в файлы [root]_s.sce и [root]_t.sce
-------------------	---

Строчка "123456789" после списка параметров сигнализирует программе о конце конфигурационного файла, ее наличие в **config.txt** обязательно.

Всем параметрам присвоено некоторое значение по умолчанию. Их можно изменять как угодно, учитывая ограничения, указанные в таблице. С помощью утилиты **setconf** можно снова установить значения всех параметров равными значениям по умолчанию. Для этого нужно просто запустить **setconf.exe**.

После окончания редактирования не забудьте сохранить **config.txt** (комбинация клавиш **Cntrl-S**).

2. Выполнение расчета.

Запустите программу **p.exe**. Дождитесь окончания ее работы. Это займет несколько минут. В случае аварийной остановки программы (например, если какие-либо параметры в конфигурационном файле находятся вне указанных выше пределов) вместо файлов с результатами в директории программы генерируется файл **error.log**, содержащий отчет об ошибках. Список сообщений об ошибках содержится в Приложении А.

3. Анализ результатов численного эксперимента.

Программа **p.exe** генерирует два файла - **[root]_s.sce** и **[root]_t.sce**. Здесь **[root]** - изменяемая часть файла, которую пользователь задает в файле **config.txt**.

Файл **[root]_s.sce** служит для хранения профилей основных параметров системы (давление, температура и т.д.), вычисленных в определенные моменты времени. Он состоит из $N + 1$ записи, где N равно параметру Number of spatial outputs в **config.txt**. В нулевой записи хранятся начальные профили, в записях 1.. $N-1$ - промежуточные, а в N -й - профили на момент конца расчета.

Запись с номером n содержит следующие данные:

- t_n - время,
- D_n - координаты узлов динамически меняющейся сетки по пространству (в см.)
- P_n - давление (в барах)
- T_n - температура (в Кельвинах)
- V_n - скорость движения смеси (в м/с)
- Y_n - процент горючей компоненты в смеси (по массе)
- K_n - турбулентная энергия
- E_n - турбулентная диссипация
- V_{in} - эффективная кинематическая вязкость

В **[root]_t.sce** находится массив **Temp** - матрица размером $N \times 10$. Каждая i -я строка содержит следующие параметры течения газа:

- Temp[i, 0]** текущее время (с),
- Temp[i, 1]** давление около поршня (бар)
- Temp[i, 2]** температура около поршня (К)
- Temp[i, 3]** скорость поршня (м/с)
- Temp[i, 4]** максимальное давление в рабочей области (бар)
- Temp[i, 5]** максимальная температура в рабочей области (К)
- Temp[i, 6]** максимальная скорость в рабочей области (м/с)

Temp[i, 7] координата поршня (см)

Temp[i, 8] координата волны давления (см)

Temp[i, 9] координата зоны пламени (см)

Рисовать графики различных величин следует с помощью пакета SciLab. Для этого необходимо:

- Запустить SciLab
- Сделать директорию с программой рабочей для SciLab. Для этого в меню главного окна SciLab надо выбрать **Файл->Сменить текущий каталог**, в появившемся окне обозревателя найти нужную папку, нажать Open. Если этого не сделать, SciLab не сможет найти файлы **[root]_s.sce**, **[root]_t.sce**.
- Читать (импортировать) массивы из **[root]_s.sce**, **[root]_t.sce** в память SciLab. Для этого в командной строке SciLab надо набрать `exec '[root]_s.sce'`, нажать Enter, набрать `exec '[root]_t.sce'`, нажать Enter. **ВНИМАНИЕ!** Импорт массивов нужно производить после каждого расчета.
- Запустить скрипт, отвечающий за рисования профилей интересующей величины. Это можно сделать так: в меню главного окна SciLab выбрать **Файл->Выполнить**, найти нужный скрипт в окне Проводника, нажать Enter.

К программе прилагается набор скриптов (файлы ***.sce**) для визуализации результатов расчета.

a. Построение в одной системе координат нескольких профилей следующих физических величин:

PlotP.sce	давление (бар)
PlotT.sce	температура (К)
PlotY.sce	массовая доля горючей компоненты (в процентах)
PlotV.sce	скорость(м/с)
PlotK.sce	удельной энергии турбулентности (Дж/кг)
PlotE.sce	удельной диссипации энергии турбулентности (Вт/кг)
PlotVi.sce	графики эффективной кинематической вязкости ($\text{м}^2/\text{с}$)
PlotOm.sce	частота пульсаций

b. Зависимость от времени следующих величин

xtime.sce	положение поршня, самой сильной волны давления (расширения или сжатия) и волны горения
ptime.sce	давление на поршне и максимальное значения давления
ttime.sce	температуры на поршне и максимальное значение температуры
vtime.sce	скорость газа у поршня и максимальное значение скорости

Скрипты рисуют графики в отдельном окне, которое далее будем называть фигурой.

Иногда необходимо более подробно рассмотреть некоторую часть графика. Для этого можно использовать инструмент **Увеличивающая лупа**. На панели инструментов фигуры нужно нажать значок лупы с плюсом внутри. Затем, удерживая левую кнопку мыши нажатой, выделить интересующий участок и отпустить кнопку. На той же панели инструментов есть **Уменьшающая лупа**. Ее действие имеет обратный эффект - она как бы отодвигает график от зрителя. Чтобы ее задействовать, необходимо нажать значок лупы с минусом внутри, затем щелкать левой кнопкой мыши по графику, пока не будет получен нужный масштаб.

SciLab предоставляет возможность задать прямоугольную область системы координат, которая будет отображаться в окне фигуры. Это достигается путем некоторого изменения визуализационного скрипта. Для этого нужно найти строчку вида $rect = [0, 0, 4, 300]$. Квадратные скобки заключают четыре числа x_{min} , x_{max} , y_{min} , y_{max} . Здесь x_{min} , y_{min} - минимальные значения x и y , а x_{max} и y_{max} - максимальные значения x и y .

4. Сохранение графиков.

Чтобы сохранить построенный график в файл (например, *.jpg) нужно сделать следующее. В верхнем меню фигуры выберите последовательно пункты **Файл-Экспортировать**.

В появившемся окне выберите папку для сохранения, имя файла и расширение. Расширение определяет формат хранения графика.

Сохраненные графики нужно будет потом вставить в отчет по практикуму.

5. Задания.

1) Движение поршня с различной скоростью.

А. Вдвигание с малой скоростью. Показать формирование ударной волны перед поршнем. Продемонстрировать, что при уменьшении коэффициента эффективной (молекулярной плюс турбулентной) вязкости уменьшается размывание волны, при увеличении – увеличивается.

Б. Выдвигание поршня. Показать формирование ударной волны разрежения

В. Вдвигание с большой скоростью. Показать формирование волны детонации.

Указания.

Вначале устанавливаем конфигурацию в состояние, заданное по умолчанию, запуском команды **setconf**. Дальнейшие действия ведутся в зависимости от подзадачи.

Задача 1А. Установить скорость поршня (1) в $V_{p1} = 200$ м/с и менять начальную турбулентную энергию смеси K_0 от 10^4 до 10^{-2} Дж/кг. Снижение K_0 приведет к снижению эффективной кинематической вязкости и к соответствующему уменьшению размывания ударной волны. Следует выдавать графики профилей давления, эффективной кинематической вязкости, температуры и скорости. Рекомендованные значения масштабов осей в скриптах следующие.

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	все	-20	80
Давление	PlotP	0	2
Вязкость	PlotVi	0.001	10
Температура	PlotT	250	500
Скорость	PlotV	-30	170

Примечание. В строках таблицы, где в колонке "Параметр" стоит "Координата", указаны пределы оси абсцисс. В других строках - пределы оси ординат. Это относится и ко всем следующим подобным таблицам.

Задача 1Б. Следует установить скорость поршня (1) V_{p1} в отрицательное значение. Это значение варьируется. Прочие параметры оставить по умолчанию. Получить графики профилей давления, температуры и скорости. Рекомендованные значения масштабов осей следующие:

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	все	-100	50
Давление	PlotP	0	1.2
Температура	PlotT	0	350
Скорость	PlotV	-1000	100

Задача 1В. Меняем скорость вдвигания для испытываемой горючей смеси от 310 м/с до 370 м/с с шагом 20 м/с. Эффект перехода к детонации наступает на достаточно узком диапазоне значений. Необходимо получить графики профилей давления, температуры, скорости и концентрации. Рекомендованные значения масштабов осей следующие.

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	все	-30	220
Давление	PlotP	0	30
Температура	PlotT	0	2000
Скорость	PlotV	-500	1300
Концентрация	PlotY	0	20

2)Задание температуры поршня.

А. Малое нагревание. Показать движение тепловой волны и обгоняющей ее ударной волны в газе.

Б. Охлаждение. Показать движение волны охлаждения и обгоняющей ее волны разрежения в газе.

В. Нагревание до высокой температуры. Исследовать процесс зажигания газа.

Указания

В обоих случаях, после приведения конфигурации в состояние по умолчанию командой **setconf**, ставим нулевую скорость поршня (1) V_{p1} . Параметр "Piston temperature set up" устанавливаем равным единице. Затем ставим температуру поршня - она должна быть выше температуры газа ("Initial temperature"), если требуется нагревание и ниже, если происходит охлаждение. Время расчета нужно сделать равным 2 мс (тепловая волна имеет лучшее разрешение на больших временах расчета). Необходимо получить графики давления, скорости, а также температуры - общий (по всей длине цилиндра) и для малых значений координаты x .

Задача 2А. Поток тепла от поршня q_p установить выше нуля, до 30 Вт/см². Следует выдавать графики профилей давления, температуры и скорости. Рекомендованные значения масштабов осей для данной задачи следующие.

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	PlotT	-1	5
Координата	PlotV, PlotP	-10	90
Давление	PlotP	0.99	1.01
Температура	PlotT	200	500
Скорость	PlotV	-5	5

Задача 2Б. Поток тепла от поршня q_p установить ниже нуля. Вывести графики тех же физических величин, что и в 2Б при следующих масштабах осей

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	PlotT	-1	5
Координата	PlotV, PlotP	-10	90
Давление	PlotP	0.95	1.01
Температура	PlotT	200	500
Скорость	PlotV	-10	2

Задача 2В. Провести исследования с температурой поршня в диапазоне от 600 до 1200 К с шагом 200 К. Те же самые условия, что и 2А (и тот же алгоритм установки конфигурации), но поток тепла ставится выше (больше 30 Вт/см^2). Получить графики тех же величин, что и в предыдущих задачах плюс график концентрации. Рекомендованные значения масштабов осей следующие :

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	PlotT, PlotY	-2	10
Координата	PlotV, PlotP	-10	90
Давление	PlotP	0.8	1.5
Температура	PlotT	0	2000
Скорость	PlotV	-10	100
Концентрация	PlotY	0	20

3) Сочетание теплового и механического воздействия на газ.

3А. Вдвигание с кусочно-постоянной скоростью при повышенной температуре. Показать возникновение горения, а затем и детонации, когда вторая волна догоняет первую.

3Б. Варьирование значений скоростей (1) и (2). Показать, что

- при большом значении скорости (1) сразу возникает детонация перед поршнем;
- при меньшем значении скорости (1) возникает волна горения и ударная волна перед ней, а затем волна детонации возникает после взаимодействия двух ударных волн;
- при еще меньшем значении скорости (1) детонация возникает через некоторое время после взаимодействия первичной и вторичной ударных волн на контактной поверхности, образовавшейся в результате взаимодействия волн;

-при совсем малых значениях скоростей (1) и (2) и возникновения детонации не происходит, и распространяется волна горения и ударная волна перед ней.

ЗВ. Выдвигание горячего поршня из трубы (скорость поршня отрицательна, его температура выше температуры газа). Получить волну горения, бегущую вправо от поршня и волну разрежения, бегущую перед ней. Показать, что скорость волны горения в лабораторной системе координат зависит от скорости вытягивания поршня и может быть даже отрицательной.

ЗГ. Вначале вдвигание горячего поршня (скорость поршня (1) положительна, его температура выше температуры газа), затем выдвигание поршня (скорость поршня (2) отрицательна). На первом временном отрезке перед поршнем должна образоваться волна детонации. Показать, что скорость волны детонации в лабораторной системе координат не зависит от скорости вытягивания поршня.

ЗД. В условиях задачи ЗГ показать, что после возникновения волны детонации увеличение скорости поршня (2) до некоторого предела не влияет на скорость волны. Найти предельное значение скорости поршня (2) при превышении которого скорость волны детонации начинает расти.

Указания.

Задача 3А. Для решения этой задачи после установки конфигурации по умолчанию сделать поток тепла от поршня $q_p = 50$ Вт/см². Скорость поршня (1) нужно поставить равной 80 м/с (чтобы не возникла детонация), а скорость поршня (2) – равной 110 м/с. Время переключения скоростей поршня ставим равным $t_{12} = 0.15$ мс, а время расчета продлеваем до 2 мс. Рекомендованные значения масштабов осей для задачи **1.3А** следующие.

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	все	-20	220
Давление	PlotP	0	30
Температура	PlotT	0	2000
Скорость	PlotV	-500	1300
Концентрация	PlotY	0	20

Задача 3Б. Для того, чтобы выполнить эту задачу, устанавливаем **config.txt** в то же состояние, что и для задачи **3А**, но скорость поршня (1) будем менять от 140 м/с до нуля.

Задача 3В. Следует установить начальную конфигурацию по умолчанию командой **setconf**. Далее установить в файле **config.txt** момент переключения скоростей и время расчета равными 2 мс (т.е. изменения скорости поршня не происходит), а поток тепла от поршня $q_p = 50$ Вт/см². Скорость поршня следует варьировать в интервале от -10 до -100 м/с. Рекомендованные значения масштабов осей для данной задачи следующие.

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	PlotT, PlotY	-20	20
Координата	PlotP, PlotV	-50	100

Давление	PlotP	0.5	1.5
Температура	PlotT	0	2000
Скорость	PlotV	-100	50
Концентрация	PlotY	0	20

Задача 3Г. Вначале необходимо установить начальную конфигурацию по умолчанию командой **setconf**. Далее в файле **config.txt** вносим следующие изменения: момент переключения скоростей $t_{12} = 0.15$ мс, поток от поршня $q_p = 50$ Вт/см². Исследовать поведение системы при нескольких значениях скорости поршня (2) в диапазоне от -10 до -100 м/с.

Рекомендованные значения масштабов осей для данной задачи:

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	все	-100	220
Давление	PlotP	0	30
Температура	PlotT	0	2000
Скорость	PlotV	-1100	1100
Концентрация	PlotY	0	20

Задача 3Д. Для решения этой задачи следует установить начальную конфигурацию командой **setconf**, а затем внести в файл **config.txt** поправки: момент переключения скоростей $t_{12} = 0.15$ мс, поток тепла от поршня $q_p = 50$ Вт/см². Исследовать поведение системы при нескольких значениях скорости поршня (2) в диапазоне от 350 до 1200 м/с. Начиная с некоторого значения V_{p2} следует ожидать увеличения скорости распространения волны.

Рекомендованные значения масштабов осей:

Параметр	Скрипт	min	max
Координата	все	-20	220
Давление	PlotP	0	30
Температура	PlotT	0	2000
Скорость	PlotV	-500	1500
Концентрация	PlotY	0	20