

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)»

На правах рукописи



Грибиненко Дмитрий Валерьевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОБМЕНА В
ТЕРМОХИМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПОТОКАХ ПРИ ПОЛЁТЕ
ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ**

1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
доктор технических наук, профессор
Молчанов Александр Михайлович

Москва – 2022

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	6
ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ	14
Выводы по главе.....	22
ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ.....	23
2.1 Основные уравнения, описывающие течение вязкого химически реагирующего колебательно неравновесного газа	23
2.2 Колебательная энергия	25
2.3 Внутренняя энергия. Энтальпия.	27
2.4 Термодинамическая энергия. Уравнение сохранения термодинамической энергии.....	28
2.5 Вязкие напряжения, тепловые/диффузионные потоки	29
2.6 Химическая кинетика	31
2.6.1 Общие понятия	31
2.6.2 Реакции горения водорода в воздухе	32
2.6.3 Кинетика реакций при гиперзвуковом входе спускаемого аппарата в атмосферу Земли	36
2.7 Моделирование турбулентности	38
2.8 Влияние турбулентности на скорости химических реакций.....	39
2.8.1 Модель диссипации вихря.....	39
2.8.2 Концепция диссипации вихря.....	40
Выводы по главе.....	40
ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД.....	42
3.1 Векторная форма	42
3.2 Конечно-объёмное представление	43
3.3 Расщепление невязкого потока.....	44
3.4 Матрица Якоби А	46
3.5 Конечно-объёмное уравнение, учитывающее только невязкие члены	47
3.6 Вязкие потоки	51

3.7 Конечно-объемное уравнение, учитывающее только вязкие члены	54
3.8 Решение системы алгебраических уравнений с разреженной матрицей	56
3.9 Численный метод решения системы уравнений с ненулевыми жесткими источниками.....	59
3.9.1 Общее представление	59
3.9.2 Матрицы Якоби для вязких и невязких потоков	61
3.9.3 Расщепление по физическим процессам	62
3.9.4 Полностью связанная схема 1	63
3.9.5 Полностью связанная схема 2	66
3.9.6 Тестирование схемы.....	66
Выводы по главе.....	69
ГЛАВА 4. ПРИМЕНЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММНОГО КОДА UNIVERSE3D	
4.1 Особенности современных вычислительных систем.....	71
4.2 Общая архитектура и алгоритм работы программного кода Universe3D	74
4.2.1 Загрузка расчётной сетки	74
4.2.2 Задание начального распределения искомых величин	76
4.2.3 Задание граничных условий.....	76
4.2.4 Заполнение матрицы коэффициентов и вектора источников.....	77
4.2.5 Решение системы уравнений	78
4.2.6 Обновление значений искомых величин в расчётной области	78
4.2.7 Проверка условий сходимости	78
4.2.7 Вывод результатов	78
4.3 Параллельные вычисления.....	78
4.3.1 Закон Амдала	79
4.3.2 Технология MPI.....	80
4.3.3 Соккрытие задержек обмена данными	82
4.3.4 Сильная и слабая масштабируемость	82
4.4 Особенности параллельной реализации программного кода Universe3D	83

4.4.1 Параллельная реализация скалярных и векторных полей	84
4.4.2 Параллельные реализации матрицы и вектора	85
4.4.3 Загрузка расчётной сетки	85
4.4.4 Задание начального распределения искомых величин.	86
4.4.5 Задание граничных условий.....	86
4.4.6 Заполнение матрицы коэффициентов и вектора источников.....	87
4.4.7 Решение системы уравнений	87
4.4.8 Обновление значений искомых величин в расчётной области	88
4.4.9 Проверка условий сходимости	88
4.4.10 Вывод результатов	88
4.5 Сильная масштабируемость программного кода Universe3D	88
Выводы по главе.....	89
ГЛАВА 5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ.....	90
5.1 Обтекание спускаемого аппарата OREX	90
5.1.1 Спускаемый аппарат OREX	90
5.1.2 Исходные данные	91
5.1.3 Результаты расчётов.....	92
5.1.4 Выводы	104
5.2 Обтекание сферы диаметром 1 см высокоскоростным потоком газа с различными числами Маха	105
5.2.1 Исходные данные	106
5.2.2 Результаты расчётов.....	106
5.2.3 Выводы	109
5.3 Течение в донной области ЛА	110
5.3.1 Исходные данные	111
5.3.2 Результаты расчётов.....	111
5.3.3 Выводы	113
5.4 Горение водорода в канале. Эксперимент Барроуса-Куркова	113
5.4.1 Исходные данные	113

5.4.2 Результаты расчётов.....	114
5.4.3 Выводы	117
5.5 Модельный прямоточный воздушно-реактивный двигатель (ПВРД).....	117
5.5.1 Исходные данные	117
5.5.2 Модельный ПВРД	118
5.5.3 Расчётная сетка.....	119
5.5.4 Граничные условия	120
5.5.5 Результаты численного исследования влияния модели химической кинетики на воспламенение горючего в камере сгорания ПВРД	121
5.5.6 Результаты численного исследования влияния полуугла сверхзвукового диффузора на воспламенение горючего в камере сгорания ПВРД	126
5.5.7 Расчёт удельного импульса.....	131
5.5.8 Выводы	133
5.6 Рабочий процесс в прямоточном двигателе гипотетического космического летательного аппарата, предназначенного для работы в атмосфере Юпитера	134
5.6.1 Схема течения и исходные данные	134
5.6.2 Результаты расчётов.....	136
5.6.3 Выводы	149
Выводы по главе.....	149
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	150
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	151

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы и степень её разработанности

Развитие авиационно-космической техники поставило перед наукой множество фундаментальных и прикладных задач. К фундаментальным задачам можно отнести необходимость рассмотрения процессов термодинамической неравновесности: неравновесных химических реакций, теплового дисбаланса между разными степенями свободы молекул газа, а также сложного неравновесного взаимодействия различных физико-химических процессов. К прикладным задачам относятся задачи технического характера, направленные на обеспечение высокой эффективности и надёжности разрабатываемой авиационно-космической техники.

Одним из самых перспективных направлений развития авиационно-космической техники является создание высокоскоростных летательных аппаратов. Для создания такого класса техники необходимо решить ряд проблем, среди которых:

- проблема создания мощных двигательных установок, в том числе сверхзвуковых реактивных двигателей, с организацией процесса горения в сверхзвуковом потоке воздуха. Сверхзвуковое течение газа в таких двигателях имеет сложную волновую структуру с огромными перепадами газодинамических параметров (давления, температуры и т.п.). Важнейшую роль играют процессы турбулентного смешения и неравновесной химической кинетики горения топлив. В камере сгорания должно происходить воспламенение горючего вследствие его смешения с воздухом, нагретым и сжатым во входном устройстве.

- проблема движения высокоскоростных летательных аппаратов в плотных слоях атмосферы при гиперзвуковых скоростях, а также проблема входа космических аппаратов в атмосферу планеты. Диссоциация и ионизация воздуха вызванные повышением температуры не позволяет рассматривать его в качестве

идеального газа с постоянной теплоёмкостью при проведении расчётов тепломассообмена и аэродинамики. Также становится необходимым учёт термической неравновесности.

Так как проведение натуральных экспериментов при решении данных проблем сопряжено с огромными финансовыми затратами и техническими сложностями, всё большую роль начинает играть проведение численных экспериментов. Одной из самых актуальных задач становится задача создания расчётных моделей позволяющих проводить моделирование высокоэнергетических течений с неравновесными физико-химическими процессами. Также актуальной является задача реализации данных расчётных моделей в компьютерном коде с применением параллельных вычислений, что позволяет решать большие по объёму задачи со сложной геометрией и высокими требованиями к точности расчёта за приемлемое время.

Цель диссертационной работы заключается в построении математической модели, описывающей физико-химические процессы, протекающие в термохимически неравновесных потоках возникающих при полёте высокоскоростных ЛА, разработке численного метода, реализующего данную модель, разработке программной реализации данного численного метода с применением параллельных вычислений для проведения численных исследований.

Основные задачи диссертационной работы:

- Построение математической модели тепломассообмена в нестационарных, вязких, химически реагирующих, термохимически неравновесных течениях;
- Построение численного метода решения системы уравнений газовой динамики, химической кинетики и энергетических переходов на неструктурированной сетке;
- Реализация построенного численного метода в программном коде с использованием параллельных вычислений;

- Валидация численного метода путём сравнения результатов численного моделирования с экспериментальными данными;
- Проведение численных исследований высокоскоростных течений с помощью разработанного программного кода Universe3D;
- Выполнение сравнительного анализа реализованных математических моделей учёта физико-химических процессов в высокотемпературном газе.

Объектом исследования являются высокоэнергетические термохимически неравновесные потоки, возникающие при полёте ЛА на больших скоростях.

Предметом исследования являются процессы теплообмена и газовой динамики в термохимически неравновесных потоках.

Методология исследования основана на проведении численного решения осредненной по Рейнольдсу системы уравнений Навье-Стокса. Для преодоления проблемы жесткости системы уравнений применяется специально разработанный численный метод.

Научная новизна работы:

1. Построена математическая модель теплообмена в нестационарных, вязких, химически реагирующих, термохимически неравновесных течениях.
2. Построен численный метод решения системы уравнений газовой динамики, химической кинетики и энергетических переходов на неструктурированной сетке.
3. Разработан новый эффективный полностью связанный численный метод решения уравнений движения химически и термически неравновесного газа с жесткими источниками.
4. На основе построенного численного метода реализован новый компьютерный код на языке Фортран с применением параллельных вычислений, позволяющий проводить расчёт теплообмена в термохимически неравновесных течениях.

5. Выработаны методические рекомендации по организации параллельных вычислений при численном решении уравнений механики сплошной среды, направленные на ускорение расчётов.
6. Проведена валидация численного метода путём сравнения результатов численного моделирования с экспериментальными данными и результатами расчётов других авторов.
7. Проведено численное исследование высокоскоростных течений с помощью разработанного компьютерного кода Universe3D. Выполнен сравнительный анализ реализованных математических моделей учёта физико-химических процессов в высокотемпературном газе.
8. Разработана схема двигателя и рекомендации по созданию двигателя для полетов в атмосфере Юпитера.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая значимость работы заключается в создании математической модели, позволяющей с высокой точностью проводить расчёт процессов теплообмена в термодинамически неравновесных потоках.

Практическая значимость работы состоит в том, что разработанный с применением параллельных вычислений компьютерный код Universe3D может быть использован для решения широкого круга возникающих при расчёте высокоскоростных летательных аппаратов задач с высокой точностью и за приемлемое время.

Положения, выносимые на защиту:

1. Метод расчёта теплообмена в нестационарных, вязких, химически реагирующих, термодинамически неравновесных течениях. Сопоставление результатов расчётов с данными экспериментальных исследований высокоскоростных течений.
2. Численный метод решения уравнений движения химически и термически неравновесного газа с жёсткими источниками.

3. Рекомендации по созданию гиперзвукового прямоточного двигателя для полетов в атмосфере Юпитера.

Рекомендации по внедрению

Разработанный программный комплекс Universe3D рекомендуется для использования в учебном процессе как альтернатива зарубежных аналогов (Ansys и т.п.), а также для проведения практических расчётов при создании изделий новой техники.

Степень достоверности результатов

Достоверность научных положений подтверждается использованием законов сохранения массы химических компонентов, количества движения и энергии, теории численных методов; всесторонним тестированием разработанных численных методов и алгоритмов, исследованием устойчивости и сходимости решений на последовательности сгущающихся сеток; сравнением результатов расчётов с экспериментальными данными и результатами расчётов тестовых задач другими авторами.

Личный вклад автора

При выполнении диссертационной работы автор принимал непосредственное участие в получении следующих результатов:

- Разработка метода расчёта тепломассообмена в нестационарных, вязких, химически реагирующих, термодинамически неравновесных течениях;
- Сопоставление результатов расчётов с данными экспериментальных исследований высокоскоростных течений;
- Участие в создании численного метода решения уравнений движения химически и термически неравновесного газа с жёсткими источниками;
- Создания высокопроизводительной и масштабируемой по объёму задачи и числу процессорных ядер программной реализации предложенного численного метода;

- Реализации программного кода Universe3D с использованием параллельных вычислений и с учётом особенностей современных вычислительных систем.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на международных и всероссийских научных конференциях:

- XIII Международная конференция по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (АММАИ'2020), 6–13 сентября 2020 г., Алушта;
- III Международная конференция «Современные проблемы теплофизики и энергетики», 19–23 октября 2020 г., Москва;
- II Международная конференция «Математическое моделирование», 21-22 июля 2021 г., Москва;
- XXII Международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2021), 4–13 сентября 2021 г., Алушта;
- VIII Международная конференция «Тепломассообмен и гидродинамика в закрученных потоках», 18-21 октября 2021 г., Москва.

Публикации по теме диссертации

По теме диссертации опубликовано 8 работ [194-201], из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 3 работы [194-196].

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Объём представленной работы составляет 171 лист, включая 101 рисунок и 19 таблицы. Список литературы содержит 201 наименование.

Краткое содержание работы

Во введении показана актуальность и практическая значимость работы, формулируются цель и задачи исследования.

В первой главе проведён анализ развития моделей вычислительной гидродинамики и теплообмена в термодинамически неравновесных потоках. Описан механизм возникновения физико-химических процессов и влияние на параметры потока в двигателях летательных аппаратов и при входе космического корабля в атмосферу. Выделены основные направления и проблемы в области разработки инструментов численного моделирования гиперзвуковых течений. Приведены основные математические модели турбулентного горения.

Во второй главе представлены основные уравнения, описывающие течение вязкого химически реагирующего колебательно неравновесного газа. Рассмотрены вопросы, связанные с колебательной релаксацией. Проанализированы основные составляющие полной энергии в химико/термодинамически неравновесных потоках. Введено понятие термодинамической энергии и выведено уравнение ее сохранения. Представлены формулы для вязких напряжений и тепловых/диффузионных потоков. Проанализированы основные реакции горения водорода и окиси углерода в воздухе и кинетика реакций при гиперзвуковом входе спускаемого аппарата в атмосферу Земли. Представлена методика учёта влияния турбулентности на скорости химических реакций.

В третьей главе формулируется численный метод решения систем уравнений газовой динамики, химической кинетики и энергетических мод. Описаны основные методы расщепления невязкого потока. Получено конечно-объёмное уравнение, учитывающее невязкие члены и вязкие потоки. Описаны методы решения системы алгебраических уравнений с разреженной матрицей. Разработан численный метод решения системы уравнений с ненулевыми жёсткими источниками.

В четвёртой главе проведён анализ современных особенностей вычислительных систем и видов взаимодействия при реализации параллельных вычислений. Описаны архитектурные решения, применённые в последовательной версии программного кода Universe3D, учитывающие современные особенности вычислительных систем. Описаны основные отличия параллельной версии

программного кода Universe3D от последовательной. Проведён расчёт сильной масштабируемости параллельной версии программного кода Universe3D.

В пятой главе с помощью разработанного программного кода Universe3D, реализующего разработанный и описанный в предыдущих главах метод расчёта тепломассообмена в нестационарных, вязких, химически реагирующих, термохимически неравновесных течениях, было решено несколько практических задач и выработаны практические рекомендации по совершенствованию изделий новой техники.

В заключении формулируются основные выводы, полученные в проведённых численных исследованиях диссертации.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

В диссертации рассматриваются высокотемпературные потоки, высокоскоростные потоки и/или потоки с протеканием химических реакций и реакций ионизации. Такие течения будем в дальнейшем называть *высокоэнтальпийными*.

В авиационной и ракетно-космической технике чаще всего приходится иметь дело с комбинацией всех трех особенностей течения. Например, в двигателях летательных аппаратов (ЛА) происходят химические реакции с интенсивным тепловыделением, имеют место высокие температуры и высокие скорости потока в сопле и выхлопной струе.

При входе летательных аппаратов в атмосферу при гиперзвуковых скоростях происходит мощнейшее тепловыделение за счет торможения потока, происходят химические реакции диссоциации и ионизации.

Исследование высокоэнтальпийных потоков важно и при решении таких актуальных задач, как энергетика, лазерная и химическая технология, а также защита окружающей среды от вредных выбросов в атмосферу.

Если обратиться к истории, то необходимо отметить, что с развитием техники повышались требования к математическим моделям, описывающим течение высокоэнтальпийного потока. Вначале ученые занимались изучением наиболее простой среды – совершенного газа, т.е. газа с постоянным составом и постоянной теплоемкостью. По мере усложнения задач, особенно с появлением ракетно-космической техники, потребовалось учитывать химические реакции и переменность состава газа, а также возможную многофазность течений. При этом предполагалось, что химические реакции находятся в равновесии, а между различными фазами наблюдается термическое и динамическое равновесие. Однако в дальнейшем характерные времена исследуемых процессов стали сравнимы с временем протекания реакций, и, как следствие, возникла

необходимость учета неравновесности химических реакций.

А в последние десятилетия такие задачи, как исследование течений в сильных ударных волнах и в расширяющиеся гиперзвуковых потоках, потребовало отказа от фундаментального представления о термическом равновесии между различными степенями свободы молекул газа.

В работе [1] показано, что при температурах 1000 К характерные времена отдельных релаксационных процессов в молекулярном газе располагаются в следующей иерархии:

$$\tau_{TT} < \tau_{RT} \ll \tau_{VV} \ll \tau_{TV} \ll \tau_{Ch} \ll \tau_J, \quad (1.1)$$

Где $\tau_{TT}, \tau_{RT}, \tau_{TV}, \tau_J$ - характерные времена установления равновесия по поступательным (ТТ-обмен), вращательным (РТ-обмен), колебательным (VT-обмен) и электронным степеням свободы, τ_{VV} - характерное время колебательного обмена между молекулами (VV-обмен), τ_{Ch} - характерное время химических превращений.

Химические реакции можно разделить на быстрые двухмолекулярные реакции (например, реакции обмена) и медленные реакции с третьим телом (например, реакции диссоциации).

В работах [2-9] показано, что при решении большинства практических задач можно считать, что вращательные энергетические моды находятся в равновесии с поступательными, и они определяются единой поступательно-вращательной температурой T_r . Это утверждение относится как к задаче о течении за сильным скачком уплотнения [2-4], так и к задаче о течении сильно расширяющего сверхзвукового потока [5-9].

Изучению термически неравновесных потоков посвящено немало научных работ. Кроме вышеупомянутых, это работа Хоува и др. (1964) [10], серия работ, выполненных в Институте Физики Белорусской Академии Наук под руководством Ю.В. Ходыко (1978-1997) [11-15], работы Пластинина Ю.А. и др.

(1969-2007) [16-22], работы С.А. Лосева, С.Т. Суржикова и др. (1995-2011) [23-28], работы А.К. Реброва и др. (1982-1984) [29-30].

Моделирование высокоэнтальпийных потоков с неравновесными физико-химическими процессами представляет сложнейшую задачу, как с точки зрения математического моделирования процессов, проходящих в этих потоках, так и с точки зрения численного решения уравнений, входящих в эту модель.

Если учесть все реакции, проходящие в двигателях ЛА или сжатом слое спускаемого аппарата, а также все энергетические переходы, то получится система из нескольких сотен уравнений в частных производных.

Кроме чисто количественных проблем, существуют и принципиальные проблемы численного решения подобных систем.

Во-первых, высокоэнтальпийные гиперзвуковые потоки имеют сложную волновую структуру и мощные скачки уплотнения; решение таких задач требуют разработки специальных численных методов.

Во-вторых, уравнения сохранения химических компонентов и уравнения энергии различных колебательных мод содержат источники, что с математической точки зрения порождает проблему *жесткости* системы уравнений. Напомню, что под жесткостью системы уравнений подразумевается ситуация, когда имеется большой разброс собственных значений матрицы системы (в 100 раз и больше). Это происходит, когда система описывает несколько процессов, которые имеют сильно отличающиеся характерные времена. Наиболее быстрый процесс имеет наибольшее (по модулю) собственное значение и вынуждает выбирать очень мелкий шаг по времени и, одновременно, быстро перестает влиять на решение.

Как можно понять из определения, термически и химически неравновесные потоки обладают именно такими свойствами.

Решение такой системы уравнений требует привлечение огромных компьютерных ресурсов, как с точки зрения оперативной и жесткой памяти, так и с точки зрения времени проведения расчёта. Вряд ли такой подход годится при

проектировании изделий новой техники, когда требуется проводить очень большое количество расчётов для отладки системы, для выбора оптимальной конструкции или технологического решения.

При проектировании авиационно-космической техники особую роль занимает численное моделирование. Проведение натурных экспериментов связано с огромными затратами материальных и временных ресурсов, при этом результаты натурных экспериментов имеют ограниченную применимость особенно во время перебора различных вариантов конструкции изделия.

Использование численного моделирования при проектировании и доводке изделий авиационно-космической техники позволяет в разы сократить потребность в натурных экспериментах, а также применить различные алгоритмы оптимизации для нахождения оптимального варианта конструкции изделия в полуавтоматическом режиме. Так, например численное моделирование применялось при разработке посадочных модулей Galileo [31], MarsPathfinder [32,33], Stardust [34,35,36] и других.

Несмотря на то, что численное моделирование позволяет значительно упростить проектирование высокоскоростной авиационно-космической техники, оно тоже имеет свои трудности при моделировании течений с высокими числами Маха, к которым можно отнести численную неустойчивость в области ударных волн [37-39].

Кроме того, несмотря на значительное развитие за последние годы вычислительной техники, численное моделирование высокоскоростных течений всё ещё представляет серьёзную проблему в плане огромных вычислительных ресурсов необходимых для решения реальных задач. Так, например для моделирования горения в канале сложной формы с высокой точностью, необходима трёхмерная сетка, количество ячеек в которой может достигать нескольких сотен миллионов. При этом для подробных механизмов горения углеводородных топлив количество реакций может быть больше сотни. Также для обеспечения высокой точности приходится применять специальные методы

решения задачи Римана [42-47], которые имеют гораздо большую вычислительную сложность по сравнению с упрощёнными методами, а для учёта процессов происходящих в высокоэнтальпийных потоках включать в решение дополнительные уравнения [48-53]. Подобные задачи возможно решать только на вычислительных кластерах, включающих несколько десятков, а то и сотен вычислительных узлов. Для работы вычислительной программы на таких кластерах она должна быть написана особым образом с применением параллельных вычислений.

Для снижения требований к вычислительным ресурсам и ускорения расчётов, были разработаны вычислительные алгоритмы использующие неявные методы [54-70], при использовании которых решение задачи «сходится» значительно быстрее, чем при использовании явных методов.

Важнейшей задачей моделирования высокоэнтальпийных потоков является создание модели турбулентности, учитывающей наиболее важные особенности этих потоков.

Процессы горения включают в себя высоконелинейные химические реакции с большим количеством химических компонентов. Данные реакции могут увеличивать градиент концентрации химических компонентов и, следовательно, изменять микросмешение (молекулярное смешение), что в свою очередь влияет на сами реакции. В турбулентном потоке эти процессы могут быть слабо или сильно связаны с турбулентностью. В частности, турбулентность увеличивает смешение и, следовательно, усиливает горение [71]. В свою очередь, горение может усилить турбулентность за счёт расширения потока [71]. В результате турбулентные флуктуации могут быть очень большими [72]. Горение также может ослабить турбулентность за счёт увеличения вязкости жидкости. Кроме того, градиенты давления и плотности могут достигать таких уровней и выравниваться таким образом, чтобы создавать или ослаблять турбулентность посредством бароклинности. Все эти явления называются турбулентным горением. Далее в главе проведён обзор литературы на тему турбулентного

горения, его моделирования, а также особенностей горения в высокоскоростном потоке.

В двигательных установках турбулентное горение имеет описанные далее особенности. В газотурбинных двигателях углеводородное топливо впрыскивается в камеру сгорания [73]. Топливо испаряется, а затем сгорает таким образом, что режим горения трудно классифицировать как кинетическое горение (горение предварительно смешанной смеси) или диффузионное горение (горение не смешанной, неоднородной смеси). Данный режим горения обычно классифицируют как горение частично смешанной смеси [73]. Более того, в таких двигателях встречаются потоки топлива и воздуха, смешивающиеся и реагирующие друг с другом в зоне рециркуляции, продукты сгорания из которой продолжают гореть ниже по потоку перемешиваясь с воздухом, подаваемым через вторичные отверстия. [73,74]. Такие многопоточные течения также присутствуют и в форсажных камерах [74,75]. Форсажные камеры должны функционировать в широком диапазоне рабочих режимов, от взлёта до ускорения на большой высоте [76], что создаёт значительные сложности при решении задачи стабилизации горения и предотвращения срыва пламени. Данная задача также важна для ГПВРД, где решение этой задачи ещё более затруднительно, так как окружающий поток является сверхзвуковым, и стабилизация пламени происходит лишь в небольших дозвуковых областях [77,78]. Поскольку срыв пламени в полёте чрезвычайно опасен, особую важность имеет разработка систем зажигания, которые способны стабилизировать горение, таких как, плазменно-индукционные системы [79]. Кроме того, широкий диапазон рабочих режимов, в которых работают форсажные камеры и прямоточные двигатели, делают их подверженными потенциально опасным термоакустическим неустойчивостям горения [80]. Другая особенность условий горения в таких устройствах как газотурбинные двигатели, форсажные камеры и ГПВРД, заключается в том, что горение происходит вблизи режима или в режиме распределённых зон реакции. Такие режимы горения также имеют место в других энергетических установках,

например в промышленных газовых турбинах с предварительным смешением топлива [81]. Кроме того, высокие скорости могут привести к сжатию или расширению потока, сравнимому с эффектом от тепловыделения при сгорании топлива. Эти процессы наглядно иллюстрируются взаимодействием пламени и скачков уплотнения в ГПВРД. При моделировании двигательных установок работающих в широком диапазоне рабочих режимов, таких как двухрежимный ПВРД [77,82,83], необходимо учитывать физические явления, которые могут присутствовать не на всех режимах, как например явление взаимодействия пламени и скачков уплотнения, которое присутствует в ГПВРД, но отсутствует в ПВРД.

Приведённые выше примеры демонстрируют, что условия горения в двигательных установках включают в себя некоторые или все из следующих физических явлений: многофазные явления [84,85]; частичное предварительное смешение [86]; многопоточные течения; затухание пламени, повторное воспламенение и выброс [87,89]; воспламенение [90,91]; взаимодействие пламени со стенкой [92]; термоакустические неустойчивости горения [93]; горение с распределёнными зонами реакции [94,95]; взаимодействие между горением и сильным сжатием или расширением потока [96,97], а также явления, не упомянутые выше, такие как транскритические и сверхкритические явления в ракетных двигателях, взаимодействия турбулентности и излучения [98,99] и термическая неравновесность [100]. Среди всех этих явлений, для моделирования ГПВРД, наибольший интерес представляют два: горение с распределёнными зонами реакции и взаимодействие между горением и сильным сжатием или расширением потока.

Физические явления описанные выше охватывают широкий диапазон пространственно-временных масштабов, начиная от масштаба молекулярных взаимодействий, заканчивая масштабом соответствующим наибольшим структурам в потоке. Моделирование данных физических явлений связано с решением двух вопросов. Первый из них: как в рамках механики сплошных сред

моделировать молекулярные взаимодействия, при этом оставаясь в рамках адекватной вычислительной сложности? Как только этот первый вопрос будет решён, можно решить второй: как в рамках механики сплошных сред моделировать взаимодействие между турбулентностью, химией и другими явлениями, такими как испарение капель и сильные сжатие и расширение потока, при этом оставаясь в рамках адекватной вычислительной сложности? Для решения этого второго вопроса доступны различные методы, такие как:

- Уравнения Рейнольдса (Осреднённые по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса), (Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (RANS)) [101];
- Моделирование больших вихрей, (Large-Eddy Simulations (LES)) [102];
- Detached-Eddy Simulations (DES) [103];
- Scale-Adaptive Simulations (SAS) [104] (которые могут быть классифицированы как разновидность RANS);
- Partially-Averaged-Navier-Stokes model [105];
- Partially-Integrated-Transport model [106];
- Temporally-and-Partially-Integrated-Transport model.

С помощью этих методов проблема решения второго вопроса может быть преобразована в проблему моделирования ряда незамкнутых членов в модельных уравнениях сохранения. Самыми популярными являются два метода: RANS и LES. Независимо от того, как решается проблема замыкания, центральной моделью является та, которая аппроксимирует взаимодействие между турбулентностью и химией. Такая модель называется моделью турбулентного горения.

Существует множество моделей турбулентного горения. Частичный список включает в себя:

- Flamelet models [71,107-109];
- Conditional moment closure [110,111];
- Conditional source estimation [112-114];

- Transported probability density function (TPDF) [115-118];
- Linear-Eddy Model (LEM) [119,120];
- One-dimensional-turbulence (ODT) model [121,122];
- Eddy-Dissipation-Concept (EDC) model [123];
- Partially-Stirred-Reactor (PaSR) model [124,125];
- Thickened-flame model [126-128];
- Homogenization-based LES [129];
- Unsteady flame embedding [130];
- Data-driven turbulent combustion models [131,132];

Литература по моделям турбулентного горения обширна. Она включает книги [71,133-135] и общие обзорные статьи [72,136-141], а также обзоры, посвящённые конкретным темам: LES [142-144]; горение предварительно смешанных смесей [145]; горение частично смешанных смесей [146]; газотурбинные двигатели [146,147]; поршневые двигатели [148]; двигательные установки [149-153]. Большая часть этой литературы посвящена горению в низкоскоростных потоках, что не удивительно, учитывая, что такой вид горения реализуется в большинстве двигательных установок. Для создания перспективных двигательных установок намного больший интерес представляет горение в высокоскоростных потоках.

Выводы по главе

Проведён анализ развития моделей вычислительной гидродинамики и теплообмена в термодинамически неравновесных потоках. Описан механизм возникновения физико-химических процессов и влияние на параметры потока в двигателях летательных аппаратов и при входе космического корабля в атмосферу. Выделены основные направления и проблемы в области разработки инструментов численного моделирования гиперзвуковых течений. Приведены основные математические модели турбулентного горения.

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

2.1 Основные уравнения, описывающие течение вязкого химически реагирующего колебательно неравновесного газа

В декартовой системе координат с использованием нотации Эйнштейна основные уравнения включают [154]:

1) Уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0, \quad (2.1)$$

где ρ - плотность газовой смеси; x_1, x_2, x_3 - 3 компоненты радиуса-вектора; u_1, u_2, u_3 - компоненты вектора скорости \mathbf{V} .

2) Уравнение сохранения количества движения

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + \delta_{ji} p - \tau_{ij}) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.2)$$

где p - давление; τ_{ij} - тензор вязких напряжений.

3) Уравнение сохранения полной энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j (\rho E + p) + q_j - u_i \tau_{ij}] = 0, \quad (2.3)$$

где E - полная энергия, содержащая в единице массы газовой смеси; q_j - плотность теплового потока в j -ом направлении.

4) Уравнения сохранения химических компонентов

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho C_s u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} (g_{s,j}) + \dot{w}_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_c - 1, \quad (2.4)$$

где $C_s = \rho_s / \rho$ - массовая доля компонента s ; $g_{s,j} = \rho_s V_{s,j}$ - диффузионный поток; \dot{w}_s - скорость образования компонента s в результате химических реакций; N_c - число компонентов в газовой смеси. Здесь: ρ_s - парциальная плотность компонента s ; $V_{s,j}$ - диффузионная скорость компонента s .

5) Уравнения сохранения колебательных энергий

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E_{v,m}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j E_{v,m} + q_{v,m,j}) = \rho \dot{E}_{v,m}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M, \quad (2.5)$$

где $E_{v,m}$ - колебательная энергия m -ой колебательной моды, содержащая в единице массы газовой смеси; $\rho \dot{E}_{v,m}$ - источник колебательной энергии, обусловленный всеми процессами энергообмена; $q_{v,m,j}$ - плотность колебательного теплового потока; N_M - число колебательных мод.

Статическое давление определяется как сумма парциальных давлений компонентов:

$$p = \sum_{s=1, s \neq e}^{N_C} \rho_s \frac{R}{M_s} T, \quad (2.6)$$

где T – поступательно-вращательная температура (предполагается, что поступательная и вращательные энергетические моды находятся в равновесии между собой).

Полная энергия газовой смеси включает 7 составляющих: энергия поступательного движения молекул, энергия поступательного движения электронов, вращательная энергия, колебательная энергия, энергия электронного возбуждения молекул, химическая энергия компонентов, кинетическая энергия направленного движения. В данной работе энергия поступательного движения электронов и энергия электронного возбуждения молекул считаются пренебрежимо малыми.

Таким образом, для единицы объёма имеем:

$$\rho E = \frac{3}{2} kT \sum_{s=1}^{N_C} n_s + \frac{i_{R,s}}{2} kT \sum_{s=1}^{N_C} n_s + \sum_m^{N_M} \varepsilon_{v,m} n_m + \sum_s^{N_C} \rho_s h_s^0 + \rho \frac{u_i u_i}{2} \quad (2.7)$$

Здесь: k - постоянная Больцмана; n_s - концентрация молекул (количество частиц компонента s в единице объема); N_C - число компонентов газовой смеси; $\varepsilon_{v,m}$ - колебательная энергия молекулы, относящаяся к m -ой колебательной моде;

n_m - концентрация молекул, обладающих m -ой колебательной модой; N_M - число колебательных мод; h_s^0 - теплота образования химического компонента s .

Здесь предполагается, что вращательная энергия молекул $\varepsilon_{R,s}$ связана с единой температурой T как:

$$\varepsilon_{R,s} = \frac{i_{R,s}}{2} kT \quad (2.8)$$

Здесь $i_{R,s}$ - число вращательных степеней свободы молекулы s ; у одноатомных молекул $i_{R,s}=0$, у двухатомных и линейных многоатомных молекул $i_{R,s}=2$, у многоатомных нелинейных молекул (число атомов > 2) - $i_{R,s}=3$.

Здесь используется допущение о термическом равновесии между поступательной и вращательной энергией, т.е. $T = T_R$.

Иногда удобно использовать парциальную плотность компонента ρ_s , для которой справедливо следующее соотношение:

$$kn_s = R_s \rho_s = \frac{R}{M_s} \rho_s, \quad (2.9)$$

где R - универсальная газовая постоянная; R_s - газовая постоянная компонента s ; M_s - молярная масса компонента s .

Система уравнений (2.1)-(2.6) не является замкнутой. В неё входят неизвестные параметры, определению которых посвящены последующие разделы диссертации.

2.2 Колебательная энергия

Для колебательной энергии обычно используется модель гармонического осциллятора.

При использовании этой модели среднее число m -ых колебательных квантов α_m , приходящихся на одну молекулу, определяется формулой

$$\alpha_m = r_m \frac{1}{\exp(\theta_m / T_{V,m}) - 1} \quad (2.10)$$

где θ_m - характеристическая колебательная температура m -ой колебательной моды; $T_{v,m}$ - соответствующая колебательная температура; r_m - кратность вырождения m -ой моды молекулы.

Кратностью вырождения называется число различных состояний квантовой физической системы, имеющих одно и то же значение физической величины.

Энергия m -ой колебательной моды определяется соотношением $h\nu_m = k\theta_m$, где h - постоянная Планка; ν_m - собственная частота m -ой колебательной моды.

Таким образом, энергия молекулы, запасенная в m -м типе колебаний, равна

$$\varepsilon_{v,m} = k\theta_m \alpha_m = \frac{r_m k \theta_m}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1} \quad (2.11)$$

Связь между колебательной энергией $E_{v,m}$, входящей в уравнение сохранения (2.5), имеет следующий вид:

$$\rho E_{v,m} = \varepsilon_{v,m} n_m = k n_m \theta_m \alpha_m = R_m \rho_m \theta_m \alpha_m \quad (2.12)$$

или

$$E_{v,m} = R_m C_m \theta_m \alpha_m = \frac{C_m}{M_m} \frac{r_m \theta_m R}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1} \quad (2.13)$$

где ρ_m, C_m - соответственно плотность и массовая доля химического компонента, к которому относится m -ая колебательная мода.

Одноатомные молекулы не обладают колебательной энергией, двухатомные - имеют одну колебательную степень свободы и, соответственно, обладают колебательной модой.

В общем случае частоты и энергии различных мод различны, а сами колебательные моды существуют независимо друг от друга, одновременно определяя любое произвольное колебательное состояние молекулы.

Введём понятие удельной колебательной энергии $e_{v,m}$, относящейся к единице массы соответствующего компонента и определяемой из соотношения

$$E_{V,m} = C_m e_{V,m} \quad (2.14)$$

2.3 Внутренняя энергия. Энтальпия.

Введём параметр $e_{V,s}$ - удельную колебательную энергию компонента s . Она складывается из всех колебательных мод, относящихся к данному компоненту:

$$e_{V,s} = \sum_{m=1}^{m(s)} e_{V,m} \quad (2.15)$$

Из сказанного в п.2.2.3. следует, что у атомов колебательная энергия отсутствует - $e_{V,s} = 0$; у двухатомных молекул всего одна колебательная степень свободы и $m(s) = 1$; у трехатомных $m(s) = 3$.

В общем случае у линейных трехатомных молекул (например, CO_2) число колебательных степеней свободы равно 4, но две из них вырождены. Т.к. коэффициент вырождения r_m уже учтен в формуле для $e_{V,m}$, то и для таких молекул $m(s) = 3$.

Формулу для полной энергии (2.7) с учетом вышеизложенного можно переписать в виде:

$$E = \frac{3}{2} T \sum_{s=1}^{N_c} R_s C_s + T \sum_{s=1}^{N_c} \frac{i_{R,s}}{2} R_s C_s + \sum_m C_m e_{V,m} + \sum_s C_s h_s^0 + \frac{u_i u_i}{2} \quad (2.16)$$

Полную энергию можно представить в виде суммы внутренней и кинетической:

$$E = e + \frac{u_i u_i}{2} \quad (2.17)$$

Внутренняя энергия с учетом (2.15) может быть представлена как

$$e = \sum_{s=1}^{N_c} C_s \left(\frac{3}{2} T R_s + \frac{i_{R,s}}{2} T R_s + e_{V,s} + h_s^0 \right) = \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_s \quad (2.18)$$

где

$$e_s = \left(\frac{3}{2} + \frac{i_{R,s}}{2} \right) TR_s + e_{v,s} + h_s^0 \quad - \quad (2.19)$$

внутренняя энергия компонента s .

Энтальпия газовой смеси задается как обычно:

$$h = e + \frac{p}{\rho} \quad (2.20)$$

и с учетом (2.18) получаем:

$$h = \sum_{s=1}^{N_c} C_s (e_s + R_s T_T) = \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s \quad , \quad (2.21)$$

где

$$h_s = e_s + R_s T_T \quad - \quad (2.22)$$

энтальпия компонента s .

Можно также ввести понятие полной энтальпии:

$$H = E + \frac{p}{\rho} = h + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (2.23)$$

2.4 Термодинамическая энергия. Уравнение сохранения термодинамической энергии

Введём понятие термодинамической энтальпии h^T газовой смеси и соответствующих энергий:

$$\begin{aligned} h^T &= \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s^T = \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s - \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s^0 = h - h^0 \\ e^T &= h^T - \frac{p}{\rho} = h - h^0 - \frac{p}{\rho} = e - h^0, \\ E^T &= e^T + \frac{u_k^2}{2} = e - h^0 + \frac{u_k^2}{2} = E - h^0, \\ H^T &= E^T + \frac{p}{\rho} = h^T + \frac{1}{2} u_i u_i \end{aligned} \quad (2.24)$$

где

$$h^0 = \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s^0 \quad (2.25)$$

Подставим термодинамическую полную энергию E^T в уравнение (2.3) и с учетом (2.4) получим уравнение полной термодинамической энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E^T) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j \left(E^T + \frac{p}{\rho} \right) + q_j^T - u_i \tau_{ij} \right] = - \sum_{s=1}^{Nc} h_s^0 \dot{w}_s, \quad (2.26)$$

где

$$q_j^T = q_j - \sum_{s=1}^{Nc} (h_s^0 g_{s,j}) \quad (2.27)$$

2.5 Вязкие напряжения, тепловые/диффузионные потоки

Предполагается, что газ подчиняется законам Ньютоновской жидкости и для него справедлива гипотеза Стокса:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (2.28)$$

где μ - коэффициент динамической вязкости.

Для диффузионного потока в упрощенном варианте используется обобщенный коэффициент диффузии $D = \mu / (\rho Sc)$. Тогда:

$$\mathbf{g}_s = -\rho D \nabla C_s = -\frac{\mu}{Sc} \nabla C_s, \quad (2.29)$$

где Sc – число Шмидта.

Можно показать [154], что, если принять допущение о подобии всех тепловых потоков и диффузионных потоков ($Pr = Sc$), то справедлива следующая формула

$$q_j^T = -\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h^T}{\partial x_j} \quad (2.30)$$

где Pr – число Прандтля.

Для расчёта переносных свойств газовой смеси используется модель, основанная на правиле смешения Уилки [155], аппроксимации Блоттера для

вязкости [156] и справочных данных МакБрайда [157].

Эта модель является достаточно простой и может использоваться для неионизированного или слабо ионизированного [158] газа при температурах не выше $\sim 10\,000$ К. При более высоких температурах, при скоростях близких ко второй космической скорости следует использовать более сложные модели.

Для вязкости газовой смеси используется формула Уилки [155]:

$$\mu = \sum_{s=1}^{N_c} \frac{X_s \mu_s}{\phi_s}, \quad (2.31)$$

где X_s - мольная доля компонента s ,

$$\phi_s = \sum_{r=1}^{N_c} X_r \left[1 + \sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}} \left(\frac{M_r}{M_s} \right)^{1/4} \right]^2 \left[\sqrt{8 \left(1 + \frac{M_s}{M_r} \right)} \right]^{-1} \quad (2.32)$$

μ_s - динамическая вязкость компонента s , определяемая по формуле [156]:

$$\mu_s = 0.1 \exp \left[\left(A_s \ln T + B_s \right) \ln T + C_s^* \right] \quad (2.33)$$

где A_s, B_s, C_s^* - справочные константы [157].

Для расчёта коэффициентов теплопроводности компонентов используется соотношение Екена (Eucken's relation):

$$\begin{aligned} \lambda_{T,s} &= \frac{5}{2} \mu_s (c_v)_{T,s}, & \lambda_{R,s} &= \mu_s (c_v)_{R,s}, & \lambda_{v_m} &= \mu_s (c_v)_{v_m} C_m, \\ \lambda_e &\approx 0 \end{aligned} \quad (2.34)$$

Входящие в эти формулы теплоёмкости при постоянном объёме рассчитываются по формулам

$$(c_v)_{T,s} = \frac{3}{2} R_s, \quad (c_v)_{R,s} = \frac{i_{R,s}}{2} R_s, \quad (c_v)_{v_m} = \frac{\partial e_{v,m}}{\partial T_{v,m}} = r_m R_m \left(\frac{\theta_m}{T_{v,m}} \right)^2 \frac{\exp(\theta_m / T_{v,m})}{[\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1]^2} \quad (2.35)$$

Для проверки определим поступательно-вращательное число Прандтля при условии $T = T_R$. В этом случае:

$$(c_v)_{TR,s} = (c_v)_{T,s} + (c_v)_{R,s}, \quad (c_p)_{TR,s} = (c_p)_{TR,s} + R_s = \frac{(5 + i_{R,s})}{2} R_s$$

$$\lambda_{TR,s} = \lambda_{T,s} + \lambda_{R,s} = \mu_s \left(\frac{5}{2} (c_v)_{T,s} + (c_v)_{R,s} \right) = \mu_s R_s \frac{1}{4} (15 + 2i_{R,s})$$

Следовательно

$$\text{Pr}_{TR,s} = \frac{\mu_s (c_p)_{TR,s}}{\lambda_{TR,s}} = \frac{4\mu_s}{\mu_s R_s (15 + 2i_{R,s})} \frac{(5 + i_{R,s}) R_s}{2} = \frac{2(5 + i_{R,s})}{(15 + 2i_{R,s})}$$

У одноатомных молекул: $i_{R,s} = 0 \Rightarrow \text{Pr}_{TR,s} = \frac{2}{3} \approx 0.67$

У двухатомных и линейных многоатомных: $i_{R,s} = 2 \Rightarrow \text{Pr}_{TR,s} = 0.737$

У многоатомных нелинейных: $i_{R,s} = 3 \Rightarrow \text{Pr}_{TR,s} = 0.762$

Коэффициенты теплопроводности газовой смеси задаются формулами:

$$\lambda_T = \sum_s \frac{X_s \lambda_{T,s}}{\phi_s}, \quad \lambda_R = \sum_s \frac{X_s \lambda_{R,s}}{\phi_s} \quad (2.36)$$

Диффузионный коэффициент D_s заменяется постоянным единым обобщенным коэффициентом D , который можно выразить через коэффициенты теплопроводности и число Льюиса Le :

$$D = Le \frac{\lambda}{\rho (c_p)_{TR}}, \quad (2.37)$$

где c_p - удельная (на единицу массы) поступательно-вращательная теплоёмкость газовой смеси при постоянном давлении:

$$(c_p)_{TR} = \sum_{s=1}^{Nc} C_s \left[(c_p)_{T,s} + (c_p)_{R,s} \right] \quad (2.38)$$

2.6 Химическая кинетика

2.6.1 Общие понятия

Скорость образования компонента в результате химических реакций \dot{w}_s складывается из скоростей всех реакций, в которых он участвует

$$\dot{w}_s = M_s \sum_{k=1}^K (v''_{k,s} - v'_{k,s}) R_k, \quad (2.39)$$

где K – число реакций, которые протекают в химически реагирующей системе; $v'_{k,s}$ – стехиометрический коэффициент компонента s в k -ой прямой реакции (слева направо); $v''_{k,s}$ – стехиометрический коэффициент компонента s в k -ой обратной реакции (справа налево); R_k – скорость k -ой химической реакции.

Пусть I_s – молярная концентрация компонента s – т.е. количество молей (киломолей) данного вещества в единице объема. Очевидно, что

$$I_s = \frac{\rho_s}{M_s} = \frac{\rho C_s}{M_s} \quad (2.40)$$

Скорость химической реакции определяется на основе закона действующих масс:

$$R_k = \left(F_k \prod_{s=1}^{N_c} I_s^{v'_{k,s}} - B_k \prod_{s=1}^{N_c} I_s^{v''_{k,s}} \right) \quad (2.41)$$

где F_k и B_k – коэффициенты скоростей прямой и обратной k -ой реакции, соответственно), $n_k = \sum_{s=1}^{N_c} v_{k,s}$ – порядок реакции.

2.6.2 Реакции горения водорода в воздухе

В работе [159] использовалась система реакций, представленная в таблице 2.1.

Таблица 2.1

№	Реакция	Коэффициент скорости прямой реакции, F_k
1	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$	$8.650 \cdot 10^{11} \cdot T^{-0.24} \cdot \exp(-8220/T)$
2	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{OH} + \text{H}$	$1.5 \cdot 10^4 \cdot T^{2.0} \cdot \exp(-3800/T)$
3	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$2.53 \cdot 10^5 \cdot T^{1.48} \cdot \exp(-1700/T)$
4	$2 \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$1.5 \cdot 10^6 \cdot T^{1.14} \cdot \exp(-50/T)$

5	$2 \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$	$9.72 \cdot 10^{10} \cdot T^{-0.6}$
6	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$2 \cdot 10^{14} \cdot T^{-1}$
7	$2 \text{O} + \text{M} = \text{O}_2 + \text{M}$	$1.89 \cdot 10^7 \cdot \exp(900/T)$
<p>Размерность F_k для бимолекулярных реакций 1-4 - $\left[\frac{\text{M}^3}{\text{кмоль} \cdot \text{сек}} \right]$, для реакций с третьим телом 5,6,7 - $\left[\frac{\text{M}^6}{\text{кмоль}^2 \cdot \text{сек}} \right]$.</p>		

Используется сравнительная эффективность третьего тела, представленная в таблице 2.2, взятая из работы [160]:

Таблица 2.2

М	Ar	N ₂	O ₂	H ₂	H ₂ O
Эфф.	0.35	0.4	0.4	1.0	6.5

Для проблем воспламенения, срыва горения и догорания, в схему добавляют реакции, включающие такие компоненты, как H_2O_2 и HO_2

Система реакций Коннера и др. [161], приведенная в таблице 2.3, является самой распространённой.

В этой таблице используются следующие стандартные для физической химии размерности: см^3 , моль , с , кал , K . Скорости реакций 14, 19 берутся как суммы двух выражений, т.е. общее количество уравнений которое необходимо решить при использовании данной системы при численном моделировании составляет 21. У тех компонентов, для которых отсутствует информация в правом столбце таблицы, эффективность третьего тела принимается равной 1. В реакциях 9, 15 верхнее выражение используется при обычных и низких давлениях, нижнее – при высоких. В то время, как по классической теории считается, что константы скорости реакций являются функцией температуры, на самом деле многие

химические реакции также являются функцией давления. Реакции 9 и 15 являются примерами этого. При очень высоких давлениях константа скорости может быть определена одним набором параметров и при очень низких давлениях другим набором параметров.

Метод, предложенным Трое и др., использует сшивание этих двух предельных случаев для промежуточного давления [162]. Используя оба набора параметров, определяются константы скорости для высокого давления k_{∞} и k_0 .

Таблица 2.3

№	Реакция	F_k			B_k			Эфф. 3-го тела
		A	β	E	A	β	E	
1	$\text{H}+\text{O}_2 = \text{O}+\text{OH}$	1.915E+14	0.00	1.644E+04	5.481E+11	0.39	-2.930E+02	
2	$\text{O}+\text{H}_2 = \text{H}+\text{OH}$	5.080E+04	2.67	6.292E+03	2.667E+04	2.65	4.880E+03	
3	$\text{OH}+\text{H}_2 = \text{H}+\text{H}_2\text{O}$	2.160E+08	1.51	3.430E+03	2.298E+09	1.40	1.832E+04	
4	$\text{O}+\text{H}_2\text{O} = \text{OH}+\text{OH}$	2.970E+06	2.02	1.340E+04	1.465E+05	2.11	-2.904E+03	
5	$\text{H}_2+\text{M} = \text{H}+\text{H}+\text{M}$	4.577E+19	-1.40	1.044E+05	1.146E+20	-1.68	8.200E+02	$\text{H}_2/2.5/$ $\text{H}_2\text{O}/12.0/$
6	$\text{O}+\text{O}+\text{M} = \text{O}_2+\text{M}$	6.165E+15	-0.50	0.000E+00	4.515E+17	-0.64	1.189E+05	$\text{H}_2/2.5/$ $\text{H}_2\text{O}/12.0/$ $\text{Ar}/0.83/$
7	$\text{O}+\text{H}+\text{M} = \text{OH}+\text{M}$	4.714E+18	-1.00	0.000E+00	9.880E+17	-0.74	1.021E+05	$\text{H}_2/2.5/$ $\text{H}_2\text{O}/12.0/$ $\text{Ar}/0.75/$
8	$\text{H}+\text{OH}+\text{M} =$ $\text{H}_2\text{O}+\text{M}$	4.500E+22	-2.00	0.000E+00	1.912E+23	-1.83	1.185E+05	$\text{H}_2/0.73/$ $\text{H}_2\text{O}/12.0/$ $\text{Ar}/0.38/$
9	$\text{H}+\text{O}_2+\text{M} =$ HO_2+M	3.4820E+16	-0.411	-1.115E+3				$\text{H}_2/1.3/$ $\text{H}_2\text{O}/14.0/$ $\text{Ar}/0.67/$
	$\text{H}+\text{O}_2 = \text{HO}_2$	1.475E+12		0.60	0.000E+00	3.090E+12	0.53	
10	$\text{HO}_2+\text{H} = \text{H}_2+\text{O}_2$	1.660E+13	0.00	8.230E+02	3.164E+12	0.35	5.551E+04	
11	$\text{HO}_2+\text{H} = \text{OH}+\text{OH}$	7.079E+13	0.00	2.950E+02	2.027E+10	0.72	3.684E+04	
12	$\text{HO}_2+\text{O} = \text{OH}+\text{O}_2$	3.250E+13	0.00	0.000E+00	3.252E+12	0.33	5.328E+04	

13	HO ₂ +OH= H ₂ O+O ₂	2.890E+13	0.00	-497.	5.861E+13	0.24	6.908E+04	
14	HO ₂ +HO ₂ =	4.200E+14	0.00	1.198E+04	4.634E+16	-0.35	5.067E+04	
	H ₂ O ₂ +O ₂	1.300E+11	0.00	-1629.	1.434E+13	-0.35	3.706E+04	
15	H ₂ O ₂ +M = OH+OH+M	1.202E+17	0.00	45500.				H ₂ /2.5/ H ₂ O/12.0/
	H ₂ O ₂ = OH+OH	2.951E+14	0.00	4.843E+04	3.656E+08	1.14	-2.584E+03	Ar/0.64/
16	H ₂ O ₂ +H = H ₂ O+OH	2.410E+13	0.00	3.970E+03	1.269E+08	1.31	7.141E+04	
17	H ₂ O ₂ +H = H ₂ +HO ₂	6.025E+13	0.00	7.950E+03	1.041E+11	0.70	2.395E+04	
18	H ₂ O ₂ +O = OH+HO ₂	9.550E+06	2.00	3.970E+03	8.660E+03	2.68	1.856E+04	
19	H ₂ O ₂ +OH =	1.000E+12	0.00	0.000E+00	1.838E+10	0.59	3.089E+04	
	H ₂ O+HO ₂	5.800E+14	0.00	9.557E+03	1.066E+13	0.59	4.045E+04	

Константа скорости определяется по формуле

$$k = k_{\infty} \left(\frac{p_r}{1 + p_r} \right) F \quad (2.42)$$

где $p_r = \frac{k_0}{k_{\infty}} C_{mix}$; C_{mix} определяется как отношение объемной плотности к

молекулярному весу смеси;

$$\lg F = \left\{ 1 + \left[\frac{\lg p_r + c}{n - d(\lg p_r + c)} \right]^2 \right\}^{-1} \lg F_{cent}, \quad (2.43)$$

$$c = -0.4 - 0.67 \lg F_{cent}, \quad n = 0.75 - 1.27 \lg F_{cent}, \quad d = 0.14, \quad (2.44)$$

$$F_{cent} = (1 - a) \exp(-T / T^{***}) + a \exp(-T / T^*) + \exp(-T^{**} / T^*)$$

Для реакций 9, 15:

$$a = 0.5, \quad T^{***} = 1.0 \times 10^{-30}, \quad T^* = 1.0 \times 10^{30}, \quad T^{**} = 1.0 \times 10^{100} \quad (2.45)$$

2.6.3 Кинетика реакций при гиперзвуковом входе спускаемого аппарата в атмосферу Земли

Для расчёта коэффициентов прямых скоростей реакций используется следующая формула [163]:

$$F = AT^n \exp(-T_r / T_a) \quad (2.46)$$

Здесь учитывается то, что каждый процесс контролирует определенная температура T_a . Под T_v подразумевается колебательная температура, относящаяся к молекуле, участвующей в реакции.

Константы, входящие в формулы (2.46), представлены в таблице 2.4.

Таблица 2.4

Реакция	M	A, см ³ /(моль с)	n	T_r	T_a	Источник
$N_2 + M \rightarrow N + N + M$	C,O,N,H	$3.0 \cdot 10^{22}$	-1.6	113 200	$\sqrt{TT_v}$	163
	CO,C ₂ ,N ₂ ,CN, NO, все ост.	$7.0 \cdot 10^{21}$	-1.6	113 200	$\sqrt{TT_v}$	163
	e ⁻	$3.0 \cdot 10^{24}$	-1.6	113 200	$\sqrt{TT_v}$	163
$O_2 + M \rightarrow O + O + M$	C,O,N,H	$1.0 \cdot 10^{22}$	-1.5	59 360	$\sqrt{TT_v}$	163
	CO,C ₂ ,N ₂ ,CN, NO, все ост.	$2.0 \cdot 10^{21}$	-1.5	59 360	$\sqrt{TT_v}$	163
$NO + M \rightarrow N + O + M$	N,O,NO,N ⁺ ,O ⁺	$1.0 \cdot 10^{17}$	0	75 500	$\sqrt{TT_v}$	164
	N ₂ ,O ₂ ,N ₂ ⁺ ,O ₂ ⁺ , NO ⁺	$5.0 \cdot 10^{15}$	0	75 500	$\sqrt{TT_v}$	164

$O + e^- \rightarrow O^+ + e^- + e^-$		$3.9 \cdot 10^{33}$	-3.78	158 500	T_e	163
$N + e^- \rightarrow N^+ + e^- + e^-$		$2.5 \cdot 10^{34}$	-3.82	168 200	T_e	163
$N_2 + O \rightarrow NO + N$		$5.7 \cdot 10^{12}$	0.42	42 938	T	163
$NO + O \rightarrow O_2 + N$		$8.4 \cdot 10^{12}$	0.	19 400	T	163
$O + N \rightarrow NO^+ + e^-$		$5.3 \cdot 10^{12}$	0.	31 900	T	163
$N + N \rightarrow N_2^+ + e^-$		$4.4 \cdot 10^7$	1.5	67 500	T	163
$O + O \rightarrow O_2^+ + e^-$		$7.1 \cdot 10^2$	2.7	80 600	T	164, 165
$NO^+ + O \rightarrow N^+ + O_2$		$1.0 \cdot 10^{12}$	0.5	77 200	T	164, 165
$N^+ + N_2 \rightarrow N_2^+ + N$		$1.0 \cdot 10^{12}$	0.5	12 200	T	164, 165
$O_2^+ + N \rightarrow N^+ + O_2$		$8.7 \cdot 10^{13}$	0.14	28 600	T	164, 165
$O^+ + NO \rightarrow N^+ + O_2$		$1.4 \cdot 10^5$	1.9	26 600	T	164, 165
$O_2^+ + N_2 \rightarrow N_2^+ + O_2$		$9.9 \cdot 10^{12}$	0.	40 700	T	164, 165
$O_2^+ + O \rightarrow O^+ + O_2$		$4.0 \cdot 10^{12}$	-0.09	18 000	T	164, 165
$NO^+ + N \rightarrow O^+ + N_2$		$3.4 \cdot 10^{13}$	-1.08	12 800	T	164, 165
$NO^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + NO$		$2.4 \cdot 10^{13}$	0.41	32 600	T	164, 165
$NO^+ + O \rightarrow O_2^+ + N$		$7.2 \cdot 10^{12}$	0.29	48 600	T	164, 165
$O^+ + N_2 \rightarrow N_2^+ + O$		$9.1 \cdot 10^{11}$	0.36	22 800	T	164, 165
$NO^+ + N \rightarrow N_2^+ + O$		$7.2 \cdot 10^{13}$	0	35 500	T	164, 165

2.7 Моделирование турбулентности

Использовалось моделирование турбулентности, основанное на использовании коэффициента турбулентной вязкости μ_T . При этом турбулентные потоки выражаются по следующим формулам:

$$\tau_{T,ij} \equiv -\bar{\rho} u_i'' u_j'' = \mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{2}{3} \bar{\rho} K \delta_{ij} \quad (2.47)$$

$$\bar{\rho} u_j'' C_s'' = -\frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{C}_s}{\partial x_j}, \quad \bar{\rho} u_j'' h'' = -\frac{\mu_T}{Pr_T} \frac{\partial h''}{\partial x_j}, \quad \frac{1}{2} \bar{\rho} u_j'' u_k''^2 = -\frac{\mu_T}{\sigma_K} \frac{\partial K}{\partial x_j} \quad (2.48)$$

где Sc_T - турбулентное число Шмидта; Pr_T - турбулентное число Прандтля; σ_K - аналог числа Прандтля для турбулентной кинетической энергии K (ТКЕ).

Здесь используются так называемые средние по Рейнольдсу, например $\bar{\rho}$.

Мгновенное значение любого параметра потока представляется в виде:

$$\rho = \bar{\rho} + \rho', \quad (2.49)$$

Кроме того, используются так называемые среднемассовые значения параметров или средние по Фавру:

$$H = \frac{\overline{\rho H}}{\bar{\rho}} \quad (2.50)$$

Мгновенные значения величин в этом случае представляются в виде:

$$H = \bar{H} + H'' \quad (2.51)$$

Для плотности, давления, тензора вязких напряжений, векторов теплового потока, скоростей образования компонентов используем осреднение по Рейнольдсу:

$$\begin{aligned} \rho &= \bar{\rho} + \rho', \quad p = \bar{p} + p', \quad \tau_{ij} = \bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij}', \\ q_j &= \bar{q}_j + q_j', \quad \dot{w}_s = \bar{w}_s + \dot{w}_s' \end{aligned} \quad (2.52)$$

для всех остальных величин – осреднение по Фавру:

$$\begin{aligned} u_i &= u_i + u_i'', E = E + E'', H = H + H'', \\ V_{k,j} &= V_{k,j} + V_{k,j}'', C_k = C_k + C_k'' \end{aligned} \quad (2.53)$$

Очевидно, что при таком подходе турбулентные потоки и напряжения строятся аналогично своим молекулярным аналогам.

Самыми популярными моделями турбулентности, которые основаны на использовании коэффициента турбулентной вязкости, являются: K - ε модель, K - ω модель, SST (Shear Stress Transfer) модель [166].

2.8 Влияние турбулентности на скорости химических реакций

2.8.1 Модель диссипации вихря

Модель диссипации вихря представляет собой упрощённую модель химической кинетики, которая основана на предположении о том, что скорость протекания химической реакции намного выше скорости процессов переноса в потоке. Согласно ей реагенты смешиваются на молекулярном уровне, мгновенно образуют продукты реакции.

Модель предполагает, что скорость реакции может быть прямо отнесена ко времени, которое необходимо для смешивания реагентов на молекулярном уровне.

В турбулентном течении это время смешивания определяется свойствами вихря, и таким образом, скорость пропорциональна времени смешивания, определенному через турбулентную кинетическую энергию k и диссипацию ε .

Для получения скорости реакции уравнение Аррениуса не используется, а выбирается минимальное значение из следующих двух формул:

$$R_k = A \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{[I_s]}{v'_{k,s}} \right) \quad (2.54)$$

$$R_k = AB \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\sum_P [I_s] M_s}{\sum_P v''_{k,s} M_s} \right) \quad (2.55)$$

Константы модели равны: $A = 4$, $B = 0,5$;

2.8.2 Концепция диссипации вихря

Концепция диссипации вихря [123] является дальнейшим развитием Модели диссипации вихря, которая позволяет применять детальный механизм реакций к турбулентному течению.

Она предполагает, что реакции происходят в мельчайших турбулентных структурах. Размеры этих структур определяются соотношением:

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \quad (2.56)$$

где $C_\xi = 2,1377$

Предполагается, что реагенты реагируют в структурах в течении времени:

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (2.57)$$

где $C_\tau = 0,4082$.

Скорость образования компонента моделируется как:

$$\dot{w}_s = \frac{\rho (\xi^*)^2}{\tau^* [1 - (\xi^*)^3]} (C_s^* - C_s) \quad (2.58)$$

где C_s^* – массовая доля компонента в структуре после протекания реакции в течении времени τ^* .

Выводы по главе

Представлены основные уравнения, описывающие течение вязкого химически реагирующего колебательно неравновесного газа. Рассмотрены

вопросы, связанные колебательной релаксацией. Проанализированы основные составляющие полной энергии в химико/термически неравновесных потоках. Введено понятие термодинамической энергии и выведено уравнение ее сохранения. Представлены формулы для вязких напряжений и тепловых/диффузионных потоков. Проанализированы основные реакции горения водорода в воздухе и кинетика реакций при гиперзвуковом входе спускаемого аппарата в атмосферу Земли. Представлена методика учёта влияния турбулентности на скорости химических реакций.

ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

3.1 Векторная форма

Система уравнений (2.1)-(2.5) с добавлением уравнений для турбулентных характеристик может быть записана в следующей векторной форме:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E}_c - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{F}_c - \mathbf{F}_v) + \frac{\partial}{\partial z}(\mathbf{G}_c - \mathbf{G}_v) = \mathbf{H}, \quad (3.1)$$

где

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E^T \\ \rho C_1 \\ \vdots \\ \rho C_{N_c-1} \\ \rho e_1 \\ \vdots \\ \rho e_{N_m} \\ \rho T_1 \\ \vdots \\ \rho T_{N_t} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_c = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ \rho u(E^T + p/\rho) \\ \rho u C_1 \\ \vdots \\ \rho u C_{N_c-1} \\ \rho u e_1 \\ \vdots \\ \rho u e_{N_m} \\ \rho u T_1 \\ \vdots \\ \rho u T_{N_t} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_c = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ \rho v(E^T + p/\rho) \\ \rho v C_1 \\ \vdots \\ \rho v C_{N_c-1} \\ \rho v e_1 \\ \vdots \\ \rho v e_{N_m} \\ \rho v T_1 \\ \vdots \\ \rho v T_{N_t} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_c = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho wu \\ \rho wv \\ \rho w^2 + p \\ \rho w(E^T + p/\rho) \\ \rho w C_1 \\ \vdots \\ \rho w C_{N_c-1} \\ \rho w e_1 \\ \vdots \\ \rho w e_{N_m} \\ \rho w T_1 \\ \vdots \\ \rho w T_{N_t} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{E}_V = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} - q_x \\ -J_{1,x} \\ \vdots \\ -J_{Nc-1,x} \\ -q_{1,x} \\ \vdots \\ -q_{Nm,x} \\ -g_{1,x} \\ \vdots \\ -g_{Nt,x} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_V = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ u\tau_{yx} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} - q_y \\ -J_{1,y} \\ \vdots \\ -J_{Nc-1,y} \\ -q_{1,y} \\ \vdots \\ -q_{Nm,y} \\ -g_{1,y} \\ \vdots \\ -g_{Nt,y} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_V = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{zx} \\ \tau_{zy} \\ \tau_{zz} \\ u\tau_{zx} + v\tau_{zy} + w\tau_{zz} - q_z \\ -J_{1,z} \\ \vdots \\ -J_{Nc-1,z} \\ -q_{1,z} \\ \vdots \\ -q_{Nm,z} \\ -g_{1,z} \\ \vdots \\ -g_{Nt,z} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H} = \left(0, 0, 0, 0, -\sum_{s=1}^{Nc} h_s^0 \dot{w}_s, \dot{w}_1, \dots, \dot{w}_{Nc-1}, \rho \dot{e}_1, \dots, \rho \dot{e}_{Nm}, S_{T,1}, \dots, S_{T,Nt} \right)^T$$

Здесь, кроме указанных выше параметров: e_m - колебательная энергия m -ой энергетической моды, содержащая в единице массы соответствующего химического компонента; $\rho \dot{e}_m$ - источник энергии m -ой энергетической моды, обусловленный всеми процессами энергообмена; T_k - турбулентные характеристики, выбор которых зависит от модели турбулентности; N_t - число уравнений, входящих в модель турбулентности; $S_{T,k}$ - источники в уравнениях для турбулентных характеристик; $g_{k,i}$ - вязкие потоки турбулентных параметров.

Вязкие потоки учитывают как молекулярный, так и турбулентный перенос, т.е. являются эффективными.

Уравнение полной энергии записывается в форме (2.26).

3.2 Конечно-объёмное представление

Конечно-объёмное представление уравнения (3.1) для q -ой ячейки сетки имеет следующий вид [165]:

$$V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} (\vec{\mathbf{F}}_{C,j} - \vec{\mathbf{F}}_{V,j}) \cdot \vec{\mathbf{n}}_j s_j + V_q \mathbf{H}_q \quad (3.2)$$

где $\vec{\mathbf{F}}_C = \mathbf{E}_C \vec{\mathbf{i}} + \mathbf{F}_C \vec{\mathbf{j}} + \mathbf{G}_C \vec{\mathbf{k}}$ - вектор невязкого потока (через поверхность); $\vec{\mathbf{F}}_{C,j}$ - вектор невязкого потока через j -ую грань; $\vec{\mathbf{F}}_V = \mathbf{E}_V \vec{\mathbf{i}} + \mathbf{F}_V \vec{\mathbf{j}} + \mathbf{G}_V \vec{\mathbf{k}}$ - вязкий поток; V_q - объем q -ой ячейки сетки; $\vec{\mathbf{n}}_j$ - вектор нормали к j -ой грани, направленный наружу по отношению к q -ой ячейке сетки; s_j - площадь поверхности j -ой грани.

Суммирование $\sum_{j \in q}$ производится только по граням, прилегающим к q -ой ячейке сетки.

3.3 Расщепление невязкого потока

Используем гомогенность невязкого потока:

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{F}}_C \cdot \vec{\mathbf{n}} &= \mathbf{F}_{C,n} = \frac{\partial \mathbf{F}_{C,n}}{\partial \mathbf{U}} \mathbf{U} = \mathbf{A} \mathbf{U} \\ \vec{\mathbf{F}}_C \cdot \vec{\mathbf{n}} &\equiv \mathbf{E}_C \vec{\mathbf{i}} \cdot \vec{\mathbf{n}} + \mathbf{F}_C \vec{\mathbf{j}} \cdot \vec{\mathbf{n}} + \mathbf{G}_C \vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{n}} \end{aligned} \quad (3.3)$$

где $\mathbf{F}_{C,n}$ - нормальная составляющая невязкого потока.

Матрица Якоби \mathbf{A} может быть диагонализирована подобным представлением

$$\mathbf{A} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{S} \quad (3.4)$$

и разделена на положительную и отрицательную часть

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{\Lambda}^+ \mathbf{S}, \quad \mathbf{A}^- = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{\Lambda}^- \mathbf{S} \quad (3.5)$$

Здесь $\mathbf{\Lambda}$ - диагональная матрица, состоящая из собственных значений матрицы \mathbf{A} .

Для представления невязкого потока на j -ой грани можно использовать:

1) метод Рое [167]

$$\vec{\mathbf{F}}_{C,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j = \mathbf{F}_{C,n,j} = 0.5(\mathbf{F}_L + \mathbf{F}_R) - 0.5 \left| \hat{\mathbf{A}} \right| (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L) \quad (3.6)$$

где

$$\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{A}(\hat{\mathbf{U}}_{LR}) \quad (3.7)$$

Здесь $\mathbf{F}_L, \mathbf{F}_R$ - значения нормального вектора $\mathbf{F}_{C,n,j}$ "слева" и "справа" от рассматриваемой грани.

Все параметры, входящие в матрицу $\hat{\mathbf{A}}$, вычисляются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \frac{\rho_R \sqrt{\rho_R} + \rho_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, & \hat{u} &= \frac{u_R \sqrt{\rho_R} + u_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, & \hat{v} &= \frac{v_R \sqrt{\rho_R} + v_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, \\ \hat{w} &= \frac{w_R \sqrt{\rho_R} + w_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, & H^T &= \frac{(H^T)_R \sqrt{\rho_R} + (H^T)_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, \\ f &= \frac{f_R \sqrt{\rho_R} + f_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Из (3.3) следует:

$$\mathbf{F}_L = \mathbf{A}_L \mathbf{U}_L, \quad \mathbf{F}_R = \mathbf{A}_R \mathbf{U}_R \quad (3.9)$$

и формула (3.6) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{F}}_{C,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j &= \mathbf{F}_{C,n,j} = 0.5(\mathbf{A}_L + |\hat{\mathbf{A}}|) \mathbf{U}_L + 0.5(\mathbf{A}_R - |\hat{\mathbf{A}}|) \mathbf{U}_R = \hat{\mathbf{A}}_L^+ \mathbf{U}_L + \hat{\mathbf{A}}_R^- \mathbf{U}_R \\ \hat{\mathbf{A}}_L^+ &= 0.5(\mathbf{A}_L + |\hat{\mathbf{A}}|), \quad \hat{\mathbf{A}}_R^- = 0.5(\mathbf{A}_R - |\hat{\mathbf{A}}|) \end{aligned} \quad (3.10)$$

2) Расщепление Стегера-Уорминга [168]

$$\vec{\mathbf{F}}_{C,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j = \mathbf{F}_{C,n,j} = (\mathbf{A}^+)_L \mathbf{U}_L + (\mathbf{A}^-)_R \mathbf{U}_R \quad (3.11)$$

где матрицы $\mathbf{A}^+, \mathbf{A}^-$ рассчитываются по формулам (3.5) на левой и правой гранях.

3) Модифицированное расщепление Стегера-Уорминга [169]

$$\vec{\mathbf{F}}_{C,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j = \mathbf{F}_{C,n,j} = (\mathbf{A}^+)_{LR} \mathbf{U}_L + (\mathbf{A}^-)_{LR} \mathbf{U}_R \quad (3.12)$$

где

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}^+)_{LR} &= \mathbf{A}^+(\mathbf{U}_{LR}), \quad (\mathbf{A}^-)_{LR} = \mathbf{A}^-(\mathbf{U}_{LR}) \\ \mathbf{U}_{LR} &= \frac{\mathbf{U}_L + \mathbf{U}_R}{2} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Все три формулы (3.10),(3.11) и (3.12) имеют одинаковую структуру

$$\vec{\mathbf{F}}_{C,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j = \mathbf{F}_{C,n,j} = \mathbf{A}_L^+ \mathbf{U}_L + \mathbf{A}_R^- \mathbf{U}_R \quad (3.14)$$

и отличаются только способом расчёта матриц $\mathbf{A}_L^+, \mathbf{A}_R^-$

3.4 Матрица Якоби А

Формулу для невязкого потока получаем из (3.3):

$$\vec{\mathbf{F}}_C \cdot \vec{\mathbf{n}} = \mathbf{E}_C n_x + \mathbf{F}_C n_y + \mathbf{G}_C n_z = \begin{pmatrix} \rho U \\ \rho U u + p n_x \\ \rho U v + p n_y \\ \rho U w + p n_z \\ \rho U H^T \\ \rho U f_1 \\ \vdots \\ \rho U f_{Na} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

где f_m - дополнительные функции (массовые доли, колебательные энергии, турбулентные характеристики и т.п.),

$$\begin{aligned} U &= u n_x + v n_y + w n_z \\ H^T &= E^T + p / \rho \end{aligned} \quad (3.16)$$

Введём вспомогательные единичные векторы \mathbf{l} и \mathbf{m} , направленные тангенциально к поверхности грани, такие, что \mathbf{n} , \mathbf{l} и \mathbf{m} взаимно ортогональны, т.е.

$$n_i l_i = n_i m_i = l_i m_i = 0 \quad (3.17)$$

Им соответствуют следующие компоненты скорости:

$$V = u l_x + v l_y + w l_z \quad (3.18)$$

$$W = u m_x + v m_y + w m_z \quad (3.19)$$

Матрица Якоби имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A} &= \frac{\partial \mathbf{F}_{C,n}}{\partial \mathbf{U}} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha \bar{\beta} n_x - Uu & un_x(1-\bar{\beta}) + U & -\bar{\beta}vn_x + un_y & -\bar{\beta}wn_x + un_z & \bar{\beta}n_x & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha \bar{\beta} n_y - Uv & -\bar{\beta}un_y + vn_x & vn_y(1-\bar{\beta}) + U & -\bar{\beta}wn_y + vn_z & \bar{\beta}n_y & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha \bar{\beta} n_z - Uw & -\bar{\beta}un_z + wn_x & -\bar{\beta}vn_z + wn_y & (-\bar{\beta}wn_z + wn_z) + U & \bar{\beta}n_z & 0 & \cdots & 0 \\ U(\alpha \bar{\beta} - H^T) & -\bar{\beta}uU + H^T n_x & -\bar{\beta}vU + H^T n_y & -\bar{\beta}wU + H^T n_z & \bar{\gamma}U & 0 & \cdots & 0 \\ -Uf_1 & f_1 n_x & f_1 n_y & f_1 n_z & 0 & U & \cdots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ -Uf_{Na} & f_{Na} n_x & f_{Na} n_y & f_{Na} n_z & 0 & \cdots & U & \end{pmatrix} \quad (3.20)
\end{aligned}$$

3.5 Конечно-объёмное уравнение, учитывающее только невязкие члены

Исходное уравнение (3.2)

$$V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} \vec{\mathbf{F}}_{C,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j s_j \quad (3.21)$$

Подставляем (3.6):

$$V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} \left[0.5(\mathbf{F}_{j,L} + \mathbf{F}_{j,R}) - 0.5 |\mathbf{A}_j| (\mathbf{U}_{j,R} - \mathbf{U}_{j,L}) \right] s_j \quad (3.22)$$

Универсальная подстановка (3.14) дает:

$$V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} (\mathbf{A}_L^+ \mathbf{U}_L + \mathbf{A}_R^- \mathbf{U}_R)_j s_j \quad (3.23)$$

Каждый из векторов, входящих в уравнения (3.22), (3.23), является функцией основного вектора \mathbf{U} в нескольких узлах.

Обозначим через \mathbf{U}_{qj} значение вектора в узле ячейки, которая соединяется с q -ой ячейкой через j -ую грань.

Пусть $Z(q)$ - множество узлов, через которые выражается поток в q -ой ячейке. Тогда

$$\begin{aligned}\mathbf{U}_{j,L} &= \sum_{s \in Z(q)} \alpha_s \mathbf{U}_s, \\ \mathbf{U}_{j,R} &= \sum_{s \in Z(q)} \alpha_s \mathbf{U}_s,\end{aligned}\tag{3.24}$$

Простейший вариант:

$$\begin{aligned}\mathbf{U}_{j,L} &= \mathbf{U}_q, \\ \mathbf{U}_{j,R} &= \mathbf{U}_{qj}\end{aligned}\tag{3.25}$$

При использовании варианта (3.25) уравнение (3.22) принимает вид

$$V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} \left[0.5(\mathbf{F}_q + \mathbf{F}_{qj}) - 0.5 |\mathbf{A}_j| (\mathbf{U}_{qj} - \mathbf{U}_q) \right] s_j \tag{3.26}$$

а уравнение (3.23):

$$\begin{aligned}V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} &= - \sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_L^+)_j \mathbf{U}_{j,L} + (\mathbf{A}_R^-)_j \mathbf{U}_{j,R} \right] s_j \\ V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} &= - \sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_L^+)_j \mathbf{U}_q + (\mathbf{A}_R^-)_j \mathbf{U}_{qj} \right] s_j\end{aligned}\tag{3.27}$$

Таким образом, эти уравнения содержат $(N_q + 1)$ неизвестных величин, где N_q - число граней, окружающих q -ую ячейку. При этом

$$\mathbf{F}_q = \mathbf{F}_{C,n,j}(\mathbf{U}_q) \tag{3.28}$$

Для примера: для 2D 4-х угольной ячейки уравнение (3.26) содержит 5 неизвестных величин; для 3D гексаэдральной ячейки - 7 неизвестных величин.

Обозначим через $\delta \mathbf{U}^{n+1}$ приращения вектора \mathbf{U} при переходе от n -го шага по времени к $(n+1)$ -му шагу по времени

$$\delta \mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n \tag{3.29}$$

На каждом шаге по времени стоит задача определения \mathbf{U}^{n+1} по известным значениям \mathbf{U}^n .

Нетрудно показать, что для векторной функции справедливы те же формулы дифференциального исчисления, что и для обычных функций. В частности, можно выразить потоки на $(n+1)$ -ом шаге через потоки на n -ом шаге с

помощью разложения в ряд Тейлора относительно приращения $\delta\mathbf{U}^{n+1}$:

$$(\mathbf{F}_{C,n})^{n+1} = (\mathbf{F}_{C,n})^n + \left(\frac{\partial \mathbf{F}_{C,n}}{\partial \mathbf{U}} \right)^n \delta\mathbf{U}^{n+1} = (\mathbf{F}_{C,n})^n + \mathbf{A}^n \delta\mathbf{U}^{n+1} \quad (3.30)$$

Выразим потоки, входящие в уравнение (3.26), как линейную комбинацию значений на n -м и $(n+1)$ -м шагах по времени

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{C,n} &= (1-\alpha)(\mathbf{F}_{C,n})^n + \alpha(\mathbf{F}_{C,n})^{n+1} = (\mathbf{F}_{C,n})^n + \alpha\mathbf{A}^n \delta\mathbf{U}^{n+1} \\ \mathbf{F}_q &= \mathbf{F}_q^n + \alpha\mathbf{A}_q^n \delta\mathbf{U}_q^{n+1}, \quad \mathbf{F}_{qj} = \mathbf{F}_{qj}^n + \alpha\mathbf{A}_{qj}^n \delta\mathbf{U}_{qj}^{n+1} \\ \mathbf{U}_{qj} &= \mathbf{U}_{qj}^n + \alpha\delta\mathbf{U}_{qj}^{n+1}, \quad \mathbf{U}_q = \mathbf{U}_q^n + \alpha\delta\mathbf{U}_q^{n+1} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Здесь α - параметр, характеризующий порядок точности представления производной по времени. Если $\alpha=0.5$, порядок равен 2, и схема подобна схеме Кранка-Николсона; при $\alpha=1$ получается чисто неявная схема; значение $\alpha > 1$ дает завышенную релаксацию, но это может улучшать сходимость метода.

1) Использование формы (3.26)

Подставляем (3.31) в (3.26):

$$\begin{aligned} &V_q \frac{\delta\mathbf{U}_q^{n+1}}{\Delta t} \\ &= -\sum_{j \in q} \left[0.5(\mathbf{F}_q^n + \alpha\mathbf{A}_q^n \delta\mathbf{U}_q^{n+1} + \mathbf{F}_{qj}^n + \alpha\mathbf{A}_{qj}^n \delta\mathbf{U}_{qj}^{n+1}) - 0.5|\mathbf{A}_j|(\mathbf{U}_{qj}^n + \alpha\delta\mathbf{U}_{qj}^{n+1} - \mathbf{U}_q^n - \alpha\delta\mathbf{U}_q^{n+1}) \right] s_j \\ &= -0.5\alpha \sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_q^n + |\mathbf{A}_j|) \delta\mathbf{U}_q^{n+1} + (\mathbf{A}_{qj}^n - |\mathbf{A}_j|) \delta\mathbf{U}_{qj}^{n+1} \right] s_j \\ &\quad - \sum_{j \in q} \left[0.5(\mathbf{F}_q^n + \mathbf{F}_{qj}^n) - 0.5|\mathbf{A}_j|(\mathbf{U}_{qj}^n - \mathbf{U}_q^n) \right] s_j \end{aligned}$$

Полученное выражение преобразуется к уравнению вида

$$\begin{aligned} &\left[\mathbf{I} + 0.5\alpha\Delta t \sum_{j \in q} (\mathbf{A}_q^n + |\mathbf{A}_j|) \frac{S_j}{V_q} \right] \delta\mathbf{U}_q^{n+1} + 0.5\alpha\Delta t \sum_{j \in q} (\mathbf{A}_{qj}^n - |\mathbf{A}_j|) \frac{S_j}{V_q} \delta\mathbf{U}_{qj}^{n+1} \\ &= -\Delta t \sum_{j \in q} \left[0.5(\mathbf{F}_q^n + \mathbf{F}_{qj}^n) - 0.5|\mathbf{A}_j|(\mathbf{U}_{qj}^n - \mathbf{U}_q^n) \right] \frac{S_j}{V_q} \end{aligned} \quad (3.32)$$

ИЛИ

$$\mathbf{A}_q \delta\mathbf{U}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta\mathbf{U}_{qj}^{n+1} = \Delta\mathbf{U}_q^n \quad (3.33)$$

где

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{U}_q^n &= -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[0.5 (\mathbf{F}_q^n + \mathbf{F}_{qj}^n) - 0.5 |\mathbf{A}_j| (\mathbf{U}_{qj}^n - \mathbf{U}_q^n) \right] s_j \\ \mathbf{A}_q &= \mathbf{I} + 0.5 \alpha \Delta t \sum_{j \in q} \left(\mathbf{A}_q^n + |\mathbf{A}_j| \right) \frac{s_j}{V_q} \\ \mathbf{A}_{qj} &= 0.5 \alpha \Delta t \left(\mathbf{A}_{qj}^n - |\mathbf{A}_j| \right) \frac{s_j}{V_q}\end{aligned}\quad (3.34)$$

Для явной части можно использовать более высокий порядок аппроксимации:

$$\Delta \mathbf{U}_q^n = -\Delta t \sum_{j \in q} \left[0.5 (\mathbf{F}_{j,L}^n + \mathbf{F}_{j,R}^n) - 0.5 |\mathbf{A}_j| (\mathbf{U}_{j,R}^n - \mathbf{U}_{j,L}^n) \right] \frac{s_j}{V_q} \quad (3.35)$$

2) Использование формы (3.27)

Теперь подставляем (3.31) в (3.27):

$$\begin{aligned}V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} &= -\sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_L^+)_j \mathbf{U}_q + (\mathbf{A}_R^-)_j \mathbf{U}_{qj} \right] s_j \\ V_q \frac{\delta \mathbf{U}_q^{n+1}}{\Delta t} &= -\sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_L^+)_j (\mathbf{U}_q^n + \alpha \delta \mathbf{U}_q^{n+1}) + (\mathbf{A}_R^-)_j (\mathbf{U}_{qj}^n + \alpha \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1}) \right] s_j \\ &= -\sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_L^+)_j (\mathbf{U}_q^n) + (\mathbf{A}_R^-)_j (\mathbf{U}_{qj}^n) \right] s_j - \sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_L^+)_j (\alpha \delta \mathbf{U}_q^{n+1}) + (\mathbf{A}_R^-)_j (\alpha \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1}) \right] s_j\end{aligned}\quad (3.36)$$

Полученное выражение преобразуется к уравнению вида

$$\begin{aligned}\left[\mathbf{I} + \frac{\alpha \Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (\mathbf{A}_L^+)_j s_j \right] \delta \mathbf{U}_q^{n+1} + \frac{\alpha \Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_R^-)_j \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1} \right] s_j \\ = -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_L^+)_j (\mathbf{U}_q^n) + (\mathbf{A}_R^-)_j (\mathbf{U}_{qj}^n) \right] s_j\end{aligned}\quad (3.37)$$

или

$$\mathbf{A}_q \delta \mathbf{U}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1} = \Delta \mathbf{U}_q^n \quad (3.38)$$

где

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_q &= \mathbf{I} + \frac{\alpha \Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (\mathbf{A}_L^+)_j s_j, \quad \mathbf{A}_{qj} = \frac{\alpha \Delta t s_j}{V_q} (\mathbf{A}_R^-)_j \\ \Delta \mathbf{U}_q^n &= -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_L^+)_j \mathbf{U}_q^n + (\mathbf{A}_R^-)_j \mathbf{U}_{qj}^n \right] s_j\end{aligned}\quad (3.39)$$

Для явной части можно использовать более высокий порядок аппроксимации:

$$\Delta \mathbf{U}_q^n = -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(\mathbf{A}_L^+)_j \mathbf{U}_{j,L} + (\mathbf{A}_R^-)_j \mathbf{U}_{j,R} \right]^n s_j = -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (\mathbf{F}_{C,n,j})^n s_j \quad (3.40)$$

Необходимо учесть, что любая внутренняя грань окружена двумя ячейками. Одна считается "правой", другая - "левой". Вектор нормали \mathbf{n} является *внешним* по отношению к "левой" ячейке, т.е. он направлен внутрь "правой".

Таким образом, поток, заданный формулой (3.3), определяет баланс "правой" ячейки. Для "левой" ячейки необходимо поменять знак перед Δt .

3.6 Вязкие потоки

Представление вязкого потока на грани:

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{F}}_V \cdot \vec{\mathbf{n}} &\equiv \mathbf{E}_V \vec{\mathbf{i}} \cdot \vec{\mathbf{n}} + \mathbf{F}_V \vec{\mathbf{j}} \cdot \vec{\mathbf{n}} + \mathbf{G}_V \vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{n}} = \mathbf{E}_V n_x + \mathbf{F}_V n_y + \mathbf{G}_V n_z \\ &= \left. \begin{aligned} &0 \\ &\tau_{xx} n_x + \tau_{yx} n_y + \tau_{zx} n_z \\ &\tau_{xy} n_x + \tau_{yy} n_y + \tau_{zy} n_z \\ &\tau_{xz} n_x + \tau_{yz} n_y + \tau_{zz} n_z \\ &(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} - q_x) n_x + (u\tau_{yx} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} - q_y) n_y + (u\tau_{zx} + v\tau_{zy} + w\tau_{zz} - q_z) n_z \\ &-J_{1,x} n_x - J_{1,y} n_y - J_{1,z} n_z \end{aligned} \right\} \quad (3.41)\end{aligned}$$

Градиент:

$$\begin{aligned}\mathbf{grad} \varphi &= \frac{\partial \varphi}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \mathbf{k} \\ \mathbf{grad} \varphi \cdot \vec{\mathbf{n}} &\equiv \frac{\partial \varphi}{\partial x} \mathbf{i} \cdot \vec{\mathbf{n}} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \mathbf{j} \cdot \vec{\mathbf{n}} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \mathbf{k} \cdot \vec{\mathbf{n}} \\ &= \frac{\partial \varphi}{\partial x} n_x + \frac{\partial \varphi}{\partial y} n_y + \frac{\partial \varphi}{\partial z} n_z\end{aligned}\quad (3.42)$$

Вязкие потоки являются функциями производных газодинамических параметров по пространственным переменным x, y, z .

Введём вектор:

$$\mathbf{V} = (\rho, u, v, w, h^T, C_1, \dots, C_{Nc-1}, T_1, \dots, T_{Nr})^T \quad (3.43)$$

Очевидно, что этот вектор является однозначной функцией искомого вектора \mathbf{U} , т.е.

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}(\mathbf{U}) \quad (3.44)$$

Эти соображения позволяют нам записать вязкие потоки в виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_V &= \mathbf{M}_{Ex} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} + \mathbf{M}_{Ey} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} + \mathbf{M}_{Ez} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} = \mathbf{M}_{Ex} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + \mathbf{M}_{Ey} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} + \mathbf{M}_{Ez} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial z}, \\ \mathbf{F}_V &= \mathbf{M}_{Fx} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} + \mathbf{M}_{Fy} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} + \mathbf{M}_{Fz} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} = \mathbf{M}_{Fx} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + \mathbf{M}_{Fy} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} + \mathbf{M}_{Fz} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial z}, \\ \mathbf{G}_V &= \mathbf{M}_{Gx} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} + \mathbf{M}_{Gy} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial y} + \mathbf{M}_{Gz} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} = \mathbf{M}_{Gx} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + \mathbf{M}_{Gy} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} + \mathbf{M}_{Gz} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial z}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Матрицы \mathbf{M}_{Ex} , \mathbf{M}_{Ey} , \mathbf{M}_{Ez} и т.д. легко получаются из формул для вязких потоков. Например,

$$\mathbf{M}_{Ex} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}u & v & w & \frac{1}{Pr} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{Sc} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{Ey} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v & -\frac{2}{3}u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{Ez} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & 0 & -\frac{2}{3}u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

$$\mathbf{M}_{Fx} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3}v & u & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{Fy} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & u & \frac{4}{3}v & w & \frac{1}{Pr} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{Fz} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w & -\frac{2}{3}v & 0 \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

$$\mathbf{M}_{G_x} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3}w & 0 & u & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{G_y} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3}w & v & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{G_z} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{4}{3} & 0 \\ 0 & u & v & \frac{4}{3}w & \frac{1}{Pr} \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

Таким образом, можно выразить вязкие потоки на гранях из формулы (3.41):

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{F}}_V \cdot \vec{\mathbf{n}} &= \mathbf{E}_V n_x + \mathbf{F}_V n_y + \mathbf{G}_V n_z = \left(n_x \mathbf{M}_{E_x} + n_y \mathbf{M}_{F_x} + n_z \mathbf{M}_{G_x} \right) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial x} \\ &+ \left(n_x \mathbf{M}_{E_y} + n_y \mathbf{M}_{F_y} + n_z \mathbf{M}_{G_y} \right) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial y} + \left(n_x \mathbf{M}_{E_z} + n_y \mathbf{M}_{F_z} + n_z \mathbf{M}_{G_z} \right) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial z} \\ &= \mathbf{M}_x \frac{\partial U}{\partial x} + \mathbf{M}_y \frac{\partial U}{\partial y} + \mathbf{M}_z \frac{\partial U}{\partial z} = \mathbf{M} \cdot \nabla U \end{aligned} \quad (3.49)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_x &= \left(n_x \mathbf{M}_{E_x} + n_y \mathbf{M}_{F_x} + n_z \mathbf{M}_{G_x} \right) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial U} \\ \mathbf{M}_y &= \left(n_x \mathbf{M}_{E_y} + n_y \mathbf{M}_{F_y} + n_z \mathbf{M}_{G_y} \right) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial U} \\ \mathbf{M}_z &= \left(n_x \mathbf{M}_{E_z} + n_y \mathbf{M}_{F_z} + n_z \mathbf{M}_{G_z} \right) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial U} \end{aligned} \quad (3.50)$$

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_x \vec{\mathbf{i}} + \mathbf{M}_y \vec{\mathbf{j}} + \mathbf{M}_z \vec{\mathbf{k}} \quad (3.51)$$

Градиент U :

$$\mathbf{grad} U = \nabla U = \frac{\partial U}{\partial x} \vec{\mathbf{i}} + \frac{\partial U}{\partial y} \vec{\mathbf{j}} + \frac{\partial U}{\partial z} \vec{\mathbf{k}} \quad (3.52)$$

Для вычисления градиента на гранях ячеек используется метод взвешенных наименьших квадратов [170].

Градиент в ячейке C равен

$$\mathbf{grad} \phi_C = \nabla \phi_C = \sum_{k=1}^{NB(C)} (\mathbf{c}_k w_k (\phi_k - \phi_C)) = \sum_{k=1}^{NB(C)} (\mathbf{d}_k (\phi_k - \phi_C)) \quad (3.53)$$

где $NB(C)$ - число соседей, через которые определяется градиента в ячейке C ; w_k - весовые коэффициенты, равные обратному расстоянию между ячейкой C и

соответствующим k -тым соседом.

$$w_k = \frac{1}{|\mathbf{r}_{F_k} - \mathbf{r}_C|} = \frac{1}{\sqrt{\Delta x_k^2 + \Delta y_k^2 + \Delta z_k^2}}$$

Градиент на грани между ячейками С и Q является линейной комбинацией градиентов в этих ячейках:

$$\begin{aligned} \nabla \phi_{CQ} &= r \nabla \phi_C + (1-r) \nabla \phi_Q \\ 0 \leq r \leq 1 \end{aligned} \quad (3.54)$$

3.7 Конечно-объемное уравнение, учитывающее только вязкие члены

Исходное уравнение (3.2)

$$V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} = \sum_{j \in q} \bar{\mathbf{F}}_{V,j} \cdot \bar{\mathbf{n}}_j s_j \quad (3.55)$$

Для вязкого потока через любую грань используем формулу (3.49), а для входящих в неё компонент градиента - формулы (3.53) и (3.54).

Таким образом,

$$\begin{aligned} (\nabla \mathbf{U})_{CQ} &= r (\nabla \mathbf{U})_C + (1-r) (\nabla \mathbf{U})_Q = r \sum_{k=1}^{NB(C)} (\mathbf{d}_k (\mathbf{U}_k - \mathbf{U}_C)) + (1-r) \sum_{m=1}^{NB(Q)} (\mathbf{d}_m (\mathbf{U}_m - \mathbf{U}_Q)) \\ (\nabla \mathbf{U})_C &= \sum_{k=1}^{NB(C)} (\mathbf{d}_k (\mathbf{U}_k - \mathbf{U}_C)) \\ (\nabla \mathbf{U})_Q &= \sum_{m=1}^{NB(Q)} (\mathbf{d}_m (\mathbf{U}_m - \mathbf{U}_Q)) \\ (\bar{\mathbf{F}}_V \cdot \bar{\mathbf{n}})_{CQ} &= \mathbf{M}_{CQ} \cdot (\nabla \mathbf{U})_{CQ} = \mathbf{M}_{CQ} \cdot \left[r \sum_{k=1}^{NB(C)} (\mathbf{d}_k (\mathbf{U}_k - \mathbf{U}_C)) + (1-r) \sum_{m=1}^{NB(Q)} (\mathbf{d}_m (\mathbf{U}_m - \mathbf{U}_Q)) \right] = \\ &= \left[r \sum_{k=1}^{NB(C)} \mathbf{M}_{CQ} \cdot \mathbf{d}_k (\mathbf{U}_k - \mathbf{U}_C) + (1-r) \sum_{m=1}^{NB(Q)} \mathbf{M}_{CQ} \cdot \mathbf{d}_m (\mathbf{U}_m - \mathbf{U}_Q) \right] \end{aligned} \quad (3.56)$$

Вектор \mathbf{d} является пространственным вектором, а вектор \mathbf{U} - вектором, состоящим из неизвестных величин системы. Они независимы друг от друга, и поэтому их можно переставлять.

Как всегда, используем явно-неявное представление потока:

$$\vec{\mathbf{F}}_V \cdot \vec{\mathbf{n}} = \alpha (\vec{\mathbf{F}}_V \cdot \vec{\mathbf{n}})^{n+1} + (1-\alpha) (\vec{\mathbf{F}}_V \cdot \vec{\mathbf{n}})^n = \alpha \left[(\vec{\mathbf{F}}_V)^{n+1} - (\vec{\mathbf{F}}_V)^n \right] \cdot \vec{\mathbf{n}} + (\vec{\mathbf{F}}_V \cdot \vec{\mathbf{n}})^n \quad (3.57)$$

Неявное представление:

$$\begin{aligned} & \left[(\vec{\mathbf{F}}_V)^{n+1} \cdot \vec{\mathbf{n}} - (\vec{\mathbf{F}}_V)^n \cdot \vec{\mathbf{n}} \right]_{CQ} \equiv (\delta \vec{\mathbf{F}}_V \cdot \vec{\mathbf{n}})_{CQ} \\ & = \left[r \sum_{k=1}^{NB(C)} \mathbf{M}_{CQ} \cdot \mathbf{d}_k (\delta \mathbf{U}_k - \delta \mathbf{U}_C) + (1-r) \sum_{m=1}^{NB(Q)} \mathbf{M}_{CQ} \cdot \mathbf{d}_m (\delta \mathbf{U}_m - \delta \mathbf{U}_Q) \right] \end{aligned} \quad (3.58)$$

Аналогично гипотезе Тисенджер-Кофи предположим, что в неявном представлении потока достаточно учитывать только разности параметров в ячейках, прилежащих к грани, т.е.

$$\begin{aligned} & \left[(\vec{\mathbf{F}}_V)^{n+1} \cdot \vec{\mathbf{n}} - (\vec{\mathbf{F}}_V)^n \cdot \vec{\mathbf{n}} \right]_{CQ} \\ & = \left[r \mathbf{M}_{CQ} \cdot \mathbf{d}_{C,Q} (\delta \mathbf{U}_Q - \delta \mathbf{U}_C) + (1-r) \mathbf{M}_{CQ} \cdot \mathbf{d}_{Q,C} (\delta \mathbf{U}_C - \delta \mathbf{U}_Q) \right] \\ & = \mathbf{M}_{CQ} \cdot \left[r \mathbf{d}_{C,Q} - (1-r) \mathbf{d}_{Q,C} \right] (\delta \mathbf{U}_Q - \delta \mathbf{U}_C) = \mathbf{M}_{CQ} \cdot \mathbf{d}_{CQ} (\delta \mathbf{U}_Q - \delta \mathbf{U}_C) \end{aligned} \quad (3.59)$$

Здесь под $\mathbf{d}_{C,Q}$ подразумевается градиентный коэффициент, определенный в ячейке C по отношению к соседу Q; а под $\mathbf{d}_{Q,C}$ подразумевается градиентный коэффициент, определенный в ячейке Q по отношению к соседу C;

$$\mathbf{d}_{CQ} = r \mathbf{d}_{C,Q} - (1-r) \mathbf{d}_{Q,C} \quad (3.60)$$

Вероятно, для определения матрицы \mathbf{M}_{CQ} следует использовать формулу типа (3.60).

Подставляем (3.59) в (3.57) и получаем окончательную формулу для неявного представления вязкого потока на грани CQ:

$$(\vec{\mathbf{F}}_V \cdot \vec{\mathbf{n}})_{CQ} = (\vec{\mathbf{F}}_V \cdot \vec{\mathbf{n}})_{CQ}^n + \alpha \mathbf{M}_{CQ} \cdot \mathbf{d}_{CQ} (\delta \mathbf{U}_Q - \delta \mathbf{U}_C) \quad (3.61)$$

Вспоминаем, что

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \mathbf{M}_x \vec{\mathbf{i}} + \mathbf{M}_y \vec{\mathbf{j}} + \mathbf{M}_z \vec{\mathbf{k}} \\ \mathbf{d}_{CQ} &= (d_{CQ})_x \vec{\mathbf{i}} + (d_{CQ})_y \vec{\mathbf{j}} + (d_{CQ})_z \vec{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

Таким образом

$$\mathbf{M}_{cQ} \cdot \mathbf{d}_{cQ} = \mathbf{M}_x (d_{cQ})_x + \mathbf{M}_y (d_{cQ})_y + \mathbf{M}_z (d_{cQ})_z \quad (3.62)$$

Для представления (3.55) лучше преобразовать формулу (3.61) к виду:

$$\vec{\mathbf{F}}_{V,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j = (\vec{\mathbf{F}}_{V,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j)^n + \alpha \mathbf{M}_j \cdot \mathbf{d}_j (\delta \mathbf{U}_{qj} - \delta \mathbf{U}_q) \quad (3.63)$$

Подставляем в (3.55) и получаем систему

$$\left[\mathbf{I} + \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (\mathbf{M}_j \cdot \mathbf{d}_j) s_j \right] \delta \mathbf{U}_q^{n+1} - \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (\mathbf{M}_j \cdot \mathbf{d}_j) s_j \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1} = \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(\vec{\mathbf{F}}_{V,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j)^n \right] s_j \quad (3.64)$$

Эта система имеет такую же форму, как для невязких потоков (3.33):

$$\mathbf{A}_q \delta \mathbf{U}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1} = \Delta \mathbf{U}_q^n \quad (3.65)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_q &= \mathbf{I} + \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (\mathbf{M}_j \cdot \mathbf{d}_j) s_j, \quad \mathbf{A}_{qj} = -\alpha \frac{\Delta t}{V_q} (\mathbf{M}_j \cdot \mathbf{d}_j) s_j, \\ \Delta \mathbf{U}_q^n &= \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(\vec{\mathbf{F}}_{V,j} \cdot \vec{\mathbf{n}}_j)^n \right] s_j \end{aligned} \quad (3.66)$$

Здесь, также как и для невязких потоков необходимо учитывать то, что для «левых» ячеек знак перед Δt должен меняться на противоположный по сравнению с «правыми» ячейками.

3.8 Решение системы алгебраических уравнений с разреженной матрицей

В результате дискретизации исходное уравнение (3.2) сводится к системе линейных алгебраических уравнений вида:

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \boldsymbol{\beta} \quad (3.67)$$

При этом матрицу системы \mathbf{A} можно представить в виде суммы диагональной матрицы \mathbf{D} , нижнетреугольной матрицы \mathbf{L} и верхнетреугольной матрицы \mathbf{U} .

$$A = D + L + U$$

$$\begin{aligned} (D + L)D^{-1}(D + U) &= (D + L)(D^{-1}D + D^{-1}U) = (D + L)I + (D + L)D^{-1}U \\ &= D + L + (DD^{-1}U + LD^{-1}U) = D + L + U + LD^{-1}U = A + LD^{-1}U \end{aligned}$$

$$A = (D + L)D^{-1}(D + U) - LD^{-1}U$$

$$(D + L)D^{-1}(D + U)\mathbf{x} = A\mathbf{x} + LD^{-1}U\mathbf{x}$$

$$A\mathbf{x} = \boldsymbol{\beta}$$

$$(D + L)D^{-1}(D + U)\mathbf{x} = \boldsymbol{\beta} + LD^{-1}U\mathbf{x}$$

Учитывая, что каждая ячейка конечно-объемной сетки имеет ограниченный набор соседей, равный количеству её граней, каждая строка матрицы A системы (3.67) имеет количество ненулевых элементов, пропорциональное числу граней соответствующей ячейки (зависит от выбранного порядка аппроксимации в неявной части). Исходя из этого, общее число ненулевых элементов матрицы мало по сравнению с общим количеством её элементов (равно количеству ячеек конечно-объемной сетки, умноженному на число параметров, характеризующих систему).

Такие матрицы называют разреженными.

В линейной алгебре демонстрируется, что применение прямых методов решения больших систем линейных уравнений с разреженной матрицей крайне неэффективно с точки зрения использования вычислительных ресурсов.

Будем использовать итеративный метод:

$$\begin{aligned} (D + L)D^{-1}(D + U)\mathbf{x}^{(m)} &= \boldsymbol{\beta} + LD^{-1}U\mathbf{x}^{(m-1)}, \quad m = 1, 2, \dots \\ \mathbf{x}^{(0)} &= \mathbf{0} \end{aligned} \tag{3.68}$$

Вводим вектор

$$\mathbf{y} = D^{-1}(D + U)\mathbf{x}^{(m)} \tag{3.69}$$

и решаем систему

$$\Phi\mathbf{y} = \mathbf{b}, \tag{3.70}$$

где

$$\Phi = (D + L), \quad \mathbf{b} = \boldsymbol{\beta} + LD^{-1}U\mathbf{x}^{(m-1)} \quad (3.71)$$

Первая строка:

$$\Phi_{11}y_1 = b_1 \quad \rightarrow \quad y_1 = \Phi_{11}^{-1}b_1 \quad (3.72)$$

Вторая строка и т.д.:

$$\Phi_{21}y_1 + \Phi_{22}y_2 = b_2 \quad \rightarrow \quad y_2 = \Phi_{22}^{-1}(b_2 - \Phi_{21}y_1)$$

$$\Phi_{31}y_1 + \Phi_{32}y_2 + \Phi_{33}y_3 = b_3 \quad \rightarrow \quad y_3 = \Phi_{33}^{-1}[b_3 - (\Phi_{31}y_1 + \Phi_{32}y_2)]$$

...

$$\Phi_{i1}y_1 + \Phi_{i2}y_2 + \Phi_{i3}y_3 + \dots + \Phi_{i,i-1}y_{i-1} + \Phi_{ii}y_i = b_i \quad \rightarrow$$

$$y_i = \Phi_{ii}^{-1}[b_i - (\Phi_{i1}y_1 + \Phi_{i2}y_2 + \Phi_{i3}y_3 + \dots + \Phi_{i,i-1}y_{i-1})], \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$(\Phi_{i1}y_1 + \Phi_{i2}y_2 + \Phi_{i3}y_3 + \dots + \Phi_{i,i-1}y_{i-1}) = \sum_{s=1}^{i-1} \Phi_{is}y_s$$

После определения \mathbf{y} решаем (3.69):

$$(D + U)\mathbf{x}^{(m)} = D\mathbf{y} \quad (3.73)$$

или

$$\Psi\mathbf{x} = \mathbf{r}, \quad (3.74)$$

где: $\mathbf{r} = D\mathbf{y}$, $\Psi = (D + U)$ (номер итерации опускаем).

Последняя строка N :

$$\psi_{NN}x_N = r_N \quad \rightarrow \quad x_N = \psi_{NN}^{-1}r_N \quad (3.75)$$

Предпоследняя и т.д.:

$$\begin{aligned}
& \psi_{N-1,N-1}x_{N-1} + \psi_{N-1,N}x_N = r_{N-1} \\
& \rightarrow x_{N-1} = (\psi_{N-1,N-1})^{-1} [r_{N-1} - \psi_{N-1,N}x_N], \\
& \psi_{N-2,N-2}x_{N-2} + \psi_{N-2,N-1}x_{N-1} + \psi_{N-2,N}x_N = r_{N-2} \\
& \rightarrow x_{N-2} = (\psi_{N-2,N-2})^{-1} [r_{N-2} - (\psi_{N-2,N-1}x_{N-1} + \psi_{N-2,N}x_N)] \\
& \dots \\
& \psi_{N-i,N-i}x_{N-i} + \psi_{N-i,N-i+1}x_{N-i+1} + \dots + \psi_{N-i,N-1}x_{N-1} + \psi_{N-i,N}x_N = r_{N-i} \rightarrow \\
& x_{N-i} = (\psi_{N-i,N-i})^{-1} [r_{N-i} - (\psi_{N-i,N-i+1}x_{N-i+1} + \dots + \psi_{N-i,N-1}x_{N-1} + \psi_{N-i,N}x_N)], \\
& i = 0, 1, \dots, N-1
\end{aligned} \tag{3.76}$$

При переходе к другому счётчику:

$$j = N - i \Rightarrow i = N - j, \quad N - i + 1 = j + 1 \tag{3.77}$$

$$\begin{aligned}
& x_j = (\psi_{j,j})^{-1} [r_j - (\psi_{j,j+1}x_{j+1} + \dots + \psi_{j,N-1}x_{N-1} + \psi_{j,N}x_N)], \quad j = N, N-1, \dots, 2, 1 \\
& \sum_{s=j+1}^N \psi_{j,s}x_s = \psi_{j,j+1}x_{j+1} + \dots + \psi_{j,N-1}x_{N-1} + \psi_{j,N}x_N
\end{aligned} \tag{3.78}$$

Данный метод характеризуется достаточной степенью эффективности при весьма простом способе программной реализации.

В дальнейшем возможно использование и иных методов решения систем линейных уравнений

3.9 Численный метод решения системы уравнений с ненулевыми жесткими источниками

3.9.1 Общее представление

В качестве исходного используется конечно-объемное представление (3.2)

$$V_q \frac{\partial \mathbf{U}_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} (\bar{\mathbf{F}}_{C,j} - \bar{\mathbf{F}}_{V,j}) \cdot \bar{\mathbf{n}}_j s_j + V_q \mathbf{H}_q$$

Источник представляется в неявной форме

$$\mathbf{H}_q = \mathbf{H}_q^n + \alpha \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \delta \mathbf{U}_q^{n+1} \quad (3.79)$$

Тогда система уравнений (3.65) преобразуется к виду

$$\left[\mathbf{A}_q - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \right] \delta \mathbf{U}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1} = \Delta \mathbf{U}_q^n \quad (3.80)$$

Здесь блочные матричные элементы \mathbf{A}_q и \mathbf{A}_{qj} выражаются через матрицы Якоби $\frac{\partial \mathbf{E}_c}{\partial \mathbf{U}}, \frac{\partial \mathbf{F}_c}{\partial \mathbf{U}}, \frac{\partial \mathbf{G}_c}{\partial \mathbf{U}}, \frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial \mathbf{U}}, \dots$ и их вариации (см. (3.34), (3.66)).

Явное приращение $\Delta \mathbf{U}_q^n$ определяется формулой

$$\Delta \mathbf{U}_q^n = -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (\vec{\mathbf{F}}_{c,j}^n - \vec{\mathbf{F}}_{v,j}^n) \cdot \vec{\mathbf{n}}_j s_j + \Delta t \mathbf{H}_q^n \quad (3.81)$$

Уравнение (3.80) по своей сути представляет систему линейных уравнений с коэффициентами в виде блочных матричных элементов; ее размерность равна $(N \times N)$, где N – число ячеек сетки. Матрица этой системы является разреженной (число ненулевых членов в каждой строке для каждой ячейки не превышает числа соседних ячеек плюс 1).

Методы решения разреженных систем линейных уравнений с числовыми коэффициентами подробно описаны, например, в [170]. Эти методы могут быть расширены и на системы с блочными матричными элементами. Но при этом необходимо на каждой итерации в каждой ячейке производить обращение матрицы $\mathbf{B}_q = \left[\mathbf{A}_q - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \right]$, размер которой равен числу уравнений в основной системе (3.1).

Число таких уравнений для реальных задач с большим количеством химических компонентов и энергетических мод может достигать 50 и более. На больших сетках многократное обращение матрицы \mathbf{B}_q может потребовать огромных вычислительных ресурсов.

Но можно существенно упростить задачу.

3.9.2 Матрицы Якоби для вязких и невязких потоков

Прежде всего следует отметить, что все матрицы Якоби, связанные с вязкими/невязкими потоками, можно привести к виду [154]:

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_{11} & \mathbf{0} \\ \Phi_{21} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \quad (3.82)$$

Матрица блок Φ_{11} связана с первыми пятью уравнениями системы (3.1) и имеет размер 5×5 . Остальные матрицы блоки связаны с дополнительными уравнениями (химических компонентов, энергий, турбулентных характеристик и имеют следующие размеры: Φ_{21} - $N_a \times 5$; \mathbf{D} - диагональная матрица размером N_a . Здесь N_a - число дополнительных уравнений.

Основные достоинства матрицы вида (3.82):

1) её обращение сводится к однократному обращению матрицы Φ_{11} и тривиальным операциям перемножения матриц (Формула Фробениуса):

$$\Phi^{-1} = \begin{pmatrix} \Phi_{11}^{-1} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{D}^{-1}\Phi_{21}\Phi_{11}^{-1} & \mathbf{D}^{-1} \end{pmatrix} \quad (3.83)$$

2) любые необходимые операции с такой матрицей (обращение, перемножение) не меняют её форму, т.е. блок Φ_{12} остается нулевым, а блок Φ_{22} остаётся диагональной матрицей.

Как следствие, блочный матричный элемент \mathbf{A}_q также имеет форму (3.82).

Таким образом, решение системы (3.80) при нулевом источнике $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ существенно менее затратное с точки зрения компьютерных ресурсов по сравнению с тем случаем, когда осуществляется прямое обращение матрицы \mathbf{V}_q .

Ситуация существенно усложняется в случае, когда источник \mathbf{H} не равен нулю.

Во-первых, матрица \mathbf{V}_q уже не имеет форму (3.82), и операции с ней не обладают теми преимуществами, о которых говорилось выше. Во-вторых, очень часто характерное время химических и энергетических процессов существенно

меньше характерного газодинамического времени, и прямое решение системы (3.80) требует уменьшения шага по времени. Это происходит из-за того, что для обеспечения устойчивого решения выбор шага должен ориентироваться на наиболее быстрые процессы.

3.9.3 Расщепление по физическим процессам

Наиболее часто для решения указанных выше проблем используется численная схема с расщеплением по физическим процессам. В этом случае на каждом шаге по времени последовательно решаются уравнения

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = \mathbf{H} \quad (3.84)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E}_c - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{F}_c - \mathbf{F}_v) + \frac{\partial}{\partial z}(\mathbf{G}_c - \mathbf{G}_v) = \mathbf{0} \quad (3.85)$$

При этом на каждом шаге по времени начальным условием для уравнения (3.85) является решение, полученное в результате решения уравнения (3.84). Приращение, полученное в результате решения (3.84), равно

$$\delta \tilde{\mathbf{U}}_q^{n+1} = \left[\mathbf{I} - \alpha \Delta t (\partial \mathbf{H} / \partial \mathbf{U})_q^n \right]^{-1} \Delta \mathbf{H}_q^n \quad (3.86)$$

Здесь $\tilde{\mathbf{U}}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \delta \tilde{\mathbf{U}}^{n+1}$

Приращение, полученное в результате решения (3.85), находится из решения системы

$$\mathbf{A}_q \delta \tilde{\mathbf{U}}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta \tilde{\mathbf{U}}_{qj}^{n+1} = \Delta \tilde{\mathbf{U}}_q^n \quad (3.87)$$

где явное приращение равно

$$\Delta \tilde{\mathbf{U}}_q^n = -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[\vec{\mathbf{F}}_{C,j}(\tilde{\mathbf{U}}^{n+1}) - \vec{\mathbf{F}}_{V,j}(\tilde{\mathbf{U}}^{n+1}) \right] \cdot \vec{\mathbf{n}}_j s_j \quad (3.88)$$

Здесь $\mathbf{U}^{n+1} = \tilde{\mathbf{U}}^{n+1} + \delta \mathbf{U}^{n+1}$. Общее приращение основного вектора равно

$$\delta \mathbf{U}^{n+1} = \delta \tilde{\mathbf{U}}^{n+1} + \delta \mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n \quad (3.89)$$

Метод расщепления по физическим величинам имеет ряд недостатков: может появиться нефизичность результатов из-за отсутствия взаимодействия между различными процессами. Также, возможны проблемы со сходимостью: результаты, полученные после решения уравнения (3.84) могут несколько отличаться от полученных после решения (3.85).

Желательно избежать раздельного приращения искомой функции в результате различных физических процессов и получить полностью связанную схему.

3.9.4 Полностью связанная схема 1

Применим следующий метод.

Преобразуем уравнение (3.80):

$$\mathbf{A}_q \delta \mathbf{U}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1} = \Delta \mathbf{U}_q^n + \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \delta \mathbf{U}_q^{n+1} \quad (3.90)$$

И рассмотрим решение уравнения

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} = \mathbf{H} \quad (3.91)$$

относительно новой переменной $\bar{\mathbf{U}}$. (Фактически это уравнение (3.1), в котором отброшены вязкие/невязкие потоки). Решением этого уравнения при использовании неявной схемы Эйлера является

$$\delta \bar{\mathbf{U}}_q^{n+1} = \left[\mathbf{I} - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \right]^{-1} \Delta t \mathbf{H}_q^n \quad (3.92)$$

Подставим это решение в уравнение (3.90) вместо $\delta \mathbf{U}_q^{n+1}$:

$$\mathbf{A}_q \delta \mathbf{U}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1} = \Delta \mathbf{U}_q^n - \Delta t \mathbf{H}_q^n + \delta \bar{\mathbf{U}}_q^{n+1} \quad (3.93)$$

При выводе этой формулы использовалось несложное преобразование

$$\begin{aligned} \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \left[\mathbf{I} - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \right]^{-1} \Delta t \mathbf{H}_q^n &= - \left[-\mathbf{I} + \mathbf{I} - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \right] \left[\mathbf{I} - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \right]^{-1} \Delta t \mathbf{H}_q^n \\ &= \left[\mathbf{I} - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} \right)_q^n \right]^{-1} \Delta t \mathbf{H}_q^n - \Delta t \mathbf{H}_q^n = \delta \bar{\mathbf{U}}_q^{n+1} - \Delta t \mathbf{H}_q^n \end{aligned}$$

Сравнение с формулой (3.81) показывает, что стоящее в правой части (3.93) выражение $\Delta \mathbf{U}_q^n - \Delta t \mathbf{H}_q^n$ есть не что иное, как явное приращение основного вектора, обусловленное только вязкими и невязкими потоками.

Система (3.93) быстро и эффективно решается таким же методом, как система (3.80) с нулевым источником.

На первый взгляд, может показаться, что данная численная схема очень похожа на метод расщепления по физическим процессам. Но на самом деле имеется качественное отличие. Система (3.93) решается относительно полного приращения основного вектора $\delta \mathbf{U}_q^{n+1}$ и является полностью связанной. Таким образом, предлагаемая численная схема лишена недостатков, присущих схеме с расщеплением по физическим процессам.

Легко показать, что численная схема (3.93) аппроксимирует исходное уравнение (3.1) с первым порядком по Δt и является безусловно устойчивой.

Как уже говорилось, решение уравнений химической кинетики и т.п. может потребовать существенно меньший шаг по времени по сравнению с газодинамическим шагом.

Поэтому в областях, где происходят быстрые химические реакции, для решения уравнения (3.91) используются неявные многошаговые методы, в частности метод Гира [171,172].

На шаге $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ решается система дифференциальных уравнений относительно неизвестного вектора \mathbf{Y}

$$\frac{d\mathbf{Y}}{dt} = \mathbf{H}(t, \mathbf{Y}) \quad (3.94)$$

Начальное условие для уравнения (3.94):

$$\mathbf{Y}_0 = \mathbf{Y}(0) = \mathbf{U}(t^n) = \mathbf{U}^n \quad (3.95)$$

Применим к решению этого уравнения метод Гира.

1) Шаг $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ разбивается на N_p частей

$$h_j = h = \Delta t / N_p \quad (3.96)$$

Значение N_p может быть разным для разных частей системы и для разных ячеек.

2) Выбирается максимальный порядок метода Гира $m_{\max} \leq 4$

На первом шаге h_1 используется метод Гира первого порядка $m=1$, на второго – второго порядка и т.д., но не больше m_{\max}

Значение m_{\max} также может быть разным для разных частей системы и для разных ячеек.

3) На каждом j -ом шаге необходимо решить систему нелинейных уравнений относительно \mathbf{Y}_{j+1} :

$$h\mathbf{H}(t_{j+1}, \mathbf{Y}_{j+1}) - a_0 \mathbf{Y}_{j+1} = \mathbf{R} \quad (3.97)$$

где

$$\mathbf{R} = \sum_{k=1}^m a_k \mathbf{Y}_{j-k+1} \quad (3.98)$$

Эту нелинейную систему можно решать отдельно для каждой части основной системы уравнений и соответствующих частей векторов \mathbf{U} и \mathbf{H} . Для решения используется метод Ньютона.

Значения коэффициентов представлены в таблице 3.1:

Таблица 3.1

m	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
1	1	-1			
2	3/2	-2	1/2		
3	11/6	-3	3/2	-1/3	

4	25/12	-4	3	-4/3	1/4
---	-------	----	---	------	-----

3.9.5 Полностью связанная схема 2

Матрицу $\partial \mathbf{H} / \partial \mathbf{U}$ можно представить в виде:

$$\partial \mathbf{H} / \partial \mathbf{U} = \mathbf{d} + \mathbf{g} \quad (3.99)$$

где \mathbf{d} - диагональная часть матрицы $\partial \mathbf{H} / \partial \mathbf{U}$, а \mathbf{g} - недиагональная.

Тогда уравнение (3.80) преобразуется к виду:

$$\left[\mathbf{A}_q - \alpha \Delta t \mathbf{d}_q^n \right] \delta \mathbf{U}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1} = \Delta \mathbf{U}_q^n + \alpha \Delta t \mathbf{g}_q^n \delta \mathbf{U}_q^{n+1} \quad (3.100)$$

Можно снова подставить в правую часть этого уравнения приращение $\delta \bar{\mathbf{U}}_q^{n+1}$, полученное в результате решения уравнения (3.91), вместо $\delta \mathbf{U}_q^{n+1}$:

$$\left[\mathbf{A}_q - \alpha \Delta t \mathbf{d}_q^n \right] \delta \mathbf{U}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta \mathbf{U}_{qj}^{n+1} = \Delta \mathbf{U}_q^n + \alpha \Delta t \mathbf{g}_q^n \delta \bar{\mathbf{U}}_q^{n+1} \quad (3.101)$$

После определения правой части уравнения (3.101) это уравнение эффективно решается таким же методом, как система (3.80) с нулевым источником, т.к. матрица имеет форму (3.82) и, следовательно, обладает всеми её преимуществами.

В остальном этот метод реализуется полностью так же, как и метод, описанный в 3.9.4.

Численные эксперименты показали, что для уравнений химической кинетики наиболее устойчивые результаты получаются при использовании метода, описанного в 3.9.4., а для энергетических уравнений – метод 3.9.5.

3.9.6 Тестирование схемы

Для апробации предложенной схемы были проведены следующие тестовые расчёты.

Тест 1. Моделирование неравновесного потока в окрестности передней

части гиперзвукового летательного аппарата (число Маха $M=27$, высота полета = 75 км; учитывалось 11 химических компонентов, 3 колебательных моды, нулевая каталитическая активность).

Использовались следующие граничные условия: радиус сферической части $R=0.05\text{m}$; скорость набегающего потока $u_e=7800\text{ m/s}$; температура и давление в окружающем пространстве $T_e=208.4\text{K}$, $p_e=2.388\text{Pa}$; стандартный состав атмосферы для данной высоты. Температура стенки $T_w=700\text{K}$.

На рисунке 1 представлено распределение плотности теплового потока вдоль образующей части носовой части летательного аппарата. Кривая 1 - расчёт с использованием чисто неявной схемы (уравнение (3.80)); кривая 2 - расчёт с использованием полностью связанной схемы 1.

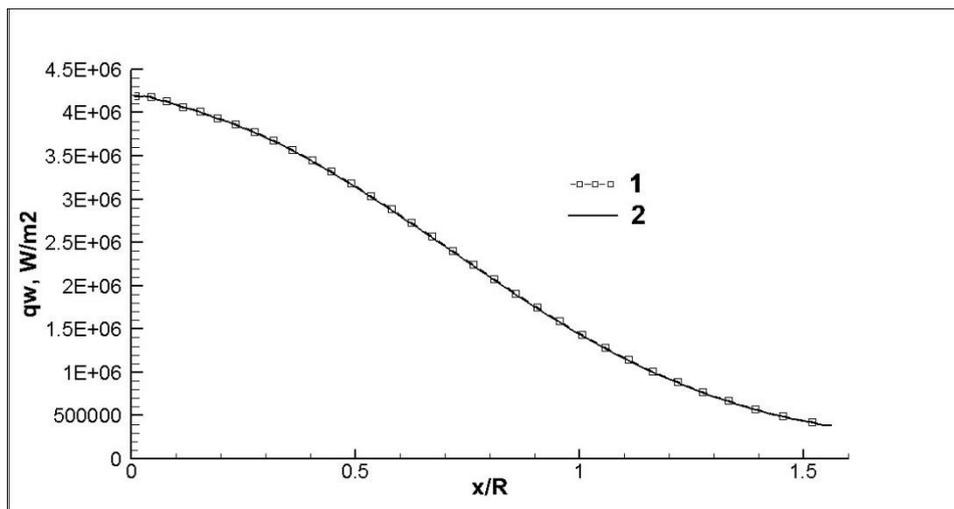


Рисунок 3.1 – Распределение плотности теплового потока вдоль образующей части носовой части летательного аппарата

Очевидно, что результаты обоих расчётов полностью совпадают.

Тест 2. Моделирование химически неравновесного гетерогенного течения в канале комбинированного прямоточного двигателя с твёрдотопливным газогенератором (скорость полета $M=7$, высота = 40 км; учитывалось 14 химических компонентов)

На рисунке 2 представлена схема расчётной области для данной задачи.

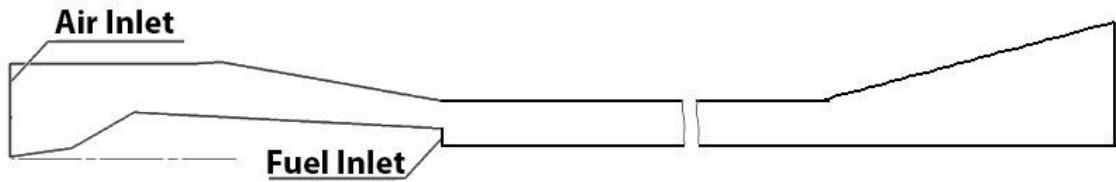


Рисунок 3.2 – Схема течения

Использовались следующие граничные условия на входе воздуха: скорость полета $u_e=2222$ m/s; температура и давление в окружающем пространстве $T_e=250.4$ К, $p_e=287.143$ Pa; стандартный состав атмосферы для данной высоты.

Параметры на выходе из газогенератора (Fuel Inlet) представлены в таблице 3.2.

Таблица 3.2

Скорость, м/с	Температура, К	Давление, Па	H	H ₂	H ₂ O	CO	CO ₂	HCl	N ₂
1582	2026	8.E4	0.3438E-3	0.37749	0.1232E-4	0.3635	0.3157E-5	0.5723E-2	0.24203

Состав задан в мольных долях. Длина камеры сгорания = 21.5 м.

На рисунках 3.3, 3.4 представлено распределения давления на стенке камеры сгорания.

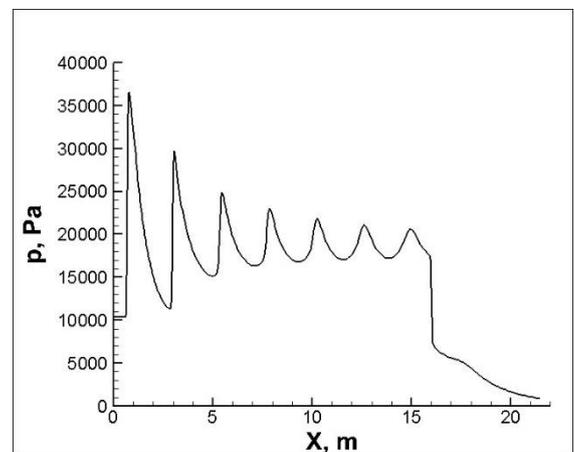
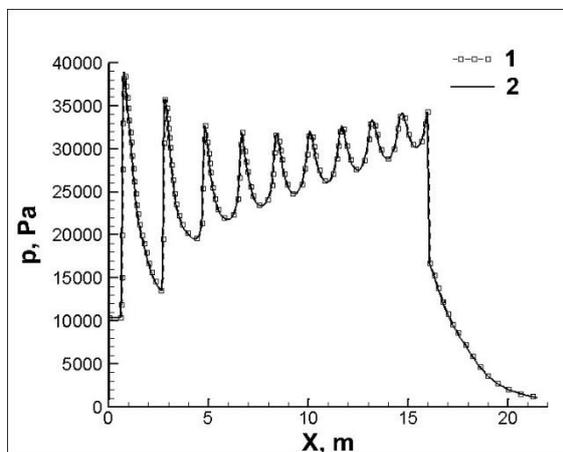


Рисунок 3.3 – Распределение давления на стенке камеры сгорания (химически реагирующий случай)

Рисунок 3.4 – Распределение давления на стенке камеры сгорания (химические реакции не учитываются)

На рисунке 3.3: кривая 1 - расчёт с использованием чисто неявной схемы (уравнение (3.80)); кривая 2 - расчёт с использованием полностью связанной схемы 1. Оба расчёта хорошо совпадают.

Сравнение эффективности различных численных схем представлено таблице 3.3:

Таблица 3.3

Схема	Число итераций	Компьютерное время, затрачиваемое на одну итерацию, по отношению к чисто неявной схеме
Чисто неявная (уравнение (3.80))	1000-1200	1
Схема с расщеплением по физическим процессам	1500-2000 (достичь полной сходимости не удалось)	0.2 - 0.25
Полностью связанная схема 1	1200-1500	0.2 - 0.25

При использовании данной схемы время расчёта может быть сокращено в несколько раз. При этом чем больше компонентов и энергетических мод, тем больше выигрыш от применения данной схемы.

Выводы по главе

Сформулирован численный метод решения систем уравнений газовой динамики, химической кинетики и энергетических мод. Описаны основные методы расщепления невязкого потока. Получено конечно-объёмное уравнение, учитывающее невязкие члены и вязкие потоки. Описаны методы решения

системы алгебраических уравнений с разреженной матрицей. Разработан численный метод решение системы уравнений с ненулевыми жёсткими источниками.

ГЛАВА 4. ПРИМЕНЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММНОГО КОДА UNIVERSE3D

Одной из основных характеристик численного метода является возможность создания его высокопроизводительной и масштабируемой по объёму задачи и числу процессорных ядер программной реализации. В данной главе описаны основные особенности реализации программного кода Universe3D, в котором реализован численный метод, представленный в главе 3, с использованием параллельных вычислений и с учётом особенностей современных вычислительных систем.

4.1 Особенности современных вычислительных систем

Сложность вычислительных задач в аэрокосмической отрасли постоянно растёт, что требует пропорционального роста производительности вычислительных систем. В последние годы рост однопроцессорной производительности, зависящей от частоты процессора и количества исполняемых за один такт инструкций, существенно замедлился, и общая производительность вычислительных систем стала увеличиваться в основном за счёт увеличения количества процессорных ядер (рисунок 4.1) и добавления векторных инструкций, позволяющих произвести одинаковую операцию сразу над несколькими элементами параллельно [173].

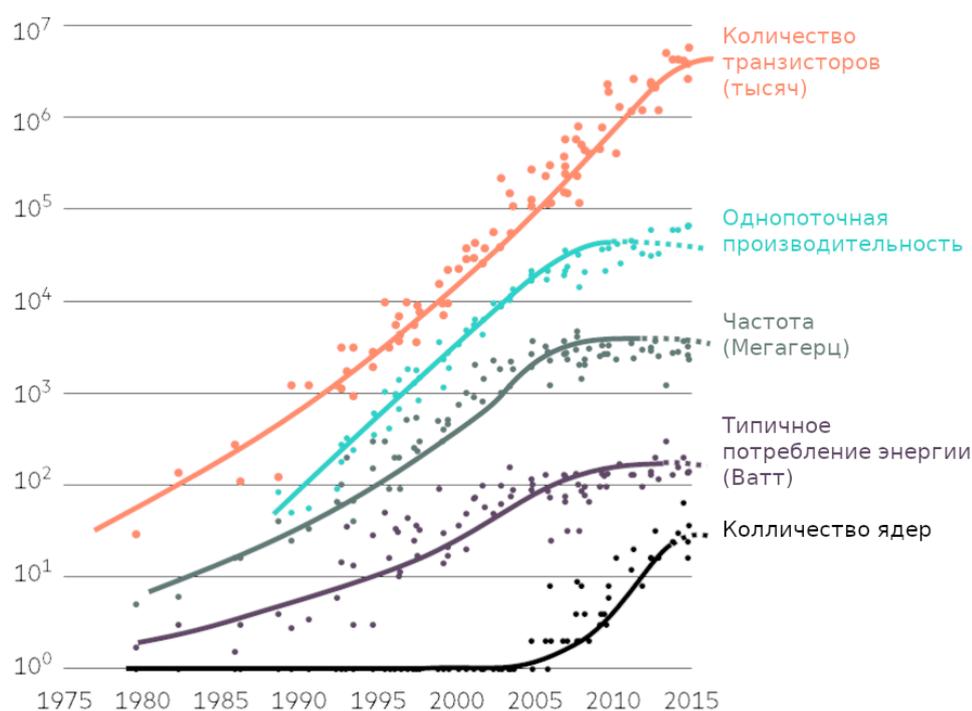


Рисунок 4.1 – Развитие процессоров

Программный код написанный под однопроцессорную систему нельзя просто запустить на многопроцессорной системе и ожидать увеличения производительности, он должен быть соответствующим образом модифицирован для использования вычислительных ресурсов многопроцессорных систем, также дело обстоит и с векторными инструкциями.

Производительность процессора является не единственным фактором влияющим на общую производительность вычислительной системы, не менее важным, а в случае вычислений с большими объёмами данных, даже более важным является производительность оперативной памяти. В данном вопросе дела обстоят ещё хуже, чем с увеличением производительности процессоров. При этом самой большой проблемой является не сам факт того, что производительность оперативной памяти выросла слабо, а то, что разрыв между производительностью процессора и оперативной памяти ещё больше увеличился [174] (рисунок 4.2). Наиболее сильное влияние на производительность оперативной памяти оказывает даже не скорость передачи данных, а задержки

случайного доступа. Из-за этого всё более часто встречается ситуация, когда процессор вместо выполнения вычислений ожидает данные из оперативной памяти.

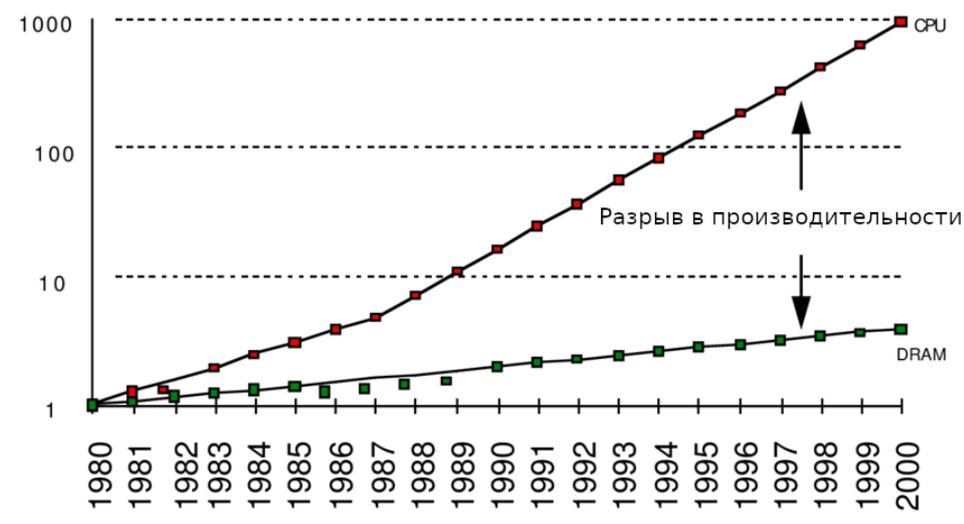


Рисунок 4.2 – Разрыв в производительности между процессорами и оперативной памятью

Для уменьшения влияния разрыва в производительности между процессором и оперативной памятью, в современных процессорах реализованы специальные механизмы, такие как:

- Процессорный кэш (CPU cache).
- Предсказание переходов (branch prediction).
- Спекулятивное исполнение (speculative execution).
- Предварительная (упреждающая) выборка данных и команд (data prefetching, instruction prefetching).

Для максимально эффективной работы данных механизмов и соответственно для приближения производительности процессора к теоретическому максимуму необходима специальная архитектура программного кода в части обработки данных и их расположения в оперативной памяти.

4.2 Общая архитектура и алгоритм работы программного кода Universe3D

Программный код Universe3D представляет собой реализацию численного метода, разработанного в данной работе. В качестве метода дискретизации уравнений по пространственным координатам используется метод конечных объёмов на неструктурированной сетке. Для дискретизации по времени используется неявный метод. Кратко записать общий алгоритм работы можно следующим образом:

1. Загружается расчётная сетка.
2. Задаётся начальное распределение искомых величин в расчётной области.
3. Задаются граничные условия.
4. Заполняется матрица неявных коэффициентов и вектор источников.
5. Решается система линейных уравнений.
6. С помощью результата решения системы обновляются значения искомых величин в расчётной области.
7. Проверяются условия сходимости. Если они не выполнены, алгоритм повторяется с пункта 3.
8. Выводятся результаты численного моделирования.

Временной шаг, условия сходимости при решении системы уравнений и условия сходимости самого метода различаются для стационарной и нестационарной задач. Стационарные задачи решаются методом установления.

Далее более подробно рассмотрим реализацию этапов данного алгоритма с привязкой к архитектурным решениям использованным в последовательной версии программного кода Universe3D.

4.2.1 Загрузка расчётной сетки

Расчётная сетка загружается в специальную структуру данных, где все элементы расчётной сетки, такие как ячейки, грани, рёбра и узлы представлены в виде элементов графа (рисунок 4.3), что позволяет быстро находить топологическую связь между элементами расчётной сетки. После загрузки

расчётной сетки производится расчёт геометрических характеристик ячеек и граней, необходимых для дальнейших вычислений.

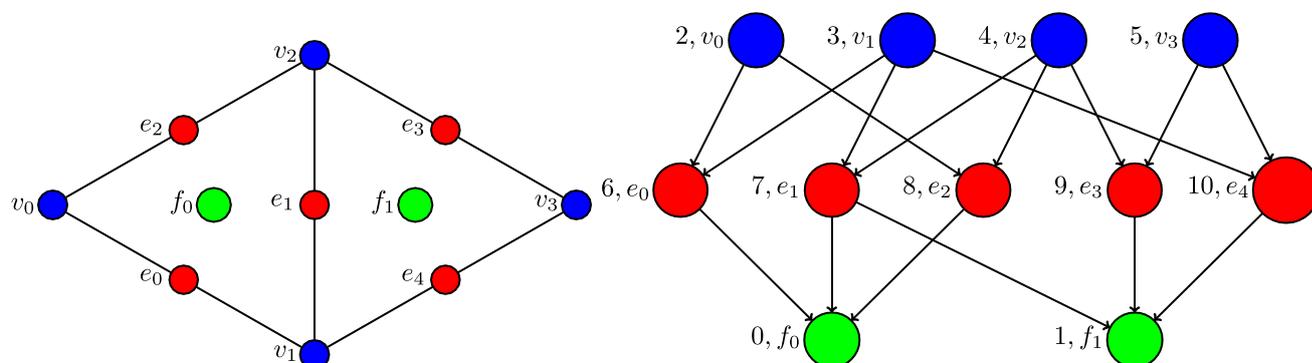


Рисунок 4.3 – Часть расчётной сетки и её представление в виде графа

Геометрические характеристики, как и большинство других массивов данных в компьютерном коде Univers3D располагаются в памяти по схеме «Структура массивов (Struct of Arrays, SoA)» [175] (рисунок 4.4, а), в противоположность схеме «Массив структур (Array of Structs, AoS)» (рисунок 4.4, б), т.е. для каждой характеристики, такой как, объём ячейки, площадь грани и т.д. используется отдельный массив, где номер элемента массива соответствует номеру ячейки или грани. Такой подход позволяет более эффективно использовать кэш процессора, т.к. загрузка в кэш из оперативной памяти производится не по одному элементу, а сразу определённым объёмом данных, значение которого зависит от конкретного процессора. Соответственно при обработке следующего элемента, значение для него уже будет располагаться в кэше процессора и обращения к оперативной памяти не последует. Если использовать схему с расположением структур в массиве, когда каждым элементом массива является структура содержащая разные геометрические характеристики ячейки, то после загрузки в кэш процессора, те из них, которые не были использованы в текущем вычислении, будут впустую занимать кэш процессора, что в свою очередь приведёт к более частому обращению к оперативной памяти и как следствие снижению производительности.

s[0]	x ₁	y ₁	z ₁	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>s_x</td> <td>x₁</td> <td>x₂</td> <td>x₃</td> <td>x₄</td> </tr> <tr> <td>s_y</td> <td>y₁</td> <td>y₂</td> <td>y₃</td> <td>y₄</td> </tr> <tr> <td>s_z</td> <td>z₁</td> <td>z₂</td> <td>z₃</td> <td>z₄</td> </tr> </tbody> </table>	s_x	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	s_y	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	s_z	z ₁	z ₂	z ₃	z ₄
s_x	x ₁	x ₂	x ₃		x ₄														
s_y	y ₁	y ₂	y ₃		y ₄														
s_z	z ₁	z ₂	z ₃		z ₄														
s[1]	x ₂	y ₂	z ₂																
s[2]	x ₃	y ₃	z ₃																
s[3]	x ₄	y ₄	z ₄																

(а)

(б)

Рисунок 4.4 – Массив структур (а) и структура массивов (б)

4.2.2 Задание начального распределения искомых величин

Начальное распределение задаётся либо по выбранному граничному условию, либо с помощью результатов предыдущего расчёта.

Для хранения текущих значений искомых величин используется вектор консервативных переменных. Также некоторые термодинамические параметры, необходимые для расчётов, хранятся в виде скалярных и векторных полей.

4.2.3 Задание граничных условий

Обычно для задания граничных условий при реализации метода конечных объёмов используются так называемые мнимые ячейки, расположенные на границе расчётной области. В них задаются значения параметров таким образом, чтобы при последующем расчёте потока через грань, выдерживались необходимые граничные условия. Данный подход связан с некоторыми сложностями при задании граничных условий и требует прохода по мнимым ячейкам для корректировки их значений на каждом шаге.

В программном коде Univers3D используется задание граничных условий без мнимых ячеек, непосредственно на самой грани, т.е. при проходе по граням производится расчёт потока в зависимости от типа грани. При этом грани разных типов хранятся в разных массивах и определение типа грани происходит сразу для всего массива, перед его обработкой. Данный подход позволяет избавиться от дополнительного ветвления в программе, которое могло бы привести к негативному эффекту на производительность из-за взаимодействия с механизмом

предсказания ветвления в процессоре. Дело в том, что данный механизм хорошо работает если ветвление происходит по определённой закономерности. Если оно полностью случайно, то данный механизм может привести даже к потере производительности, т.к. при каждом неудачном предсказании процессору приходится откатывать внутреннее состояние на несколько шагов назад, что требует достаточно большого количества тактов.

4.2.4 Заполнение матрицы коэффициентов и вектора источников.

Матрица коэффициентов представляет из себя квадратную разреженную матрицу с размерностью равному количеству ячеек, при этом каждый ненулевой элемент представляет из себя блочную матрицу, состоящую из трёх блоков, размерность блочной матрицы зависит от количества уравнений. Вектор источников представляет из себя логически двухмерный массив, который хранится в виде одномерного с размерностью (количество ячеек на количество уравнений).

Для вычисления вязких и невязких потоков используется проход по граням, расчёт потока через грань и внесение коэффициентов в матрицу и вектор источников. Направление потока определяется с помощью нормали грани и заранее определённых индексов владеющей и соседней ячейки.

Для эффективного обхода граней используется специальная структура данных упомянутая выше, а именно разделение массива граней на отдельные массивы по типу граней. Все массивы, относящиеся к граням, например геометрические характеристики, номера владеющей ячейки и т.д. разделяются на отдельные массивы с одинаковой индексацией в каждый из них. Данный подход позволяет обеспечить для разных типов граней разный набор массивов (например, у граничных граней нет индекса соседней ячейки). При этом нет необходимости хранить индексы граней, а при обходе по граням обеспечивается эффективное использование кэша процессора, т.к. данные в массивах граней хранятся в том же порядке, в котором происходит обход граней.

Для вычисления источников химических реакций, турбулентных характеристик и т.д. используется обход по ячейкам.

4.2.5 Решение системы уравнений

Для решения получившейся системы уравнений используется обобщённый метод минимальных невязок (англ. Generalized minimal residual method, GMRES) [176].

В качестве предобуславливателя используется Простой предобуславливатель Якоби [177].

4.2.6 Обновление значений искомых величин в расчётной области

Результат решения системы уравнений используется для корректировки текущего значения вектора консервативных переменных, после чего из него пересчитываются значения полей термодинамических величин.

4.2.7 Проверка условий сходимости

Обновляются значения невязки и проверяются условия сходимости в зависимости от типа задачи.

4.2.7 Вывод результатов

Из вектора консервативных величин вычисляются необходимые для вывода в качестве результатов поля искомых величин и выводятся в необходимом формате.

4.3 Параллельные вычисления

Под термином «параллельные вычисления» в данной работе подразумевается способ организации обработки данных, при котором одни и те же операции производятся над разными частями данных параллельно. Существует несколько способов организации параллельных вычислений, самыми распространёнными являются:

1. Организация взаимодействия через разделяемую память, когда потоки исполнения в рамках одного процесса операционной системы либо отдельные процессы операционной системы взаимодействуют через оперативную память. Достоинством такого метода является полный доступ всех потоков к разделяемым данным, соответственно отсутствует необходимость в обмене данными. К недостаткам можно отнести необходимость координации между потоками с помощью специальных примитивов синхронизации. Правильная организация такого взаимодействия является достаточно сложной задачей. А также невозможность организации такого взаимодействия между отдельными узлами в сети.
2. Организация взаимодействия через обмен сообщениями, когда процессы обмениваются данными, например, по средством сетевого соединения. Достоинствами данного способа взаимодействия является то, что каждый отдельный процесс можно рассматривать как однопоточный, соответственно отсутствует необходимость использования примитивов синхронизации, а также то, что обмен данными может производиться между отдельными узлами в сети.
3. Комбинированный способ взаимодействия, когда в рамках одного узла в сети используется взаимодействие через разделяемую память, а между отдельными узлами через обмен сообщениями. Данный способ является самым производительным, но одновременно и самым сложным в реализации.

4.3.1 Закон Амдала

Максимально возможное ускорение исполнения программного кода при использовании параллельных вычислений определяет закон Амдала (4.1) [178], который гласит: «В случае, когда задача разделяется на несколько частей, суммарное время её выполнения на параллельной системе не может быть меньше

времени выполнения самого медленного фрагмента».

$$Sp = \frac{1}{a + \frac{1-a}{p}} \quad (4.1)$$

Где Sp — ожидаемое ускорение; a — доля времени вычислений, которые могут быть получены только последовательными расчётами, p — количество ядер на которые производится распараллеливание.

Суть данного закона заключается в том, что ускорение исполнения программы на любом, даже бесконечно большом множестве вычислительных устройств, будет ограничено временем необходимым на выполнение её последовательной части (рисунок 4.5).

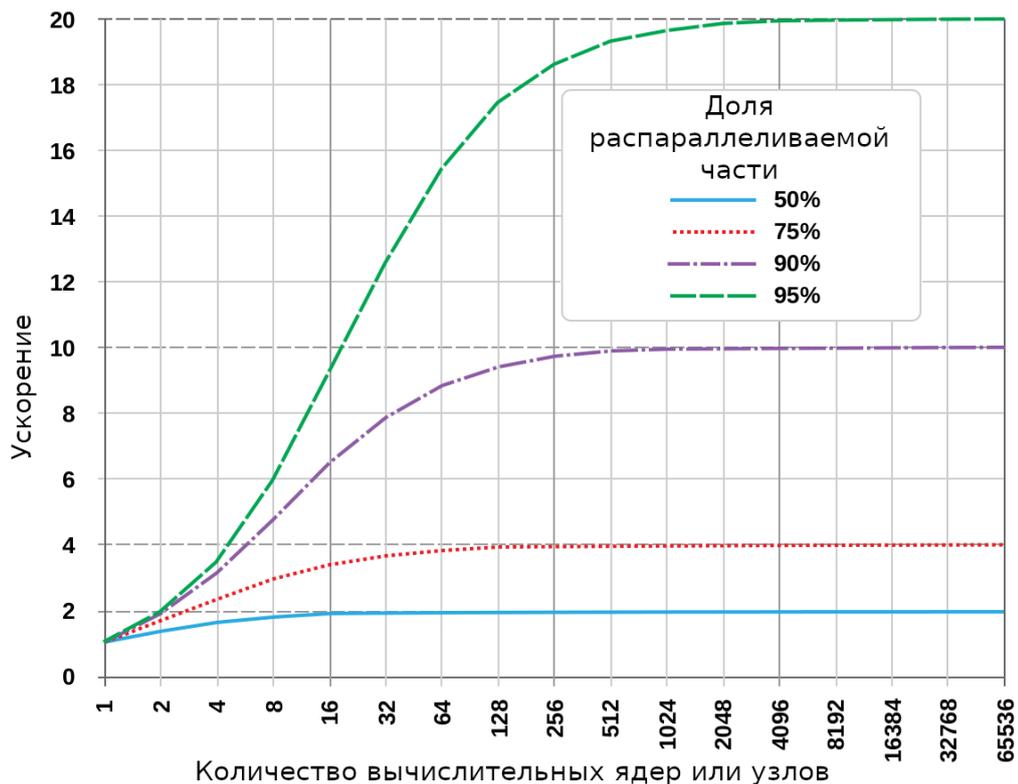


Рисунок 4.5 – Зависимость максимального ускорения от доли распараллеливаемой части программного кода

4.3.2 Технология MPI

Для реализации параллельных вычислений в компьютерном коде Universe3D используется технология MPI (Message Passing Interface) [179],

которая расшифровывается как Интерфейс передачи сообщений. Данная технология представляет из себя программный интерфейс, предназначенный для обмена данными между отдельными процессами. Данный интерфейс стандартизован и имеет несколько свободных и коммерческих реализаций в виде программных библиотек.

Среди функций интерфейса:

- Передача и получение сообщений между отдельными процессами.
- Коллективные взаимодействия процессов.
- Взаимодействия в группах процессов.
- Реализация топологий процессов.
- Динамическое порождение процессов и управление процессами.
- Односторонние коммуникации.
- Параллельный ввод и вывод.

Базовым механизмом взаимодействия при использовании MPI является передача сообщений между процессорами, при которой помимо передаваемых данных, необходимо указать:

- Коммуникатор (идентификатор группы процессов).
- Ранг процесса отправителя (номер процесса в коммуникаторе).
- Ранг процесса получателя.
- Тип сообщения.

При этом взаимодействие между процессами может быть:

- Блокирующим, при котором при вызове функции обмена происходит блокировка, ожидающая завершения обмена данными.
- Неблокирующим, когда после вызова функции обмена данными, управление сразу передаётся обратно в программу, не дожидаясь завершения обмена данными, но перед обращением к данным необходим

вызова дополнительной функции, производящей блокировку с ожиданием завершения обмена данными, если он ещё не был произведён.

Неблокирующие функции позволяют производить сокрытие задержек обмена данными.

4.3.3 Соккрытие задержек обмена данными

Среди всех элементов вычислительной системы одним из самых медленных является ввод-вывод, к которому в том числе относится обмен данными по сети. При этом основной проблемой является не скорость с которой передаются данные, а задержка их передачи, то есть время прошедшее с момента запроса данных, до начала их передачи. И если при использовании интерфейса MPI для обмена данными в рамках одного узла обычно применяется оптимизация, когда обмен данными на самом деле происходит через оперативную память и задержка обмена не заметна, то при обмене между отдельными узлами в сети необходимо использовать приёмы сокрытия задержек.

Самый распространённый приём заключается в перекрытии во времени обмена данными с вычислениями. Данный приём реализуется посредством начала обмена данными с помощью неблокирующего интерфейса, как только все данные необходимые для передачи готовы, и выполнении параллельно, независимых от передаваемых данных, вычислений.

4.3.4 Сильная и слабая масштабируемость

Для оценки качества программного кода, реализующего параллельные вычисления, используются показатели сильной и слабой масштабируемости.

- Сильная масштабируемость — показывает, как меняется время решения задачи с увеличением количества процессоров (или узлов) при неизменном общем объёме задачи.

- Слабая масштабируемость — показывает, как меняется время решения задачи с увеличением количества процессоров (или узлов) при неизменном объёме задачи для одного процессора (или узла) [180].

4.4 Особенности параллельной реализации программного кода Universe3D

Параллельная реализация программного кода Universe3D основана на организации обмена данными через обмен сообщениями с помощью технологии MPI.

В качестве механизма распределения работы на отдельные процессы используется разбиение расчётной сетки на отдельные части (рисунок 4.6).

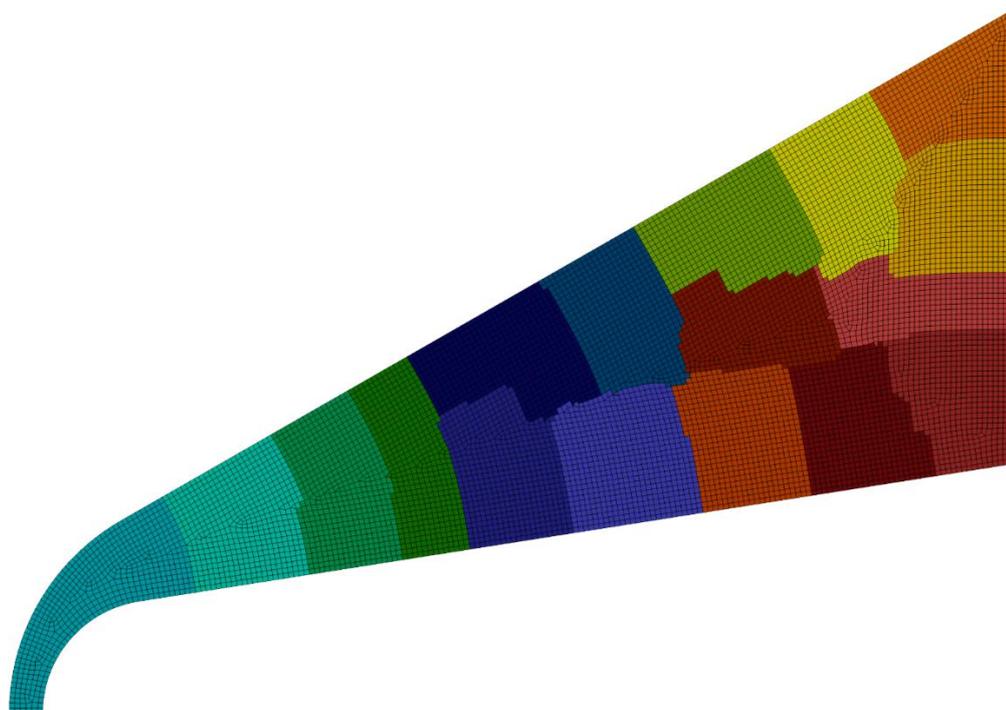


Рисунок 4.6 – Разбиение сетки на отдельные части

Так как при определении градиентов искомых величин и расчёте потоков через грани требуются значения соседних ячеек, то разбиение сетки делается с некоторым перекрытием, зависящим от выбранного метода расчёта градиента (рисунок 4.7), при этом ячейки, входящие в данное перекрытие, считаются принадлежащими соседнему процессу.

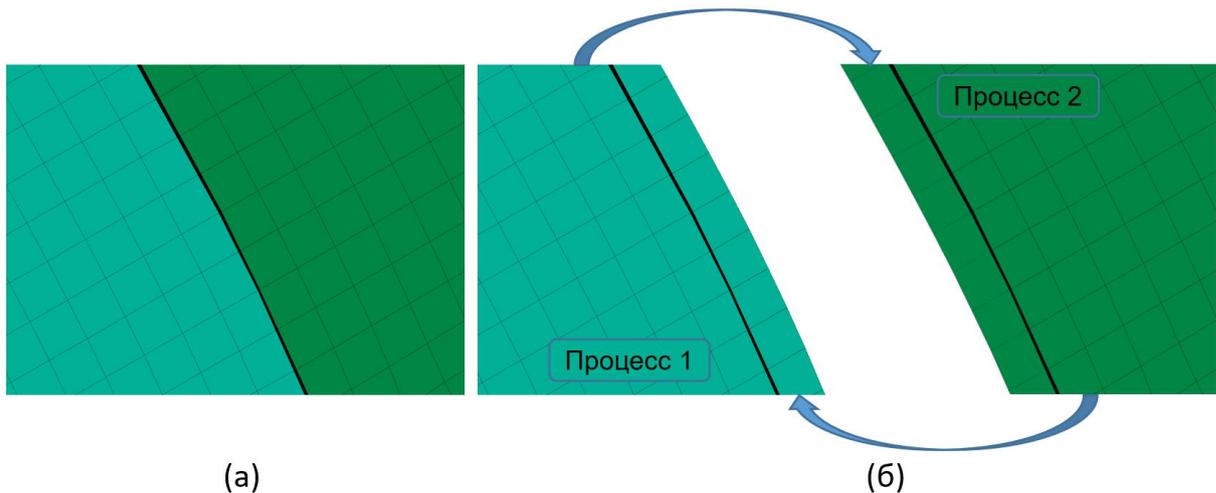


Рисунок 4.7 – (а) Граница разделения сетки, (б) Части сетки на 1-м и 2-м процессах с перекрытием (стрелками показан порядок обмена данными)

Из закона Амдала следует, что для ускорения расчёта параллельными необходимо делать все этапы работы алгоритма.

4.4.1 Параллельная реализация скалярных и векторных полей

Большинство полей векторных и скалярных величин в параллельной версии программного кода, как и в последовательной версии, представляют собой массив по количеству ячеек части сетки обрабатываемой данным процессом. При некоторых расчётах, как, например, расчёт химических источников и параметров турбулентности, расчёт достаточно провести только для ячеек принадлежащих данному процессу и проигнорировать ячейки принадлежащие соседнему процессу. Для того, чтобы при обработке ячеек постоянно не проверять принадлежность ячейки, ячейки пронумерованы таким образом, что ячейки, принадлежащие соседнему процессу, находятся после ячеек, принадлежащих данному процессу. Благодаря чему, достаточно просто обработать диапазон от первой ячейки до количества ячеек, принадлежащих процессу.

Кроме упрощения обработки ячеек данное расположение также упрощает обмен данными, т.к. достаточно просто передать последовательный участок данных.

4.4.2 Параллельные реализации матрицы и вектора

Параллельные матрица и вектор сделаны с помощью разделения общей матрицы и вектора на отдельные части по строкам, соответствующим глобальной нумерации ячеек. При этом на каждом процессе находятся строки матрицы и элементы вектора только для принадлежащих процессу ячеек.

Локальная часть матрицы на каждом процессе хранится в виде двух частей, квадратной матрицы с диагональными элементами и прямоугольной с элементами за пределами диагональной части (рисунок 4.8).

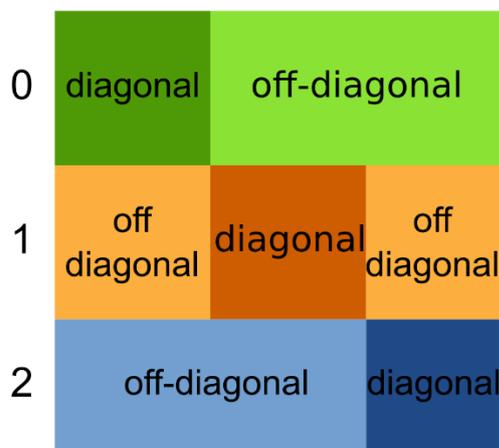


Рисунок 4.8 – Расположение параллельной матрицы на трёх процессах, diagonal - диагональная часть, off-diagonal - часть с элементами за пределами диагональной части

Данное разделение сделано для сокращения задержек обмена данными при решении системы уравнений. Например, при перемножении глобальной матрицы и вектора, обмен данными на данном процессе происходит параллельно с перемножением диагональной части локальной матрицы с локальным участком вектора.

4.4.3 Загрузка расчётной сетки

Загрузка расчётной сетки в параллельной версии программного кода происходит на так называемом корневом MPI процессе. Далее выполняется перенумерация ячеек по обратному алгоритму Катхилла-Макки (RCM, reverse

Cuthill-McKee) [181], что позволяет переместить большинство ненулевых элементов ближе к главной диагонали матрицы (рисунок 4.9).

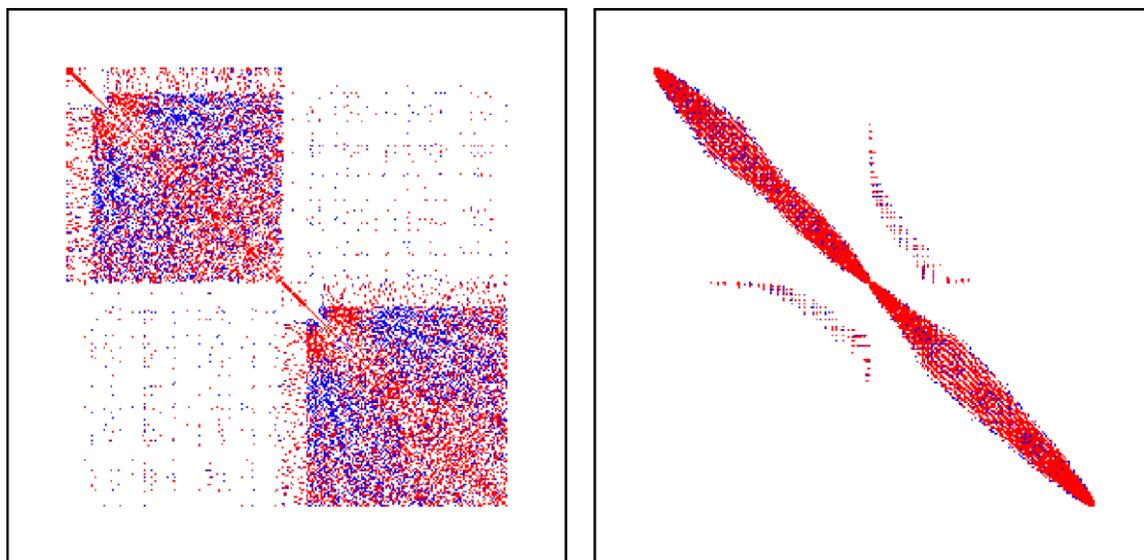


Рисунок 4.9 – Расположение ненулевых элементов матрицы до и после использования перенумерации по обратному алгоритму Катхилла-Макки

После этого происходит разбиение расчётной сетки на отдельные части и их распределение по процессам. Далее каждый процесс выполняет вычисление геометрических характеристик аналогично последовательной версии.

4.4.4 Задание начального распределения искомых величин.

Также как и в последовательной версии начальное распределение задаётся либо из параметров граничного условия, либо из результатов предыдущего расчёта. В случае задания начального распределения из результатов предыдущего расчёта результаты загружаются на корневом MPI процессе и распределяются по процессам согласно распределению сетки.

4.4.5 Задание граничных условий

Из-за распределения сетки по процессам с перекрытием относительно последовательной версии появились новые типы граней. К внутренним граням добавились грани между двумя ячейками, принадлежащими соседнему процессу, и грани на границе расчётной области и ячейками, принадлежащими соседнему

процессу. Данные виды граней в расчёте не участвуют, соответственно при заполнении массивов граней они должны быть отброшены. Кроме этого появляется необходимость отдельно обрабатывать грани, находящиеся между ячейками, принадлежащими данному процессу, и ячейками, принадлежащими соседнему процессу, для этого данные грани располагаются в отдельных массивах.

4.4.6 Заполнение матрицы коэффициентов и вектора источников

В параллельной версии программного кода к обходу по внутренним граням, расчёту конвективных и вязких потоков через них и заданию с помощью данных потоков коэффициентов в матрице, добавилась необходимость обработки особым образом граней находящихся между ячейкой, принадлежащей данному процессу, и ячейкой, принадлежащей соседнему процессу. Для таких граней коэффициенты в матрице необходимо устанавливать только в строке матрицы с номером ячейки, принадлежащей процессу, т. к. другой коэффициент будет установлен соседним процессом в своей части матрицы. Несмотря на кажущуюся расточительность вычислительных ресурсов, т.к. поток через грань будет рассчитан дважды, данный способ в итоге оказывается быстрее, чем расчёт потока на одном из процессов и пересылка результата другому процессу, т. к. расчёт потока занимает гораздо меньшее время по сравнению с задержкой отправки данных по сети.

Также изменился и алгоритм прохода по ячейкам при расчёте источников химических реакций и турбулентных параметров, в параллельной версии он осуществляется только для ячеек принадлежащих процессу.

4.4.7 Решение системы уравнений

Решение системы уравнений в параллельной версии также осуществляется параллельно. Для этого используется параллельная реализация обобщённого метода минимальных невязок, работающая с параллельной матрицей, описанной выше, а в качестве предобуславливателя был реализован параллельный блочный предобуславливатель Якоби [182].

4.4.8 Обновление значений искомых величин в расчётной области

После корректировки вектора консервативных переменных с помощью результата решения системы уравнений происходит обмен между процессами значениями вектора консервативных переменных в ячейках пересечения. Для сокращения задержек обмена данными данный обмен происходит параллельно с пересчётом полей термодинамических величин из значений вектора консервативных переменных для ячеек принадлежащих процессу.

4.4.9 Проверка условий сходимости

Вычисление невязок и проверка условий сходимости также происходит параллельно на каждом процессе, далее общий результат вычисляется и устанавливается на всех процессах с помощью функции из интерфейса MPI — MPI_Allreduce.

4.4.10 Вывод результатов

Для вывода результатов значения вектора консервативных переменных пересылаются на корневой MPI процесс, далее из данного вектора вычисляются поля термодинамических величин и выводятся в заданном формате.

4.5 Сильная масштабируемость программного кода Universe3D

Было выполнено определение сильной масштабируемости параллельного программного кода Universe3D с использованием процессора AMD Ryzen 9 5950X, имеющего 16 физических ядер, при расчёте сетки состоящей из 1035253 ячеек. Результаты представлены на графике (рисунок 4.10).

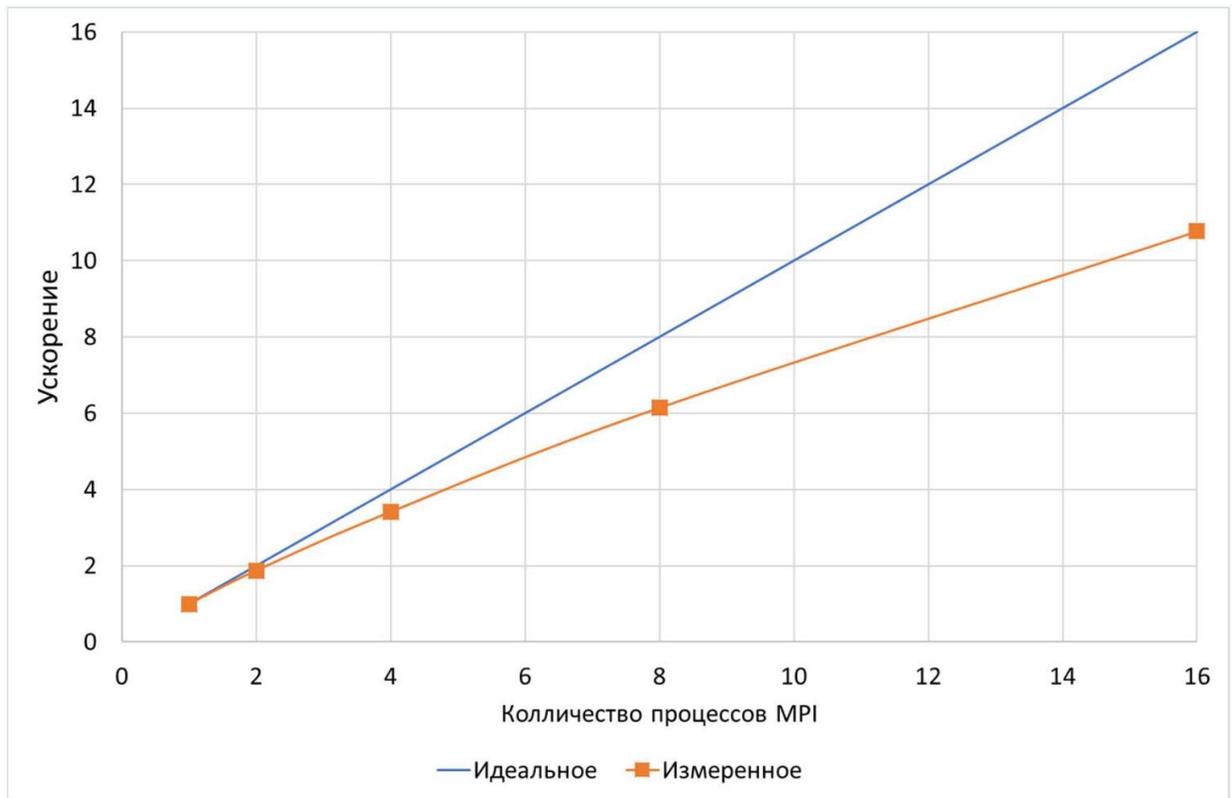


Рисунок 4.10 – График сильной масштабируемости

Выводы по главе

Проведён анализ современных особенностей вычислительных систем и видов взаимодействия при реализации параллельных вычислений. Описаны архитектурные решения, применённые в последовательной версии программного кода Universe3D, учитывающие современные особенности вычислительных систем. Описаны основные отличия параллельной версии программного кода Universe3D от последовательной. Проведён расчёт сильной масштабируемости параллельной версии программного кода Universe3D.

ГЛАВА 5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ

5.1 Обтекание спускаемого аппарата OREX

Для тестирования предложенной модели проведено численное исследование обтекания спускаемого аппарата OREX [10] в окрестности передней критической точки.

5.1.1 Спускаемый аппарат OREX

Спускаемый аппарат OREX представляет собой сферически затупленный конус с углом наклона 50° , с радиусом носовой части 1.35 м и диаметром основания 3.4 м, как показано на рисунке 5.1. Он был запущен на орбиту Земли с использованием японского ракетносителя Н-П. Во время входа в атмосферу аэротермические данные были получены примерно с высоты 120 км до примерно 40 км, включая период радиомолчания, в течении которого происходит максимальное нагревание.

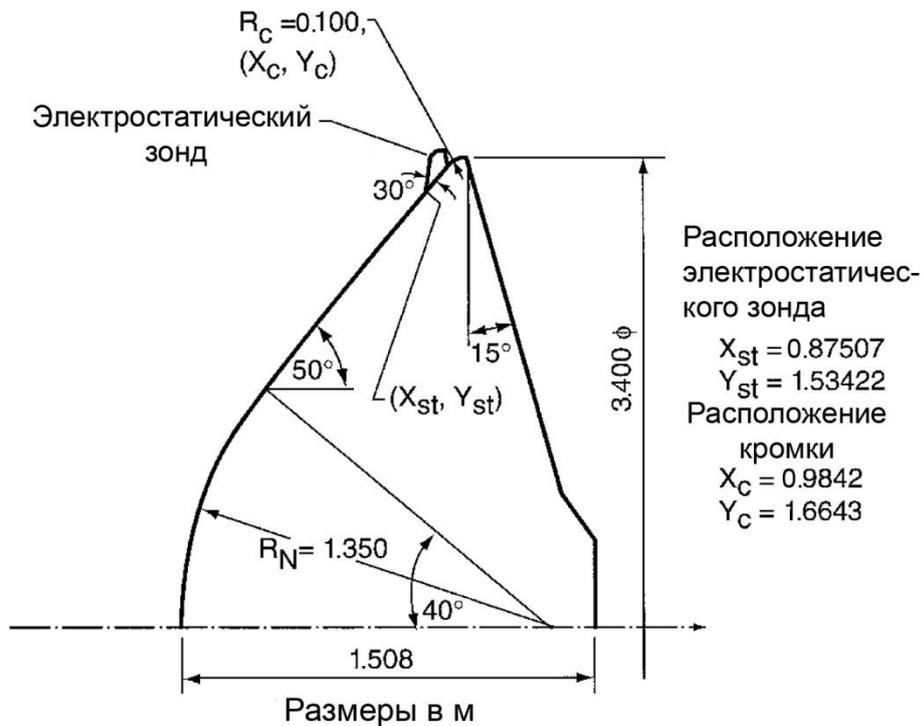


Рисунок 5.1 – Геометрические параметры аппарата OREX [183]

5.1.2 Исходные данные

В эксперименте [183] проводилось измерение теплового потока в передней критической точке и концентрации электронов. Электростатический зонд, с помощью которого проводилось измерение концентрации электронов, выступает с поверхности аппарата OREX на высоту 70 мм.

Расчёты проводились для высот полета $H=79.9, 84, 88.4, 92.8, 96.8$ и 101.1 км.

Параметры траектории взяты из работы [184] и представлены в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Параметры траектории аппарата OREX

H , км	V_∞ , м/с	ρ_∞ , кг/м ³	T_∞ , К	X_{O_2}	X_{N_2}	X_O	P_∞ , Па	T_w , К
101.1	7454.6	4.83×10^{-7}	196.9	0.1726	0.7839	0.0435	2.81×10^{-2}	401.5
96.8	7456.3	9.36×10^{-7}	190.3	0.1884	0.7863	0.0253	5.20×10^{-2}	485.2
92.8	7454.1	1.95×10^{-6}	188.3	0.2025	0.7881	0.0094	0.106	586.1
88.4	7444.3	4.30×10^{-6}	186.9	0.2125	0.7875	0	0.232	686.9
84	7415.9	1.09×10^{-5}	188.9	0.2375	0.7625	0	0.594	785.1
79.9	7360.2	1.84×10^{-5}	198.6	0.2375	0.7625	0	1.05	878.4

Рассматривалось 6 вариантов расчёта. Во всех вариантах задавалась поступательно-вращательная температура на стенке T_w . Остальные условия на стенке представлены в таблице 5.2.

Таблица 5.2

211	Для колебательных температур использовалось условие $\left. \frac{\partial T_v}{\partial n} \right _w = 0$	Нулевая каталитическая активность
221	$T_v _w = T_w$	Нулевая каталитическая активность
212 $K_w=1000$	$\left. \frac{\partial T_v}{\partial n} \right _w = 0$	Задана каталитическая активность $K_w=1000$
222 $K_w=10$	$T_v _w = T_w$	Задана каталитическая активность $K_w=10$

222 $K_W=100$	$T_V _W = T_W$	Задана каталитическая активность $K_W=100$
222 $K_W=1000$	$T_V _W = T_W$	Задана каталитическая активность $K_W=1000$

Кроме того, проводились расчёты этих вариантов в предположении термической равновесности ($T = T_{V,N_2} = T_{V,O_2} = T_{V,NO}$).

5.1.3 Результаты расчётов

Некоторые результаты представлены на следующих рисунках.

На рисунке 5.2 представлено изменение плотности теплового потока в передней критической точке в зависимости от высоты полета для двух вариантов расчёта: 211 ($\left. \frac{\partial T_V}{\partial n} \right|_W = 0$, нулевая каталитическая активность) и 221 ($T_V|_W = T_W$, нулевая каталитическая активность). Во втором случае тепловой поток несколько больше, однако это различие уменьшается с ростом высоты. Результаты расчёта хорошо совпадают с экспериментом [184].

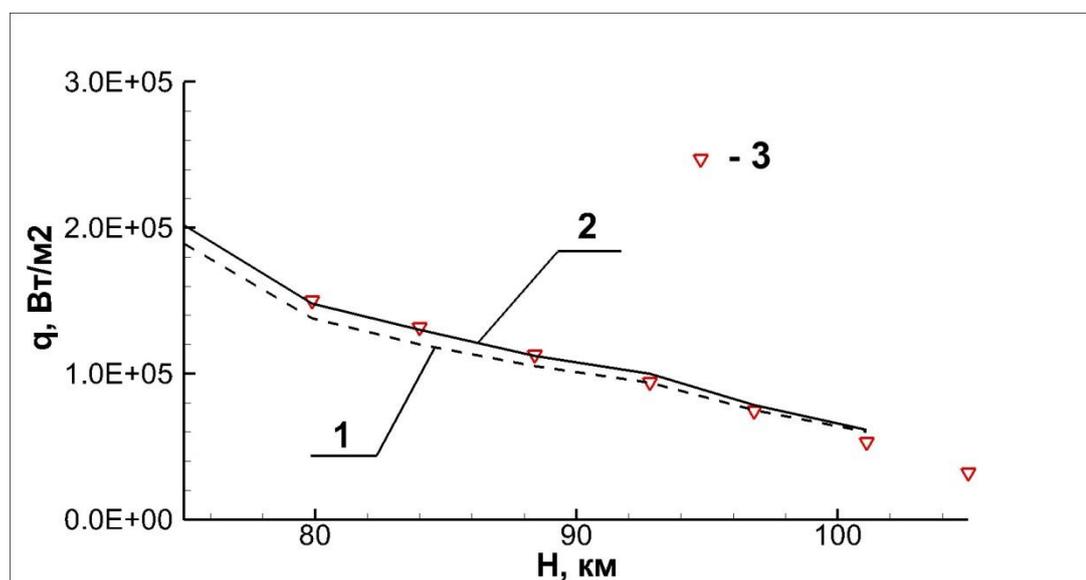


Рисунок 5.2 – Тепловые потоки в передней критической точке аппарата OREX.

Влияние задания граничных условий для колебательных температур на некаталитической поверхности:

1 - расчёт 211; 2 - расчёт 221; 3 - эксперимент [184]

На рисунке 5.3 приведено аналогичное сравнение для вариантов 212 ($\left. \frac{\partial T_v}{\partial n} \right|_w = 0, K_w=1000$) и 222 ($T_v|_w = T_w, K_w=1000$), т.е. для каталитически активной стенки. При задании колебательных температур равными T_w тепловой поток выше, но с ростом высоты различие также уменьшается.

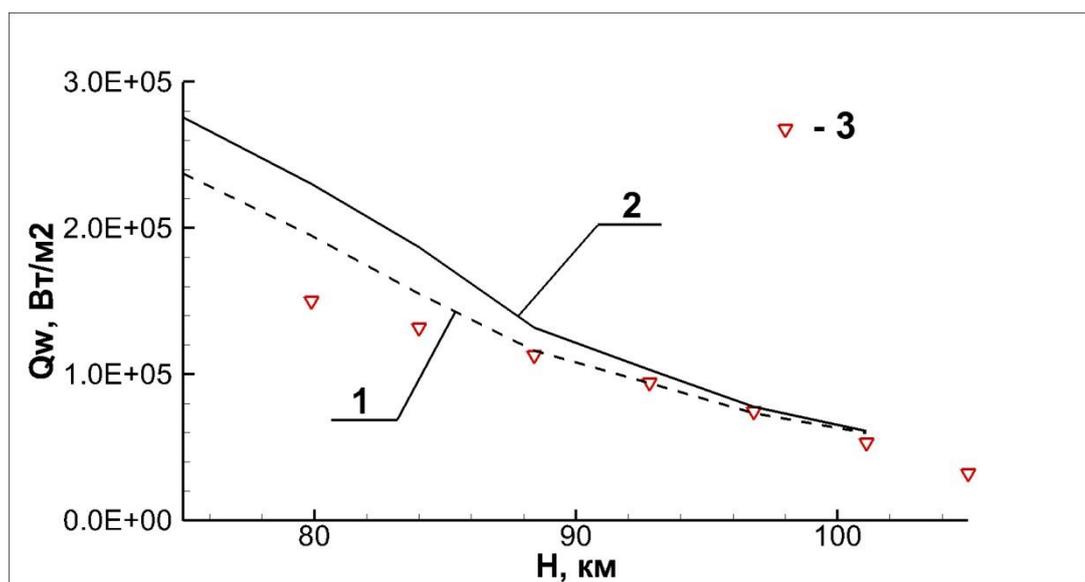


Рисунок 5.3 – Тепловые потоки в передней критической точке аппарата OREX. Влияние задания граничных условий для колебательных температур на поверхности с высокой каталитической активностью ($K_w=1000$): 1 - расчёт 212 $K_w=1000$; 2 - расчёт 222 $K_w=1000$; 3 - эксперимент [183]

На рисунке 5.4 приведено сравнение результатов расчёта плотности теплового потока в зависимости от высоты полета при различной каталитической активности стенки. С ростом каталитической активности наблюдается увеличение теплового потока, но, при высотах 92.8 км и выше, различие практически отсутствует.

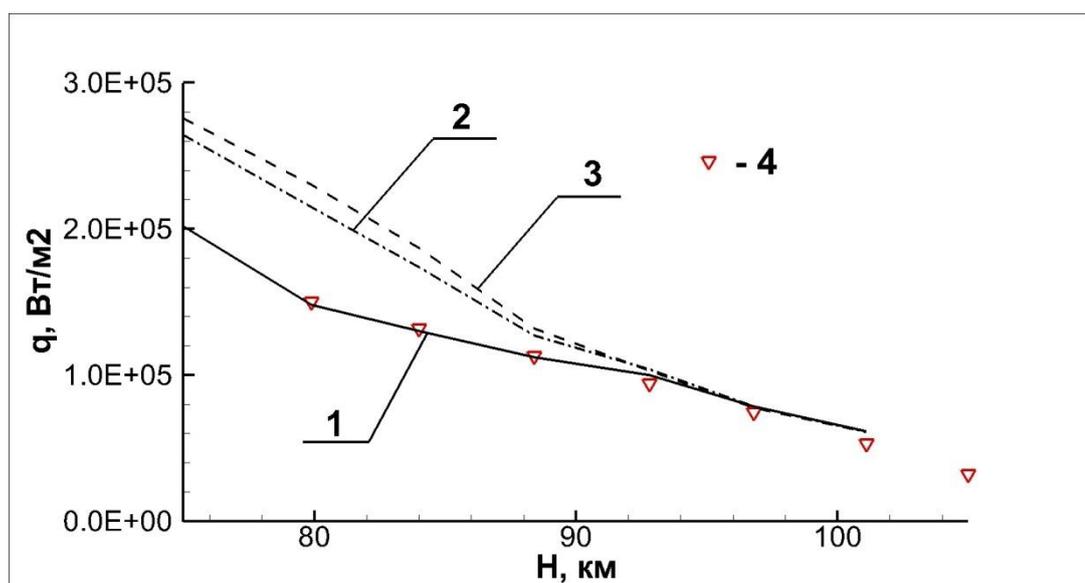


Рисунок 5.4 – Тепловые потоки в передней критической точке аппарата OREX. Влияние каталитической активности поверхности: 1 - расчёт 221 (нулевая каталитическая активность); 2 - расчёт 222 ($K_w=10$); 3 - расчёт 222 ($K_w=1000$); 4 - эксперимент [183]

Более подробный анализ результатов расчёта для высоты полета 84 км приводится на следующих рисунках.

На рисунке 5.5 представлено распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата на высоте 84 км при нулевой каталитической активности. При использовании граничного условия $T_v|_w = T_w$ тепловой поток на всей передней поверхности выше, чем при использовании граничного условия $\left. \frac{\partial T_v}{\partial n} \right|_w = 0$. Кроме вариантов 211 и 221, приводятся данные расчёта термически равновесного газа ($T = T_{v,N_2} = T_{v,O_2} = T_{v,NO}$); в этом случае тепловой поток получается еще выше.

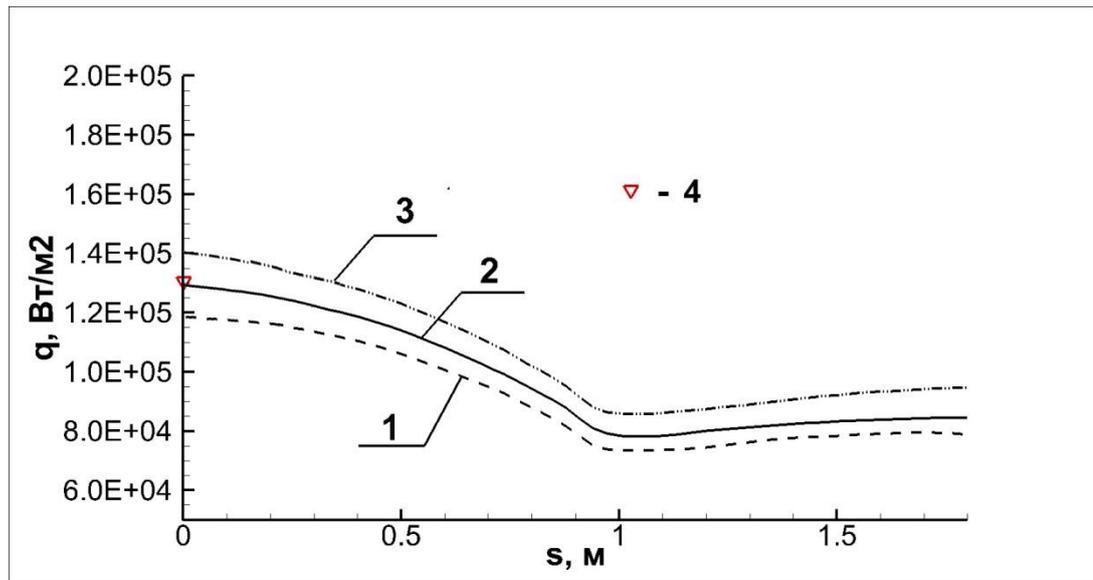


Рисунок 5.5 – Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 84 км. Влияние задания граничных условий для колебательных температур на некаталитической поверхности:
 1 - расчёт 211; 2 - расчёт 221; 3 - термически равновесный расчёт варианта 221;
 4 - эксперимент [183]

На рисунке 5.6 представлено распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной на оси потока для этих же двух вариантов: 211 и 221, а на рисунке 5.7 - сравнение результатов расчёта термически неравновесного (вариант 221) и термически равновесного газа. Поступательно-вращательная температура термически неравновесного газа непосредственно за скачком уплотнения получается выше (~ 18000 К), чем равновесного (~ 15000 К), однако вблизи от стенки различие незначительно.

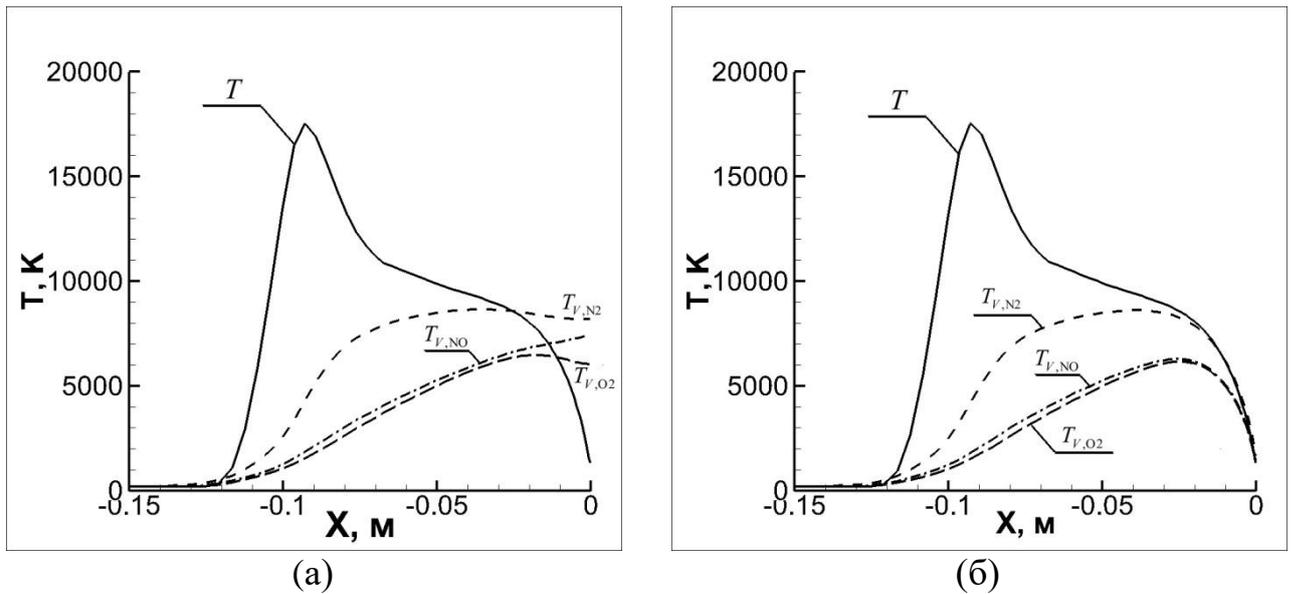


Рисунок 5.6 – Высота 84 км. Распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной при различных способах задания граничных условий для колебательных температур:
(а) - 211; (б) - 221

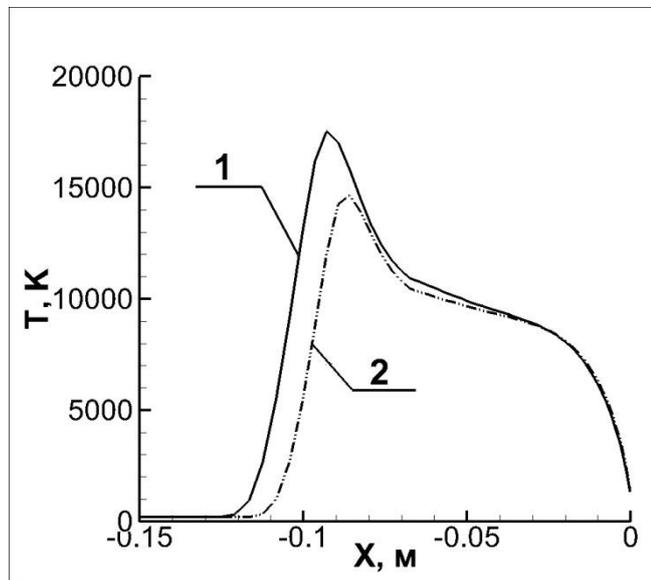


Рисунок 5.7 – Высота 84 км. Распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной при условиях 221:
1 - термически неравновесный расчёт; 2 - термически равновесный расчёт

Влияние задания граничных условий для колебательных температур на поверхности с высокой каталитической активностью ($K_w=1000$)

продемонстрировано на рисунке 5.8. Результат аналогичен предыдущему случаю:

при использовании граничного условия $T_v|_w = T_w$ тепловой поток на всей передней

поверхности выше, чем при использовании граничного условия $\left. \frac{\partial T_v}{\partial n} \right|_w = 0$

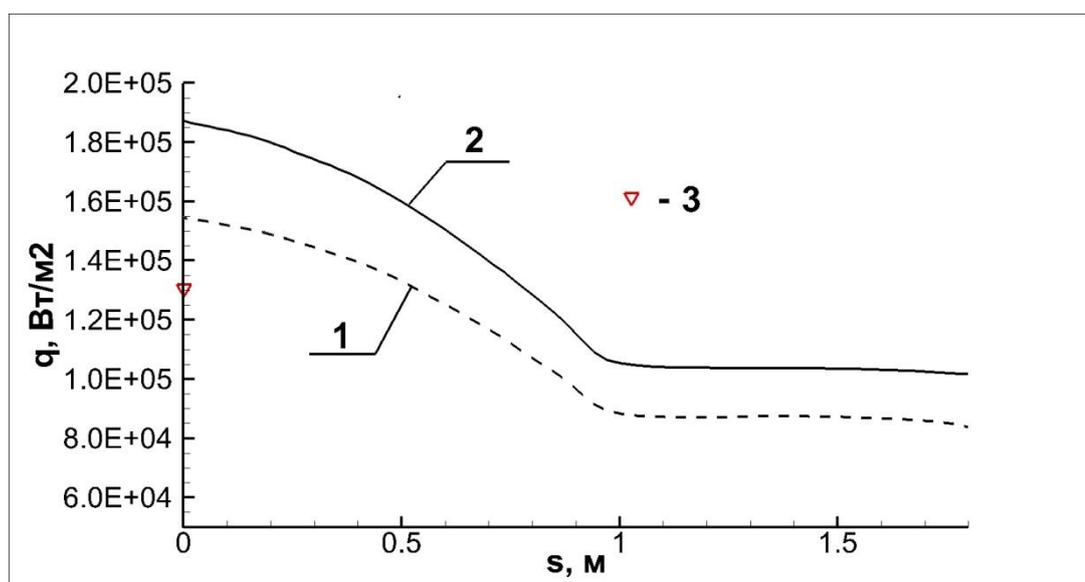


Рисунок 5.8 – Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 84 км. Влияние задания граничных условий для колебательных температур на поверхности с высокой каталитической активностью ($K_w=1000$):

1 - расчёт 212; 2 - расчёт 222; 3 - эксперимент [183]

На рисунке 5.9 представлено распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата на высоте 84 км при различной каталитической активности поверхности. На этой высоте получается существенное различие результатов расчёта: при высокой каталитической активности поверхности тепловой поток выше почти вдвое по сравнению с неактивной поверхностью.

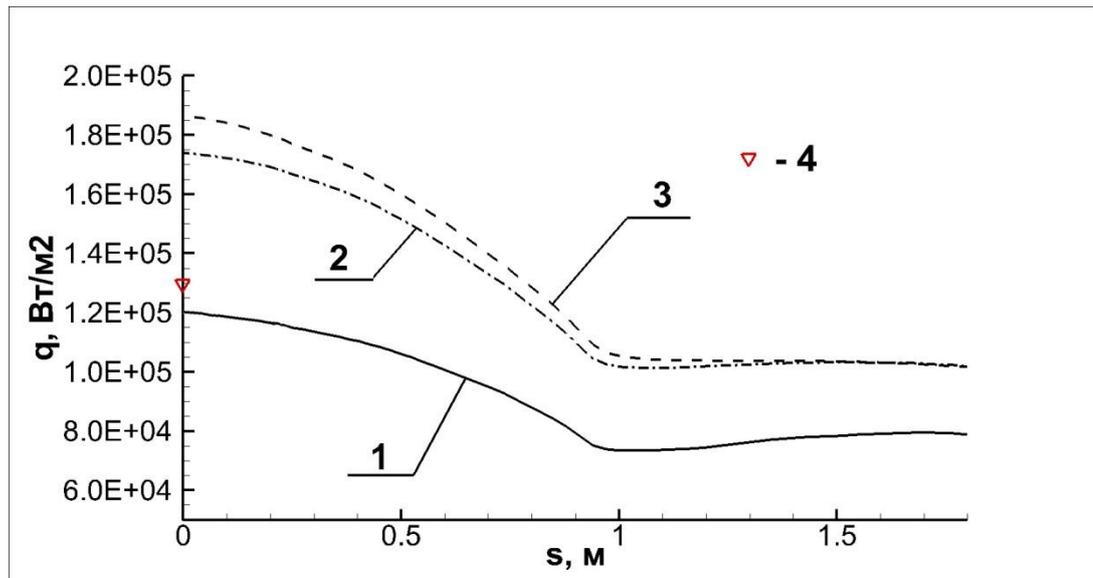


Рисунок 5.9 – Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 84 км. Влияние каталитической активности поверхности: 1 - расчёт 221 (нулевая каталитическая активность); 2 - расчёт 222 ($K_w=10$); 3 - расчёт 222 ($K_w=1000$); 4 - эксперимент [183]

На рисунке 5.10 приведено распределение массовых долей химических компонентов в сжатом слое за головной ударной волной при различной каталитической активности поверхности. С ростом каталитической активности усиливается рекомбинация атомов O и N непосредственно у стенки. У молекул O₂ и N₂ химическая энергия ниже, чем у O и N, поэтому энтальпия у стенки уменьшается, что приводит к увеличению градиента $\left. \frac{\partial h}{\partial n} \right|_w$ и, соответственно, к росту теплового потока.

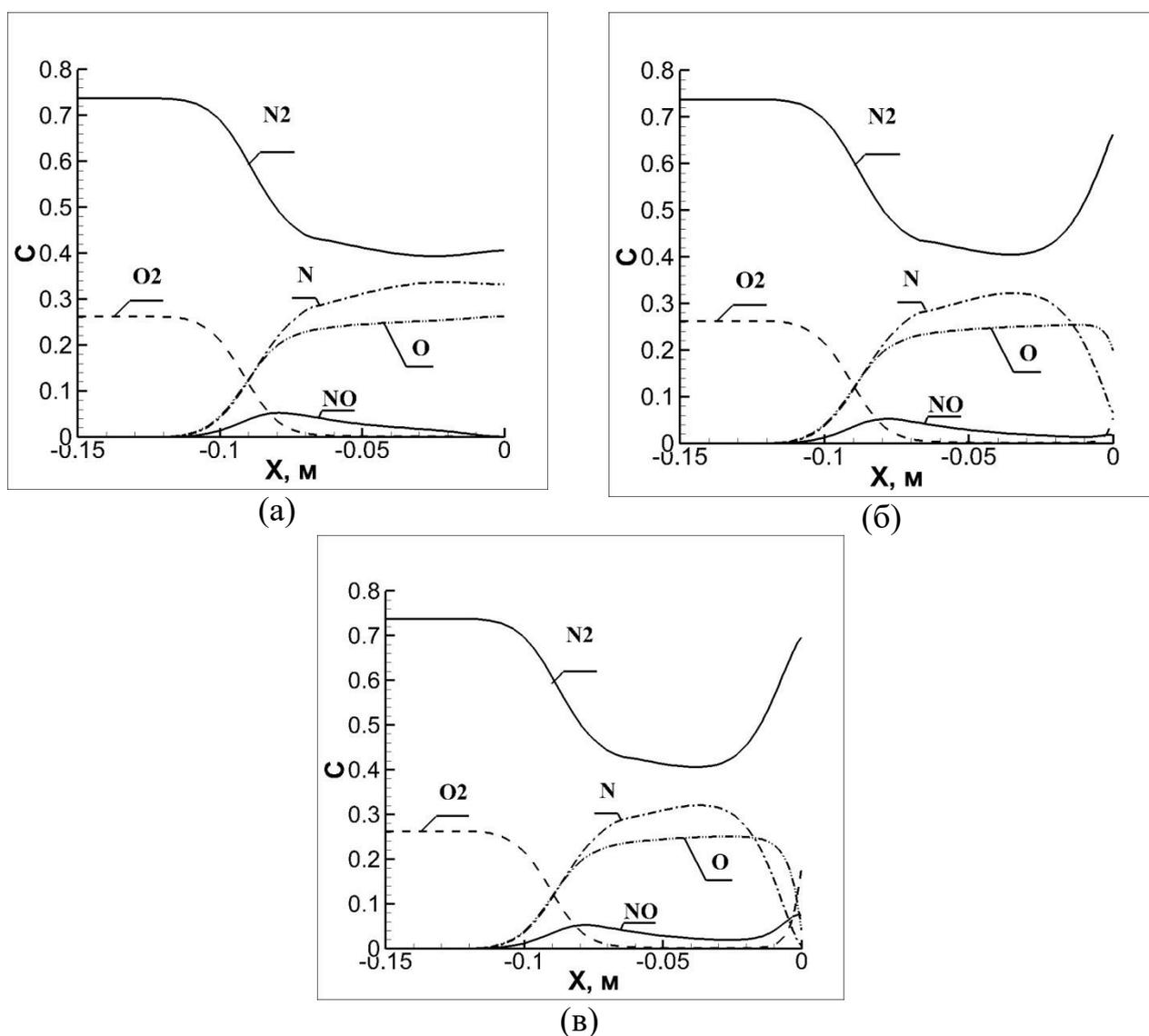


Рисунок 5.10 – Высота 84 км. Распределение массовых долей химических компонентов в сжатом слое за головной ударной волной при различной каталитической активности поверхности:

(а) - 221; (б) - 222 ($K_w=10$); (в) - 222 ($K_w=1000$)

Аналогичные результаты получены для высот 96.8 км и 101.1 км.

На рисунке 5.11 представлено распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 96.8 км при нулевой каталитической активности. Расчёт вариантов 211 и 221 очень слабо отличаются, т.е. влияние способа задания граничных условий для колебательных температур проявляется очень слабо.

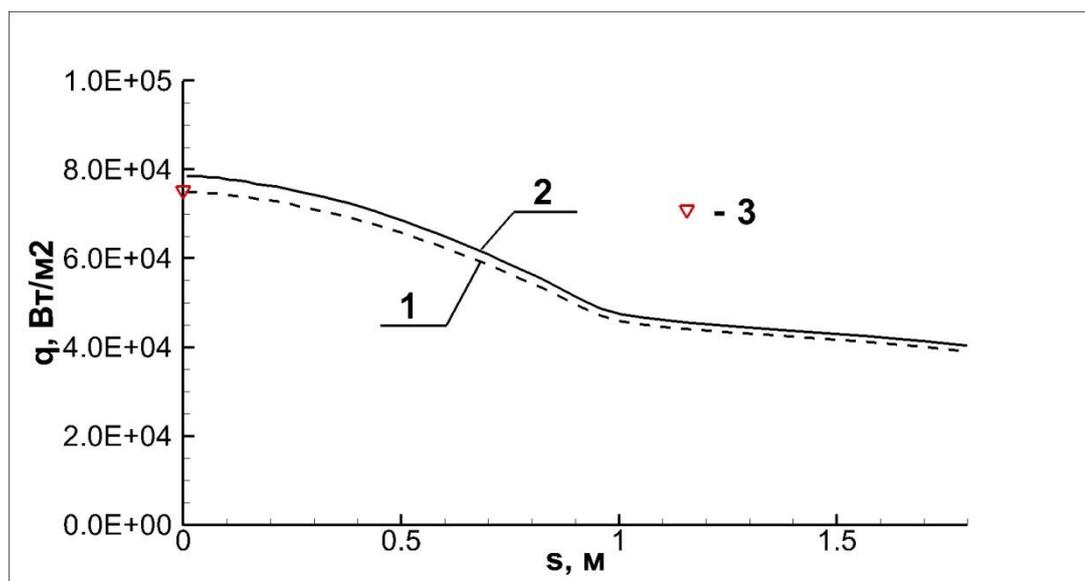
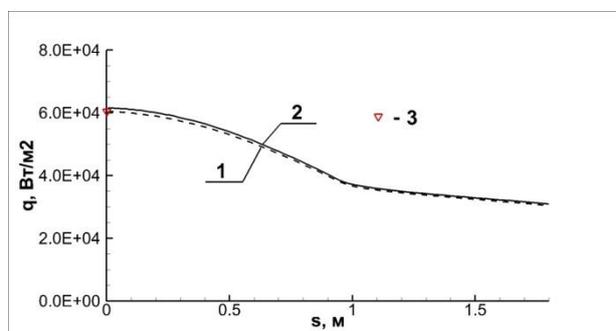
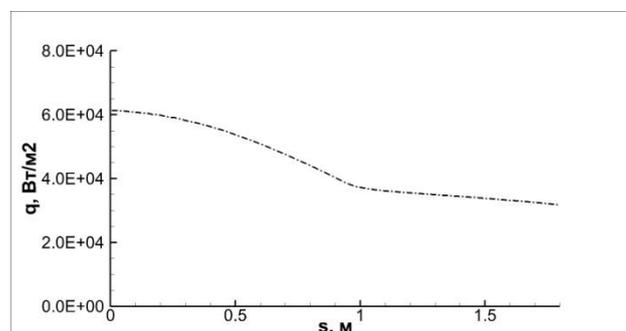


Рисунок 5.11 – Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 96.8 км. Влияние задания граничных условий для колебательных температур на некаталитической поверхности:
1 - расчёт 211; 2 - расчёт 221; 3 - эксперимент [183]



(а)



(б)

Рисунок 5.12 – Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 101.1 км.

(а) - влияние задания граничных условий для колебательных температур на некаталитической поверхности: 1 - расчёт 211; 2 - расчёт 221; 3 - эксперимент [10]

(б) - термически равновесный расчёт варианта 221 на некаталитической поверхности

Еще меньше отличие этих вариантов расчёта проявляется на высоте 101.1 км (см. рисунок 5.12(а)). Наблюдаемое уменьшение влияния задания граничных условий для колебательных температур связано с тем, что роль последних с ростом высоты полета уменьшается (см. рисунок 5.13). Колебательные

температуры существенно ниже, чем поступательно-вращательная: у азота она не выше 3000 К, а у кислорода и NO - порядка 1000 К. Для сравнения: на высоте 84 км эти температуры соответственно ~8000 К и ~6000 К (см. рисунок 5.6)

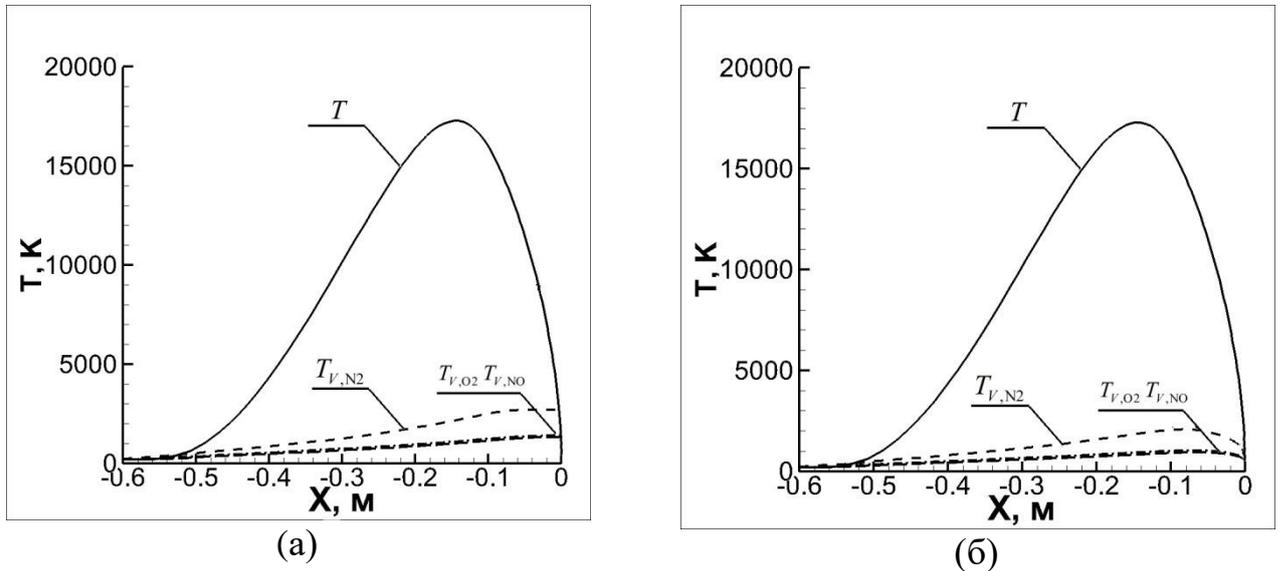


Рисунок 5.13 – Высота 101.1 км. Распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной при различных способах задания граничных условий для колебательных температур:
(а) - 211; (б) - 221

Также следует отметить, что расчёты теплового потока, использующие предположения о термическом равновесии и термической неравновесности, на этой высоте практически не отличаются (рисунки 5.12 (а) и (б)). Тем не менее, различие температур в этих двух вариантах по-прежнему остается очень большим (см. рисунок 5.14).

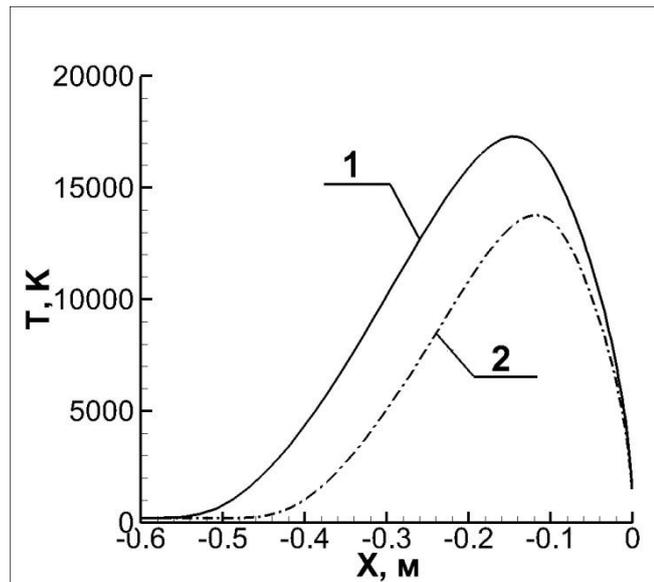


Рисунок 5.14 – Высота 101.1 км. Распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной при условиях 221:
1 - термически неравновесный расчёт; 2 - термически равновесный расчёт

Анализ рисунков 5.6 и 5.13 позволяет сделать важный вывод о том, колебательные температуры различных компонентов сильно отличаются друг от друга. Таким образом, двухтемпературная модель колебательной неравновесности (T и T_V) не соответствует наблюдаемым результатам расчёта.

На рисунке 5.15 показано влияние каталитической активности поверхности на высоте 96.8 км.

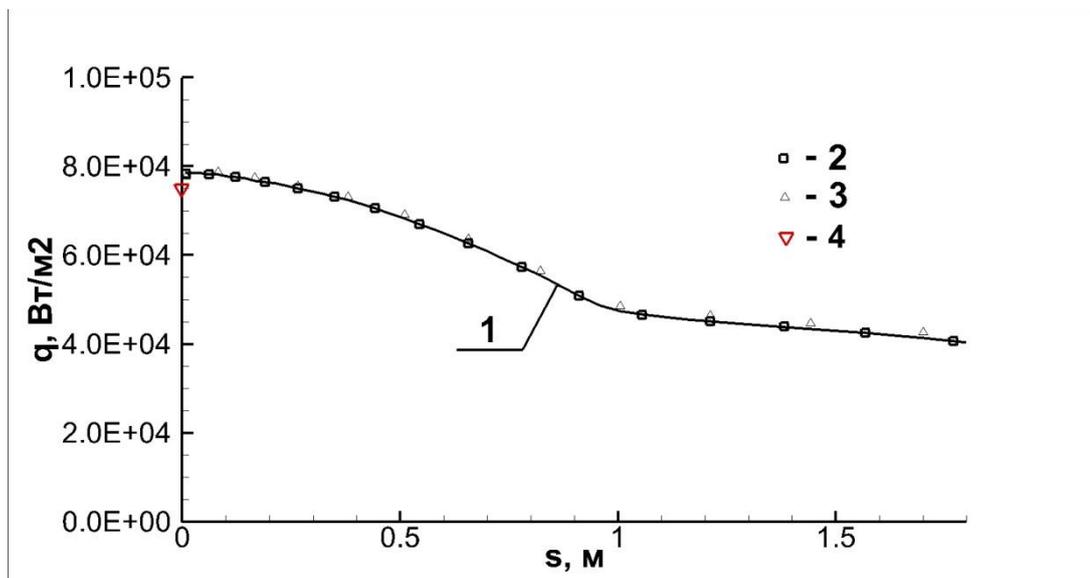


Рисунок 5.15 – Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата

OREX на высоте 96.8 км. Влияние каталитической активности поверхности:
 1 - расчёт 221 (нулевая каталитичность); 2 - расчёт 222 ($K_w=10$); 3 - расчёт 222
 ($K_w=1000$); 4 - эксперимент [183]

Связано это с тем, что с ростом высоты уменьшается число Дамкёлера, течение "замораживается", и реакции диссоциации и рекомбинации проходят слабо (см. рисунок 5.16).

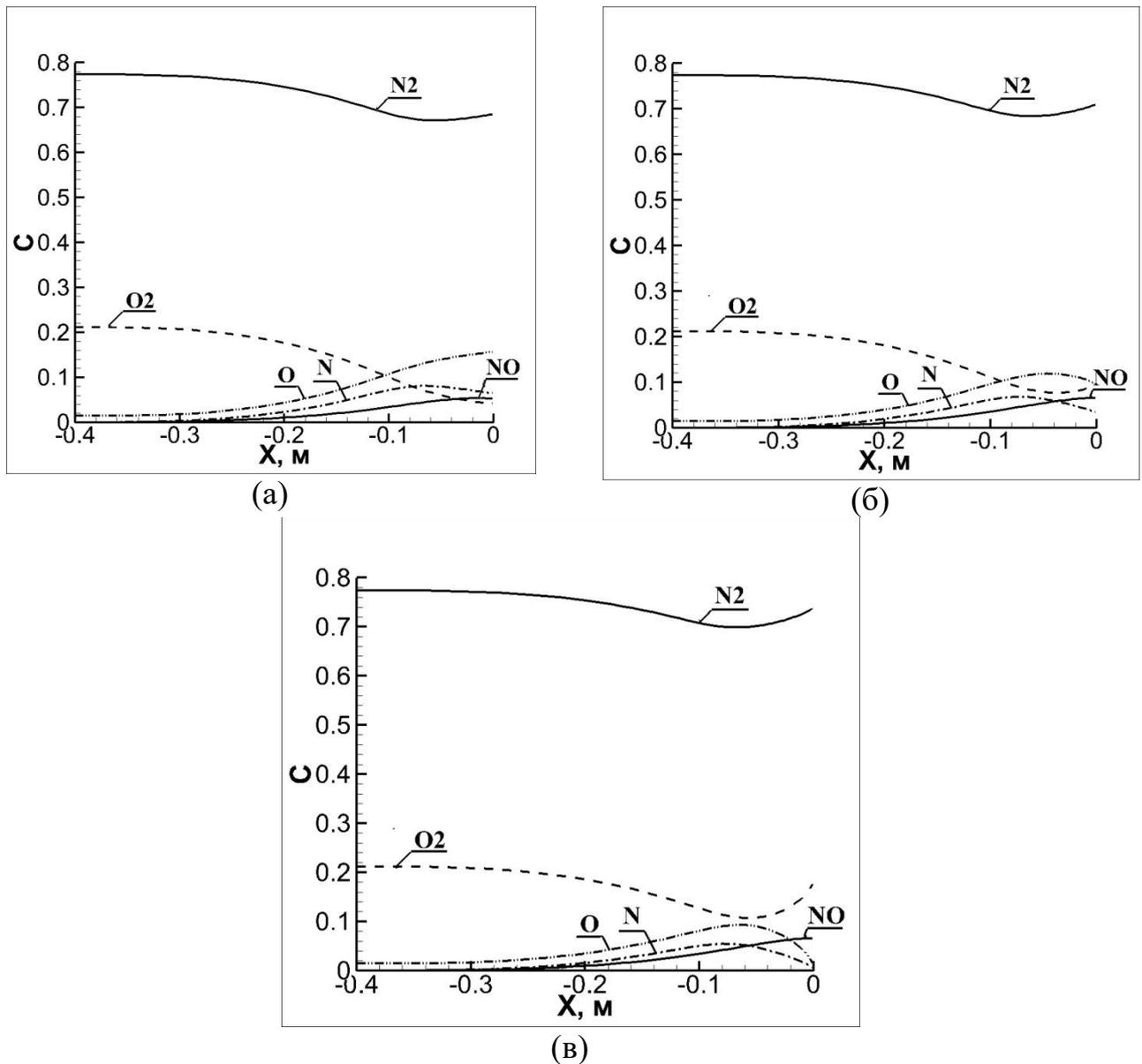


Рисунок 5.16 – Высота 96.8 км. Распределение массовых долей химических компонентов в сжатом слое за головной ударной волной при различной каталитической активности поверхности:
 (а) - 221; (б) - 222 ($K_w=10$); (в) - 222 ($K_w=1000$)

На рисунке 5.17 представлено распределение плотности электронов в районе электростатического зонда в зависимости от высоты полета. Сопоставление результатов расчёта (вариант 221) с экспериментальными данными [10] показывает удовлетворительное совпадение.

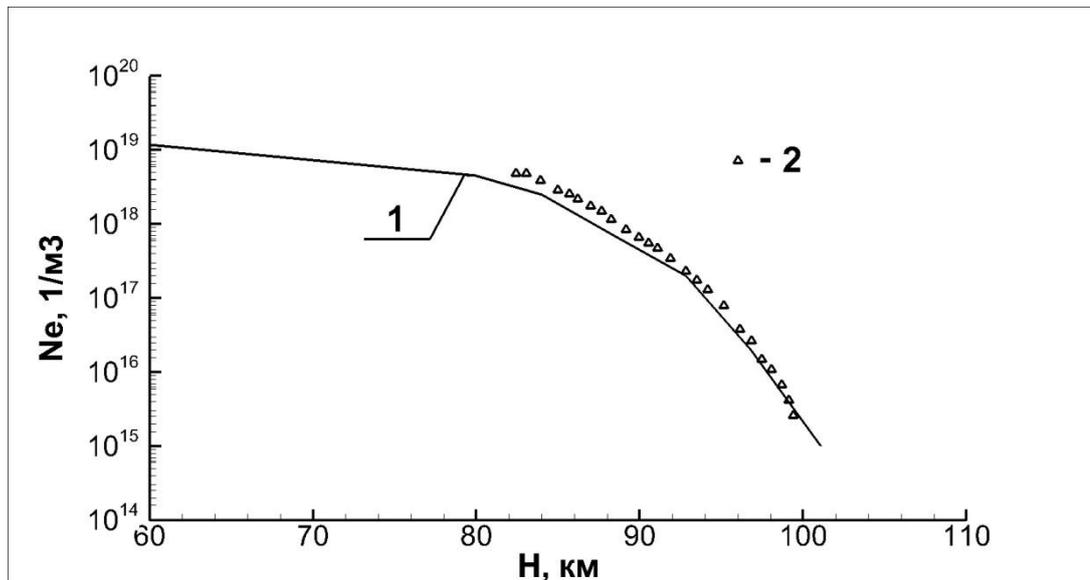


Рисунок 5.17 – Плотность электронов в районе электростатического зонда ($s = 1.9135$ м, $n = 5.8335 \cdot 10^{-2}$ м) в зависимости от высоты полета.
1 - расчёт (221); 2 - эксперимент [13]

5.1.4 Выводы

Получено хорошее совпадение результатов расчёта с экспериментальными данными по измерению тепловых потоков в стенку и концентрации электронов.

Проанализировано влияние различных факторов на результаты расчёта. Показано, что:

- При задании значений колебательных температур у стенки равными температуре стенки плотность теплового потока выше, чем при условии нулевого градиента этих температур на стенке; это обусловлено тем, что во втором случае отсутствует вклад колебательных температур в перенос тепла возле стенки. С ростом высоты это отличие несколько уменьшается, что объясняется небольшими значениями колебательных температур по сравнению с поступательной и, соответственно, меньшим их вкладом в

общий тепловой поток.

- Увеличение каталитической активности стенки для высот меньше 90 км приводит к существенному росту плотности теплового потока; это обусловлено тем, что возле стенки усиливается рекомбинация молекул O_2 и N_2 и происходит переход химической энергии в тепловую. Однако, на бóльших высотах происходит постепенное "замораживание" химических реакций, и, следовательно, влияние каталитической активности пропадает.
- При использовании модели термического равновесия, т.е. предположения, что все энергетические моды находятся в равновесии, температура в сжатом слое за скачком уплотнения получается существенно ниже по сравнению с поступательной температурой в неравновесном расчёте (~15000 К и ~18000 К соответственно). Причем это явление наблюдается на всем диапазоне рассматриваемых высот. В непосредственной близости от стенки, однако, это отличие становится незначительным, и температура в равновесном расчёте даже несколько выше на высотах до 90 км, что приводит к увеличению теплового потока.
- Колебательные температуры различных компонентов сильно отличаются друг от друга. Таким образом, двухтемпературная модель колебательной неравновесности не соответствует действительности.

5.2 Обтекание сферы диаметром 1 см высокоскоростным потоком газа с различными числами Маха

Рассматривалась задача обтекания сферы диаметром 1 см высокоэнергетическим потоком воздуха с протекающими в нем реакциями диссоциации-рекомбинации в широком диапазоне чисел Маха.

Целью данной работы являлось сравнение значений коэффициентов сопротивления, полученных в результате численного моделирования, с экспериментальными данными.

Результаты данного исследования были опубликованы в [195].

5.2.1 Исходные данные

Давление и температура окружающей среды соответствовали параметрам атмосферы на высоте 10 км (температура - 223.252 К, давление - 2.65×10^4 Па. Рассмотренные скоростные режимы приведены в таблице 5.3.

Таблица 5.3 – Скоростные режимы обтекания

Число M набегающего потока	Скорость набегающего потока u , м/с
1.999	600
8.32949	2500
11.661	3500
14.993	4500
16.659	5000
19.99	6000

Задача решалась в двухмерной осесимметричной постановке с учетом протекания в сжатом слое химических реакций.

Расчётная сетка приведена на рисунке 5.18.

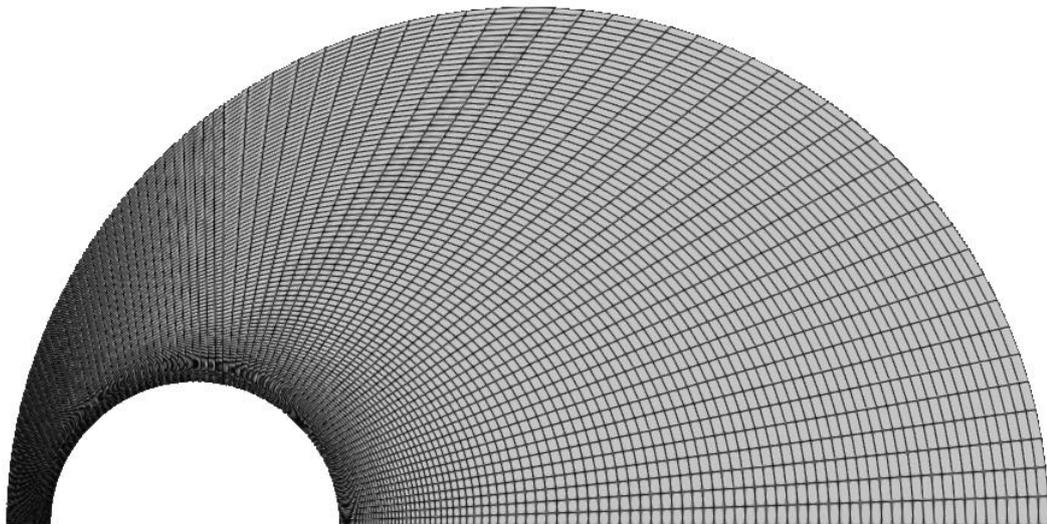


Рисунок 5.18 – Расчётная сетка

5.2.2 Результаты расчётов

Некоторые результаты представлены на следующих рисунках.

На рисунках 5.19-5.21 приведены поля числа M , давления и температуры для скоростного режима $M=19,99$.

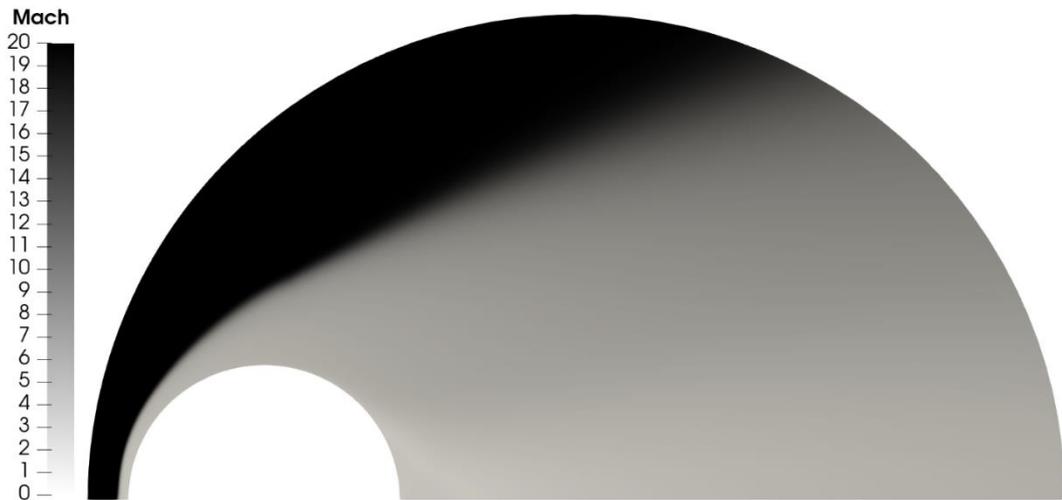


Рисунок 5.19 – Поле числа M для расчётного режима $M=19,99$

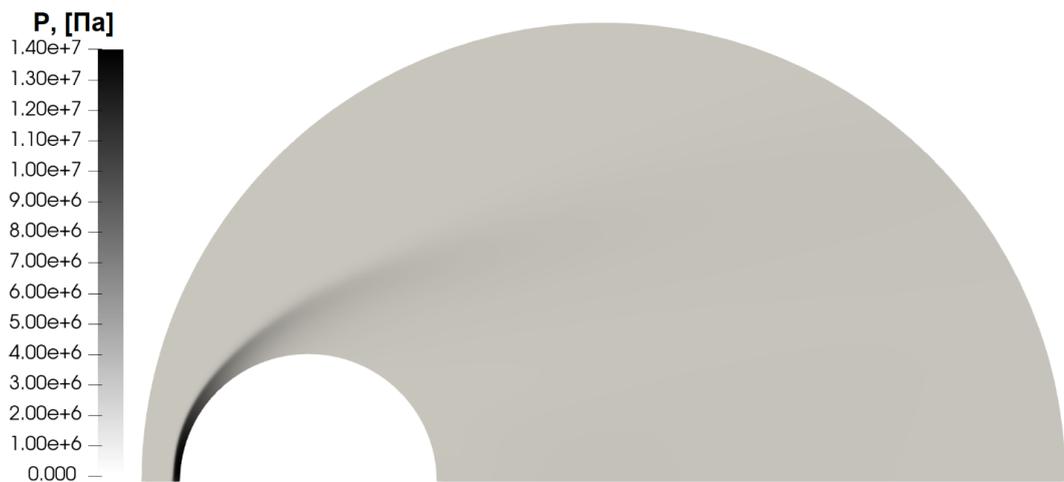


Рисунок 5.20 – Поле давления для расчётного режима $M=19,99$

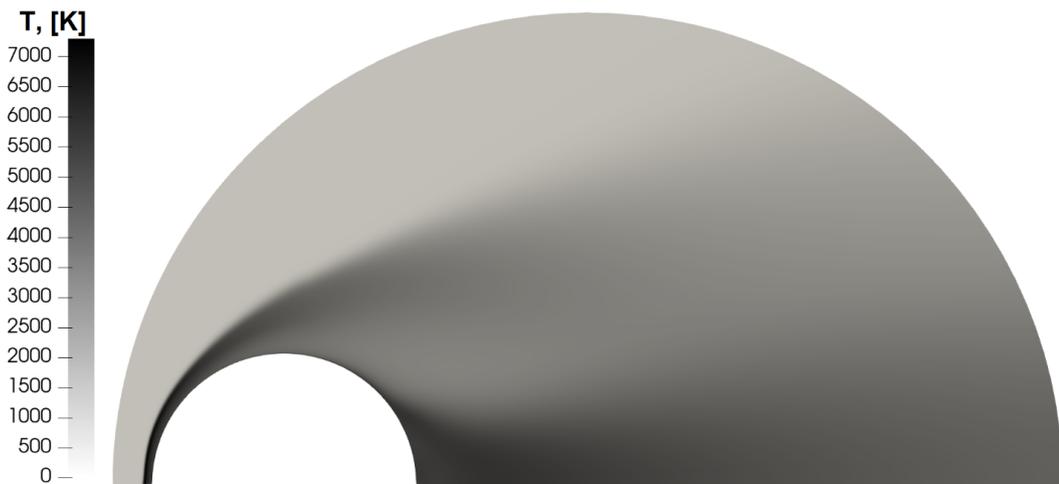


Рисунок 5.21 – Поле температуры для расчётного режима $M=19,99$

Результаты расчёта сравнивались с экспериментальными данными, приведенными в [185].

Сравнение приведено на рисунках 5.22 и 5.23.

Расчёт коэффициента сопротивления по оси x c_x (в виду малости сил трения по сравнению с силами давления в рассматриваемом случае) производился по формуле:

$$c_x = \frac{\int p \mathbf{n} \cdot d\mathbf{S}}{\frac{\rho u_\infty^2 A}{2}} \quad (5.1)$$

где p – давление, A – миделево сечение обтекаемого тела, \mathbf{S} – площадь поверхности обтекаемого тела, \mathbf{n} – нормаль к поверхности.

Сравнение показывает, что полученные результаты близки к результатам экспериментальных исследований.

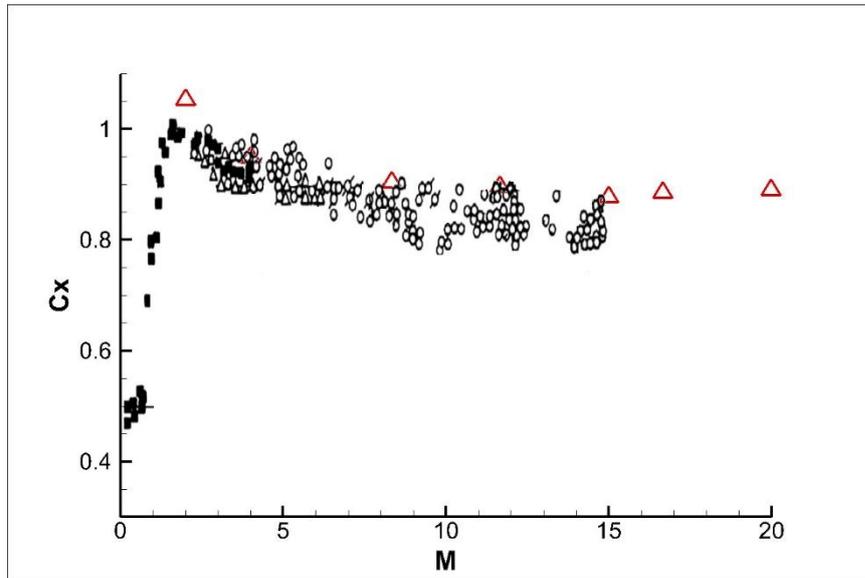


Рисунок 5.22 – Результаты расчётов коэффициента сопротивления в сравнении с экспериментальными данными (Δ - данные расчётов, \circ – экспериментальные данные из [185])

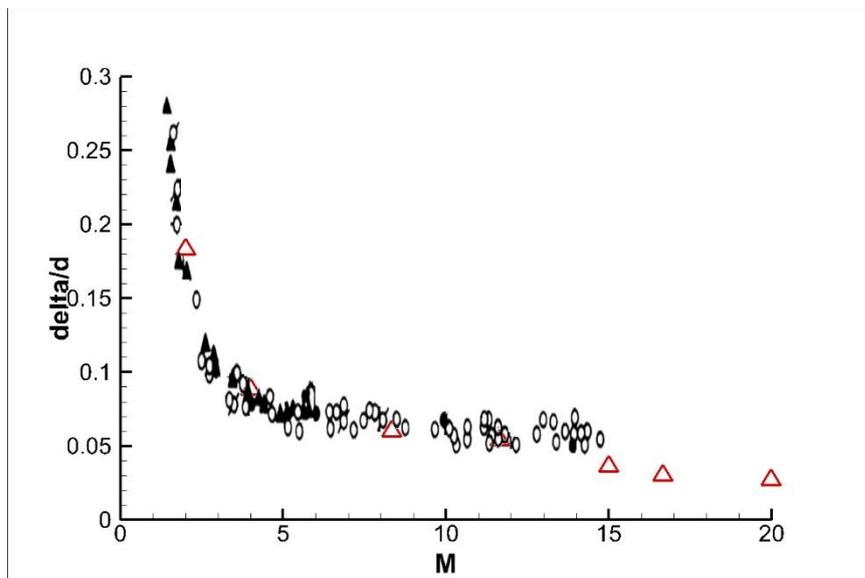


Рисунок 5.23 – Результаты приведенного расстояния отхода ударной волны от поверхности сферы вблизи ПКТ в сравнении с экспериментальными данными (Δ - данные расчётов, \circ – экспериментальные данные из [185])

5.2.3 Выводы

Полученные результаты свидетельствуют о возможности применения разработанной методики для расчета внешнего высокоскоростного обтекания турбулентным потоком с учетом реакций рекомбинации-диссоциации.

5.3 Течение в донной области ЛА

Исследования течений в донной области имеет огромное значение в задачах проектирования аэрокосмической техники, т.к. отрывные течения, возникающие в донной области, имеют непосредственное влияние на тепловой поток к элементам конструкции ЛА, а также на дальность полёта и траекторию.

При этом считается, что численное моделирование течений в донной области основанное на осреднённых по Рейнольдсу уравнениях Навье-Стокса имеет сложности с успешным описанием таких течений [186,187].

Задача осложняется тем, что на распределение параметров в донной области оказывает влияние так называемая «предыстория» потока [188], т.е. течение вдоль корпуса ЛА.

Целью данной работы является анализ использования различных, реализованных в программном коде Universe3D, моделей турбулентности для расчёта течений в донной области и в следе ЛА с учётом «предыстории» потока.

Типичная картина течения в донной области ЛА представлена на рисунке 5.24.

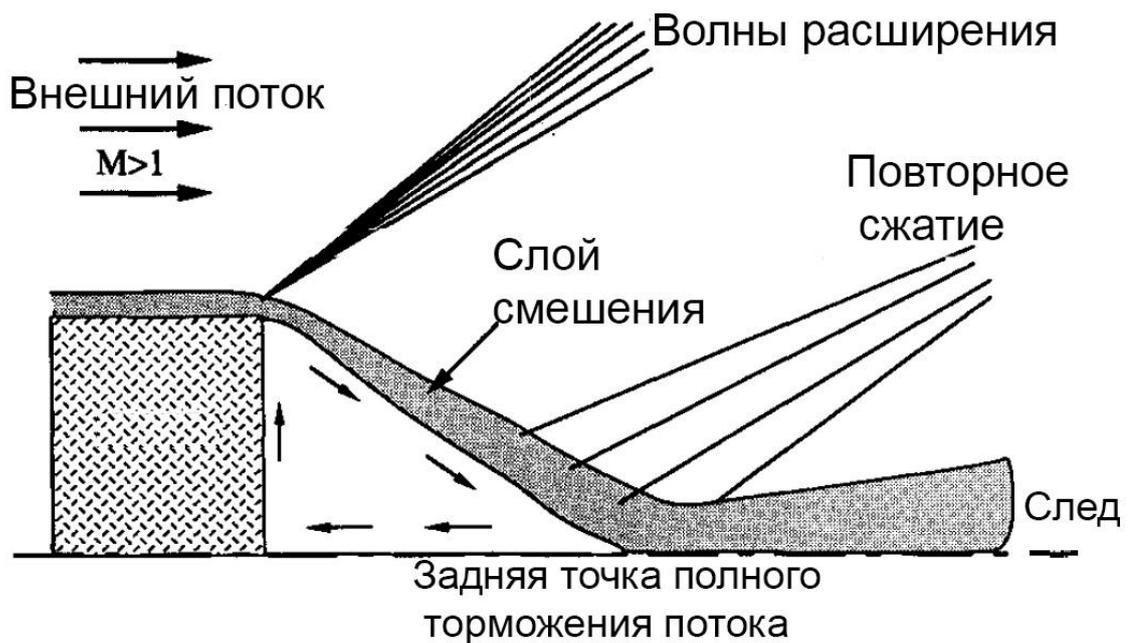


Рисунок 5.24 – Схема течения в донной области летательного аппарата,

движущегося со сверхзвуковой скоростью

5.3.1 Исходные данные

В качестве источника данных для проверки метода расчёта использовались эксперименты из [188, 189, 190]. Параметры набегающего потока: $M=2.5$, $T=130\text{K}$, $p=30141\text{ Па}$. Диаметр корпуса= 63.5мм .

Расчётная сетка для описания обтекания самолета, течения в донной области и в следе представлена на рисунке 5.25.

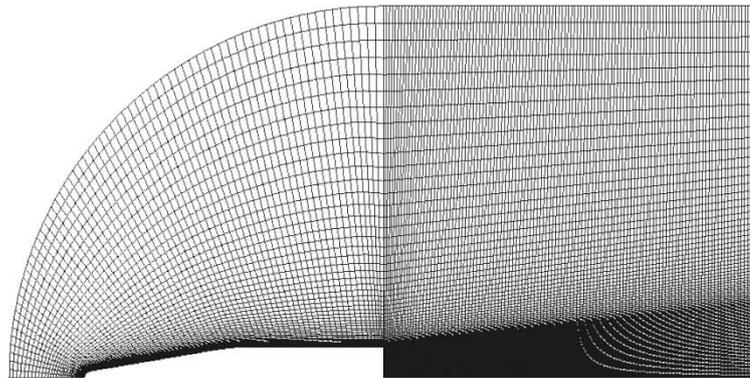
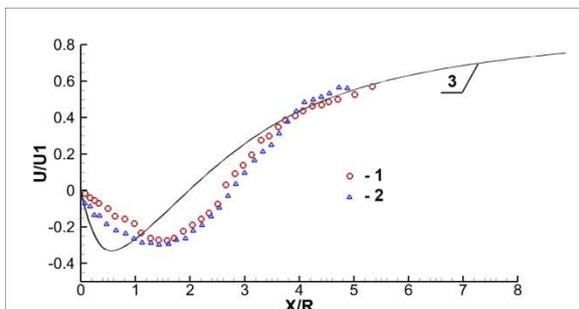


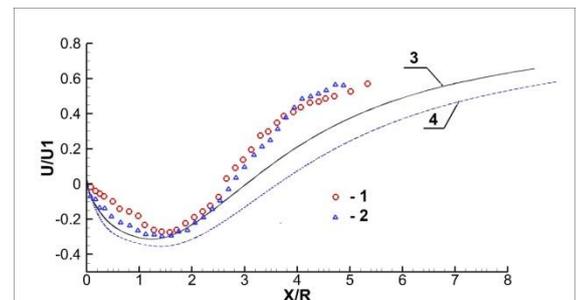
Рисунок 5.25 – Расчётная сетка

5.3.2 Результаты расчётов

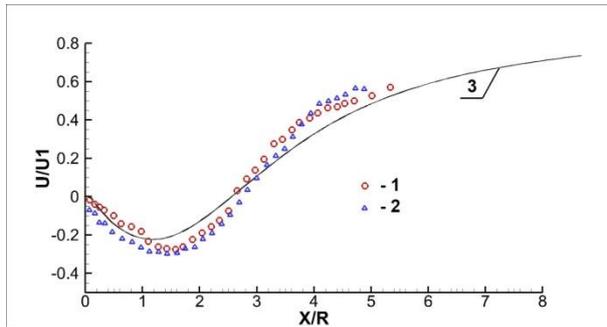
На рисунках 5.26а-5.26г показаны результаты расчёта скорости по оси в области дна и в следе с использованием различных моделей турбулентности.



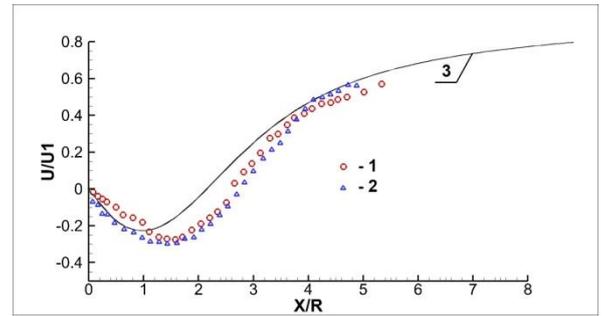
(a) Spalart-Allmarès model



(б) k-ε RNG model



(b) Model RS standar



(г) Model RS BSL

Рисунок 5.26 – Распределение осевой скорости в донной области цилиндрической модели в сверхзвуковом потоке $M = 2,5$.

1 - эксперимент [188], 2 - эксперимент [189]; 3,4 – расчёты (3 – без коррекции на сжимаемость, 4 – с коррекцией на сжимаемость)

На рисунке 5.27 представлена зависимость давления на поверхности днища ЛА от числа Маха набегающего потока набегающего потока (1 – расчёт по модели турбулентности SST, 2 – $k-\varepsilon$ RNG, 3 – стандартный RS). Стандартная модель RS с этой точки зрения вполне удачна.

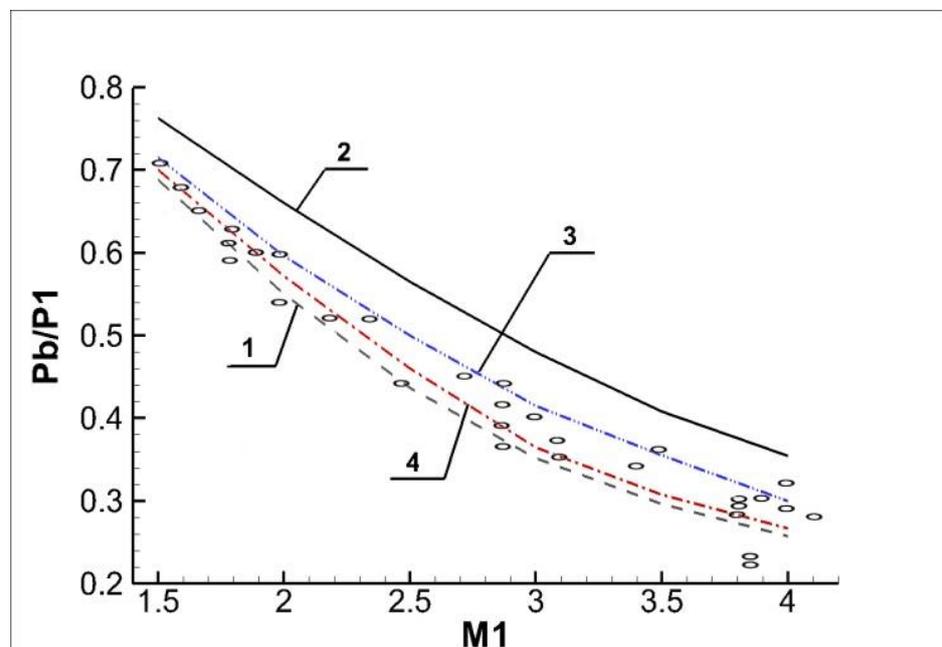


Рисунок 5.27 – Изменение давления на поверхности днища самолета в зависимости от числа Маха набегающего потока.

Кружки - экспериментальные данные [190];

1 - модель турбулентности SST;

2 - модель турбулентности $k-\varepsilon$ RNG;

- 3 - стандартная модель турбулентности RS;
- 4 – модель турбулентности RS BSL

5.3.3 Выводы

На основании анализа полученных данных и их сопоставления с экспериментом можно сделать следующие выводы:

- при расчёте течения в районе днища и в следе за самолетом очень важно учитывать «предыстория» обтекания, т.е. рассчитать обтекание всего транспортного средства;
- однако для лучшего описания распределения скоростей в области дна рекомендуется использовать стандартную модель RS, а затем вносить в нее поправки аналогично тому, как это было сделано в модели k-ε.

5.4 Горение водорода в канале. Эксперимент Барроуса-Куркова

Для проверки методики расчёта был выбран эксперимент Барроуза и Куркова [191,192], посвященный экспериментальному исследованию сверхзвукового турбулентного потока воздуха, в котором осуществляется параллельный вдув водорода.

5.4.1 Исходные данные

Как показано на рисунке 5.28, дозвуковая струя водорода впрыскивается тангенциально вблизи стенки в сверхзвуковой искаженный воздушный поток, втекающий в канал с расходящимися стенками. Высота щели струи составляет 0,4 см, а температура стенки удерживается на уровне 298К. Условия эксперимента приведены в таблице 5.4.

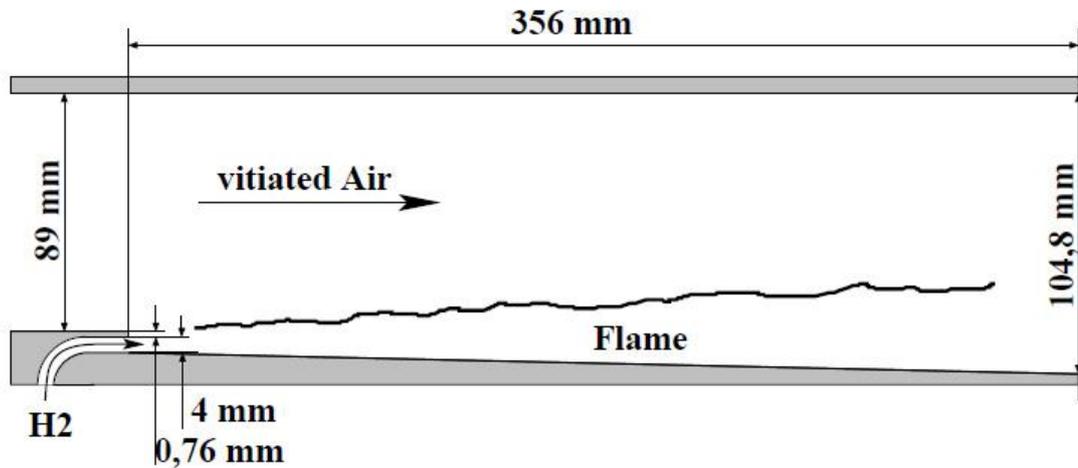


Рисунок 5.28 – Геометрия течения [191,192]

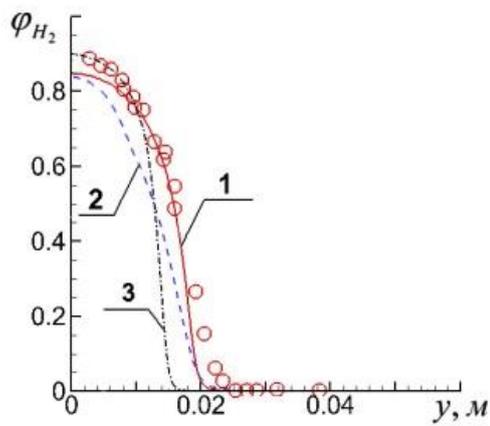
Таблица 5.4 Условия эксперимента [191,192]

	M	p, Pa	T, K	C_{H_2}	C_{O_2}	C_{H_2O}	C_{N_2}
Air	2.44	10^5	1270	0.0	0.258	0.256	0.486
H₂	1.0	10^5	254	1.0	0.	0.	0.

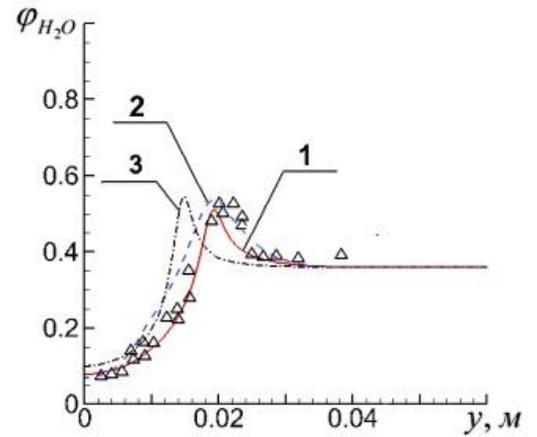
5.4.2 Результаты расчётов

На рисунках 5.29-5.32 представлены экспериментальные и расчётные профили некоторых параметров потока в выходном сечении канала на расстоянии 0,356 м от места ввода водорода при различных условиях расчёта.

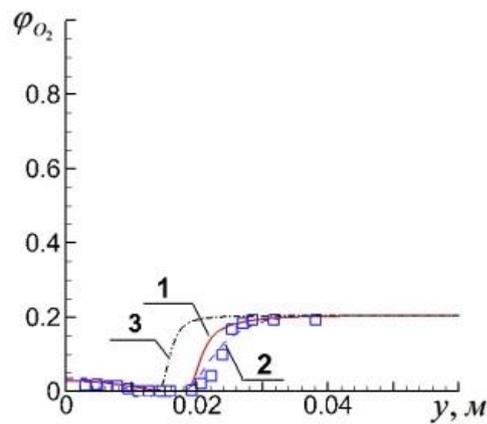
Анализ данных, представленных на рисунках 5.29, 5.30, показывает, что результаты расчёта, полученные с использованием SST- и K-ε-моделей турбулентности и неравновесной химической кинетики, удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [191,192]. Исключением является поперечный профиль объемной доли водорода, особенно при использовании K-ε модели турбулентности. Вероятно, это связано с переменностью турбулентных чисел Прандтля и Шмидта. Важность учета этого фактора показана, например, в [159]. В данной работе использовались постоянные значения: $Pr_t = Sc_t = 0.9$.



(a)



(б)



(в)

Рисунок 5.29 – Сравнение расчётных поперечных профилей объемных долей компонентов в поперечном сечении на расстоянии 0,356 м от места ввода водорода с экспериментом Барроуза и Куркова [191,192]. Расчёт: 1 - SST модель турбулентности, полная химия; 2 - K-ε модель турбулентности, полная химия; 3 - SST модель турбулентности, модель Eddy Dissipation. Экспериментальные данные представлены символами: кружками, треугольниками и квадратами

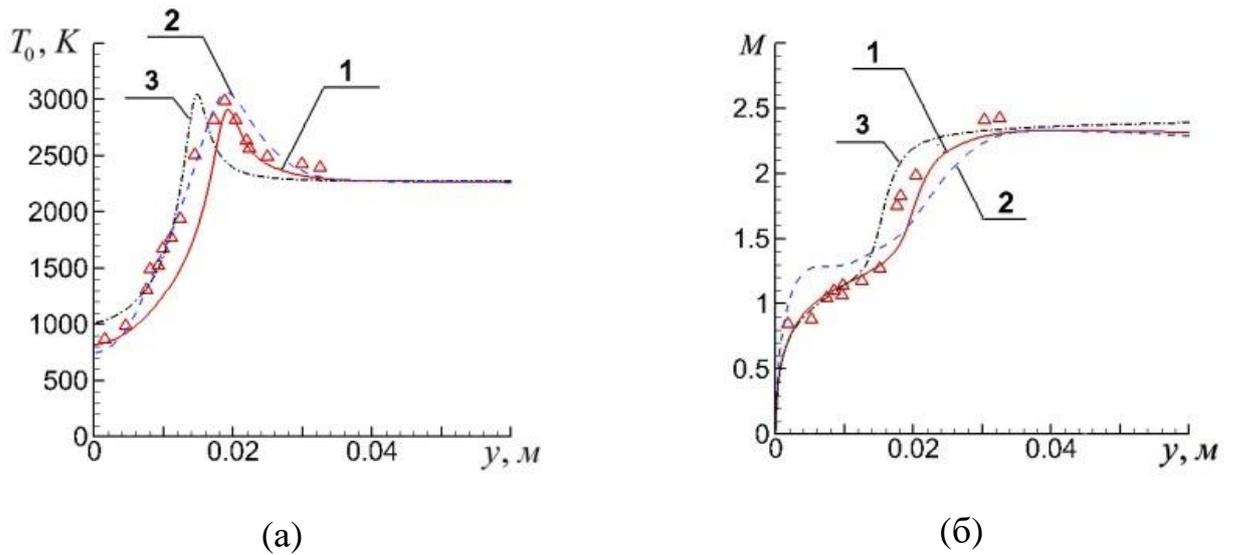


Рисунок 5.30 – Сравнение рассчитанных поперечных профилей полной температуры (а) и числа Маха (б) в поперечном сечении на расстоянии 0,356 м от места вдувания водорода с экспериментом Берроуза и Куркова [191,192].

Пояснение см. на рисунке 5.29

Однако по сравнению с учетом переменности Pr_T, Sc_T значительно большее влияние на результаты расчёта оказывает значение интенсивности турбулентности воздушного потока на входе в канал. В большинстве расчётов значение интенсивности составляло $Ti = 2\%$. Для сравнения на рисунке 5.31 приведены результаты расчёта для $Ti = 5\%$. Результаты существенно отличаются как от расчёта, представленного на рисунке 5.29, так и от экспериментальных данных.

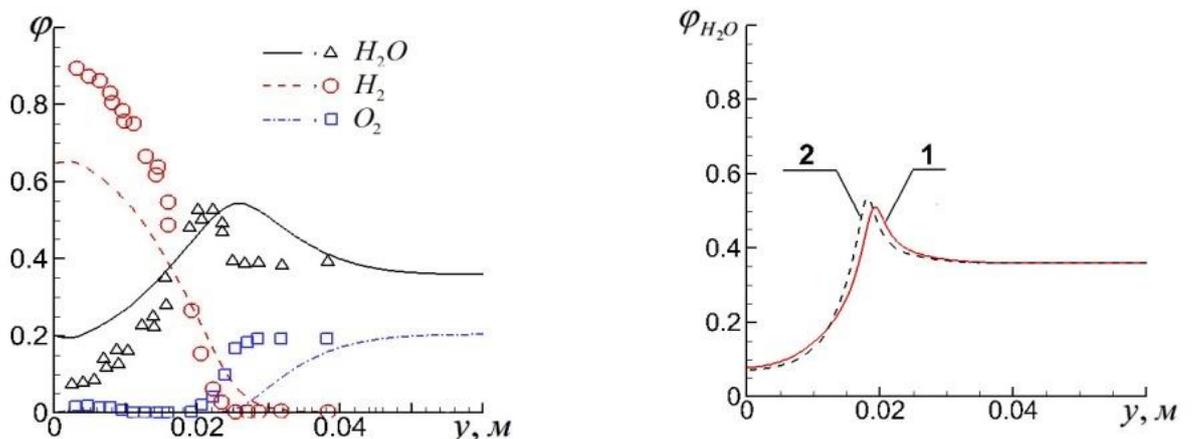


Рисунок 5.31 – Сравнение рассчитанных поперечных профилей объемных долей компонентов в сечении 0,356 м (при повышенной интенсивности турбулентности на начальном участке воздушного потока: $T_i = 5\%$) с экспериментом [191,192]

Рисунок 5.32 – Расчётные кросс-профили объемной доли H_2O на сечении 0,356 м с использованием различных моделей неравновесной химической кинетики: 1 – полная модель, 2 – короткая модель

На Рисунок 5.32 представлено сравнение результатов расчёта объемной доли основного продукта горения H_2O с использованием различных моделей неравновесной химической кинетики. Очевидно, что разница незначительна. То же самое относится и к другим параметрам потока (для краткости они не приводятся).

5.4.3 Выводы

Полученные результаты свидетельствуют о возможности применения разработанной методики для расчета горения водорода в сверхзвуковом турбулентном потоке.

5.5 Модельный прямоточный воздушно-реактивный двигатель (ПВРД)

В данном разделе были проведены две серии расчётов с целью определения влияния химической кинетики и геометрических характеристик на воспламенение горючего в камере сгорания прямоточного воздушно-реактивного двигателя.

Часть результатов данного исследования была опубликована в [194].

5.5.1 Исходные данные

При численном исследовании модельного ПВРД использовались следующие исходные данные:

Высота полёта: $H = 30$ км;

Давление на высоте: $P_\infty = 1197$ Па;

Температура на высоте: $T_\infty = 226.5$ К;

Скорость набегающего потока: $V_\infty = 2000$ м/с;

Горючее: Газообразный водород;

Давление водорода: $P_{H_2} = 54900$ Па;

Температура водорода: $T_{H_2} = 151.5$ К;

Коэффициент избытка окислителя: 1;

Модель турбулентности: SST;

В первой серии расчётов варьировалась модель химической кинетики:

а) Модель диссипации вихря, (МДВ);

б) Концепция диссипации вихря, 1 реакция ($[H_2+O_2=H_2O]$), (КДВ-1);

в) Концепция диссипации вихря, 21 реакция, (КДВ-21);

Полуугол сверхзвукового диффузора α был равен 25° .

Во второй серии расчётов варьировался полуугол сверхзвукового диффузора α :

а) $\alpha = 25^\circ$;

б) $\alpha = 26^\circ$;

в) $\alpha = 27^\circ$;

В качестве химической кинетики использовалась – Концепция диссипации вихря, 21 реакция.

5.5.2 Модельный ПВРД

Модельный ПВРД представляет собой плоский канал, изображённый на рисунке 5.33. Он состоит из сверхзвукового диффузора, в котором происходит торможение воздуха, длиной в 1 м. Диффузор в свою очередь состоит из 2-х участков: первого, с углом наклона к оси равным 15° , и второго – с углом наклона к оси равным α . За сверхзвуковым диффузором расположена камера сгорания, высота которой равна 0,3 м и длинна – 6 м.

На расстоянии 0,5 м от начала камеры, по центру расположен пилон, имеющий высоту 0,02 м и длину 1 м. Головная часть пилона имеет форму клина с полууглом - 10° . Правый плоский торец пилона служит для подачи горючего.

Через 0,5 м после пилона, камера сгорания наклонена к оси под углом $0,5^\circ$.

После камеры сгорания расположено сверхзвуковое сопло, полуугол раскрытия которого равен 15° . Общая длина канала – 12 м.

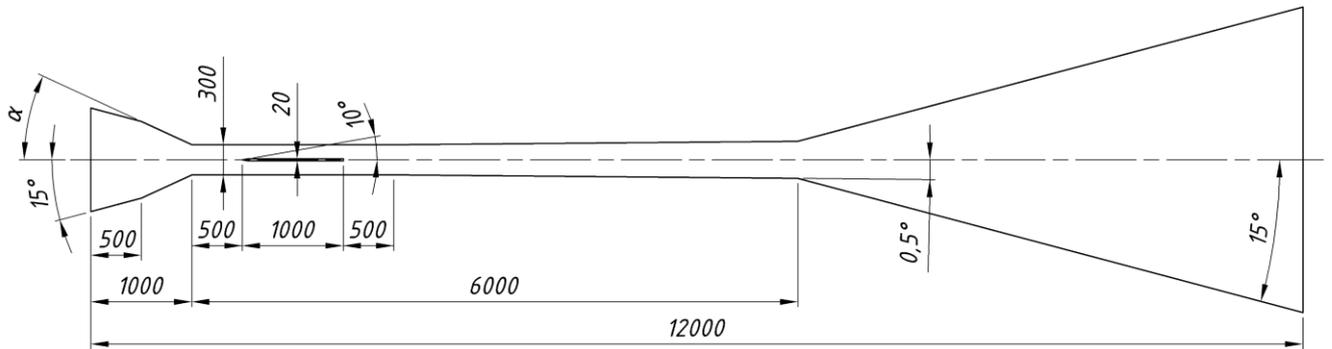


Рисунок 5.33 – Схема модельного ПВРД

5.5.3 Расчётная сетка

Так как модельный ПВРД представляет собой канал симметричный относительно оси, для сокращения времени необходимого для проведения расчётов, в качестве расчётного участка была выбрана половина канала.

Достаточно простая геометрия расчётного участка позволила использовать для него псевдо-структурированную сетку из прямоугольных ячеек, которая показана на рисунке 5.34.



Рисунок 5.34 – Расчётная сетка

Для точного моделирования пограничного слоя, в пристеночной области, расчётная сетка сделана более плотной, её структура показана на рисунке 5.35.

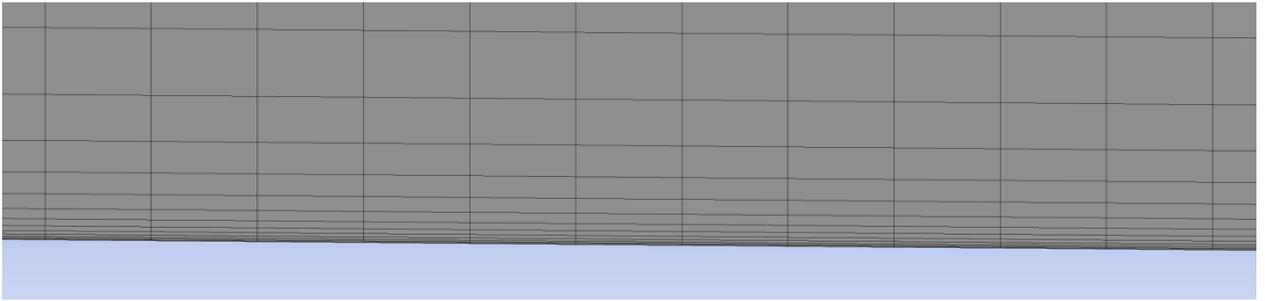


Рисунок 5.35 – Пристеночная область расчётной сетки

Количество узлов расчётной сетки составило – 74028 шт.;

Количество элементов расчётной сетки составило – 72422 шт.;

5.5.4 Граничные условия

После создания расчётной сетки, на её границах были заданы граничные условия. Задание граничных условий показано на рисунке 5.36, тип граничных условий представлен в таблице 5.5.

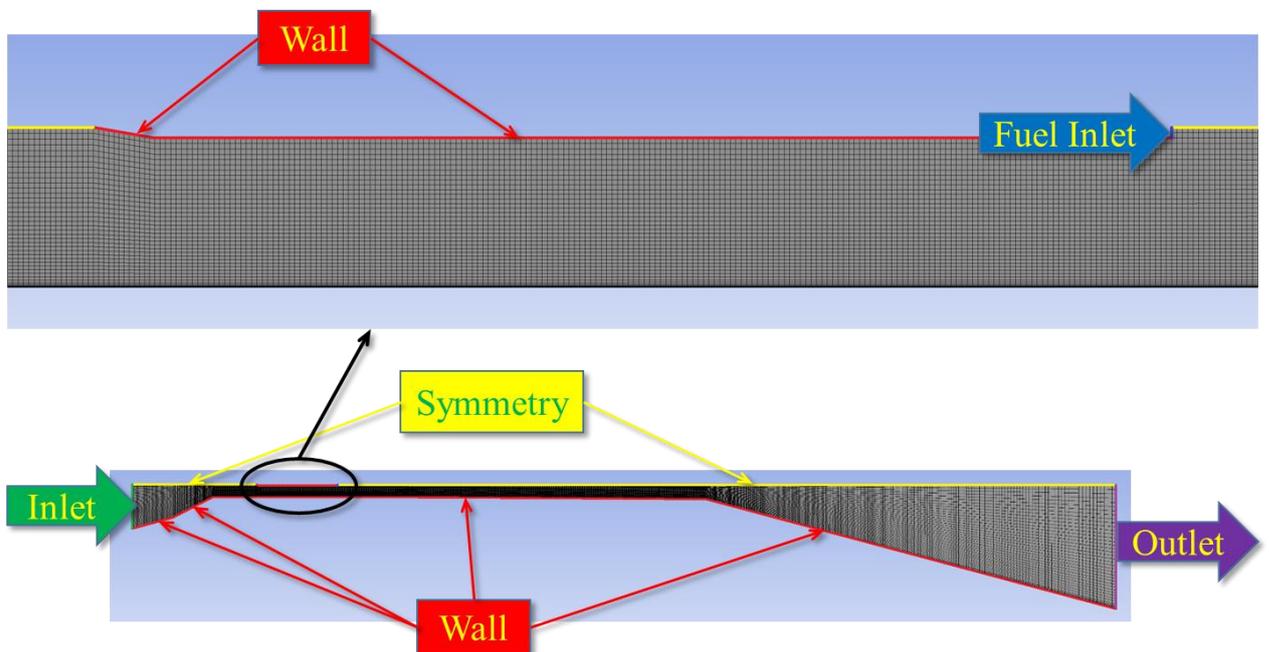


Рисунок 5.36 – Граничные условия

Таблица 5.5 – Граничные условия

Название	Тип граничного условия
----------	------------------------

Wall	Стенка
Symmetry	Симметрия
Inlet	Вход внешнего потока
Fuel Inlet	Вход горючего
Outlet	Сверхзвуковой выход

5.5.5 Результаты численного исследования влияния модели химической кинетики на воспламенение горючего в камере сгорания ПВД

В данной серии расчётов варьировалась модель химической кинетики:

- а) Модель диссипации вихря, (МДВ);
- б) Концепция диссипации вихря, 1 реакция ($[H_2+O_2=HO_2]$), (КДВ-1);
- в) Концепция диссипации вихря, 21 реакция, (КДВ-21);

Полуугол сверхзвукового диффузора α был равен 25° .

Полученные результаты представлены на рисунках 5.37-5.49.

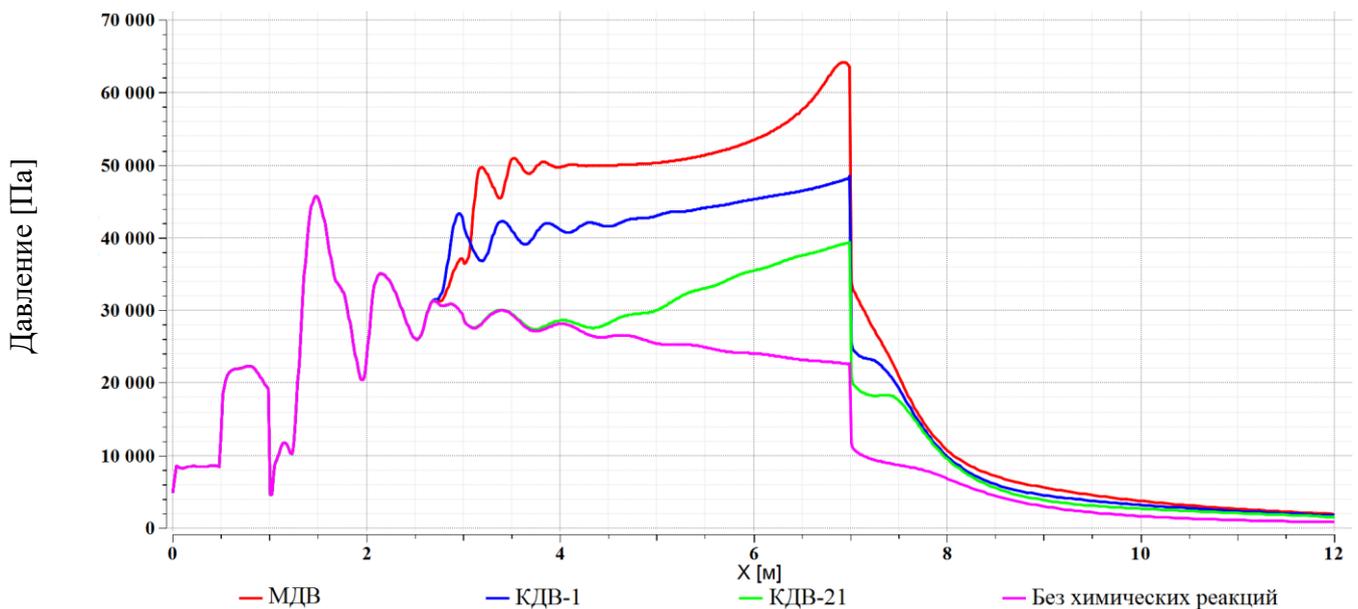


Рисунок 5.37 – Распределение давления на стенке канала

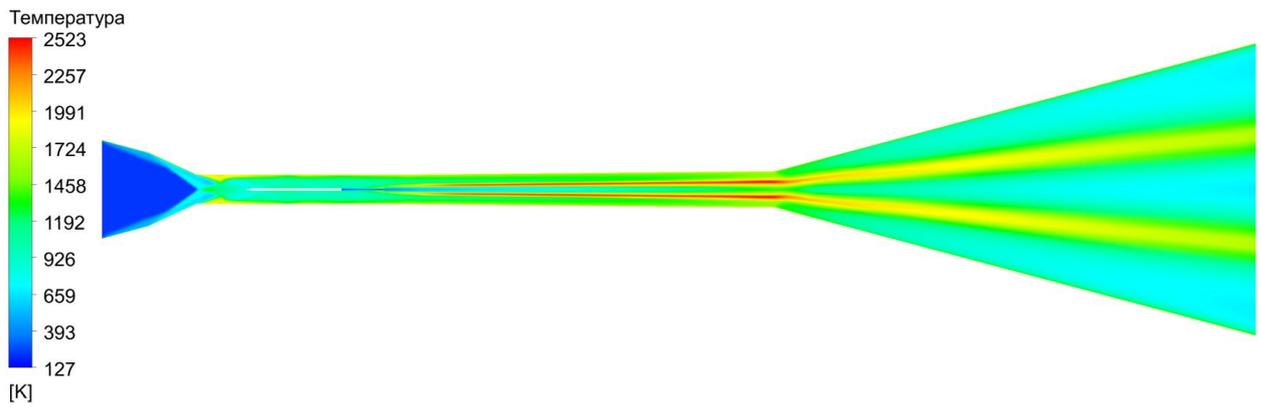


Рисунок 5.38 – Распределение температуры (МДВ)

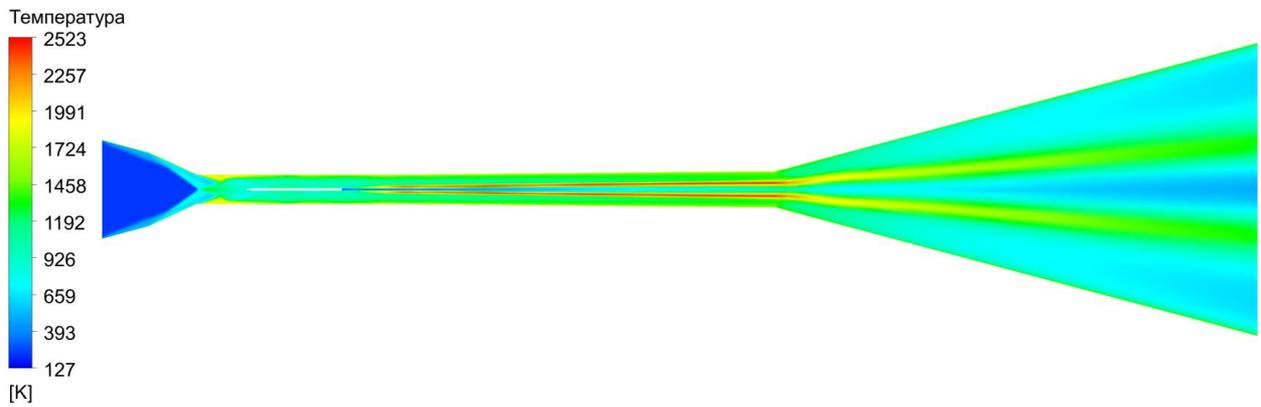


Рисунок 5.39 – Распределение температуры (КДВ-1)

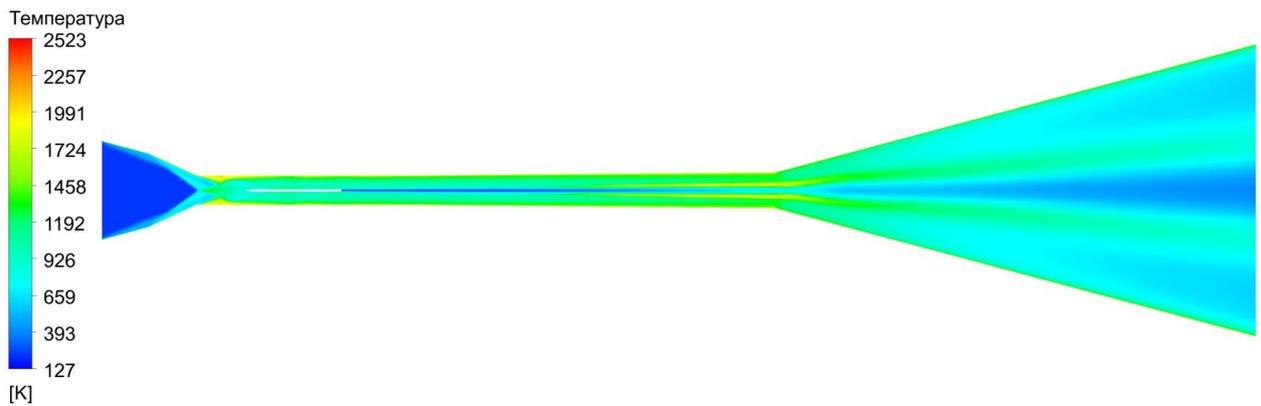


Рисунок 5.40 – Распределение температуры (КДВ-21)

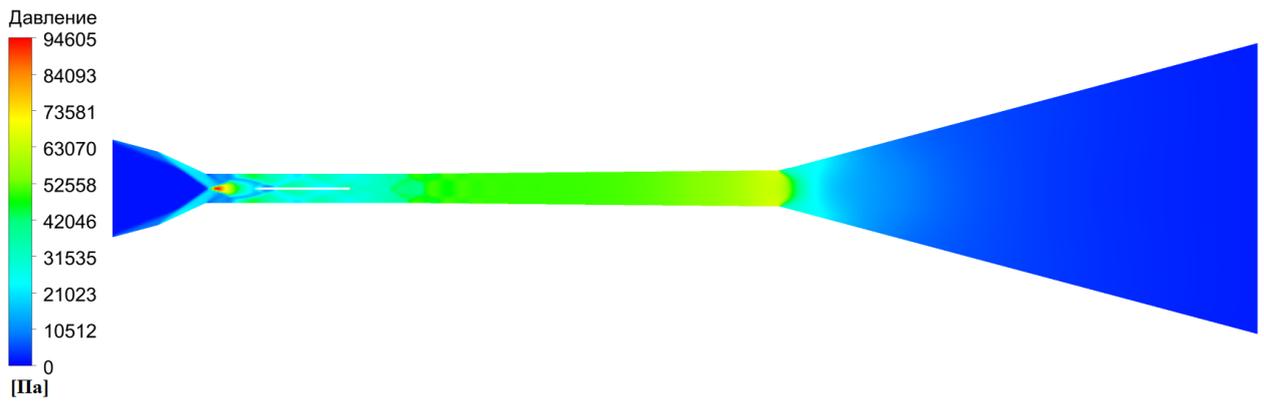


Рисунок 5.41 – Распределение давления (МДВ)

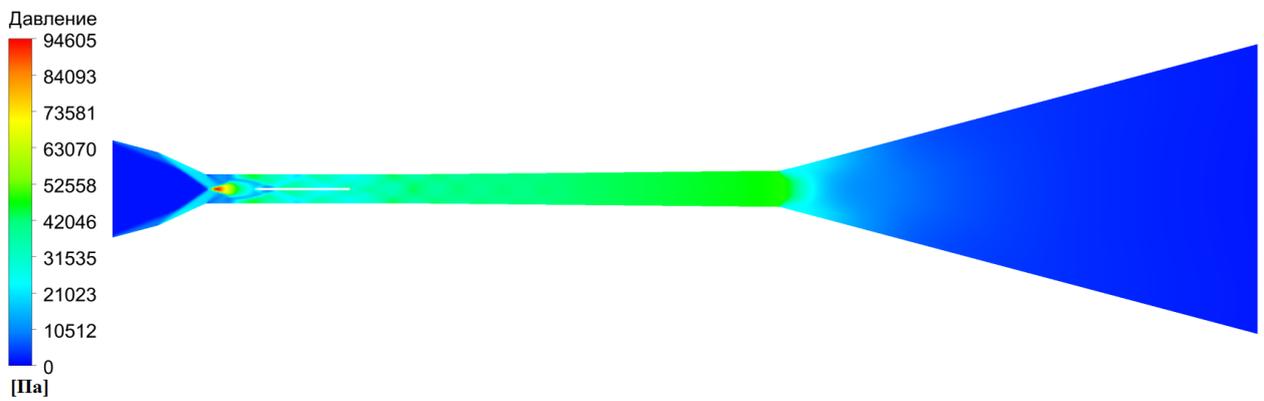


Рисунок 5.42 – Распределение давления (КДВ-1)

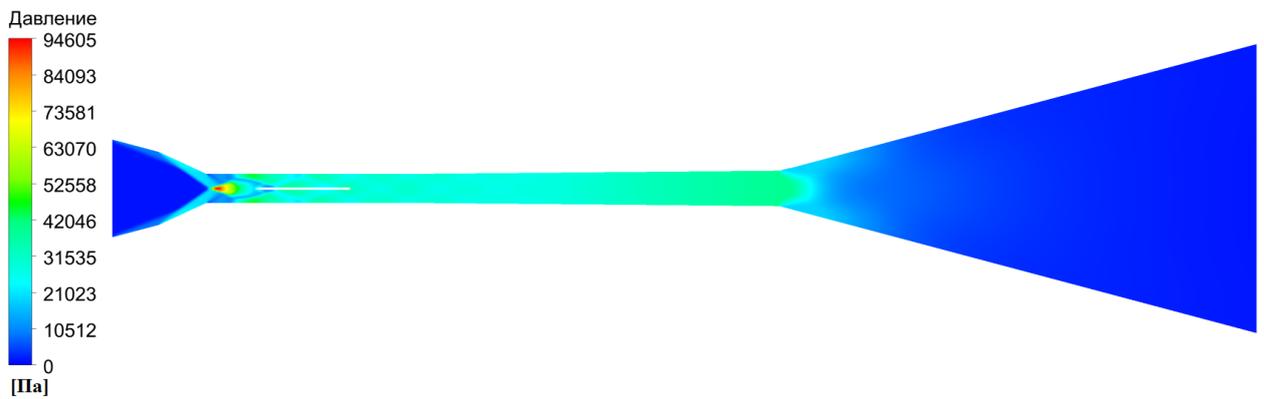


Рисунок 5.43 – Распределение давления (КДВ-21)

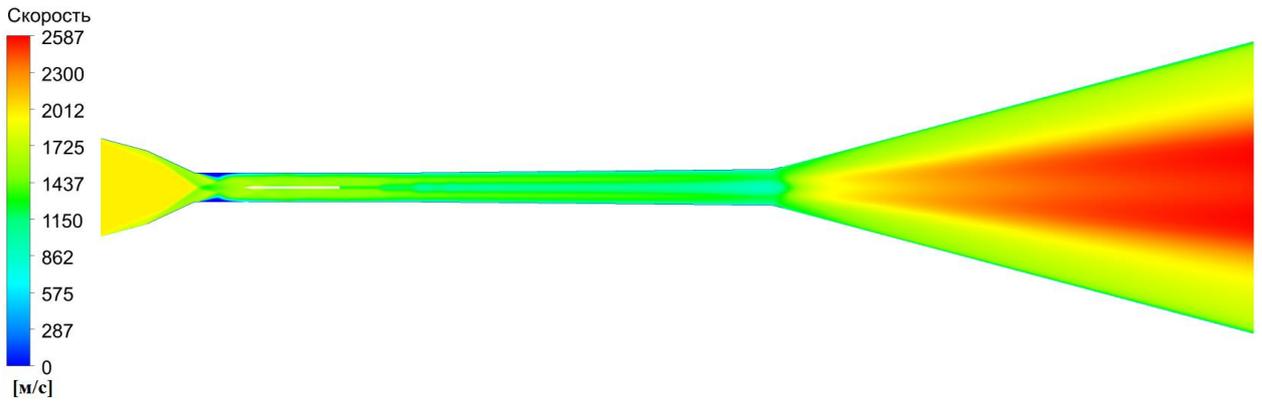


Рисунок 5.44 – Распределение скорости (МДВ)

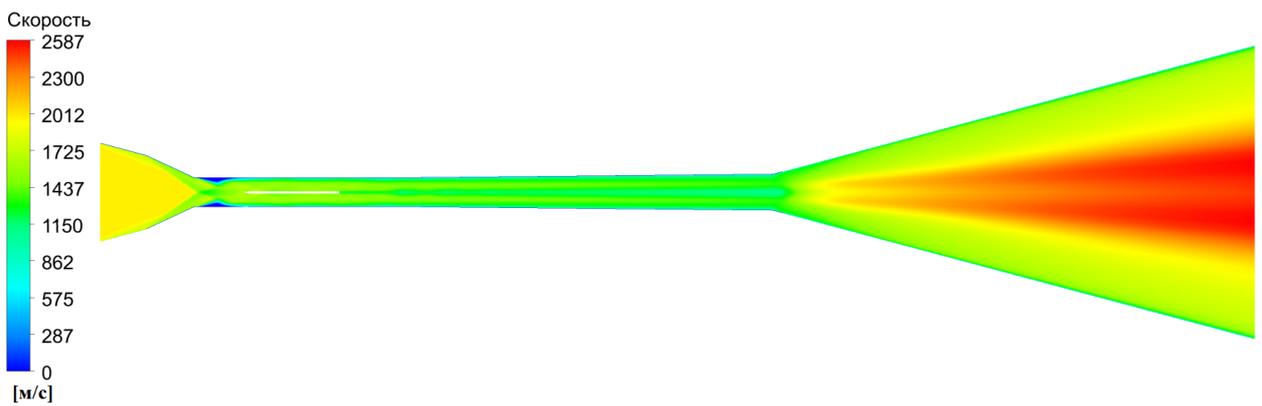


Рисунок 5.45 – Распределение скорости (КДВ-1)

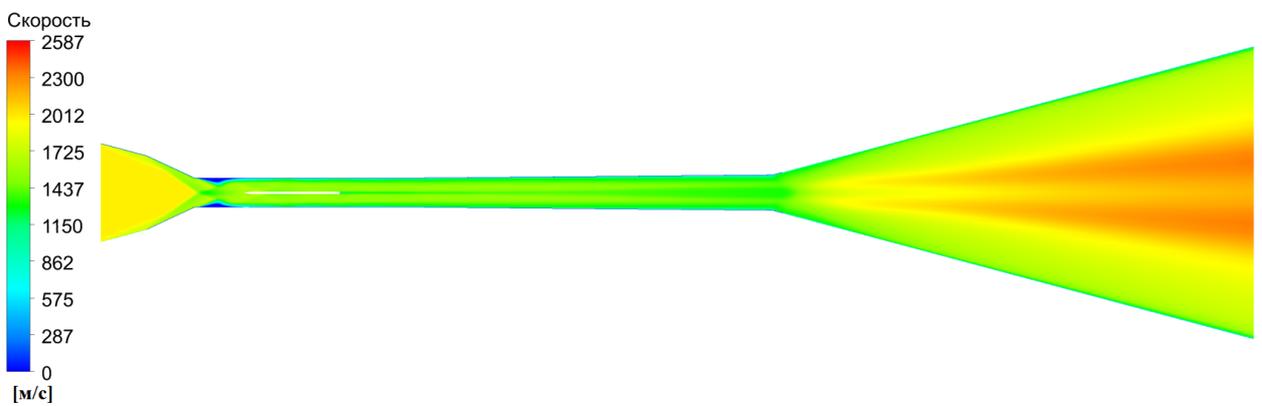
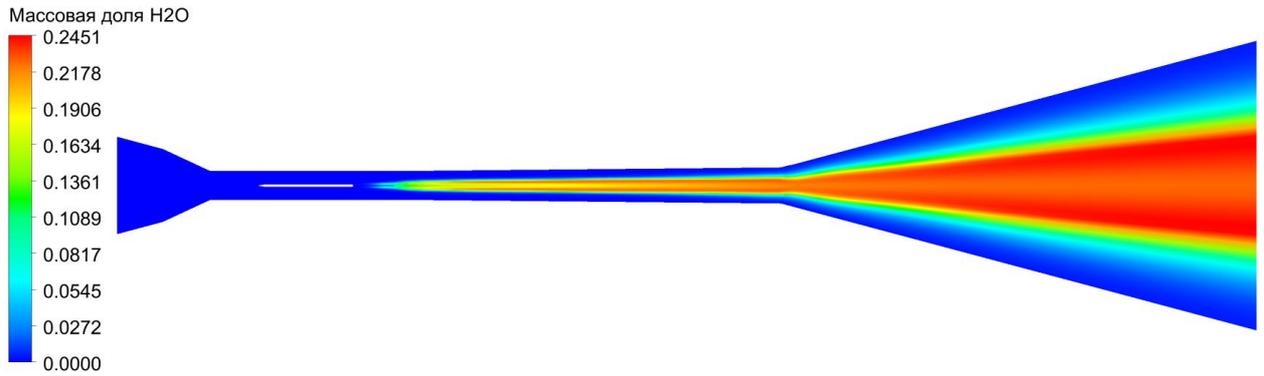
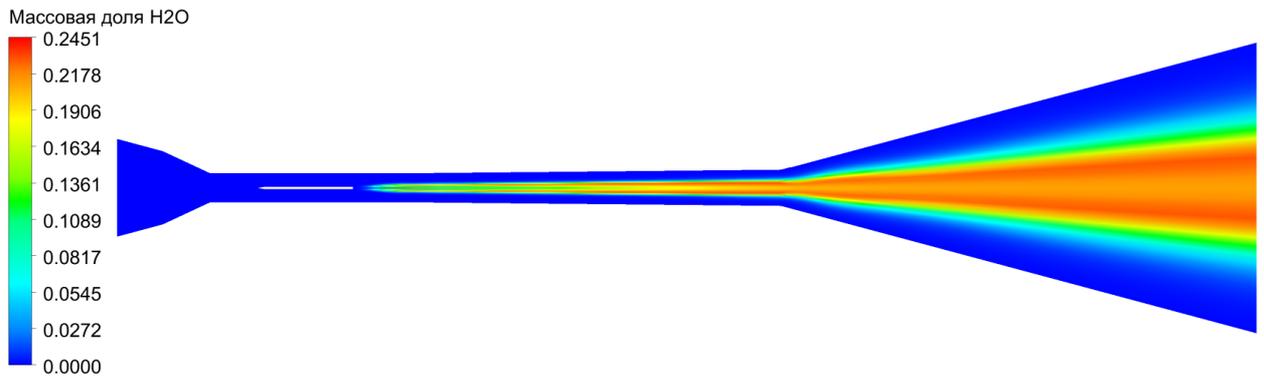
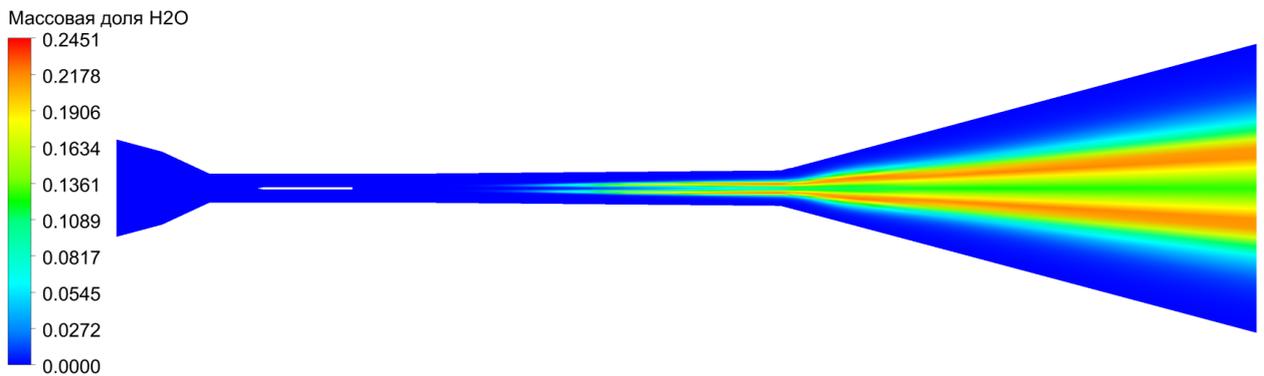


Рисунок 5.46 – Распределение скорости (КДВ-21)

Рисунок 5.47 – Распределение массовой доли H₂O (МДВ)Рисунок 5.48 – Распределение массовой доли H₂O (КДВ-1)Рисунок 5.49 – Распределение массовой доли H₂O (КДВ-21)

5.5.6 Результаты численного исследования влияния полуугла сверхзвукового диффузора на воспламенение горючего в камере сгорания ПВРД

В данной серии расчётов варьировался полуугол сверхзвукового диффузора α :

- а) $\alpha = 25^\circ$;
- б) $\alpha = 26^\circ$;
- в) $\alpha = 27^\circ$;

В качестве химической кинетики использовалась – Концепция диссипации вихря, 21 реакция.

Полученные результаты представлены на рисунках 5.50-5.62.

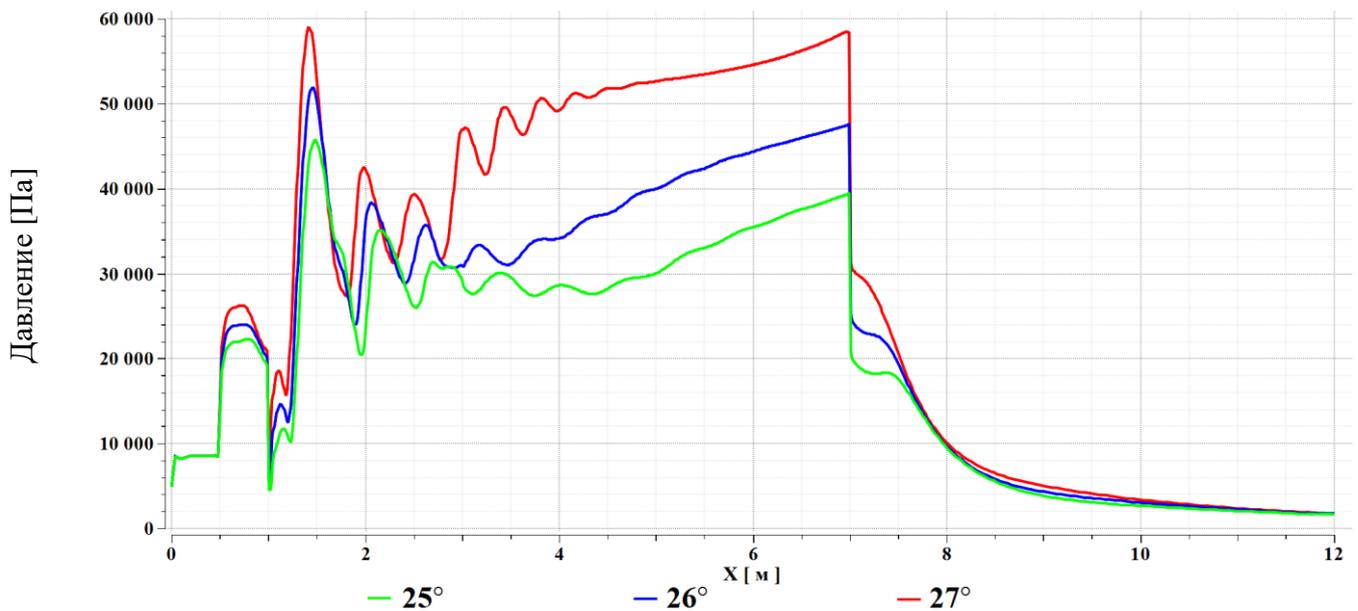
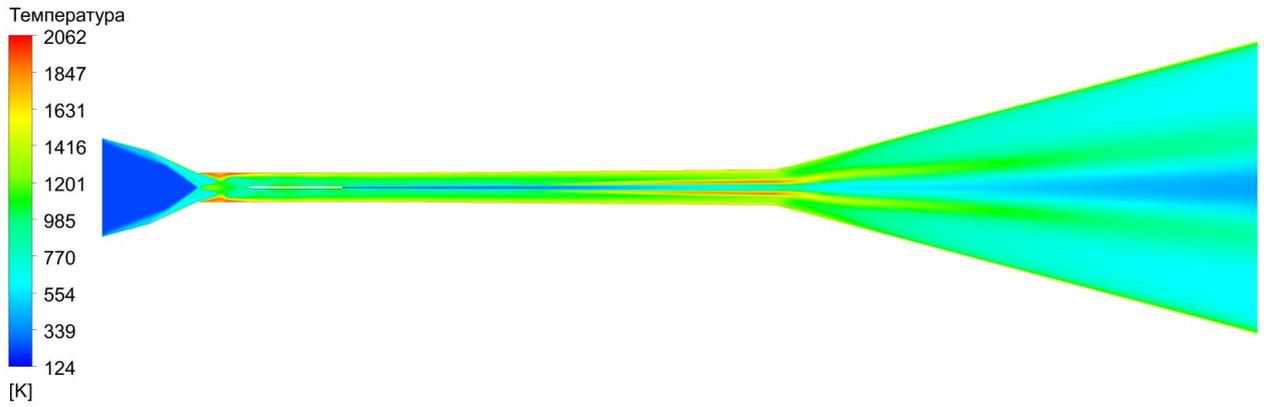
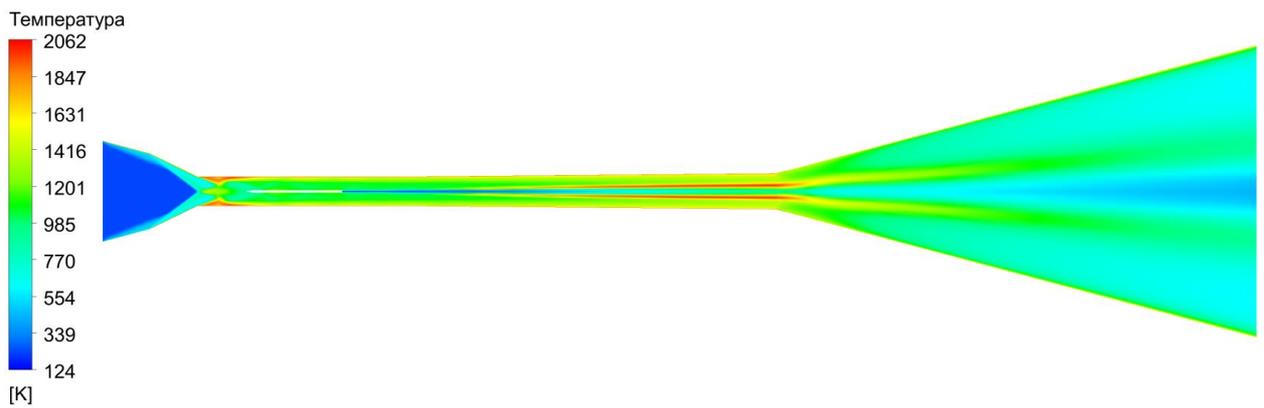
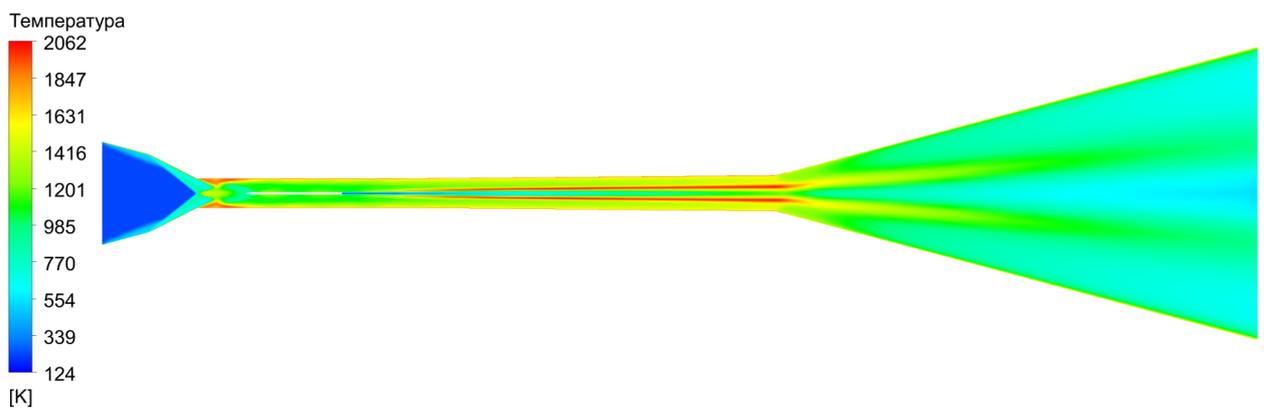
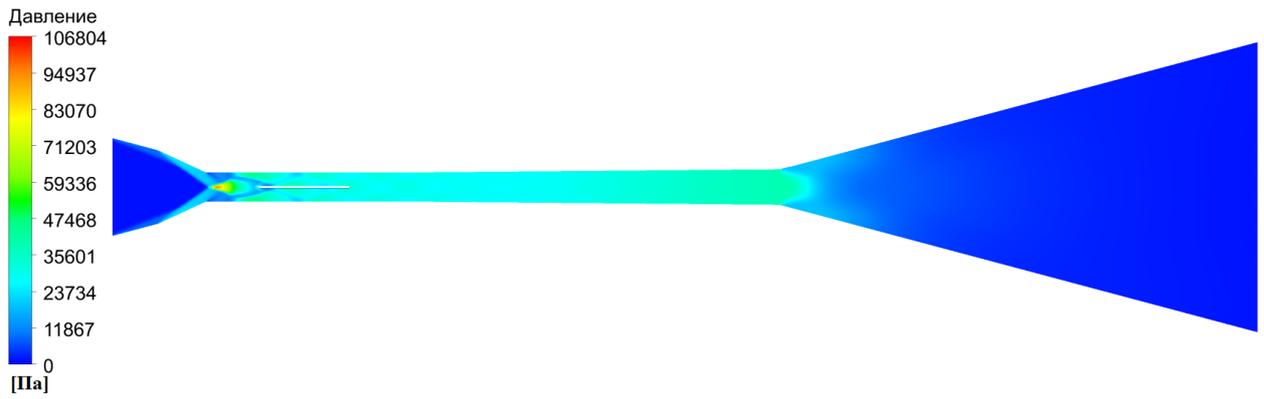
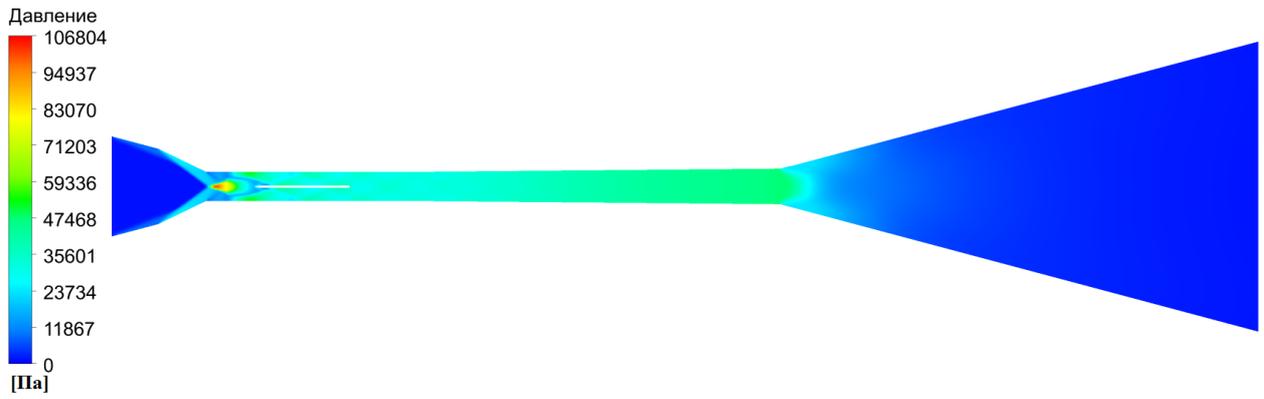
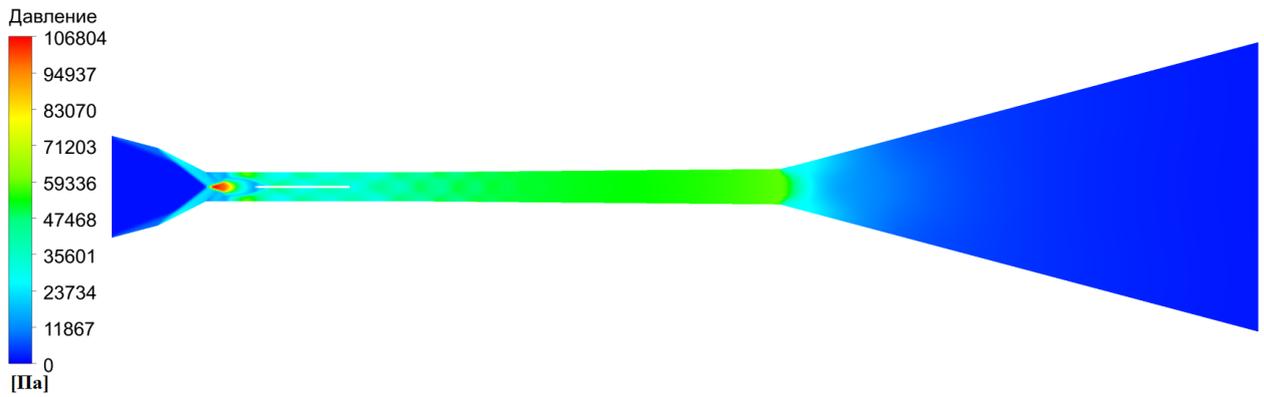
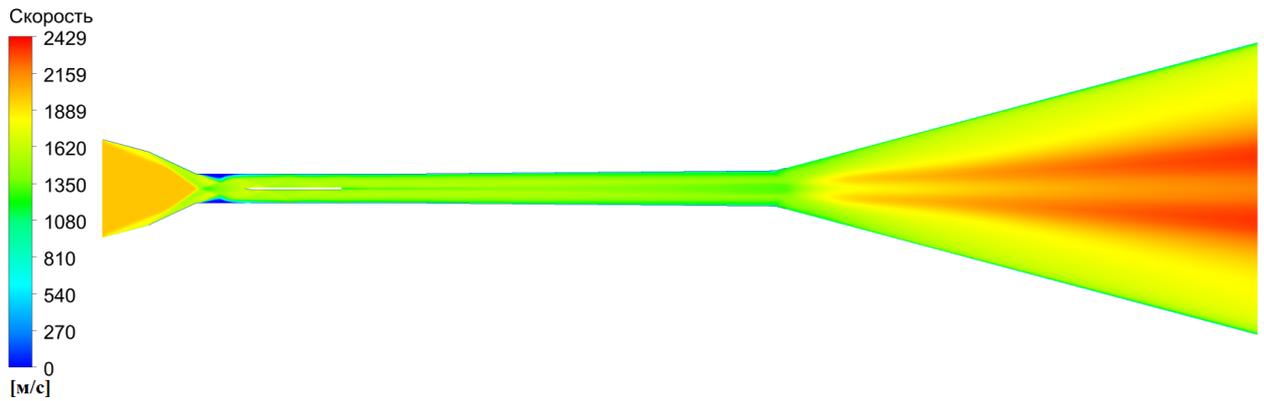
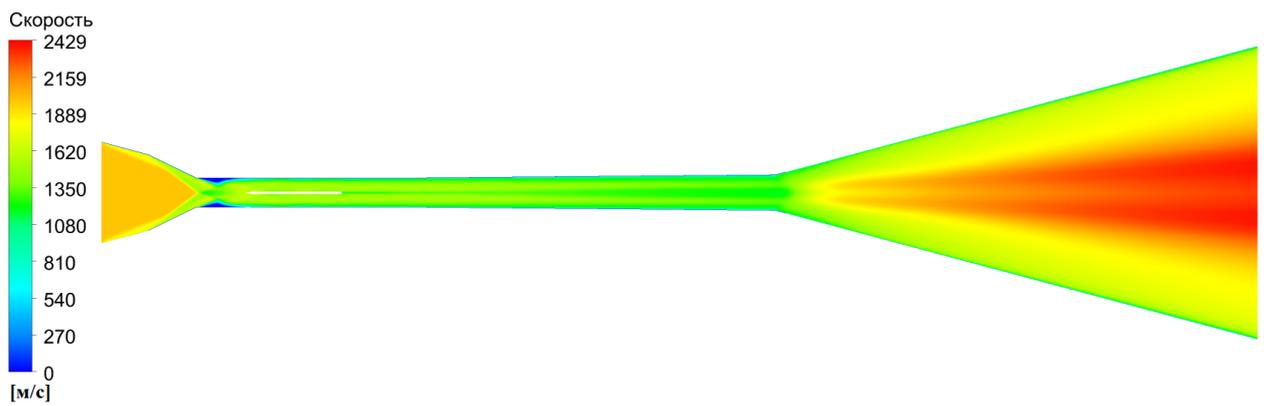
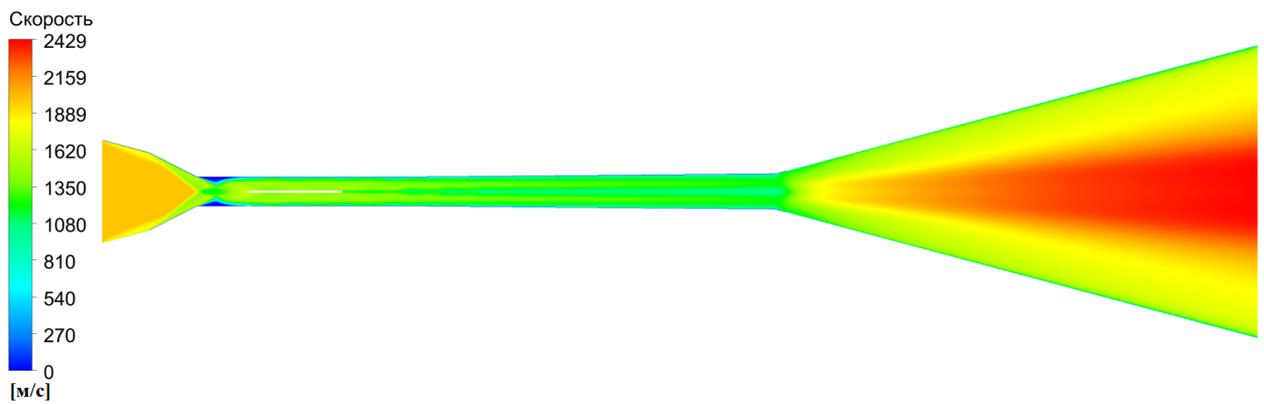
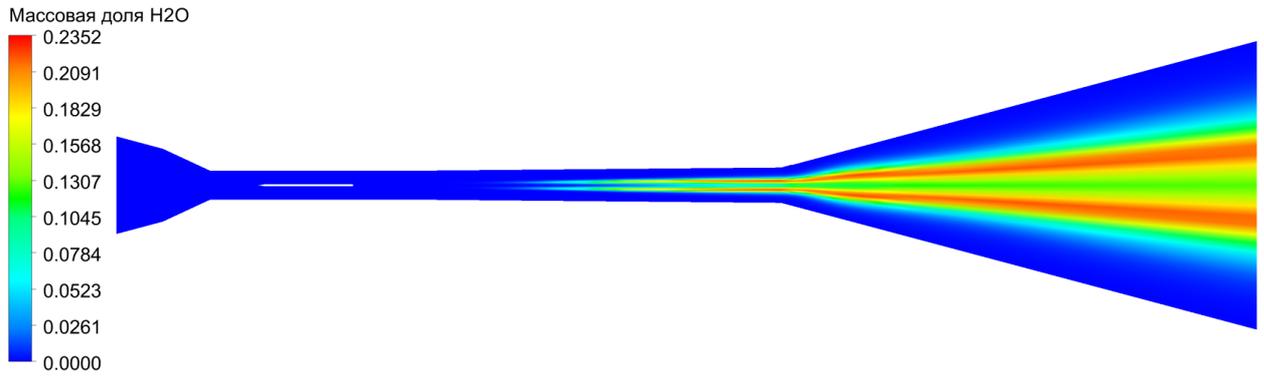
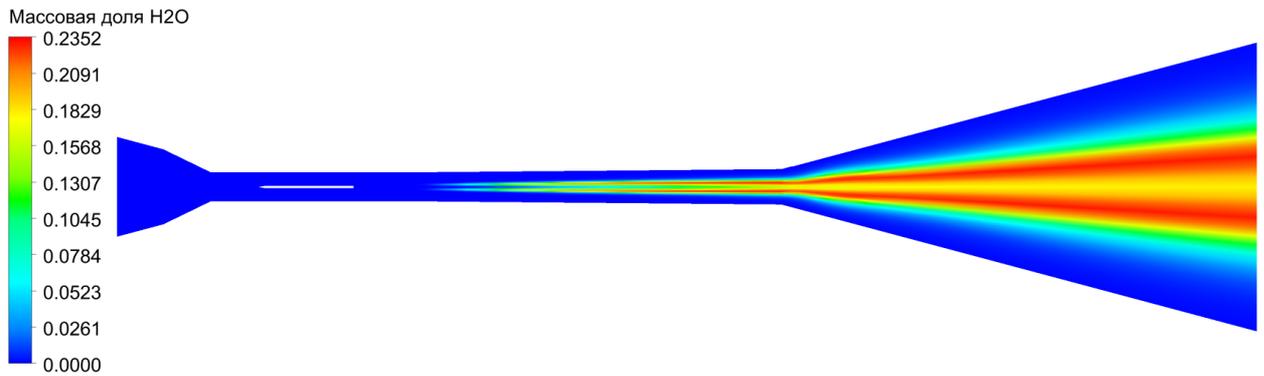
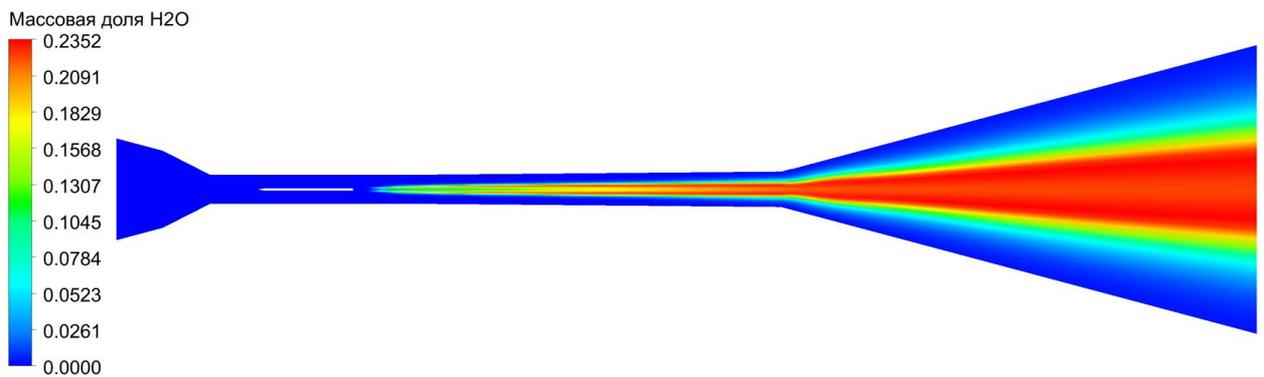


Рисунок 5.50 – Распределение давления на стенке канала

Рисунок 5.51 – Распределение температуры ($\alpha = 25^\circ$)Рисунок 5.52 – Распределение температуры ($\alpha = 26^\circ$)Рисунок 5.53 – Распределение температуры ($\alpha = 27^\circ$)

Рисунок 5.54 – Распределение давления ($\alpha = 25^\circ$)Рисунок 5.55 – Распределение давления ($\alpha = 26^\circ$)Рисунок 5.56 – Распределение давления ($\alpha = 27^\circ$)

Рисунок 5.57 – Распределение скорости ($\alpha = 25^\circ$)Рисунок 5.58 – Распределение скорости ($\alpha = 26^\circ$)Рисунок 5.59 – Распределение скорости ($\alpha = 27^\circ$)

Рисунок 5.60 – Распределение массовой доли H₂O ($\alpha = 25^\circ$)Рисунок 5.61 – Распределение массовой доли H₂O ($\alpha = 26^\circ$)Рисунок 5.62 – Распределение массовой доли H₂O ($\alpha = 27^\circ$)

5.5.7 Расчёт удельного импульса

Для каждой серии расчётов был рассчитан удельный импульс.

Тяга ПВРД рассчитывалась по формуле:

$$R = \dot{m}_{\text{возд}} (V_e - V) + \dot{m}_{\text{H}_2} V_e \quad (5.2)$$

где $\dot{m}_{\text{возд}}$ - секундный расход воздуха; \dot{m}_{H_2} - секундный расход водорода; V_e - скорость на срезе сопла; V - скорость полёта;

Удельная тяга:

$$R_y = \frac{R}{\dot{m}_{\text{H}_2}} \quad (5.3)$$

Удельный импульс:

$$I_y = \frac{R_y}{g_0} \quad (5.4)$$

где g_0 - ускорение свободного падения (9,80665 м/с²).

Для серии расчётов, в которой варьировались модели химической кинетики, исходные данные представлены в таблице 5.6, а результаты в таблице 5.7 и на рисунке 5.63.

Таблица 5.6 – Исходные данные

Расчёт	V , м/с	V_e , м/с	$\dot{m}_{\text{возд}}$, кг	\dot{m}_{H_2} , кг
МДВ	2000	2362.2085	19.0408	0.5522
КДВ-1	2000	2265.5039	19,0408	0,5522
КДВ-21	2000	2166.4657	19,0408	0,5522

Таблица 5.7 – Результаты расчётов

Расчёт	R_y , м/с	I_y , с
МДВ	14852	1515
КДВ-1	11421	1165
КДВ-21	7907	806

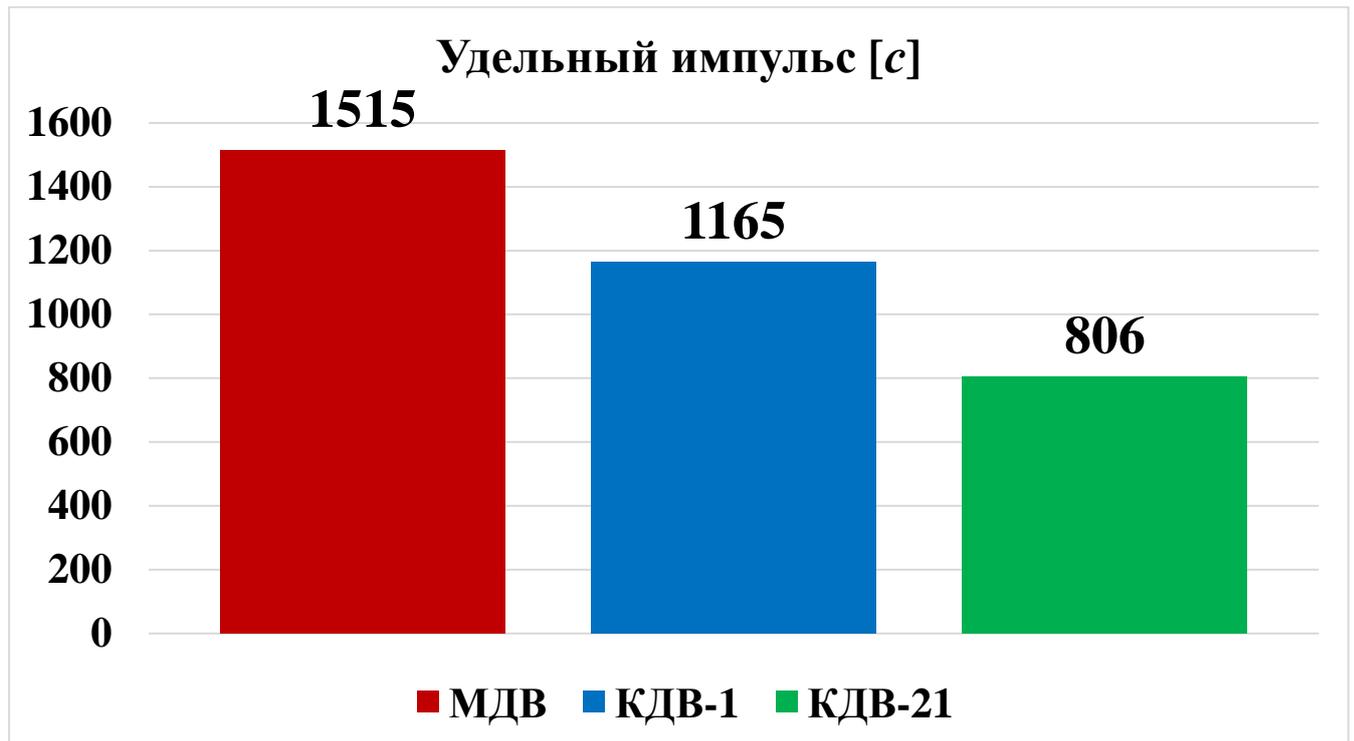


Рисунок 5.63 – Удельный импульс при различных моделях химической кинетики

Для серии расчётов, в которой варьировался полуугол раскрытия сверхзвукового диффузора, исходные данные представлены в таблице 5.8, а результаты в таблице 5.9 и на рисунке 5.64.

Таблица 5.8 – Исходные данные

Расчёт	V , м/с	V_e , м/с	$\dot{m}_{\text{возд}}$, кг	\dot{m}_{H_2} , кг
$\alpha = 25^\circ$	2000	2166.4657	19,0408	0,5522
$\alpha = 26^\circ$	2000	2193.9973	19,4352	0,5636
$\alpha = 27^\circ$	2000	2231.4079	19,8365	0,5753

Таблица 5.9 – Результаты расчётов

Расчёт	R_y , м/с	I_y , с
$\alpha = 25^\circ$	7907	806
$\alpha = 26^\circ$	8884	906
$\alpha = 27^\circ$	10211	1041

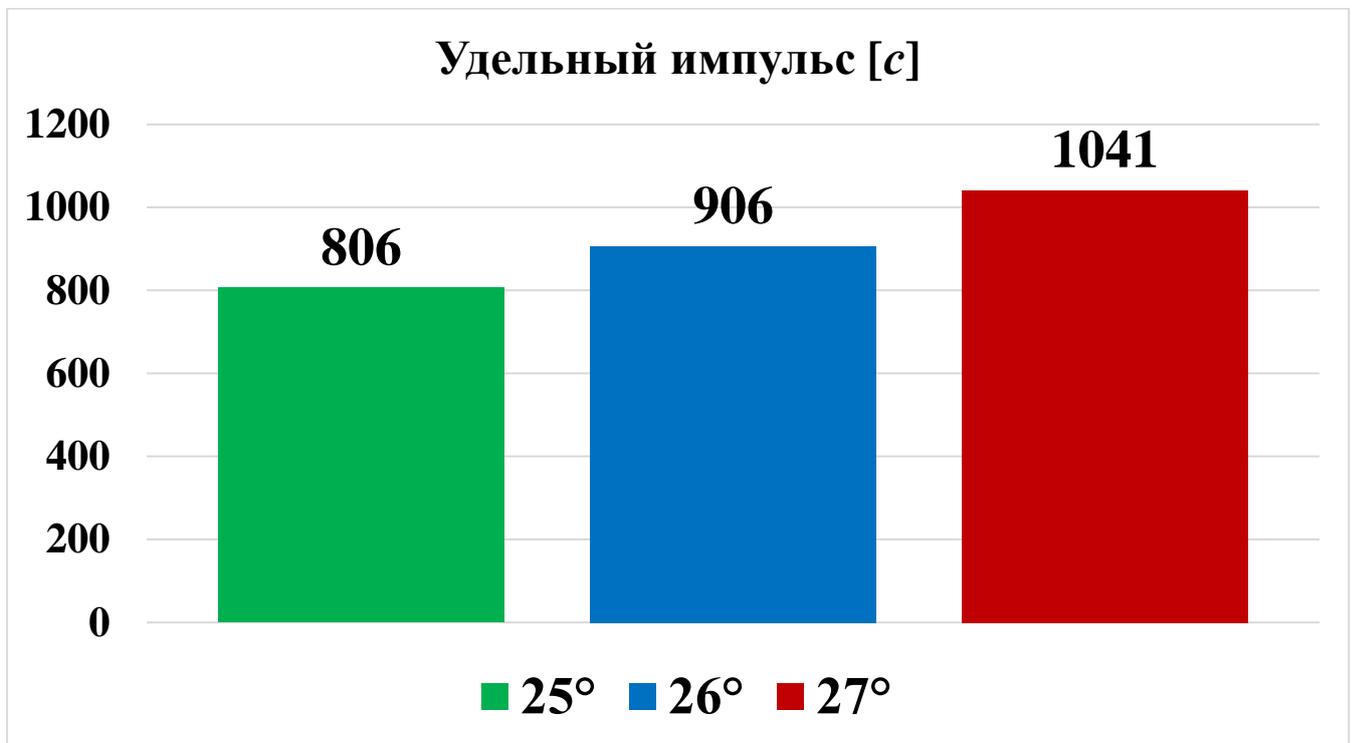


Рисунок 5.64 – Удельный импульс при различных полууглах сверхзвукового диффузора

5.5.8 Выводы

- Исследовано влияние, применяемой при расчётах, математической модели химической кинетики на воспламенение горючего в камере сгорания ПВРД. Показано, что упрощённые модели химической кинетики, показывают результат существенно отличающийся от полной модели.

- Исследовано влияние изменения угла сверхзвукового диффузора на воспламенение горючего в камере сгорания ПВРД. Показано, что даже небольшое изменение угла входного устройства, существенно влияет на момент воспламенения и интенсивность горения топлива.
- Посчитан удельный импульс модельного ПВРД при различных моделях химической кинетики и различных углах сверхзвукового диффузора.

5.6 Рабочий процесс в прямоточном двигателе гипотетического космического летательного аппарата, предназначенного для работы в атмосфере Юпитера

В последнее время в связи с продолжающимся освоением космоса, и в частности других планет солнечной системы, актуальной становится задача использования материалов находящихся на этих планетах в качестве топлива для силовой установки аппарата предназначенного для передвижения в атмосфере планеты. Использование солнечной энергии не всегда представляется возможным, например при нахождении аппарата под слоями атмосферы, не пропускающими солнечный свет.

В данной работе рассматривается возможность функционирования прямоточного воздушно-реактивного двигателя в атмосфере Юпитера. Предполагается, что в качестве горючего будет использоваться водород из атмосферы Юпитера, а в качестве окислителя - запасённый в аппарате кислород.

Результаты данного исследования докладывались на международной конференции и были опубликованы в [199].

5.6.1 Схема течения и исходные данные

Для тестирования модели проведены расчёта течения в прямоточном водородно-реактивном двигателе, схема течения в котором представлена на рисунке 5.65. Схему течения по сравнению с земным вариантом пришлось существенно изменить так как молекулярный вес подаваемого топлива, в отличии

от земного варианта, существенно превосходит молекулярный вес атмосферного горючего.

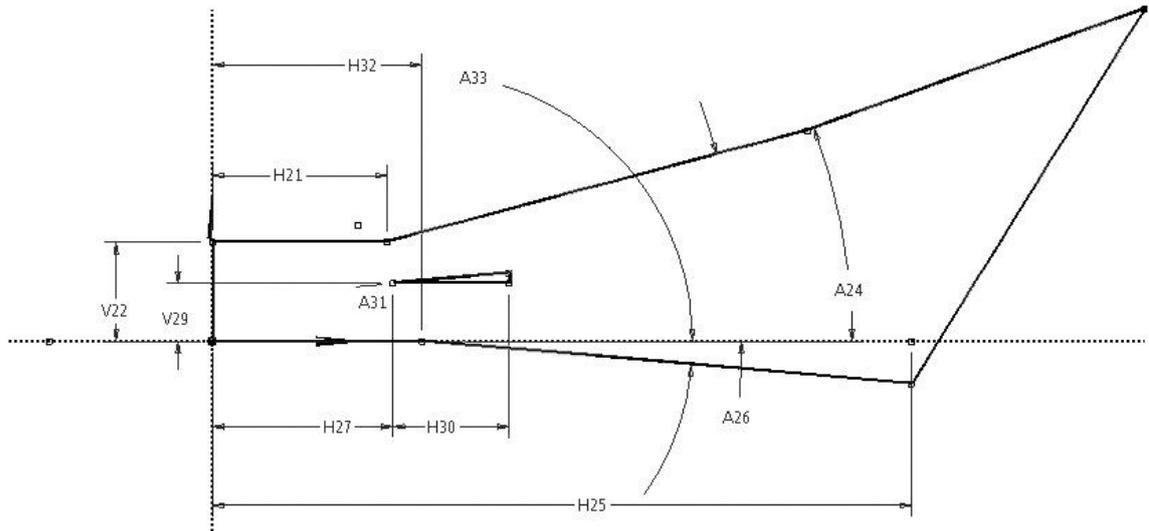


Рисунок 5.65 – Схема течения

Основные размеры представлены в таблице 5.10.

Таблица 5.10 – Основные размеры

A24	20°	H27	31 см
A26	15°	H30	20 см
A31	5°	H32	36 см
A33	5°	V22	17.161 см
H21	30 см	V29	10 см
H25	120 см		

Слева в изолятор (isolator) подается газ атмосферы Юпитера, предварительно сжатый во входном устройстве. Параметры на входе представлены в таблице 5.11.

Таблица 5.11

Скорость, м/с	Давление, Па	Температура, К	Массовые доли	
			H ₂	He
2241	621.6	756274	0.863	0.137

Эти параметры соответствуют полету со скоростью 4147 м/с при давлении окружающей атмосферы равном 4374 Па и температуре 122.6 К (число Маха =5). Параметры атмосферы подобраны в соответствии с данными работы [193] для высоты полета 60 км от «уровня моря Юпитера» (Jovian Sea Level).

В камере сгорания через расположенный в центре пилон подается предварительно разогретая смесь кислорода с продуктом сгорания – H₂O. Параметры потока представлены в таблице 5.12.

Таблица 5.12

Скорость, м/с	Давление, Па	Температура, К	Массовые доли	
			O ₂	H ₂ O
700.	1200.	656274.	0.8	0.2

Изолятор имеет постоянный вертикальный размер, а камера сгорания имеет некоторое расширение, т.к. при постоянном размере происходит запираание потока. Водород намного легче кислорода и продуктов сгорания, поэтому ему трудно проталкивать их.

5.6.2 Результаты расчётов

Некоторые результаты расчёта процессов в камере сгорания представлены на следующих рисунках.

На рисунке 5.66, 5.67 сравниваются распределения давления на верхней (рисунок 5.66) и нижней (рисунок 5.67) стенках камеры сгорания при отсутствии горения (кривая 1) и при наличии горения (кривая 2). Отсчет продольного размера

ведется от начала соответствующей стенки.

Горение в камере сгорания увеличивает давление на стенках и, соответственно создает тягу двигателя за счет продольной силы. На верхней стенке за счет горения давление увеличивается примерно на 60%, на нижней - несколько меньше.

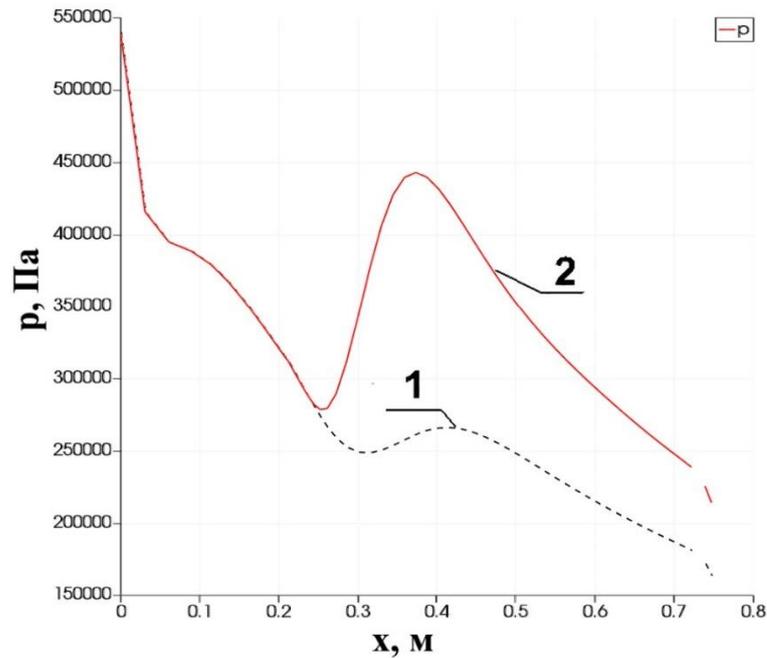


Рисунок 5.66 – Давление на верхней стенке. Номинальный режим (01, 02). 1 – расчёт БЕЗ учета химических реакций; 2 – расчёт С учетом химических реакций

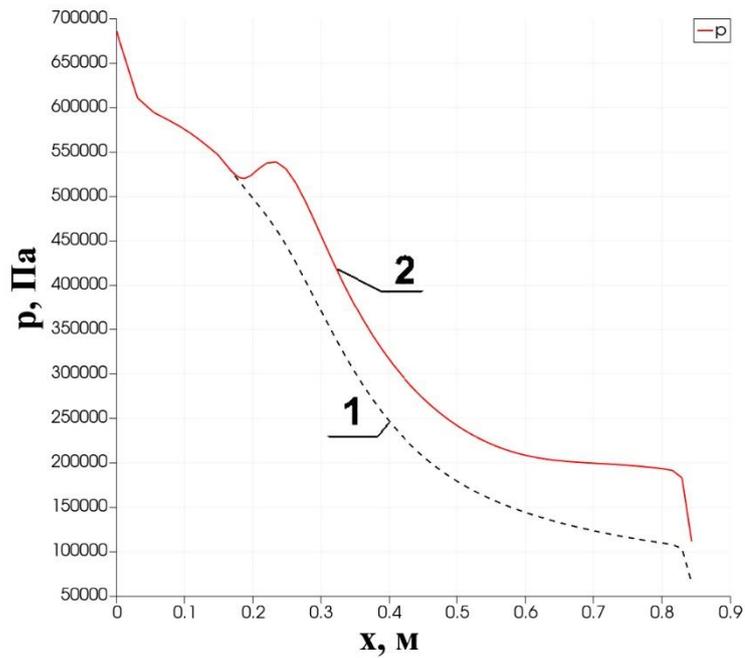


Рисунок 5.67 – Давление на нижней стенке. Номинальный режим (01, 02). 1 – расчёт БЕЗ учета химических реакций; 2 - расчёт С учетом химических реакций

На рисунках 5.68-5.70 показаны распределения температуры и массовых долей H_2O и O_2 . Очевидно, что кислород практически полностью выгорает в камере сгорания и начале сопла.

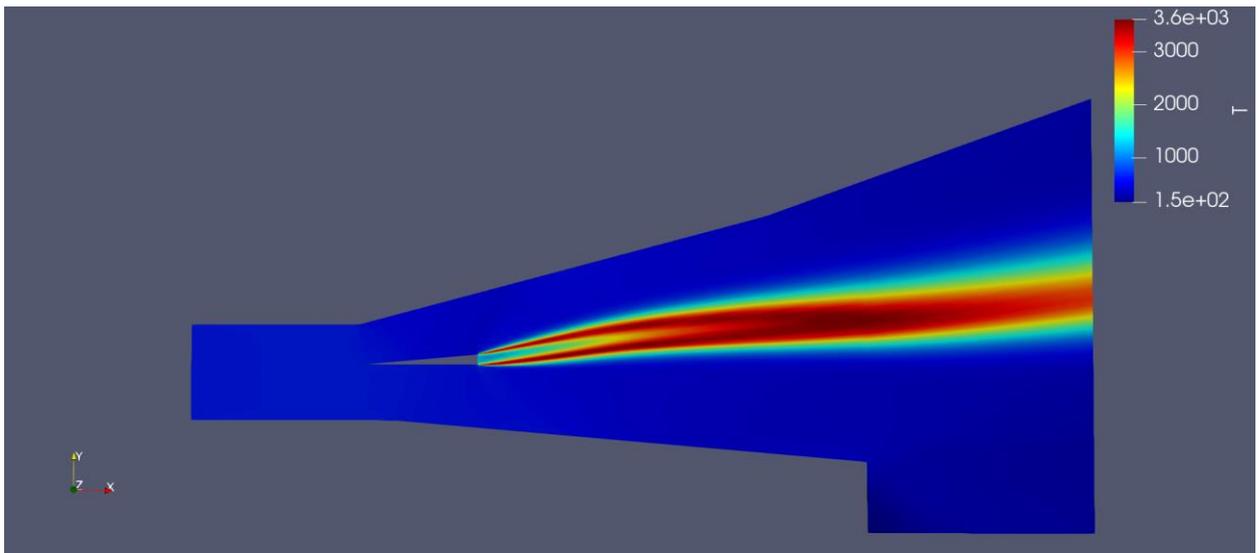


Рисунок 5.68 – Распределение температуры. Номинальный режим (02). Расчёт с учетом химических реакций

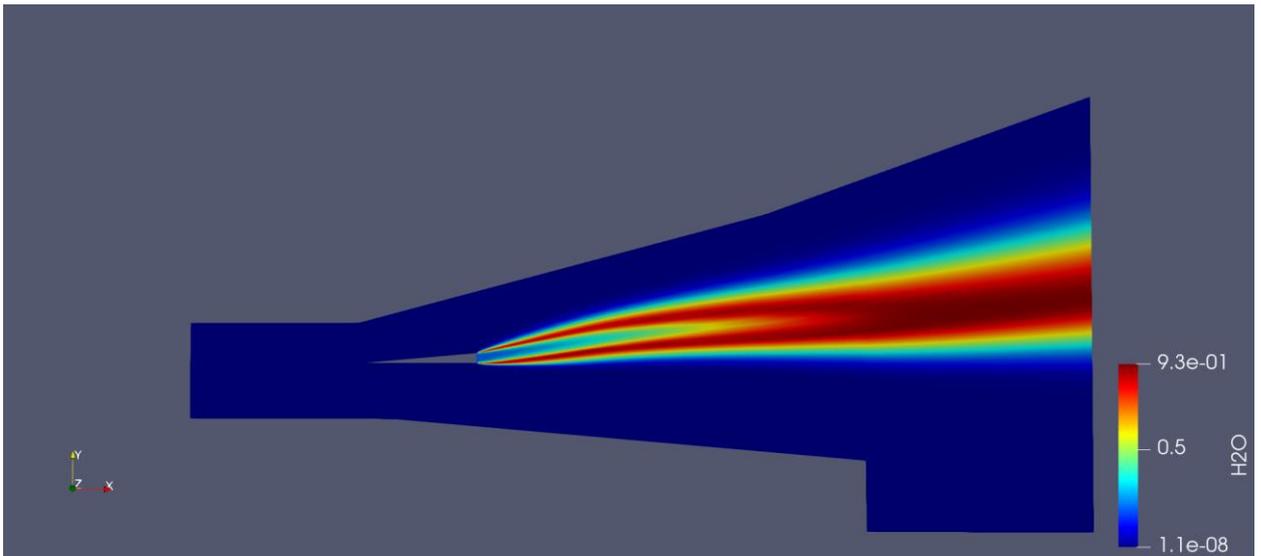


Рисунок 5.69 – Распределение H_2O . Номинальный режим (02). Расчёт с учетом химических реакций

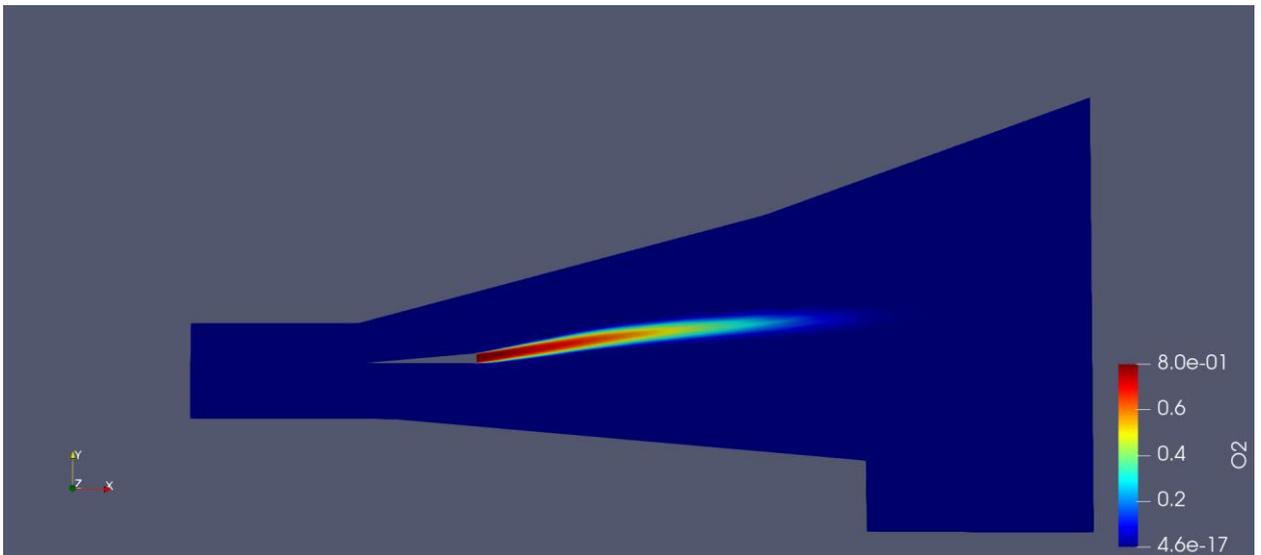


Рисунок 5.70 – Распределение O_2 . Номинальный режим (02). Расчёт с учетом химических реакций

Интересно проанализировать, как влияют на процессы горения основные параметры подаваемых компонентов.

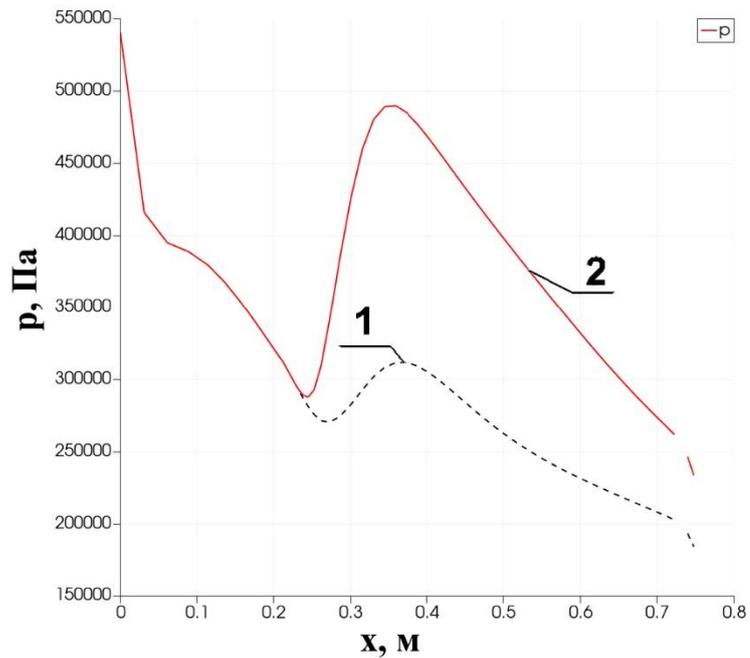


Рисунок 5.71 – Давление на верхней стенке. Расход O_2 увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (03, 04). 1 – расчёт БЕЗ учета химических реакций; 2 - расчёт С учетом химических реакций

На 5.71-5.75 представлены аналогичные результаты расчёта в случае, когда расход окислителя увеличен вдвое по сравнению с номиналом (см. табл. 5.8)

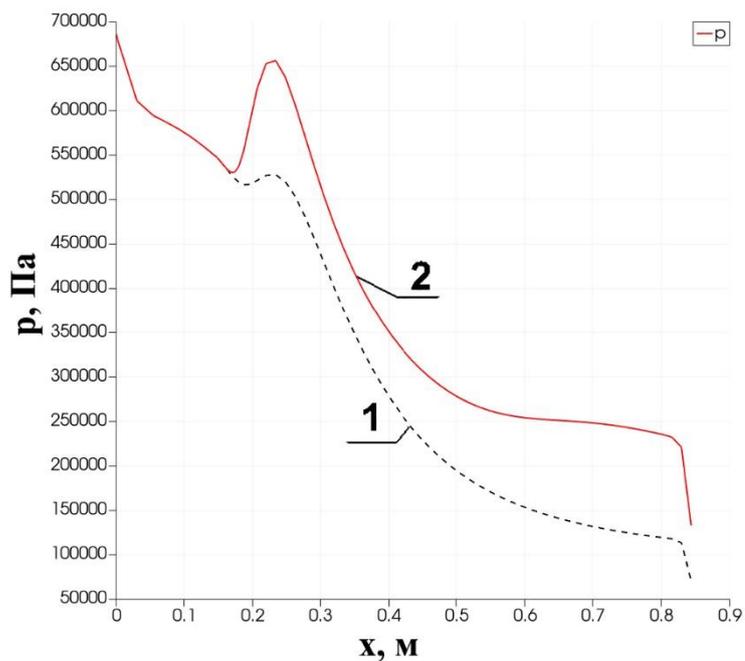


Рисунок 5.72 – Давление на нижней стенке. Расход O_2 увеличен вдвое по

сравнению с номинальным режимом (03, 04). 1 – расчёт БЕЗ учета химических реакций; 2 - расчёт С учетом химических реакций

Прирост давления становится больше, а кислород тоже практически весь выгорает в камере сгорания и частично в сопле.

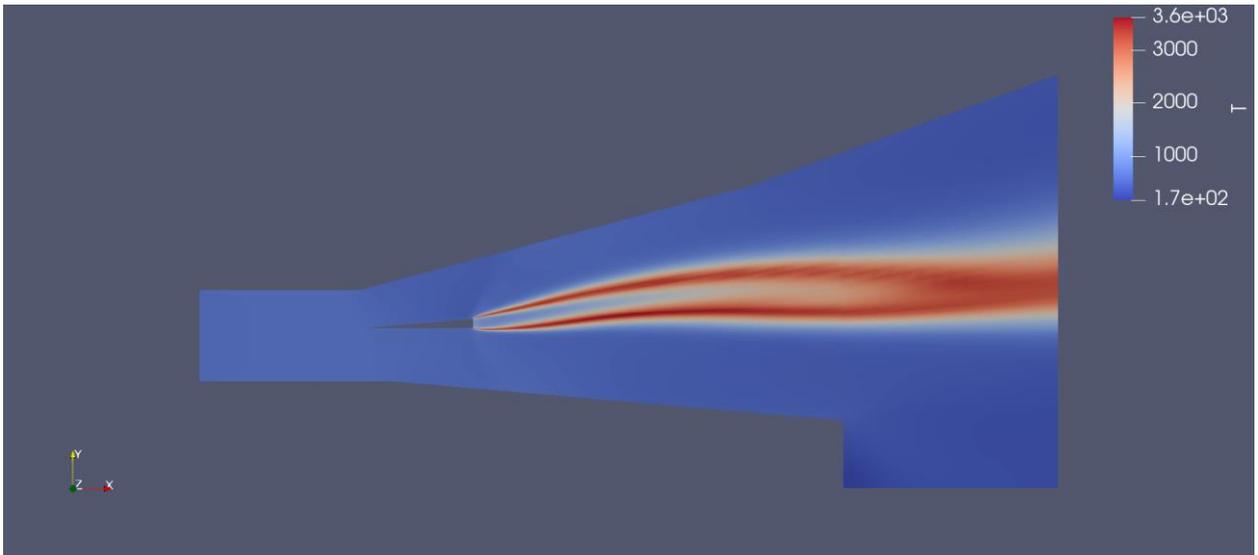


Рисунок 5.73 – Распределение температуры. Расход O_2 увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (04). Расчёт С учетом химических реакций

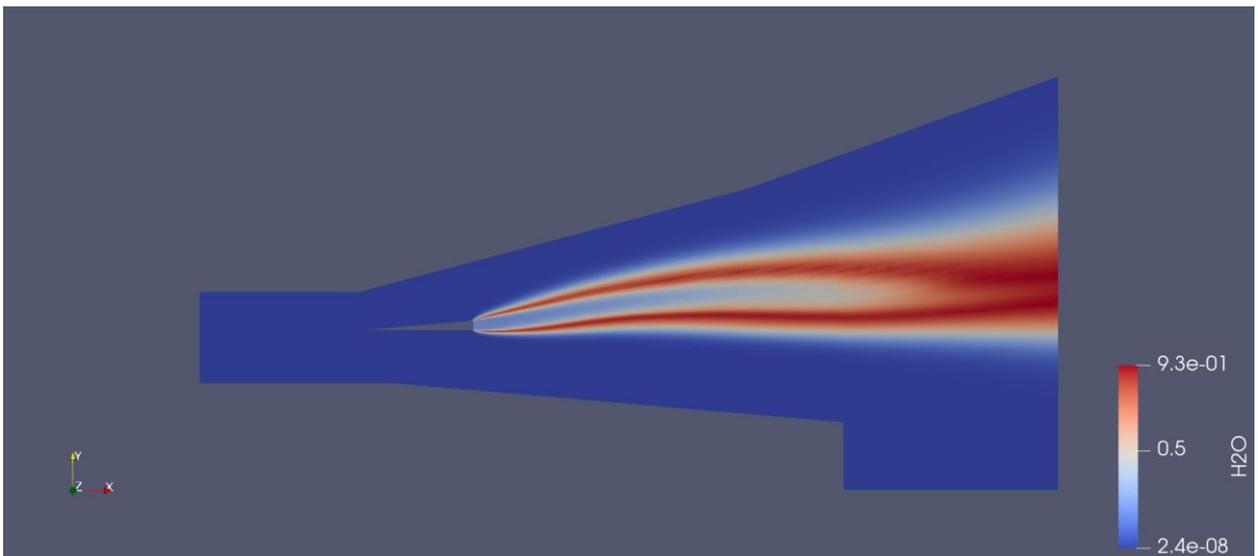


Рисунок 5.74 – Распределение H_2O . Расход O_2 увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (04). Расчёт С учетом химических реакций

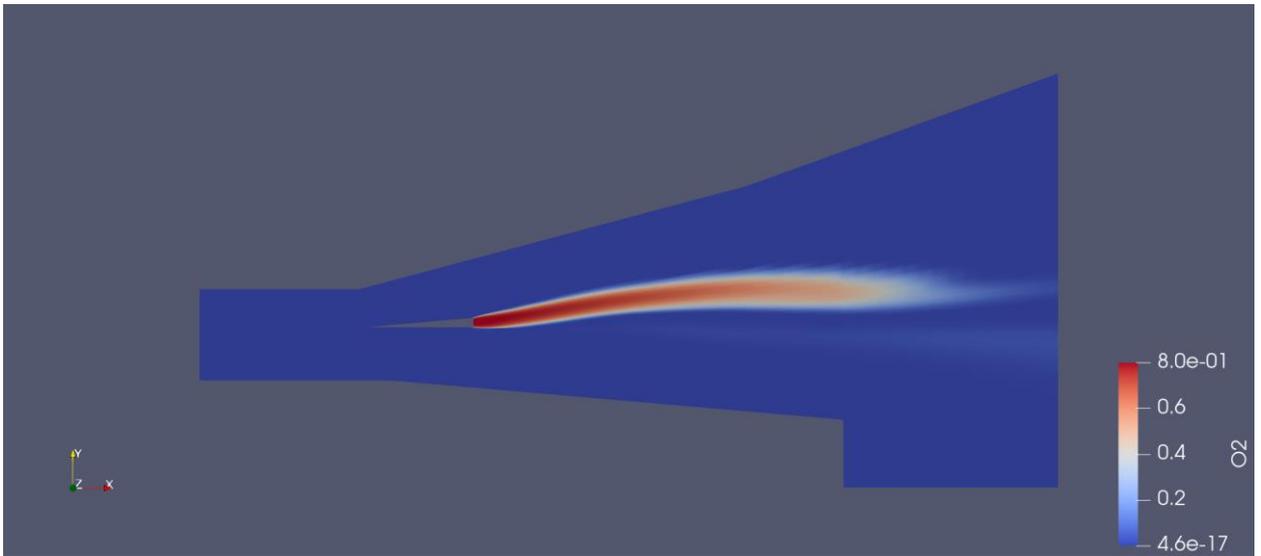


Рисунок 5.75 – Распределение O_2 . Расход O_2 увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (04). Расчёт с учетом химических реакций

На рисунке 5.76 сравнивается давление на верхней стенке для номинального режима и увеличенного расхода окислителя.

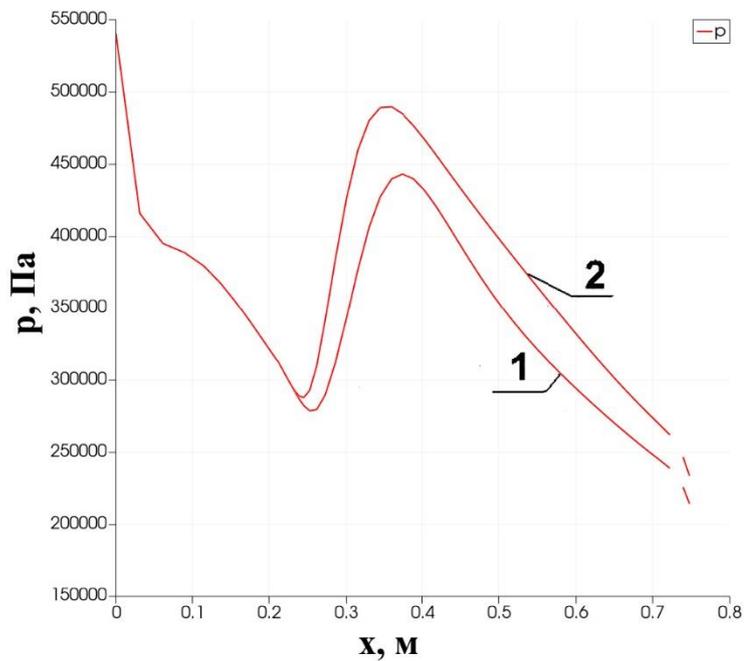


Рисунок 5.76 – Давление на верхней стенке при наличии горения. 1 – номинальный расход окислителя; 2 – Расход O_2 увеличен вдвое по сравнению с

номинальным режимом

На рисунках 5.77-5.82 представлены результаты расчёт варианта, когда расход окислителя остается номинальным, но в 2 раза уменьшено давление набегающего потока, т.е. полет происходит на большей высоте.

Наблюдается существенно приращение давления за счет горения, но существенное количество кислорода не догорает. Для повышения эффективности двигателя необходимо либо удлинить камеру сгорания, либо интенсифицировать процесс смешения горючего и окислителя, например, увеличив число пилонов, через которые подается окислитель.

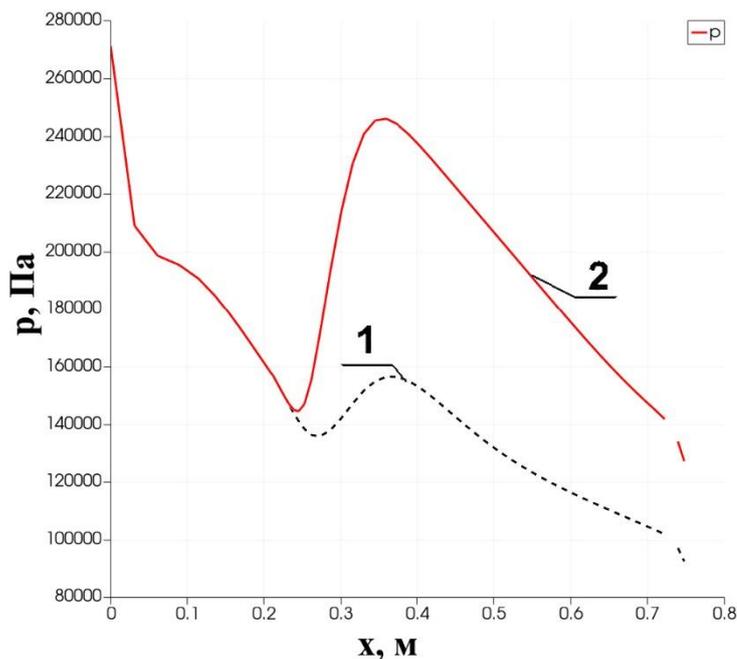


Рисунок 5.77 – Давление на верхней стенке. Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом (08, 07). 1 – расчёт БЕЗ учета химических реакций; 2 - расчёт С учетом химических реакций

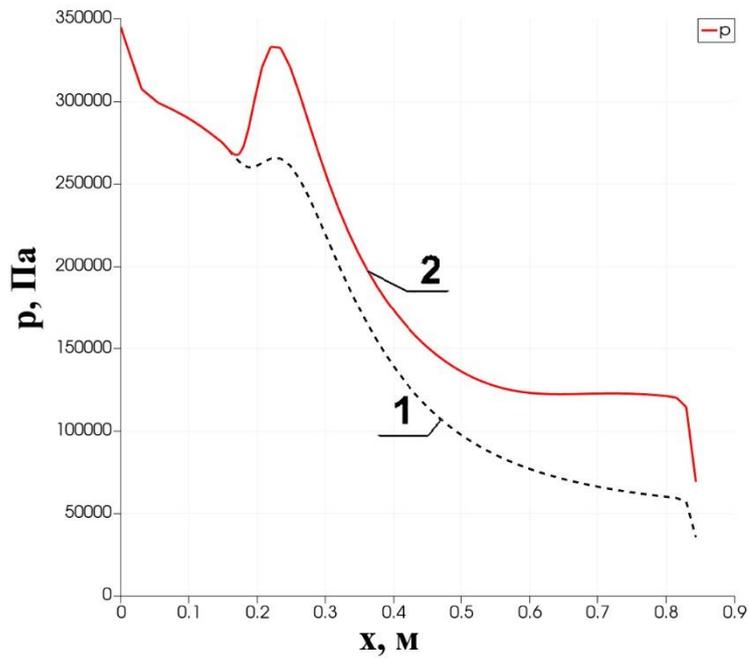


Рисунок 5.78 – Давление на нижней стенке. Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом (08, 07). 1 – расчёт БЕЗ учета химических реакций; 2 - расчёт С учетом химических реакций

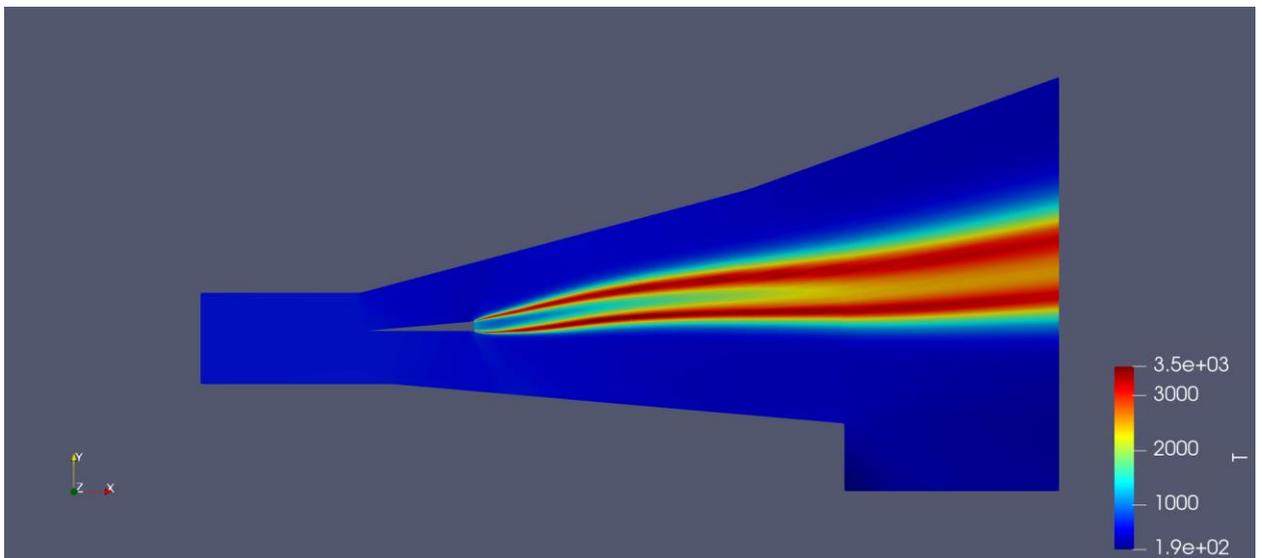


Рисунок 5.79 – Распределение температуры. Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом (07). Расчёт С учетом химических реакций

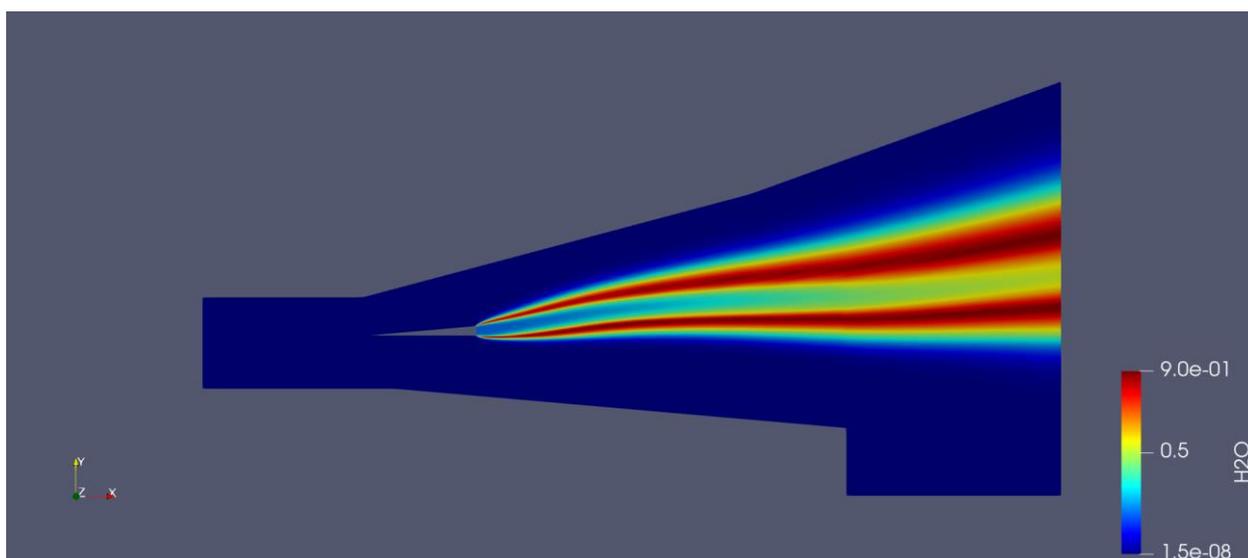


Рисунок 5.80 – Распределение H₂O. Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом (07). Расчёт с учетом химических реакций

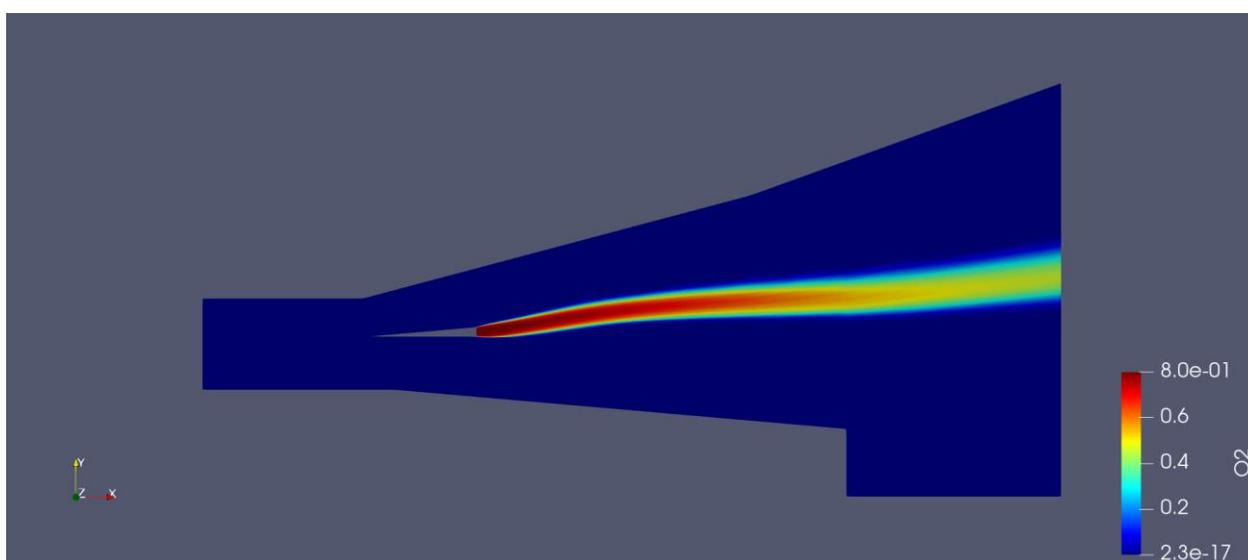


Рисунок 5.81 – Распределение O₂. Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом (07). Расчёт с учетом химических реакций

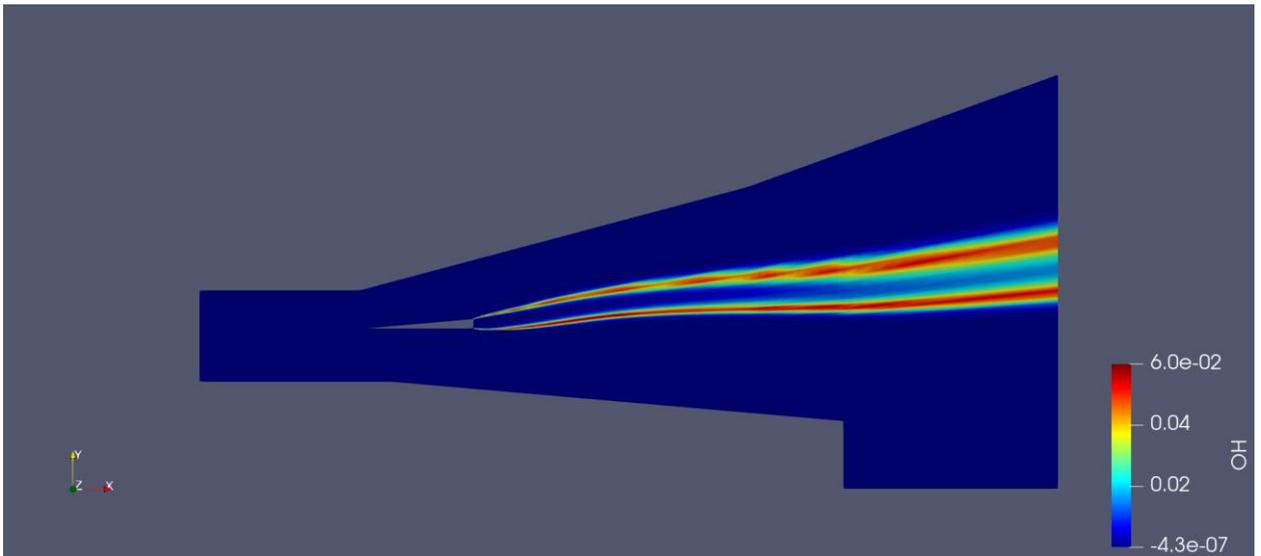


Рисунок 5.82 – Распределение ОН. Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом (07). Расчёт с учетом химических реакций

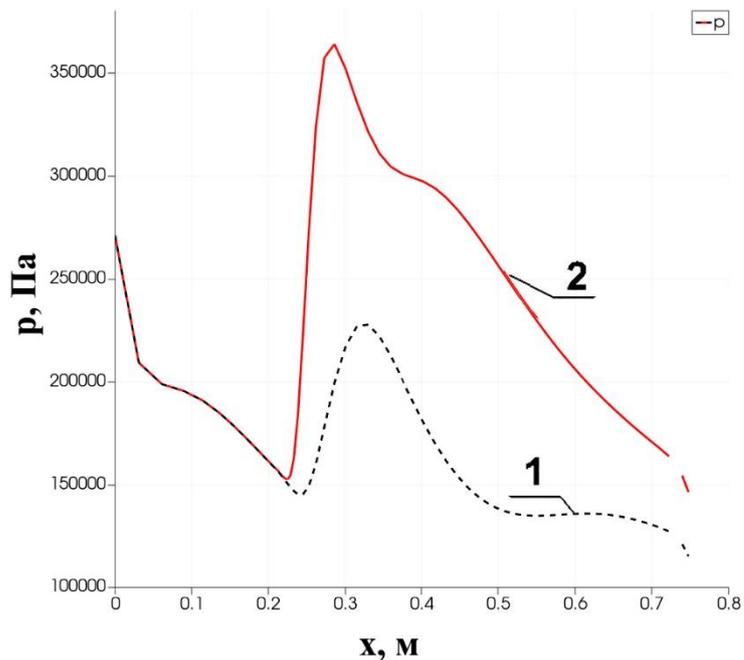


Рисунок 5.83 – Давление на верхней стенке. Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом, и расход O₂ увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (05, 06). 1 – расчёт БЕЗ учета химических реакций; 2 - расчёт с учетом химических реакций

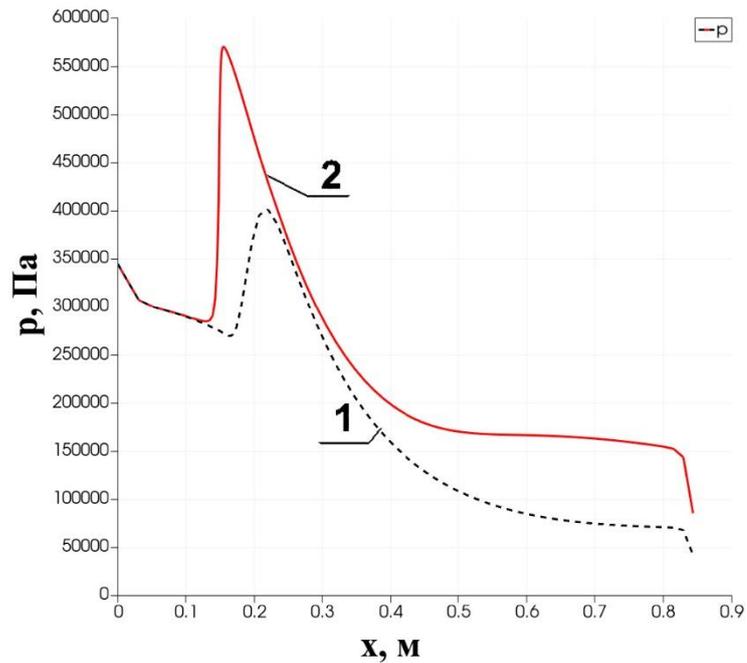


Рисунок 5.84 – Давление на нижней стенке. Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом, и расход O₂ увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (05, 06). 1 – расчёт БЕЗ учета химических реакций; 2 - расчёт С учетом химических реакций

Аналогичные результаты получены для случая, когда давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом, и расход O₂ увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (см. рисунки 5.83-5.87)

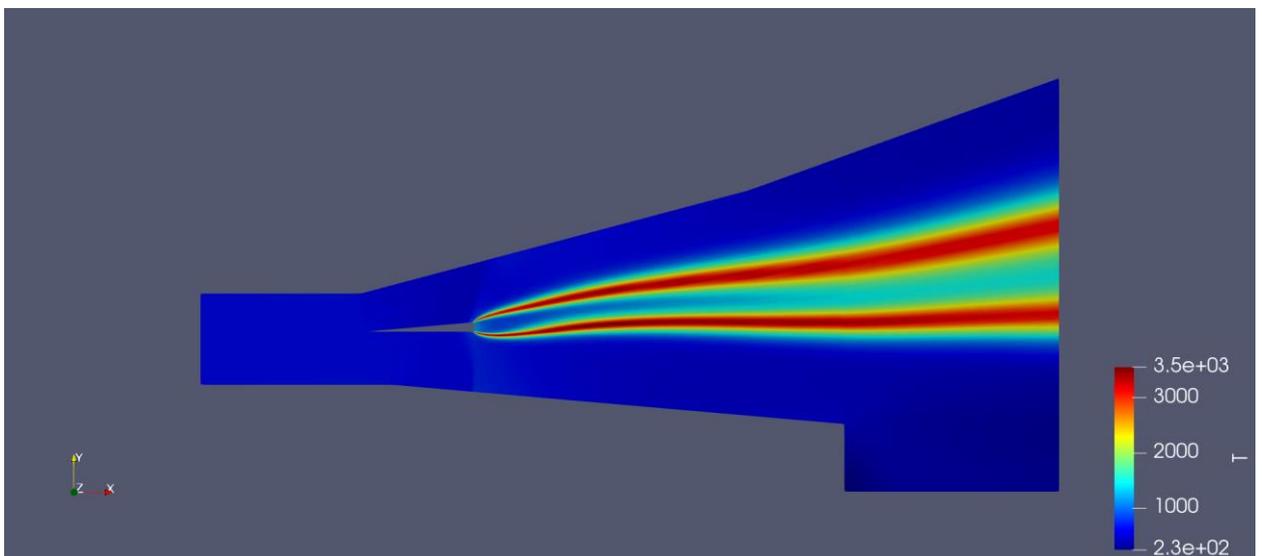


Рисунок 5.85 – Распределение температуры. Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом, и расход O_2 увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (06). Расчёт с учетом химических реакций

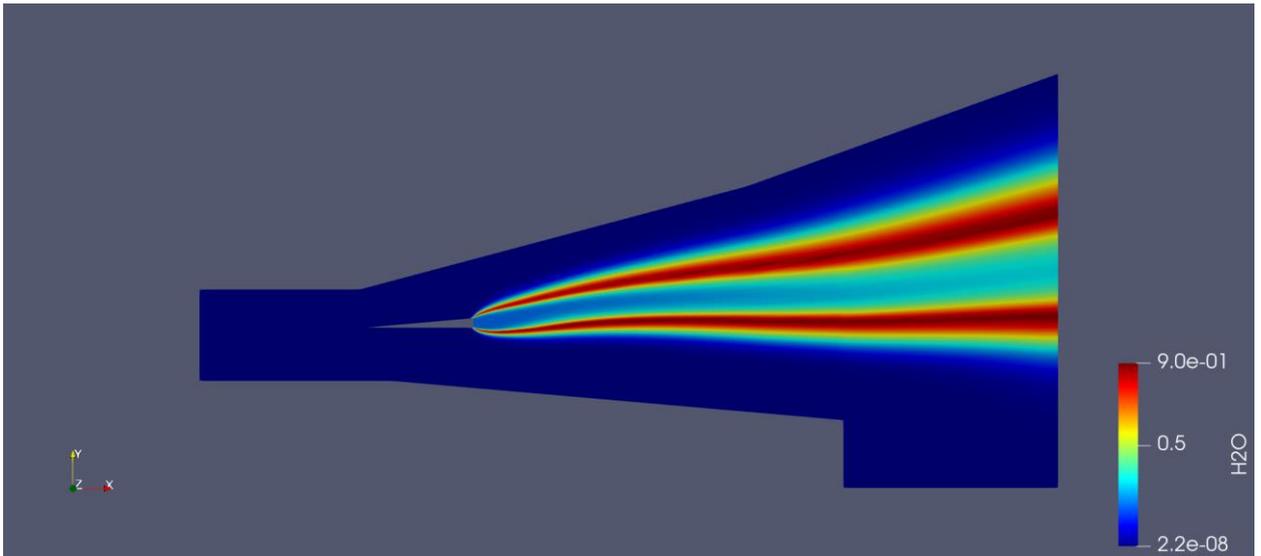


Рисунок 5.86 – Распределение H_2O . Давление набегающего потока уменьшено вдвое по сравнению с номинальным режимом, и расход O_2 увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (06). Расчёт с учетом химических реакций

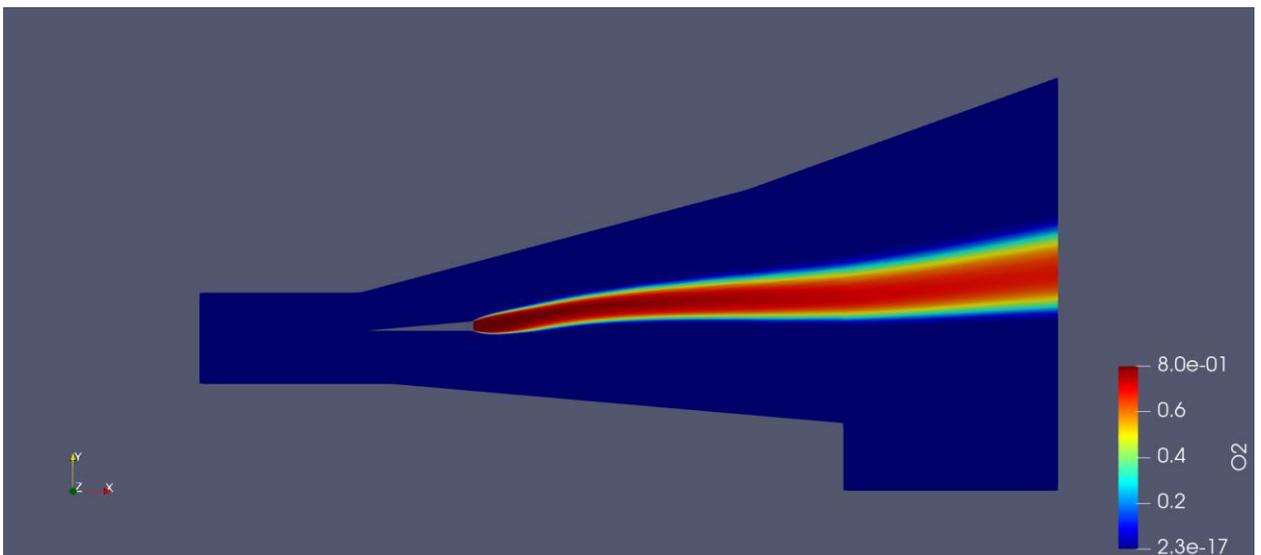


Рисунок 5.87 – Распределение O_2 . Давление набегающего потока уменьшено

вдвое по сравнению с номинальным режимом, в расход O_2 увеличен вдвое по сравнению с номинальным режимом (06). Расчёт с учетом химических реакций

5.6.3 Выводы

- Показана возможность работы данного типа двигателя в атмосфере юпитера;
- Для обеспечения работы двигателя пришлось изменить схему течения по сравнению с земным вариантом, так как молекулярный вес подаваемого топлива, в отличие от земного варианта, существенно превосходит молекулярный вес атмосферного горючего.

Выводы по главе

С помощью разработанного программного кода Universe3D, реализующего разработанный и описанный в предыдущих главах метод расчёта тепломассообмена в нестационарных, вязких, химически реагирующих, термодинамически неравновесных течениях, было решено несколько практических задач и выработаны практические рекомендации по совершенствованию изделий новой техники.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Построена математическая модель тепломассообмена в нестационарных, вязких, химически реагирующих, термохимически неравновесных течениях.
2. Построен численный метод решения системы уравнений газовой динамики, химической кинетики и энергетических переходов на неструктурированной сетке.
3. Разработан новый эффективный полностью связанный численный метод решения уравнений движения химически и термически неравновесного газа с жесткими источниками.
4. На основе построенного численного метода реализован новый компьютерный код на языке Фортран с применением параллельных вычислений, позволяющий проводить расчёт тепломассообмена в термохимически неравновесных течениях.
5. Выработаны методические рекомендации по организации параллельных вычислений при численном решении уравнений механики сплошной среды, направленные на ускорение расчётов.
6. Проведена валидация численного метода путём сравнения результатов численного моделирования с экспериментальными данными и результатами расчётов других авторов.
7. Проведено численное исследование высокоскоростных течений с помощью разработанного компьютерного кода Universe3D. Выполнен сравнительный анализ реализованных математических моделей учёта физико-химических процессов в высокотемпературном газе.
8. Разработана схема двигателя и рекомендации по созданию двигателя для полетов в атмосфере Юпитера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Осипов А.И., Уваров А.В. Кинетические и газодинамические процессы в неравновесной молекулярной физике // Успехи физических наук. 1992. Т. 162. № 11. С. 1-42.
2. Candler G.V., MacCormack R.W. Computation of Weakly Ionized Hypersonic Flows in Thermochemical Nonequilibrium // J.Thermophysics. 1991. Vol. 5. No. 3. P. 266-272.
3. Gnoffo P.A., Gupta R.N., Shinn J.L. Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium. // NASA-TP-2867, NASA Langley, Hampton, Virginia, 1989. 58 p.
4. Scalabrin L.C. Numerical Simulation of Weakly Ionized Hypersonic Flow over Reentry Capsules // A dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy (Aerospace Engineering) in The University of Michigan. 2007. 182 p.
5. Vitkin E.A., Karelin V.G., Kirillov A.A., Suprun A.S., Khadyka J.U.V. A physico-mathematical model of rocket exhaust plumes // Int. J. Heat Mass Transfer. 1997. Vol. 40. No. 5. P. 1227-1241.
6. Ashratov E.A., Dubinskaya N.V. Investigation of nozzle flows with vibrational relaxation // Computational Methods and Programming. 1977. Moscow. P. 96-115.
7. Penny H.C., Henry Aroeste. Vibrational Relaxation Times of Diatomic Molecules and Rocket Performance // The Journal of Chemical Physics. 1955. Vol. 23. No. 7. P. 1281-1283.
8. Stollery J.L., Smith J.E. A note on the variation of vibrational temperature along a nozzle // Journal of Fluid Mechanics. 1962. Vol. 13. P. 225-236.

9. Blauer J.A., Nickerson G.R. A Survey of Vibrational Relaxation Rate Data for Processes Important to CO₂-N₂-H₂O Infrared Plume Radiation // Ultrasystems, Incorporated, Technical rept. Report Number 0455177. 1973. 72 p.
10. Howe J.T., Sheaffer Y.S. Chemical relaxation behind strong shock waves in carbon dioxide including interdependent dissociation and ionization process //NASA. Ames Research Center, MoffettField, California. 1964. 52 p.
11. Kruglov V.I., Khodyko Yu.V. Vibrational nonequilibrium radiation in diatomic gases-I // Int. J. Heat Mass Transfer. 1978. Vol. 21. P. 163-168.
12. Виткин Э.И., Шуралев С.Л., Таманович В.В. Метод расчёта переноса излучения вдоль неоднородных трасс в колебательно-вращательных полосах неравновесных газов // Минск: Ин. физики АН БССР. 1987, препр. №459, С. 48.
13. Виткин Э.И., Кириллов А.А., Перельман Л.Т. Численное моделирование процессов колебательной релаксации в нестационарных газовых струях // ПМТФ. – 1994.- № 5. С. 55-60.
14. Vitkin E.I., Shuralyov S.L., Tamanovich V.V. Radiation transfer in vibrationally nonequilibrium gases // Int. J. Heat Mass Transfer. 1995. Vol. 38. No. 1. P. 163-173.
15. Виткин Э.И., Кириллов А.А. Особенности свечения неравновесных молекулярных газов при разлете в вакуум // Матем. моделирование. 1996. Т. 8. № 6. С. 85–88.
16. Коньков А.А., Нейланд В.Я., Николаев В.М., Пластинин Ю.М. Проблемы лучистого теплообмена в суперзвуковой аэродинамике // ТВТ. 1969. Т. 7. С. 140-164.
17. Кузнецова Л.А., Кузьменко Н.Е., Кузяков Ю.Я., Пластинин Ю.А. Вероятности оптических переходов двухатомных молекул. // М.: Наука, 1980. 320 с.

18. Родионов А.В. Монотонная схема второго порядка точности для сквозного счета неравновесных течений // Журнал вычисл. матем. и матем. физ. 1987. Т. 27. № 4. С. 585-593.
19. Карабаджак Г.Ф. Определение эффективного сечения реакции $O+H_2O=OH(A)+OH(X)$ при гиперскоростных столкновениях компонентов по измерениям интенсивности свечения гидроксила в ходе космических экспериментов // Космонавтика и ракетостроение, 2004, вып. 3 (36), С. 123-130.
20. Карабаджак Г.Ф., Пластинин Ю.А., Родионов А.В., Сженев Е.Ю., Сипачев Г.Ф., Хмелинин Б.А. Спектрозональные исследования сверхслабых эмиссий естественного и техногенного происхождения в верхних слоях атмосферы и ионосферы Земли // Космонавтика и ракетостроение, 2007, вып. 4 (49), С. 26-32.
21. Карабаджак Г.Ф., Комраков Г.П., Кузнецов В.Д., Пластинин Ю.А., Ружин Ю.Я., Фролов В.Л., Хмелинин Б.А. Исследование глобальных пространственно-временных характеристик свечения верхней атмосферы и ионосферы Земли при воздействии на них радиоизлучения при наблюдении с борта МКС // Космонавтика и ракетостроение, 2009, вып. 4 (57), С. 88-94.
22. Власов В.И., Горшков А.Б., Залогин Г.Н., Карабаджак Г.Ф., Пластинин Ю.А. Измерение и анализ интенсивности УФ излучения плазменного образования по траектории спуска с орбиты СА «СОЮЗ-ТМА» по данным наблюдений с борта МКС // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2006. (<http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2006-08-14-001.pdf>)
23. Физико-химические процессы в газовой динамике. Компьютеризованный справочник в 3-х томах. Т. 1: Динамика физико-химических процессов в газе и плазме // Под ред. Г.Г. Черного и С.А. Лосева – М.: Изд. Моск. ун-та, 1995. 350 с.

24. Залогин Г.Н., Козлов П.В., Кузнецова Л.А., Лосев С.А., Макаров В.Н., Романенко Ю.В., Суржигов С.Т. Излучение смеси CO₂-N₂-Ar в ударных волнах: эксперимент и теория // ЖТФ. 2001. Т. 71. № 6. С. 10-16.
25. Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Том 2: Физико-химическая кинетика и термодинамика // Под ред. Г.Г. Черного и С.А. Лосева – М.: Научно-издательский центр механики. 2002. 368 с.
26. Ковач Э.А., Лосев С.А., Сергиевская А.Л., Храпак Н.А. Каталог моделей физико-химических процессов. 2. Процессы колебательного энергообмена // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. (<http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-07-08-002.pdf>).
27. Суржигов С.Т. Неравновесная аэрофизика гиперзвукового обтекания сферы углекислым газом // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. (<http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-026.pdf>)
28. Surzhikov S., Shang J. Influence of Atomic Lines on Radiative Heating of Entering Space Vehicles //AIAA-2011-3630. 2011.
29. Ребров А.К., Чекмарев С.Ф., Чернявина Н.М. Колебательная релаксация и излучения H₂O при ударном нагреве смеси газов низкой плотности // Журнал прикладной механики и технической физики. 1982. N. 3. С. 27-32.
30. Ребров А.К. Неравновесные процессы в свободных струях // Современные проблемы теории теплообмена и физической гидрогазодинамики. - Новосибирск, 1984. С. 126-144.
31. Moss J., Simmonds A. Galileo probe forebody flowfield predictions during Jupiter entry // AIAA Paper. 1982.
32. Chen Y.K., Henline W.D., Tauber M.E. Trajectory based heating and ablation calculation for Mars Pathfinder aeroshell // Journal of Spacecraft and Rockets. 1995. p. 225-230.
33. Gnoffo P.A., Weilmuenster K.J., Braun R.D., Cruz C.I. Influence of sonicline location on Mars pathfinder probe aerothermodynamics // Journal of Spacecraft

- and Rockets. 1996. p. 169-177.
34. Olynick D.R. Aerothermodynamics of the Stardust sample return capsule // AIAA Paper. 1998.
 35. Olynick D.R., Chen Y.K., Tauber M. Forebody TPS sizing with radiation and ablation for the Stardust sample return capsule // AIAA Paper. 1997.
 36. Olynick D.R., Chen Y.K., Tauber M. Wake flow calculations with radiation and ablation for the Stardust sample return capsule // AIAA Paper. 1997.
 37. Dietrich S., Boyd I.D. Scalar and parallel optimized implementation of the direct simulation Monte Carlo method // J. Comput. Phys. 1996. p. 328-342.
 38. Родионов А.В. Разработка методов и программ для численного моделирования неравновесных сверхзвуковых течений в приложении к аэрокосмическим и астрофизическим задачам. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук: 05.03.18. // Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ ИТМФ, 2019. 299 с.
 39. Kitamura K. Advancement of Shock Capturing Computational Fluid Dynamics Methods: Numerical Flux Functions in Finite Volume Method // Springer. 2020. p. 142.
 40. Hirsch C. Numerical Computation of Internal and External Flows // N.Y.: Wiley. 1991. p. 672.
 41. Kim M.D., Bhutta B.A., Lewis C.H. Three-dimensional effects upon real gas flows past the Space Shuttle // AIAA Paper. 1984.
 42. Steger J.L., Warming R.E Flux vector splitting for the inviscid gasdynamic equations with applications to finite difference methods // J. Comput. Phys. 1981. p. 263-293.
 43. Leer B.V. Flux vector splitting for the Euler equations // LNP. 1982. p. 507-512.
 44. Roe P.L. Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes // J. Comput. Phys. 1981. p. 357-372.
 45. Roe P.L. The use of the Riemann problem in finite difference schemes // LNP.

2006. p. 354-359.
46. Leer B.V. Towards the ultimate conservative scheme IV: A new approach to numerical convection // *J. Comput. Phys.* 1977. p. 276-299.
 47. Leer B.V. Towards the ultimate conservative scheme V: A second order sequel to godunov's method // *J. Comput. Phys.* 1979. p. 101-136.
 48. Gnoffo P.A., McCandless R.S. Three-dimensional AOTV flow fields in chemical nonequilibrium // *AIAA Paper*. 1986.
 49. Eberhardt S., Brown K. A shock capturing technique for hypersonic, chemically relaxing flows // *AIAA Paper*. 1986.
 50. Candler G.V. *The Computational of Weakly Ionized Flow in Nonequilibrium* // Stanford University, 1988.
 51. Lee J.H. Basic governing equations for the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles // vol. 19th *AIAA Thermophysics Conference*. 1985. p. 3-53.
 52. Gnoffo P.A., Gupta R.N., Shinn J.L. Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium // *NASA-TP-2867*. 1989. p. 58.
 53. Gnoffo P.A., Weilmuenster K.J., Hamilton H.H., Olynick, D.R., Venkatapathy E. Computational aerothermodynamic design issues for hypersonic vehicles // *Journal of Spacecraft and Rockets*. 1999. p. 21-43.
 54. Gnoffo P.A., Weilmuenster KJ. and Alter S.J. A multiblock analysis for Shuttle orbiter re-entry heating from Mach 24 to Mach 12 // *AIAA Paper*. 1993.
 55. Wright M.J. *A Family of Data-Parallel Relaxation Methods for the Navier-Stokes Equations* // University of Minnesota, 1997.
 56. Venkatakrishnan V. Convergence to steady state solutions of the Euler equations on unstructured grids with limiters // *J. Comput. Phys.* 1995. p. 120-130.
 57. Nompelis I., Drayna T.W., Candler G.V. A parallel unstructured implicit solver for reacting flow simulation // *AIAA Paper*. 2005. p. 389-395.
 58. Hassan O., Morgan K., Peraire J. An adaptive implicit/explicit finite element

- scheme for compressible high-speed flows // AIAA Paper. 1989.
59. Martin D., Lohner R. An implicit linelet-based solver for incompressible flows // AIAA Paper. 1992.
 60. Candler G.V., Johnson H.B., Nompelis I., Subbareddy P.K., Drayna T.W., Gidzak V.M., Bamhardt M.D. Development of the US3D code for advanced compressible and reacting flow simulations // 53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting. 2015. p. 25.
 61. Бессонов О.А., Харченко Н.А. Программная платформа для суперкомпьютерного моделирования задач аэротермодинамики // Программная инженерия. 2021. Т. 12. № 6. с. 302-310.
 62. Park C. Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics // N.Y.: Wiley. 1990. p. 358.
 63. Park C., Jaffe R.L., Partridge H. Chemical-Kinetic Parameters of Hyperbolic Earth Entry // J. of Thermophysics and Heat Transfer. 2001. Vol. 15. N. 1. p. 76-90.
 64. Park C., Howe., Jaffe R.L., Candler G. Review of chemical kinetic problems of future NASA missions, II - Mars entries // J. of Thermophysics and Heat Transfer. 1994. Vol. 8. N. 1. p. 9-23.
 65. Gupta R.N., Yos J.M., Thompson R.A., Lee K. A Review of Reaction Rates and Thermodynamic and Transport Properties for an 11-Species Air Model for Chemical and Thermal Nonequilibrium Calculations to 30000 K. // NASA RP-1232. 1990. p. 86.
 66. Palmer G., Wright M. Comparisons of methods to compute high temperature gas viscosity // J. of Thermophysics and Heat Transfer. 2003. Vol. 17. N. 2. p. 232-239.
 67. Wright M.J., Bose D., Palmer G.E., Levin E. Recommended Collision Integrals for Transport Property Computations, Part 1: Air Species // AIAA Journal. 2005. Vol. 43. N. 12. p. 2558-2564.
 68. Sutton K., Gnoffo P.A. Multi-component diffusion with application to

- computational aerothermodynamics // AIAA Paper. 1998. p. 14.
69. Gosse R., Candler G. Diffusion flux modeling: Application to direct entry problems // AIAA Paper. 2005. p. 11.
 70. Olynick D.R., Henline W.D., Chambers L.H., Candler G.V. Comparison of coupled radiative flow solutions with project FIRE II flight data // J. of Thermophysics and Heat Transfer. 1995. Vol. 9. N. 1. p. 586-594.
 71. Peters N. Turbulent combustion // Cambridge University Press, 2000.
 72. Pope S.B. Small scales, many species and the manifold challenges of turbulent combustion // Proc Combust Inst 2013. V. 34. N. 1. p. 1-31.
 73. Lefebvre A.H. Gas turbine combustion // CRC Press, 1998.
 74. Mattingly J.D., Heiser W.H., Pratt D.T. Aircraft engine design // AIAA Education Series, 2002.
 75. Oates G.C. Aerothermodynamics of aircraft engine components // AIAA, 1985.
 76. Ebrahimi H.B. Overview of gas turbine augmentor design, operation, and combustion oscillation // ILASS Americas, 19th Annual conference on liquid atomization and spray systems, Toronto, Canada, 2006.
 77. Segal C. The scramjet engine: processes and characteristics // Cambridge University Press, 2009.
 78. Wang Z., Wang H., Sun M. Review of cavity-stabilized combustion for scramjet applications // Proc Inst Mech Eng, Part G: J Aerosp Eng 2014. V. 228. N. 14. p. 2718-2735.
 79. Starikovskiy A., Aleksandrov N. Plasma-assisted ignition and combustion // Prog Energy Combust Sci 2013. V. 39. N. 1. p. 61-110.
 80. Culick F.E. Unsteady motions in combustion chambers for propulsion systems // Research and Technology Organisation/North Atlantic Treaty Organisation, 2006.

81. Dunn MJ, Masri AR, Bilger RW, Barlow RS, Wang GH. The compositional structure of highly turbulent piloted premixed flames issuing into a hot coflow // *Proc Combust Inst* 2009. V. 32(2). p. 1779–86.
82. Cockrell CE, Auslender AH, Guy, RW, McClinton CR, Welch SS. Technology roadmap for dual-mode scramjet propulsion to support space-access vision vehicle development // *AIAA Paper* 2002-5188, 2002.
83. Fotia ML, Driscoll JF. Ram-scram transition and flame/shock-train interactions in a model scramjet experiment // *J Propul Power* 2012. V. 29(1) p. 261–73.
84. Subramaniam S. Lagrangian-Eulerian methods for multiphase flows // *Prog Energy Combust Sci* 2013. V. 39(2) p. 215–45.
85. Sirignano WA. Fluid dynamics and transport of droplets and sprays // Cambridge University Press. 1999.
86. Knudsen E, Pitsch H. Large-eddy simulation for combustion systems: modeling approaches for partially premixed flows // *Open Thermodyn J* 2010. V. 4. p. 76–85.
87. Pantano C. Direct simulation of non-premixed flame extinction in a methane-air jet with reduced chemistry // *J Fluid Mech* 2004. V. 514. p. 231–70.
88. Lignell D, Chen J, Schmutz H. Effects of Damkohler number on flame extinction and reignition in turbulent non-premixed flames using DNS // *Combust Flame* 2011. V. 158(5) p. 949–963.
89. Shanbhogue SJ, Husain S, Lieuwen T. Lean blowoff of bluff body stabilized flames: scaling and dynamics // *Prog Energy Combust Sci* 2009. V. 35(1) p. 98–120.
90. Richard S, Colin O, Vermorel O, Benkenida A, Angelberger C, Veynante D. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines // *Proc Combust Inst* 2007. V. 31(2) p. 3059–66.

91. Boileau M, Staffelbach G, Cuenot B, Poinso T, Berat C. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine // *Combust Flame* 2008. V. 154(1) p. 2–22.
92. Gruber A, Sankaran R, Hawkes ER, Chen J. Turbulent flame-wall interaction: a direct numerical simulation study // *J Fluid Mech* 2010. V. 658 p. 5–32.
93. Lieuwen TC. *Unsteady combustor physics*. Cambridge University Press; 2012.
94. Dunn M, Masri A, Bilger R. A new piloted premixed jet burner to study strong finite-rate chemistry effects // *Combust Flame* 2007. V. 151(1) p. 46–60.
95. Zhou B, Brackmann C, Li Q, Wang Z, Petersson P, Li Z, et al. Distributed reactions in highly turbulent premixed methane/air flames: Part I. flame structure characterization // *Combust Flame* 2015. V. 162(7) p. 2937–53.
96. Luo KH. Combustion effects on turbulence in a partially premixed supersonic diffusion flame // *Combust Flame* 1999. V. 119(4) p. 417–35.
97. Luo K, Jin T, Lu S, Fan J. DNS Analysis of a three-dimensional supersonic turbulent lifted jet flame // *Fuel* 2013. V. 108 p. 691–8.
98. Deshmukh KV, Haworth D, Modest M. Direct numerical simulation of turbulence-radiation interactions in homogeneous nonpremixed combustion systems // *Proc Combust Inst* 2007. V. 31(1) p. 1641–8.
99. Mehta RS, Modest MF, Haworth DC. Radiation characteristics and turbulence-radiation interactions in sooting turbulent jet flames // *Combust Theor Model* 2010. V. 14(1) p. 105–24.
100. Koo H, Raman V, Varghese PL. Direct numerical simulation of supersonic combustion with thermal nonequilibrium // *Proc Combust Inst* 2015. V. 35(2) p. 2145–53.
101. Wilcox DC, et al. *Turbulence modeling for CFD* // DCW Industries; 1998.

102. Garnier E, Adams N, Sagaut P. Large eddy simulation for compressible flows // Springer; 2009.
103. Spalart PR. Detached-eddy simulation // Annu Rev Fluid Mech 2009. V. 41 p. 181–202.
104. Menter FR, Egorov Y. The scale-adaptive simulation method for unsteady turbulent flow predictions. Part 1: theory and model description // Flow, Turbul Combust 2010. V. 85(1) p. 113–38.
105. Girimaji S. Partially-averaged ND Navier-stokes model for turbulence: a Reynolds-averaged Navier-stokes to direct numerical simulation bridging method // J Appl Mech 2006. V. 73(3) p. 413–21.
106. Fadai-Ghotbi A, Friess C, Manceau R, Boree J. A seamless hybrid RANS-LES model based on transport equations for the subgrid stresses and elliptic blending // Phys Fluids 2010. V. 22. 055104.
107. Peters N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion // Prog Energy Combust Sci 1984. V. 10(3) p. 319–39.
108. Cuenot B. The flamelet model for non-premixed combustion. Turbulent combustion modeling // Springer; 2011. p. 43–61.
109. Cant S. RANS and LES modelling of premixed turbulent combustion // Turbul Combust Model 2011. p. 63–90.
110. Klimenko AY, Bilger RW. Conditional moment closure for turbulent combustion // Prog Energy Combust Sci 1999. V. 25(6) p. 595–687.
111. Kronenburg A, Mastorakos E. The conditional moment closure model. Turbulent combustion modeling // Springer; 2011. p. 91–117.
112. Steiner H, Bushe WK. Large eddy simulation of a turbulent reacting jet with conditional source-term estimation. Phys Fluids 2001. V. 13(3) p. 754–69.

113. Jin B, Grout R, Bushe WK. Conditional source-term estimation as a method for chemical closure in premixed turbulent reacting flow // *Flow, Turbul Combust* 2008. V. 81(4) p. 563–82.
114. Salehi MM. Numerical simulation of turbulent premixed flames with conditional source-term estimation // University of British Columbia Ph.D. thesis; 2012.
115. Pope SB. PDF Methods for turbulent reactive flows // *Prog Energy Combust Sci* 1985. V. 11(2) p. 119–92.
116. Givi P. Filtered density function for subgrid scale modeling of turbulent combustion // *AIAA J* 2006. V. 44(1) p. 16–23.
117. Haworth DC. Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows // *Prog Energy Combust Sci* 2010. V. 36(2) p. 168–259.
118. Haworth D, Pope S. Transported probability density function methods for Reynolds-averaged and large-eddy simulations // *Turbul Combust Model* 2011. p. 119–42.
119. Menon S, Kerstein AR, McMurtry PA. A linear eddy mixing model for large eddy simulation of turbulent combustion // *Large eddy simulation of complex engineering and geophysical flows*; 1993. p. 287–314.
120. Menon S, Kerstein AR. The linear-eddy model // *Turbul Combust Model* 2011. p. 221–47.
121. Kerstein AR. One-dimensional turbulence: stochastic simulation of multi-scale dynamics // *Lect Notes Phys* 2009. V. 756 p. 291–333.
122. Echehki T, Kerstein A, Sutherland J. The one-dimensional-turbulence model // *Turbul Combust Model* 2011. p. 249–76.
123. Ertesva g IS, Magnussen BF. The eddy dissipation turbulence energy cascade model // *Combust Sci Technol* 2000. V. 159(1) p. 213–35.

124. Nordin PA. Complex chemistry modeling of diesel spray combustion // Chalmers University of Technology Ph.D. thesis; 2001.
125. Sabelnikov V, Fureby C. LES Combustion modeling for high Re flames using a multi-phase analogy // *Combust Flame* 2013. V. 160(1) p. 83–96.
126. Butler T, O'Rourke P. A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows // *Proc Combust Inst* 1977. V. 16(1) p. 1503–15.
127. Angelberger C, Veynante D, Egolfopoulos F, Poinso T. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames // *Annual research briefs of the center for turbulence research*; 199861–82.
128. Colin O, Ducros F, Veynante D, Poinso T. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion // *Phys Fluids* 2000. V. 12. 1843.
129. Fureby C. Homogenization based LES for turbulent combustion // *Flow, Turbul Combust* 2010. V. 84(3) p. 459–80.
130. El-Asrag HA, Ghoniem AF. Unsteady flame embedding // *Turbulent combustion modeling*. Springer; 2011. p. 277–300.
131. Parente A, Sutherland JC, Tognotti L, Smith PJ. Identification of low-dimensional manifolds in turbulent flames // *Proc Combust Inst* 2009. V. 32(1) p. 1579–86.
132. Sutherland JC, Parente A. Combustion modeling using principal component analysis // *Proc Combust Inst* 2009. V. 32(1) p. 1563–70.
133. Fox RO. *Computational models for turbulent reacting flows* // Cambridge University Press; 2003.
134. Poinso T, Veynante D. *Theoretical and numerical combustion* // RT Edwards, Inc.; 2005.

135. Cant RS, Mastorakos E. An introduction to turbulent reacting flows // World Scientific; 2008.
136. Borghi R. Turbulent combustion modelling // Prog Energy Combust Sci 1988. V. 14 (4) p. 245–92.
137. Bray KNC. The challenge of turbulent combustion // Proc Combust Inst 1996. V. 26 (1) p. 1–26.
138. Bilger RW. Future progress in turbulent combustion research // Prog Energy Combust Sci 2000. V. 26(4) p. 367–80.
139. Veynante D, Vervisch L. Turbulent combustion modeling // Prog Energy Combust Sci 2002. V. 28(3) p. 193–266.
140. Kerstein AR. Turbulence in combustion processes: modeling challenges // Proc Combust Inst 2002. V. 29(2) p. 1763–73.
141. Bilger R, Pope S, Bray K, Driscoll J. Paradigms in turbulent combustion research // Proc Combust Inst 2005. V. 30(1) p. 21–42.
142. Janicka J, Sadiki A. Large eddy simulation of turbulent combustion systems // Proc Combust Inst 2005. V. 30(1) p. 537–47.
143. Oefelein JC. Large eddy simulation of turbulent combustion processes in propulsion and power systems // Prog Aerosp Sci 2006. V. 42(1) p. 2–37.
144. Pitsch H. Large-eddy simulation of turbulent combustion // Annu Rev Fluid Mech 2006. V. 38 p. 453–82.
145. Bray KNC. Turbulent transport in flames // Proc R Soc Lond A: Math, Phys Eng Sci 1995. V. 451(1941) p. 231–56.
146. Brewster BS, Cannon SM, Farmer JR, Meng F. Modeling of lean premixed combustion in stationary gas turbines // Prog Energy Combust Sci 1999. V. 25(4) p. 353–85.

147. Gicquel LYM, Staffelbach G, Poinso T. Large eddy simulations of gaseous flames in gas turbine combustion chambers // Prog Energy Combust Sci 2012. V. 38 (6) p. 782–817.
148. Haworth D.C. A review of turbulent combustion modeling for multidimensional in-cylinder CFD // SAE Paper 2005-01-09932005.
149. Sankaran V., Merkle C.L. Fundamental physics and model assumptions in turbulent combustion models for aerospace propulsion // AIAA Paper 2014-3941, 2014.
150. Drummond JP. Methods for prediction of high-speed reacting flows in aerospace propulsion // AIAA J 2014;52(3) p. 1–21.
151. Oefelein J.C. Analysis of turbulent combustion modeling approaches for aeropropulsion applications // AIAA Paper 2015-1378, 2015.
152. Foster J.W., Miller R.S. Survey of turbulent combustion models for large eddy simulations of propulsive flowfields // AIAA Paper 2015-1379, 2015.
153. Miller RS, Foster JW. Survey of turbulent combustion models for large-eddy simulations of propulsive flowfields // AIAA J 2016: p. 1–17.
154. Молчанов А.М. Неравновесная высокоэнтальпийная термогазодинамика // А. М. Молчанов. - Москва : Издательство МАИ, 2020. - 158 с.
155. Wilke C.R. A Viscosity Equation for Gas Mixtures // Journal of Chemical Physics. 1950. Vol. 18. No. 4. PP. 517-519.
156. Blottner, F.G., Johnson, M., Ellis, M. Chemically Reacting Viscous Flow Program for Multi-Component Gas Mixtures. // Sandia Laboratories, Albuquerque, NM, Kept. SC-RR-70-754. -1971. Web. doi:10.2172/4658539. - 320 p.

157. McBride B.J., Gordon S., Reno M.A. Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species // NASA Technical Memorandum 4513. - October 1993. - 94 p.
158. Candler, G.V., MacCormack, R.W. Computation of Weakly Ionized Hypersonic Flows in Thermochemical Nonequilibrium // J.Thermophysics. -1991. -Vol.5. -No.3. -P.266-272.
159. Molchanov A.M. Numerical Simulation of Supersonic Chemically Reacting Turbulent Jets // 20th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference 27-30 June 2011, Honolulu, Hawaii. 2011. AIAA Paper 2011-3211, 37p.
160. Химия горения. // ред. У. Гардинер. -М.: Мир. 1988. 464 с.
161. Connaire M.O., Curran H.J., Simmie J.M., Pitz W.J., Westbrook C.K. A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation // International Journal of Chemical Kinetics. 2004. Vol. 36. PP.603-622.
162. Gilbert, R. G., Luther, K., and Troe, J., Theory of Unimolecular Reactions in the Fall-Off Range. // Ber. Bunsenges. Phys. Chem., Vol. 87, 1983, pp. 169-177.
163. Park, C. Chemical-kinetic parameters of hyperbolic Earth entry // Journal of Thermophysics and Heat Transfer. -2001. -V.15. -P.76–90.
164. Park, C. Review of Chemical-Kinetic Problems of Future NASA Missions, I: Earth Entries // Journal of Thermophysics and Heat Transfer. -1993. -Vol. 7. - No. 3. -pp. 385-398.
165. Scalabrin L.C. Numerical Simulation of Weakly Ionized Hypersonic Flow over Reentry Capsules //A dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy (Aerospace Engineering) in The University of Michigan. 2007. 182p.
166. Молчанов А.М. Математическое моделирование задач газодинамики и теплообмена. // Москва : Изд-во МАИ, 2013, 206 с.

167. Roe P.L. Characteristic-based schemes for the Euler equations // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 1986. 18. 337–365
168. Steger J. L., Warming R. F. Flux vector splitting for the inviscid gasdynamic equations with applications to finite difference methods // *Journal of Computational Physics*. 1981. Vol. 40. PP.263–293.
169. MacCormack R.W., Pulliam T. Assessment of A New Numerical Procedure For Fluid Dynamics // *AIAA Paper 98-2821*. 1998. 9p.
170. Moukalled F., L. Mangani L., M. Darwish. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics* . Springer Cham Heidelberg New York Dordrecht London, Springer International Publishing Switzerland 2016, 798p.
171. Воеводин В.В. *Вычислительные основы линейной алгебры* .М.: Наука, 1977. 303 с
172. Мышенков В.И., Мышенков Е.В. *Численные методы. Ч. 2. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений: Учебное пособие для студентов специальности 073000*. – М.:МГУЛ, 2005. – 109 с.:ил.
173. Karl Rupp <https://www.karlrupp.net/2018/02/42-years-of-microprocessor-trend-data/>
174. Hennessy, J.L.; Patterson, D.A. *Computer Organization and Design*, 6nd ed. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 2020
175. Fedoseev K, Askarbekuly N, Uzbekova A E and Mazzara M 2020 *J. Phys. Conf. Ser.* 1694 012035
176. Y. Saad and M.H. Schultz, "GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 7:856–869, 1986. doi:10.1137/0907058
177. Benzi, M.: Preconditioning techniques for large linear systems: a survey. *J. Comput. Phys.* 182 (2), 418–477, 2002

178. Rodgers, David P. (June 1985). "Improvements in multiprocessor system design". ACM SIGARCH Computer Architecture News. New York, NY, USA: ACM. 13 (3): 225–231 [p. 226]. doi:10.1145/327070.327215
179. Walker D.W. Standards for message-passing in a distributed memory environment. Oak Ridge National Lab., TN (United States), Center for Research on Parallel Computing (CRPC). p. 25. 1992.
180. Gustafson, John L. (1988). Communications of the ACM. 31 (5): 532–533. doi:10.1145/42411.42415
181. E. Cuthill and J. McKee. Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices In Proc. 24th Nat. Conf. ACM, pages 157–172, 1969.
182. M. Becka, G. Oksa and M. Vajtersic, Dynamic ordering for a parallel block-Jacobi SVD algorithm, Parallel Computing, 28 (2002), pp. 243–262.
183. Yamamoto, Y., “Tabulated Values for Temperature and Heat Transfer Distributions,” Aerodynamics Div., National Aerospace Lab., Tokyo, Japan, Dec. 1995.
184. Moss J.N., Gupta R.N., Price J. M. DSMC SIMULATIONS OF OREX ENTRY CONDITIONS. Aerothermodynamics Branch, NASA Langley Research Center, Hampton, Virginia. 0001, USA) NASA-TM-21162Z . 6 p.
185. Красильщиков А. П., Гурьяшкин Л. П. Экспериментальные исследования тел вращения в гиперзвуковых потоках. — М.:ФИЗМАТЛИТ, 2007. — 208 с. — ISBN 978-5-9221-0736-5.
186. Soshi Kawai, Kozo Fujii. Computational Study of Supersonic Base Flow Using Hybrid Turbulence Methodology // AIAA JOURNAL. -2005. -Vol. 43. -No. 6. - p.1265-1275
187. Guoliang, Li; Liu, Qiang; Yang, Yunjun; Gong, Anlong; Liu, Zhou. Study on Supersonic Base Flow with and without Plume Interaction //International Space

- Planes and Hypersonics Technologies Conference - Xiamen, China (O)] 21st AIAA International Space Planes and Hypersonics Technologies Conference // AIAA 2017-2276. -p.1-8
188. Herrin J. L. and. Dutton J. C. Supersonic Base Flow Experiments in the Near Wake of a Cylindrical Afterbody// AIAA JOURNAL. -1994. -Vol. 32. -No. 1. - p.77-83.
189. Mathur, T. and Dutton, J. C., “Base-Bleed Experiments with a Cylindrical Afterbody in Supersonic Flow,” JOURNAL OF SPACECRAFT AND ROCKETS. Vol. 33, No. 1, January-February 1996, pp. 30-37
190. Catalano, G.D. Sturek, W. B., Sr, “A Numerical Investigation of Subsonic and Supersonic Flow Around Axisymmetric Bodies”, Army Research Laboratory, Aberdeen Proving Ground, MD 21005-5067ARL-TR-2595 September 2001, pp.1-62
191. MARSHALL C. BURROWS AND ANATOLE P. Kurkov. An Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in Vitiated Air Stream. AIAA JOURNAL VOL. 11, NO. 9, 1973, pp.1217-1218.
192. Marshall C. Burrows and Anatole P. Kurkov. ANALYTICAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF SUPERSONIC COMBUSTION OF HYDROGEN IN A VITIATED AIRSTREAM. NASA TM X-2828, 1973. 25 pages
193. A. Seiff, T.C.D. Knight, R.F. Beebe and L.F. Huber, GP-J-ASI-3-ENTRY-V1.0, NASA Planetary Data System, URL: https://pds-atmospheres.nmsu.edu/PDS/data/gp_0001/
194. Молчанов А.М., Грибиненко Д.В., Янышев Д.С. Численное моделирование воспламенения горючего в камере сгорания ГПВРД // Тепловые процессы в технике. 2021. Т.13, №4. С. 148-155.

195. Грибиненко Д.В. Численное моделирование обтекания сферы высокоэнергетическим потоком газа // Тепловые процессы в технике. 2022. Т.14, №1. С. 30-34.
196. Gribinenko D.V., Molchanov A.M., Siluyanov M.V., Yanyshev D.S. Utilization of parallel computing for mathematical modeling of high-enthalpy flows // Journal of Physics: Conference Series. 2022. V. 2308, No. 1. Art. 012010. P. 1-6. URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/2308/1/012010/pdf>
197. Грибиненко Д.В., Молчанов А. М. Разработка и реализация программного комплекса «Universe2d», предназначенного для расчета газовых и гетерогенных высокоэнтальпийных неравновесных течений // Материалы XIII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (АММАГ'2020), 6–13 сентября 2020 г., Алушта. М.: Изд-во МАИ, 2020. С.478-480.
198. Грибиненко Д.В., Молчанов А. М. Математические методы и особенности реализации программного комплекса «Universe», предназначенного для численного расчета высокоэнтальпийных неравновесных течений // Современные проблемы теплофизики и энергетики (19–23 октября 2020): материалы III международной конференции. М.: Издательство МЭИ, 2020. С.72-74.
199. Грибиненко Д.В., Мякочин А.С., Молчанов А.М., Янышев Д.С. Математическое моделирование рабочего процесса в прямоточном двигателе гипотетического космического летательного аппарата, предназначенного для работы в атмосфере Юпитера // II Международная конференция «Математическое моделирование». 21-22 июля 2021 года. Москва. Тезисы. М.: Издательство «Перо», 2021. С.38-39.
200. Грибиненко Д.В., Молчанов А.М., Силуянова М.В., Янышев Д.С. Применение параллельных вычислений при математическом моделировании высокоэнтальпийных течений // Материалы XXII

- Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2021), 4–13 сентября 2021 г., Алушта. М.: Изд-во МАИ, 2021. С.348-350.
201. Молчанов А.М., Янышев Д.С., Грибиненко Д.В. Влияние закрутки на устойчивость горения в струйном диффузионном пламени // Тепломассообмен и гидродинамика в закрученных потоках (18-21 октября 2021): материалы VIII международной конференции. М.: Издательство МЭИ, 2021. С.176-178.