

ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ГЕОФИЗИКИ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

Труды Международной конференции
АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ – 2015
посвященной 90-летию со дня рождения академика Г. И. Марчука

19–23 октября 2015
Академгородок, Новосибирск, Россия

УДК 519.6
ББК 22.19

Труды Международной конференции "Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики – 2015", посвященной 90-летию со дня рождения академика Гурия Ивановича Марчука. Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук. Новосибирск. 19–23 октября 2015 г. [Электрон. ресурс]. Новосибирск: Абвей, 2015. 1 электрон. опт. диск. 916 с.

ISBN 978-5-9905347-2-8

Конференция АПВПМ-2015 посвящена 90-летию со дня рождения академика Гурия Ивановича Марчука – выдающегося ученого и организатора науки, признанного специалиста в области вычислительной математики, математического моделирования, физики атмосферы и океана, иммунологии и медицины.

Целью конференции является привлечение специалистов по численному анализу, прикладной математике и вычислительным технологиям для обсуждения актуальных вопросов математики и математического моделирования, а также вопросов практического применения современных численных методов. Основные темы конференции: численный анализ, методы прикладной математики и математическое моделирование, параллельные и распределенные вычисления, информационные и вычислительные системы.

Конференция проводится при финансовой поддержке
Федерального агентства научных организаций
и Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 15-01-20772

Соорганизаторы конференции:

Институт вычислительных технологий СО РАН
Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН
Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН
Институт систем информатики им. А. П. Ершова СО РАН
Институт цитологии и генетики СО РАН
Новосибирский государственный университет
Конструкторско-технологический институт вычислительной техники СО РАН

Золотой спонсор:

Корпорация Intel

Серебряные спонсоры

Корпорация Hewlett-Packard
Корпорация EMC
Корпорация Schlumberger
Компания NVIDIA
Группа компаний РСК
Группа компаний ЦФТ

При поддержке компаний:

ЛЕДАС
Росинка Сибири

Информационная поддержка:

Газета "Наука в Сибири"
Газета "Поиск"

Сайт конференции: <http://conf.nsc.ru/amca15>

ISBN 978-5-9905347-2-8

Содержание

Ж. Абдыкалык кызы, С.Н. Колупаева, Б.М. Шумилов, З.М. Сулайманов АНАЛИЗ И ПЛАНИРОВАНИЕ РЕМОНТОВ АВТОМОБИЛЬНЫХ ДОРОГ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАННЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ	10
Т.А. Аверина МОДИФИЦИРОВАННЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИСТЕМ СО СЛУЧАЙНОЙ СТРУКТУРОЙ С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ПЕРЕХОДАМИ	18
Т.А. Аверина, С.С. Артемьев, А.Л. Бондарева, Г.И. Змиевская ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ СТОХАСТИЧЕСКИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В МОДЕЛИРОВАНИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ	25
А.К. Алексеев О СВЯЗИ СОПРЯЖЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ С ИНФОРМАЦИЕЙ	32
Д.В. Алексеев, А.В. Травин РЕКОНСТРУКЦИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗОТОПНЫХ СИСТЕМ ОБРАЗЦОВ ГОРНЫХ ПОРОД И МИНЕРАЛОВ ПРИ ДАТИРОВАНИИ	36
Л.А. Алексеева, Г.К. Кайшибаева ТРАНСПОРТНЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ЛАМЕ. УДАРНЫЕ УПРУГИЕ ВОЛНЫ	43
А.В. Андерс, Р.В. Андерс, А.А. Калинин INTEL MATH KERNEL LIBRARY PARDISO ON INTEL XEON PHI	50
В.А. Андрющенко, Л.П. Кондаурова, С.К. Немировский ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ КОЛЛАПСИРУЮЩИХ ВИХРЕВЫХ ПЕТЕЛЬ В СВЕРХТЕКУЧЕМ ГЕЛИИ	56
А.С. Апарцин ФОРМУЛЫ ОБРАЩЕНИЯ И ИХ КОНЕЧНОМЕРНЫЕ АНАЛОГИ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ КЛАССОВ УРАВНЕНИЙ ВОЛЬТЕРРА I РОДА С РАЗРЫВНЫМИ ЯДРАМИ	62
А.С. Апарцин, Е.В. Маркова, И.В. Сидлер, В.В. Труфанов ИНТЕГРАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ДОЛГОСРОЧНОГО ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ВОЗРАСТНОЙ СТРУКТУРЫ ОСНОВНЫХ ВИДОВ ЭЛЕКТРОСТАНЦИЙ	70
И.В. Афанаскин, А.В. Королёв МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРАБОТКИ НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ ГИДРОРАЗРЫВА ПЛАСТА	75
Р.Р. Ахунов, С.П. Куксенко УСКОРЕНИЕ МНОГОКРАТНОГО РЕШЕНИЯ СЛАУ С ИЗМЕНЯЮЩЕЙСЯ МАТРИЦЕЙ	84
Г.А. Бабичева, Н.А. Каргаполова, В.А. Огородников РАНДОМИЗИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОДНОРОДНЫХ СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ С НЕВЫПУКЛЫМИ КОРРЕЛЯЦИОННЫМИ ФУНКЦИЯМИ	91
В.В. Белов, М.В. Тарасенков АЛГОРИТМЫ СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ИМПУЛЬСНЫХ РЕАКЦИЙ БИСТАТИЧЕСКИХ КАНАЛОВ СВЯЗИ	95
А.С. Бердышев, Х.Х. Имомназаров, А.А. Михайлов МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В ФЛЮИДОНАСЫЩЕННОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДЕ	102
Е.А. Берендеев МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ ПЛАЗМЕННЫХ ЛОВУШЕК МЕТОДОМ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ	108

И.А. Блатов, Е.В. Китаева СХОДИМОСТЬ АЛГОРИТМОВ АДАПТАЦИИ РАСЧЕТНЫХ СЕТОК ДЛЯ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ	115
С.П. Борисов, А.Н. Кудрявцев ПРИМЕНЕНИЕ НЕОТРАЖАЮЩИХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ПРИ РЕШЕНИИ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ТЕОРИИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ	121
М.А. Боронина, В.А. Вшивков СХЕМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В СЛУЧАЕ ТРЕХМЕРНЫХ ПЛОСКИХ ОБЛАСТЕЙ	129
Л.П. Брагинская, А.П. Григорюк, В.В. Ковалевский НАУЧНЫЙ ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИНТЕРНЕТ-РЕСУРС "АКТИВНАЯ СЕЙСМОЛОГИЯ"	135
К.И. Будников, А.В. Курочкин, А.А. Лубков, А.В. Яковлев ОЦЕНКА ДАТЧИКОВ МОНИТОРИНГА ЭЛЕКТРОННОЙ ПОЧТЫ С ПОМОЩЬЮ СИНТЕТИЧЕСКОГО ТЕСТА TRANSMAIL	140
И.В. Бычков, В.И. Зоркальцев, И.В. Мокрый СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СПОСОБОВ ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ СИСТЕМ	144
В.И. Васильев, А.М. Кардашевский ИТЕРАЦИОННОЕ РЕШЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА	150
М.П. Вишневский, В.И. Прийменко ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧИ НЕЛИНЕЙНОЙ ТРЕХМЕРНОЙ МАГНИТОУПРУГОСТИ	157
А.Ф. Воеводин, В.С. Никифоровская РАСЧЕТ ГИДРОТЕРМИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЙ ВОДЫ В СИСТЕМАХ ОТКРЫТЫХ РУСЕЛ И ВОДОЕМАХ	162
К.В. Воронин, Ю.М. Лаевский ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПРИМЕНЕНИЯ ОДНОГО КЛАССА ВЕКТОРНЫХ СХЕМ РАСЩЕПЛЕНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПЕРЕНОСА	167
Т.А. Воронина, А.А. Романенко ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРВОНАЧАЛЬНОЙ ФОРМЫ ВОЛНЫ ЦУНАМИ 06.02.2013	174
В.А. Вшивков, И.М. Куликов, И.Г. Черных МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АСТРОФИЗИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЙ НА СУПЕРЭВМ	182
Р.В. Галёв, А.Н. Кудрявцев, С.И. Трашкеев ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ДИСКЛИНАЦИЯМИ В НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ	189
Ю.Г. Губарев, А.И. Светоносков К НЕУСТОЙЧИВОСТИ ОДНОМЕРНЫХ СОСТОЯНИЙ ДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ ПЛАЗМЫ ВЛАСОВА-ПУАССОНА	196
С.А. Гусев ПОСТРОЕНИЕ ОЦЕНОК МАТЕМАТИЧЕСКИХ ОЖИДАНИЙ ВЫРАЖЕНИЙ, СОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫЕ ПО ПАРАМЕТРАМ ВРЕМЕНИ ПЕРВОГО ВЫХОДА ДИФФУЗИОННОГО ПРОЦЕССА ИЗ ОБЛАСТИ	203
О.И. Гусев, Г.С. Хакимзянов ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСПЕРСИОННЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН НА ВРАЩАЮЩЕЙСЯ СФЕРЕ	210
Ю.И. Димитриенко, М.Н. Коряков, А.А. Захаров МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ RKDG217	

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ RKDG

Ю.И. Димитриенко¹, М.Н. Коряков¹, А.А. Захаров¹

¹Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, Москва

УДК 519.6, 533.6

В работе проведено развитие численного метода RKDG (Runge-Kutta Discontinuous Galerkin) для решения задач гиперзвуковой неравновесной газовой динамики для модели вязкого-химически реагирующего газа. На первом этапе решается задача динамики идеального газа. На втором учитывается вязкость и теплопроводность газа, но не учитывается конвекция. Для нахождения численного потока при решении системы Эйлера используется метод HLLC, и для устранения нефизических осцилляций решения применяется TVD ограничитель. Для поиска численных потоков при решении уравнений на втором этапе используются центральные потоки. На третьем этапе решаются уравнения химической кинетики за 3 шага. Сначала учитывается приток массы i -ого элемента за счёт химических превращений. Система решается итерационным явно-неявным методом. Далее учитывается конвекция, а затем диффузия химических компонентов. Для интегрирования получающихся уравнений также применяется метод RKDG аналогично первому и второму этапам решения газодинамических уравнений с конвективными и диффузионными членами. Представлены результаты численного моделирования обтекания сферического затупления набегающим гиперзвуковым потоком.

Ключевые слова: вычислительная газовая динамика, неравновесная аэрогазодинамика, химическая кинетика, метод RKDG, высокопроизводительные вычисления.

1 Введение

В настоящее время в России и за рубежом проявляется большой интерес к созданию гиперзвуковых летательных аппаратов (ГЛА), способных двигаться в атмосфере Земли продолжительное время со скоростью, которая превышает скорость звука более чем в 6 раз (число Маха $M \geq 6$). Среди первых разработок в данной области можно отметить аппарат X-51, созданный в США, успешный запуск которого был произведен в августе 2012 года (во время экспериментального полета X-51 развил скорость в 5 Махов).

Движение ГЛА в атмосфере Земли неразрывно связано с эффектом появления высоких температур в окружающей ГЛА внешней среде. Такие температуры появляются вследствие торможения потока, при котором кинетическая энергия упорядоченного движения частиц переходит во внутреннюю энергию газа. Температура газа может достигать 3000K и выше. В этих условиях начинают происходить процессы диссоциации и ионизации молекул воздуха, поэтому появляется необходимость учёта гетерогенности внешней среды.

При проектировании ГЛА во многих случаях затруднительно проводить экспериментальные аэротермодинамические исследования и невозможно для исследования химических реакций в высокотемпературных газовых потоках. Следовательно, исследования внешней гиперзвуковой аэродинамики с учётом многокомпонентности набегающего потока главным образом основываются на методах численного моделирования. Однако при этом возникают трудности, связанные с выбором методов генерации сеток для расчётных областей и численного решения дифференциальных уравнений с частными производными, описывающими поведение газового потока.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК 3007.2015.8 Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова [10].

Существует значительное число работ ([1, 2, 3] и другие) посвящённых численному моделированию гиперзвуковых газовых потоков, учитывающих эти эффекты. Среди численных методов широко распространены конечно–разностные методы, основанные на TVD схемах и обладающие такими необходимыми свойствами как сохранение монотонности решения и достижение второго порядка точности. Недостатком данных методов является требование генерации гладких конечно–разностных сеток, которое очень сложно выполнить при решении практических задач со сложной трёхмерной геометрией поверхности тела. Следовательно, в таких случаях предпочтительно использовать нерегулярные сетки и конечно–объёмные или конечно–элементные методы.

В данной работе рассматривается конечно–объёмный метод RKDG [4], имеющий второй порядок точности, компактный шаблон и соответствующий классу TVD схем благодаря отдельной процедуре монотонизации. Проводится адаптация этого метода для интегрирования трёхмерных нестационарных дифференциальных уравнений на тетраэдральных сетках. Помимо решения уравнений газовой динамики, рассматривается применения метода RKDG для численного интегрирования уравнений, описывающих изменения концентраций химических компонент в реакциях диссоциации и ионизации газа.

2 Система уравнений

Рассматривается система уравнений вязкого теплопроводного газа с химическими реакциями, описывающая поведение высокоскоростного потока вблизи ГЛА:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} &= 0, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbf{E} - \mathbf{T}_v) &= \mathbf{0}, \\ \frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho \epsilon + p) \mathbf{v} - \mathbf{T}_v \cdot \mathbf{v} + \mathbf{q}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho y_i \mathbf{v} - \rho D_{ij} \nabla y_i) &= \omega_i, \end{aligned} \quad (1)$$

где ρ — плотность смеси газов, t — время, \mathbf{v} — вектор скорости движения центра масс газовой смеси, p — давление смеси, \mathbf{E} — единичный тензор, ϵ — плотность полной энергии смеси, $y_i = \rho_i/\rho$ — массовая концентрация i -ой компоненты, ω_i — массовая скорость образования i -ой компоненты, D_{ij} — коэффициенты диффузии.

К этим уравнениям присоединяются определяющие соотношения:

$$\begin{aligned} p &= \rho \frac{R_0}{M_0} \theta, \quad \frac{1}{M_0} = \sum_{i=1}^7 \frac{y_i}{M_i}, \quad \epsilon = e + \frac{|\mathbf{v}|^2}{2}, \quad e = c_v \theta, \quad |\mathbf{v}|^2 = \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \\ c_v &= \sum_{i=1}^7 y_i c_{v_i}, \quad \mathbf{T}_v = -\frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{E} + \mu (\nabla \otimes \mathbf{v} + \nabla \otimes \mathbf{v}^T), \quad \mathbf{q} = -\lambda \nabla \theta, \end{aligned}$$

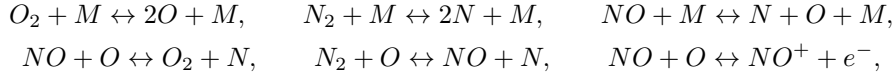
где R — газовая постоянная, M_i — молярная масса i -ой компоненты газовой смеси, θ — температура, e — плотность внутренней энергии, c_{v_i} — удельная теплоемкость при постоянном объёме i -ой компоненты, μ — коэффициент вязкости, λ — коэффициент теплопроводности.

Рассматривается модель бинарной диффузии. Коэффициенты диффузии, вязкости и теплопроводности вычисляются по формулам [5]:

$$\begin{aligned} D_{12} &= 1.85 \cdot 10^{-7} \frac{\theta^{3/2}}{p \sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)}} \left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right)^{1/2}, \\ \mu &= \sum_{i=1}^6 \frac{\mu_i}{1 + \sum_{j=1, j \neq i}^6 G_{ij}^{\mu} \frac{\gamma_j}{\gamma_i}}, \quad \lambda = \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i}{1 + \sum_{j=1, j \neq i}^6 G_{ij}^{\lambda} \frac{\gamma_j}{\gamma_i}}, \quad \gamma_i = \frac{y_i}{M_i}, \end{aligned}$$

where σ_{12} — характеристическое расстояние, $\Omega_{12}^{(1,1)}$ — интеграл столкновений, μ_i , λ_i — вязкость и теплопроводность чистых газов, G_{ij}^{μ} , G_{ij}^{λ} — универсальные постоянные.

Обтекающий тело газ состоит из семи компонентов, а в качестве возможных химических реакций, протекающих в ударном слое при высоких температурах, принимаются следующие:



где M — любой из 6 рассматриваемых компонентов, являющихся катализаторами, e^- — электронная компонента. Будем ассоциировать индекс $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ с компонентами O, N, NO, O_2, N_2, NO^+ , соответственно.

Также имеют место условия сохранения атомарного состава:

$$y_{O_2} = 0.21 - 0.5 \cdot (y_O + y_{NO} + y_{NO^+}), \quad y_{N_2} = 0.79 - 0.5 \cdot (y_N + y_{NO} + y_{NO^+})$$

и условие квазинейтральности смеси: $y_{NO^+} = y_{e^-}$.

3 Численный метод

Воспользуемся методом разделения по физическим процессам и пошагово опишем алгоритм решения.

На первом шаге не учитывается вязкость и теплопроводность газа. Система уравнений, описывающая идеальный газ выглядит следующим образом:

$$\mathbf{U}_t + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, \quad (2)$$

где $\mathbf{U} = [\rho, \rho\bar{v}_x, \rho\bar{v}_y, \rho\bar{v}_z, \rho E]^T$ — вектор консервативных переменных, $\mathbf{F} = [\rho\mathbf{v}, \rho\mathbf{v}\bar{v}_x + p\delta_1^i, \rho\mathbf{v}\bar{v}_y + p\delta_2^i, \rho\mathbf{v}\bar{v}_z + p\delta_3^i, \rho(E + p)\mathbf{v}]^T$ — вектор потока. Для решения системы (2) воспользуемся методом RKDG. Введем систему базисных функций φ_i , $i = \overline{1,4}$, которые обладают следующим свойством: $\varphi_i(x_i) = 1$, $\varphi_i(x_j) = 0$, $i \neq j$, где x_i — точки интегрирования по квадратурной формуле Гаусса второго порядка для тетраэдра. Введем линейную аппроксимацию вектора \mathbf{U} внутри тетраэдра: $\mathbf{U}_h = \sum_{i=1}^4 \varphi_i(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{U}_i(t)$. Умножим систему (2) на функцию $\varphi_i(\mathbf{x})$ и проинтегрируем по тетраэдру. После несложных преобразований получим

$$\frac{V}{4} \frac{d\mathbf{U}_i(t)}{dt} = \int_V \mathbf{F}(\mathbf{U}_h) \nabla \varphi_i(\mathbf{x}) dV - \int_S \tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{U}_h^{\text{int}}, \mathbf{U}_h^{\text{ext}}) \varphi_i(\mathbf{x}) dS. \quad (3)$$

где V — объём тетраэдра, $\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{U}_h^{\text{int}}, \mathbf{U}_h^{\text{ext}})$ — численный поток, который зависит от значений вектора консервативных переменных рассматриваемого тетраэдра $\mathbf{U}_h^{\text{int}}$ и от значений в четырёх соседних тетраэдрах $\mathbf{U}_h^{\text{ext}}$. Численный поток может быть найден, например, методом HLLC [6]. Система обыкновенных дифференциальных уравнений (3) решается явным методом Рунге-Кутты. Для устранения нефизических осцилляций решения применим TVD ограничитель [7]. Перейдем к характеристическим переменным \mathbf{V} , умножив систему (2) на матрицу левых собственных векторов матрицы $\mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}}$, $\mathbf{V} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$. Линейную аппроксимацию внутри тетраэдра представим так: $\mathbf{V} = \mathbf{V}_m + (x - x_m)\alpha_m + (y - y_m)\beta_m + (z - z_m)\gamma_m$, где индекс m относится к центру тетраэдра, $\alpha_m, \beta_m, \gamma_m$ — некоторые коэффициенты. Далее вычислим $\mathbf{V}_{\min} = \min \left(\mathbf{V}_m, \min_{n=\overline{1,4}} \mathbf{V}_n \right)$ и $\mathbf{V}_{\max} = \max \left(\mathbf{V}_m, \max_{n=\overline{1,4}} \mathbf{V}_n \right)$ — значения в центрах соседних тетраэдров. Операции \min и \max применяются к каждому элементу вектора в отдельности. Найдем величины ψ_i , $i = \overline{1,4}$ в вершинах рассматриваемого тетраэдра. Тогда

$$\psi_i^j = \begin{cases} \min \left(1, \frac{V_{\min}^j - V_m^j}{V_i^j - V_m^j} \right), & \text{если } V_i^j - V_m^j > 0 \\ \min \left(1, \frac{V_{\max}^j - V_m^j}{V_i^j - V_m^j} \right), & \text{если } V_i^j - V_m^j < 0 \\ 1, & \text{если } V_i^j - V_m^j = 0 \end{cases}$$

Пусть $\psi^j = \min(\psi_1^j, \psi_2^j, \psi_3^j, \psi_4^j)$, тогда ограниченные наклоны $\psi^T \cdot \alpha_m, \psi^T \cdot \beta_m, \psi^T \cdot \gamma_m$ будут удовлетворять свойству TVD. После применения ограничителя возвращаемся к исходным консервативным переменным $\mathbf{U} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{V}$, где \mathbf{R} — матрица правых собственных векторов матрицы \mathbf{A} .

На втором шаге учитываем вязкость и теплопроводность газа, но не учитываем конвекцию. Система уравнений записывается следующим образом:

$$\begin{cases} \mathbf{U}_t + \nabla \cdot \mathbf{T}(\mathbf{U}, \omega) = 0 \\ \omega^T = \nabla \cdot \mathbf{\Omega}^T \end{cases} \quad (4)$$

где $\mathbf{T}(\mathbf{U}, \omega) = [0, -\mathbf{T}_v, -\mathbf{T}_v \cdot \mathbf{v} + \mathbf{q}]$ — тензор вязкости, который зависит от вектора ω , а матрица $\mathbf{\Omega}$ имеет вид:

$$\mathbf{\Omega} = \begin{bmatrix} v_x & 0 & 0 \\ 0 & v_y & 0 \\ 0 & 0 & v_z \\ v_y & v_x & 0 \\ v_z & 0 & v_x \\ 0 & v_z & v_y \end{bmatrix}.$$

Как и на шаге 1, введем линейную аппроксимацию внутри элемента $\mathbf{U}_h = \sum_{i=1}^4 \varphi_i(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{U}_i(t)$, $\omega_h = \sum_{i=1}^4 \varphi_i(\mathbf{x}) \cdot \omega_i(t)$, умножим каждое уравнение системы (4) на базисную функцию φ_i , $i = \overline{1, 4}$. Получим:

$$\begin{aligned} \frac{V}{4} \frac{d\mathbf{U}_i(t)}{dt} &= \int_V \mathbf{T}(\mathbf{U}_h, \omega) \nabla \varphi_i(\mathbf{x}) dV - \int_S \tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{U}_h^{\text{int}}, \omega_h^{\text{int}}, \mathbf{U}_h^{\text{ext}}, \omega_h^{\text{ext}}) \cdot \varphi_i(\mathbf{x}) dS, \\ \omega_i &= \frac{4}{V} \left[\int_S \tilde{\mathbf{\Omega}} \cdot \mathbf{n} \varphi_i(\mathbf{x}) dS - \int_V \mathbf{\Omega} \nabla \varphi_i(\mathbf{x}) dV \right]. \end{aligned}$$

Для поиска численных потоков $\tilde{\mathbf{T}}$ и $\tilde{\mathbf{\Omega}}$ используем центральные потоки:

$$H(a, b) = \frac{1}{2}[H(a) + H(b)].$$

Далее переходим к решению уравнений химической кинетики. Сначала учитываем приток массы i -ого элемента за счёт химических превращений

$$\frac{\partial X_i}{\partial t} = \dot{\omega}_i, \quad X_i = \frac{\rho y_i}{M_i}, \quad \dot{\omega}_i = \frac{\omega_i}{M_i}. \quad (5)$$

Скорости образования i -ого компонента вычисляются с использованием закона действующих масс:

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_1 &= \varphi_{11} + \varphi_{13} + \varphi_{14} + \varphi_{15} + \varphi_{16}, & \varphi_{11} &= 2k_1(K_1 X_4 - X_1^2), \\ \dot{\omega}_2 &= \varphi_{22} + \varphi_{13} - \varphi_{14} - \varphi_{15} + \varphi_{16}, & \varphi_{13} &= k_3(K_3 X_3 - X_1 X_2), \\ \dot{\omega}_3 &= -\varphi_{13} + \varphi_{14} - \varphi_{15}, & \varphi_{14} &= -k_4(K_4 X_1 X_3 - X_2 X_4), \\ \dot{\omega}_6 &= -\varphi_{16}, & \varphi_{15} &= -k_5(K_5 X_1 X_5 - X_2 X_3), \\ & & \varphi_{16} &= -k_6(K_6 X_1 X_2 - X_6 X_7), \\ & & \varphi_{22} &= 2k_2(K_2 X_5 - X_2^2), \end{aligned}$$

где константы скоростей обратных реакций k_i и константы равновесия K_i зависят от температуры [8].

Систему (5) решаем итерационным явно-неявным методом:

$$\mathbf{X}^{n+1} = \tilde{\mathbf{X}}^{n+1} + \left[\mathbf{X}^n - \tilde{\mathbf{X}}^{n+1} + \Delta t (\alpha \dot{\omega}^n + (1 - \alpha) \tilde{\omega}^{n+1}) \right] \cdot \left[\mathbf{I} - (1 - \alpha) \Delta t \left[\frac{\partial \tilde{\omega}^{n+1}}{\partial \mathbf{X}} \right] \right]^{-1},$$

где $\mathbf{X} = [X_1, X_2, X_3, X_6]^T$, $\tilde{\mathbf{X}}$ — промежуточное значение итерационного процесса, Δt — шаг по времени, α — параметр явно-неявной схемы (обычно полагают $\alpha = 0.4$), \mathbf{I} — единичная матрица.

Затем учитываем конвекцию химических компонент:

$$\frac{\partial \rho y_i}{\partial t} + \nabla \cdot \rho y_i \mathbf{v} = 0. \quad (6)$$

Метод RKDG для решения уравнений (6) применяется аналогично описанному алгоритму на шаге 1.

Наконец учитываем диффузию химических компонент:

$$\frac{\partial \rho y_i}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho D_{ij} \nabla y_i). \quad (7)$$

Алгоритм решения методом RKDG уравнений (7) аналогичен описанному алгоритму на шаге 2.

4 Описание разработанного программного комплекса

Разработанные алгоритмы вошли в состав программно-вычислительного комплекса SIGMA, который применяется для моделирования сверхзвуковых и гиперзвуковых газодинамических потоков, определения механических и температурных полей, а также концентраций химических веществ вблизи критических компонент ГЛА. Программный комплекс включает в себя модули: трёхмерного геометрического моделирования, позволяющего генерировать достаточно широкий диапазон трёхмерных геометрических областей, модуль задания свойств, параметров и начальных данных, генератор адаптивной сетки (препроцессор), расчётный модуль (процессор) и визуализатор расчётов (постпроцессор). Каждый модуль является независимым программным продуктом, написанным на языке C++, и поддерживает возможность создания расширений. Большинство итерационных процедур генерации сеток и расчётного модуля обладают геометрическим параллелизмом и реализованы с использованием коммуникационных библиотек OpenMP 2.0 и MPI.

Модуль препроцессора имеет графический интерфейс, позволяющий визуально создавать расчётную область. Область строится из набора исходных гексаэдральных блоков (примитивов) путём их составления и последующего деформирования. Деформирование осуществляется с помощью изменения координат опорных точек геометрии путём их ввода или считывания из файла. Опорные точки геометрии расположены на граничных поверхностях примитивов, образуют поверхностную регулярную сетку узлов, и являются основой для построения линейных или кубических сплайнов поверхностей. Существует возможность генерации криволинейных блоков на основе геометрии поверхностей, импортируемых из программ твердотельного моделирования в формате STL. В этом случае, для построения регулярной сетки опорных точек на импортированной поверхности, реализованы функции генерации точек в заданных сечениях геометрии и вдоль линий между двумя заданными на поверхности точками.

Для генерации сеток используется собственный генератор геометрически-адаптивных сеток [8]. Генератор создаёт неортогональные блочно-структурированные сетки на основе явной формы алгебраических преобразований, которые относятся к лагранжевым координатным преобразованиям методов трансфинитной интерполяции. Имеются функции, позволяющие управлять сгущением узлов сетки вблизи граничных поверхностей блоков. Для некоторых типов криволинейных областей поддерживается возможность построения O-grid блоков подобно одноимённым блокам в коммерческом генераторе ANSYS ICEM CFD.

Сгенерированная гексаэдральная сетка преобразуется в тетраэдральную для применения метода RKDG. Для этого большинство гексаэдральных ячеек разделяется на 5 тетраэдральных элементов. В некоторых исключительных случаях, когда разбиением на 5 тетраэдров не удаётся состыковать соседние элементы, применяется разбиение на 6 тетраэдров. Полученные таким образом тетраэдральные сетки сохраняют адаптацию сеточных линий под границы области и позволяют получать более качественные картины течения, чем на сетках, в которых ребра тетраэдров ориентированы произвольным образом.

Проводилось тестирование программного комплекса на различных тестовых задачах путём сравнения с известными аналитическими и численными решениями, а также с расчётами, полученными коммерческими программными пакетами [8, 9]. Установлено, что в среднем погрешность решения не превышает 2%, на большинстве задач удаётся достигнуть сеточной сходимости результатов.

5 Результаты

Были проведены тестовые расчёты обтекания гиперзвуковым потоком тестовой конструкции при различных значениях числа Маха и на различных высотах полета. Тестовая конструкция представляла собой сплошной алюминиевый шар радиуса $R = 30$ см и коэффициентом поглощения излучения поверхности $\varepsilon = 1$. Ставилась задача определения зависимости спектральной силы излучения тела от длины волны с шагом по длине волны 0.1 мкм в спектральных диапазонах: 1) 0.4 – 0.8 мкм, 2) 2.5 – 5 мкм и 3) 6 – 7 мкм. Расчёты были проведены по следующему алгоритму:

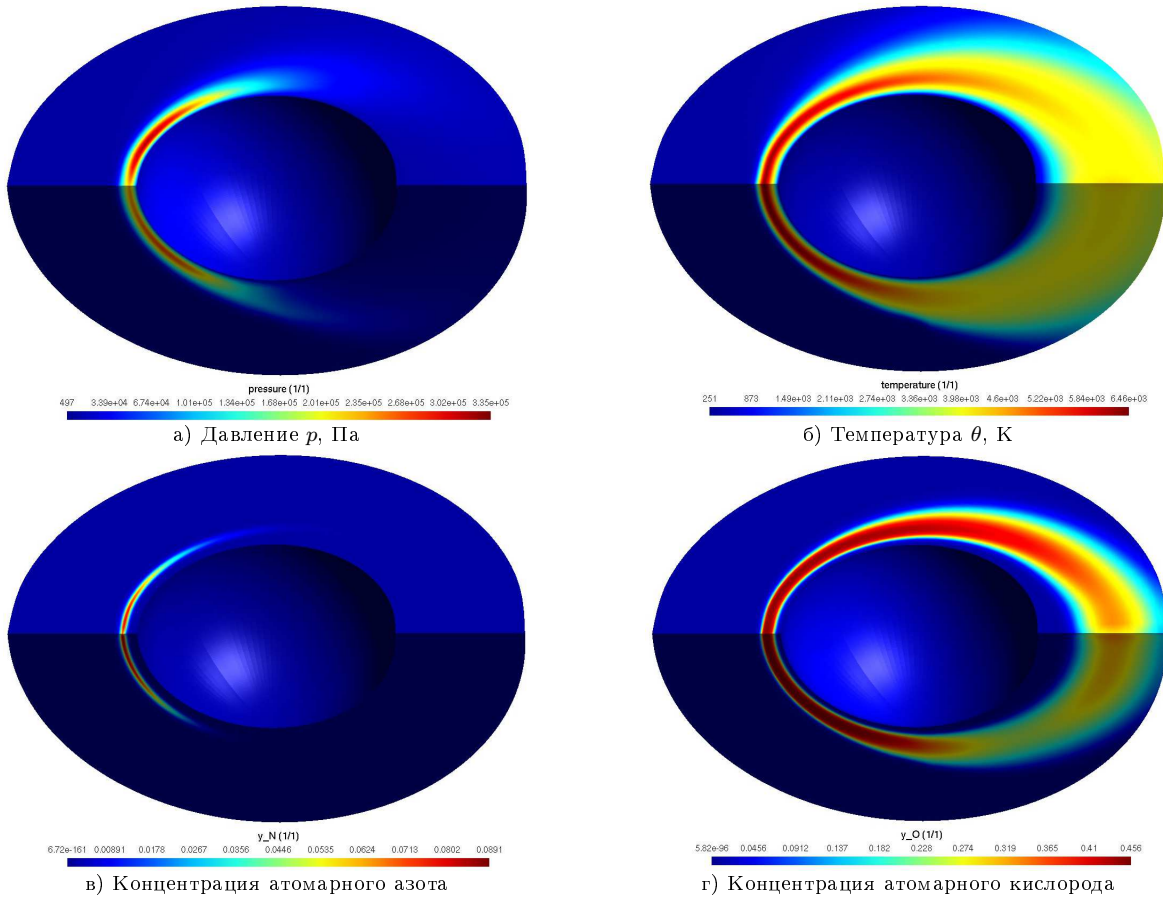


Рис. 1: Распределение параметров газового потока в окрестности поверхности аппарата

1. Для заданной высоты и скорости полета рассчитываются трёхмерные поля газодинамических параметров: температуры θ , давления p плотности ρ , концентраций химических газовых компонентов смеси y_i . По распределению температуры в газовом потоке на установившемся режиме вычисляется коэффициент теплообмена α из условия $-\lambda \nabla \theta = \alpha(\theta_e - \theta_w)$. Далее из условия теплового баланса из уравнения $\alpha(\theta_e - \theta_w) = \varepsilon \sigma \theta_w^4$ находится температура на поверхности сферы. Предполагается, что сфера полностью прогрелась, и тепловой поток внутрь сферы отсутствует.

2. По распределению температуры на поверхности сферы рассчитывается поле спектральной плотности энергетической светимости абсолютно чёрного тела в пределах пространственного угла 2π (полусфера) по формуле Планка:

$$M_{e\lambda}^0(z, r) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp(hc/\lambda k\theta) - 1}, \text{ [Вт/(м}^2 \cdot \text{мкм)]}.$$

3. Вычисляется спектральная плотность потока излучения:

$$\Phi_\lambda = \int_{\Sigma} M_{e\lambda}^0 d\Sigma, \text{ [Вт/мкм]}.$$

4. Вычисляется спектральная плотность силы излучения в пределах телесного угла 2π стер:

$$I_\lambda = \frac{\Phi_\lambda}{2\pi}, \text{ [Вт/(мкм} \cdot \text{стер)]}.$$

На рис. 1 представлены некоторые результаты моделирования для режима с числом Маха ($M = 20$) на высоте $h = 30$ км. Теплозащитный материал конструкции должен выдерживать экстремально высокие температуры вплоть до 6500°K в точке торможения. При таких температурах начинают происходить процессы

диссоциации и ионизации молекулы воздуха. Показано образование вблизи поверхности тела концентраций атомарного азота и кислорода. Пиковые значения длины волны при которых спектральная сила излучения тела максимальна при данном режиме полета приходится на ближнюю инфракрасную часть спектра.

6 Заключение

Разработан численный метод для решения задач неравновесной гиперзвуковой аэрогазодинамики на основе использования полных трёхмерных уравнений Навье–Стокса, дополненных уравнениями химической кинетики и конечно–объёмного метода RKDG. Разработан программный комплекс SIGMA для моделирования сверхзвуковых и гиперзвуковых течений, определения полей механических и температурных напряжений, а также концентраций химических компонент газа в ответственных узлах аэрокосмических летательных аппаратов. SIGMA включает в себя полный набор программ, необходимых для проведения моделирования — от редактора геометрии расчётных областей до визуализатора полученных результатов расчёта. Проведено численное моделирование гиперзвукового обтекания тестовой конфигурации с учётом неравновесных химических реакций, протекающих в газе и на поверхности. Химическая газофазная модель включала все основные компоненты высокотемпературного воздуха для условий полета в атмосфере Земли. Определены спектральные диапазоны максимальной светимости аппарата для различных режимов полета.

Список литературы

- [1] Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен. М.: Мир, 1990. Т. 1, 2.
- [2] Лунев В.В. Гиперзвуковая аэродинамика. М.: Машиностроение, 1975.
- [3] Тирский Г.А. Гиперзвуковая аэродинамика и тепломассообмен спускаемых космических аппаратов и планетных зондов. М.: Физматлит, 2011.
- [4] Cockburn B., Shu Chi-Wang Runge–Kutta Discontinuous Galerkin Methods for Convection-Dominated Problems // Journal of Scientific Computing. 2001. V. 16, iss. 3.
- [5] Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B. Molecular theory of gases and liquids. American Institute of Aeronautics and Astronautics. John Wiley & Sons, Inc. New York, 1954.
- [6] Eleuterio F. Toro Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. Berlin: Springer, 2009.
- [7] Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2012.
- [8] Димитриенко Ю.И., Котенев В.П., Захаров А.А. Метод ленточных адаптивных сеток для численного моделирования в газовой динамике. М.: Физматлит, 2011.
- [9] Коряков М.Н., Захаров А.А., Димитриенко Ю.И. Численное моделирование трёхмерных гиперзвуковых газовых потоков методом RKDG. Тезисы докладов XIV Всероссийской конференции молодых учёных по математическому моделированию и информационным технологиям. Томск, 2013. С. 22.
- [10] Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. Практика суперкомпьютера "Ломоносов". Открытые системы. - Москва: Издательский дом "Открытые системы" № 7, 2012. С. 36-39.

*Юрий Иванович Димитриенко — д.ф.-м.н., проф., зав. кафедрой
Московского государственного технического университета имени Н.Э. Баумана;
Москва, 105005; e-mail: dimit@bmstu.ru;*

*Михаил Николаевич Коряков — ассистент кафедры
Московского государственного технического университета имени Н.Э. Баумана;
Москва, 105005; e-mail: mkoryakov@bmstu.ru;*

*Андрей Алексеевич Захаров — к.ф.-м.н., доц. кафедры
Московского государственного технического университета имени Н.Э. Баумана;
Москва, 105005; e-mail: azaharov@bmstu.ru.*

Дата поступления — 31 августа 2015

Труды Международной конференции
"АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ – 2015",
посвященной 90-летию со дня рождения
академика Гурия Ивановича Марчука

Ответственные за выпуск:
А. В. Пененко, М. А. Боронина

Компьютерная верстка *О. Г. Заварзина*

Подписано к печати 9.10.2015. Формат 60×84, 1/8.
Усл. печ. л. 106,2. Уч. изд. л. 72,9.