

Отзыв официального оппонента
на диссертацию **Титарева Владимира Александровича «Численное
моделирование пространственных течений разреженного
газа с использованием суперЭВМ»,**
представленную к защите на соискание ученой степени доктора физико-
математических наук по специальности 05.13.18 — Математическое
моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертация посвящена разработке эффективных численных методов моделирования течений разреженных газов с помощью кинетического подхода. Исследования динамики разреженных газов уже многие годы не теряют актуальности. Первоначально интерес к данной тематике был связан, в основном, с аэрокосмическими приложениями. Как известно, вход космического аппарата в верхние слои атмосферы, где числа Кнудсена достаточно велики, нельзя описывать методами механики сплошной среды. В последние годы число задач, требующих применения методов динамики разреженных газов, заметно увеличилось в связи с бурным развитием микро- и нано-электромеханических устройств, которые находят широкое применение во многих современных технологиях – электронике, машиностроении, метрологии, медицине. Использование традиционных методов механики сплошной среды для описания процессов в микро-электромеханических устройствах также некорректно, поскольку важную роль в них играют высокоскоростные процессы, проявляются эффекты разреженности и неравновесности (например, в насосах Кнудсена). Необходимо применять более сложные способы описания, основанные на решении уравнения Больцмана, или методы прямого статистического моделирования (ПСМ). Существующие на данный момент алгоритмы численного решения уравнения Больцмана и модельных уравнений достаточно сложны и могут применяться лишь для решения одномерных и простейших двумерных задач. Методы ПСМ хорошо подходят для широкого класса стационарных задач высотной аэродинамики, но менее эффективны

для решения нестационарных задач и расчета медленных течений. В связи с этим развитие современных высокопроизводительных методов моделирования течений разреженных газов в задачах со сложной геометрией, основанных на применении модельного кинетического уравнения и позволяющих эффективно использовать возможности современных гибридных суперЭВМ, является **актуальной** задачей, имеющей большую практическую значимость.

Основные результаты.

Автор предлагает новую методологию численного моделирования сложных трехмерных задач механики разреженного газа на основе решения кинетических уравнений на суперЭВМ. Методология включает несколько этапов: выбор математической модели; построение сеточной модели в шестимерном фазовом пространстве; построение численного метода; создание программного комплекса и верификация программ на тестовых задачах; решение конкретных задач.

Основой для моделирования является приближенное кинетическое уравнение, аппроксимирующее кинетическое уравнение Больцмана с точным интегралом столкновений. В работе выбрана S-модель Е.М. Шахова, выгодно отличающаяся от интуитивной БГК модели тем, что позволяет получить с хорошей точностью основные макроскопические параметры газа, силовые и тепловые нагрузки. Однако даже в модельной постановке кинетическое уравнение является сложным интегро-дифференциальным уравнением высокой размерности, численное решение которого сопряжено с существенными трудностями. В диссертации разработан новый неявный численный метод (трехмерная модификация метода дискретных скоростей) решения модельного кинетического уравнения, позволяющий моделировать течения разреженного газа на общих неструктурированных сетках для произвольных режимов обтекания. Применение метода к задаче гиперзвукового обтекания тел обеспечивает ускорение счета до 1000 раз по сравнению с общепринятыми схемами решения кинетических уравнений.

Основные особенности разработанного метода: 1) использование многоблочных структурированных и произвольных неструктурированных сеток независимо в физическом и скоростном пространствах; 2) консервативность по интегралу столкновений; 3) неоднородная дискретизация оператора переноса; 4) полностью неявный экономичный алгоритм продвижения по времени. Данные особенности метода позволили создать на его основе программный комплекс, применимый для решения прикладных задач со сложной геометрией.

Программный комплекс “Несветай-3Д” состоит из вычислительного ядра, кинетического решателя и препроцессоров сетки. Вычислительное ядро представляет собой набор модулей, реализующих базовые операции, необходимые для проведения расчетов; кинетический решатель реализует разностную схему решения кинетического уравнения; препроцессоры используются для разбиения расчетной сетки при параллельных вычислениях. Комплекс параллельных программ “Несветай-3Д” позволяет получить решение трехмерного кинетического уравнения на современных суперЭВМ с использованием рекордного числа процессоров / гиперпотоков (более 60000).

С помощью нового метода и комплексов программ решен ряд задач о стационарном течении разреженного газа через каналы произвольной конечной длины и сложной формы. Приведено сравнение результатов вычислений с аналитическим решением задачи Пуайзеля для уравнений Навье-Стокса несжимаемой жидкости и приближением плоских сечений. Уточнены границы применимости приближенных подходов, как для расхода массы, так и для распределения параметров по оси симметрии. Для составной трубы показано формирование диска Маха при достаточно малых числах Кнудсена. Проведена верификация и валидация численного метода и приближенного интеграла столкновений. Для стандартной тестовой задачи истечения газа в вакуум через короткую круглую трубу показано хорошее согласие результатов с расчетами по методу ПСМ, решением точного уравнения Больцмана и с экспериментальными данными;

С помощью разработанных методов и программ решен ряд задач внешнего гиперзвукового обтекания тел потоком разреженного газа. Для моделирования течений с большими числами Маха набегающего потока предложен простой метод построения неравномерной сетки в пространстве скоростей. Впервые проведена количественная оценка точности моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа на основе численного решения модельного кинетического уравнения. Показана хорошая точность S-модельного кинетического уравнения в задачах гиперзвукового обтекания затупленных тел, включая задачу определения теплообмена на поверхности.

Проведены расчеты обтекания моделей спускаемых аппаратов реалистичной формы (ВКА ЦАГИ) под разными углами атаки при больших числах Маха. Впервые построено решение кинетического уравнения для задачи обтекания спускаемого аппарата при входе в атмосферу с первой космической скоростью. Для расчетов использовались шестимерные пространственные сетки с общим числом узлов до 19 миллиардов.

Перечисленные выше результаты являются **новыми**. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, не вызывает сомнений. **Достоверность** полученных результатов обоснована тем, что разработанные комплексы программ были верифицированы путем сопоставления результатов на серии широко известных тестовых задач; проводилось сравнение с экспериментальными данными, а также с расчетами других авторов методом ПСМ и с помощью решения уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений. Получено хорошее качественное и количественное совпадение результатов в широком диапазоне чисел Кнудсена и Маха.

По содержанию диссертации можно сделать следующие **замечания**:

1. При построении математической модели и в разработанных программных комплексах не учитываются внутренние степени свободы молекул и химические реакции. Утверждается, что при верном выборе числа Прандтля точность определения аэродинамических коэффициентов слабо

зависит от учета внутренней энергии. Однако данный вывод сделан на основе решения некоторых частных задач, в которых роль возбуждения внутренних степеней свободы не слишком велика. В гиперзвуковых течениях, особенно при учете каталитических свойств поверхности, пренебрежение физико-химическими процессами может приводить к заметной потере точности при расчете тепловых потоков.

2. Использование модельного уравнения накладывает некоторые ограничения на условия решаемых задач, в частности, оно может применяться в случае достаточно слабых отклонений от равновесия. При этом полное уравнение Больцмана применимо при произвольной степени отклонения от равновесия. Интересно было бы на примере решения конкретных задач в полной и модельной постановке выявить критерии применимости модельного уравнения.

3. В работе отмечаются сложности реализации предложенного метода численного моделирования при малых числах Кнудсена. При этом не совсем понятна целесообразность применения именно кинетического подхода в условиях, когда методы механики сплошной среды дают вполне удовлетворительную точность. Каково преимущество подхода, развиваемого автором, при малых Kn по сравнению с решением уравнений Навье-Стокса с учетом граничных условий скольжения и скачка температуры? Вероятно, следует более четко определить условия, при которых действительно необходимо применение кинетического подхода, особенно для задач гиперзвуковой аэродинамики тел сложной геометрии.

4. В диссертации используется граничное условие диффузного отражения на поверхности (и зеркального отражения от плоскости симметрии). Возможно ли обобщение модели на случай аккомодации импульса и энергии на поверхности? Есть ли принципиальные трудности при постановке более реалистичных граничных условий?

Указанные замечания носят характер пожеланий и могут быть полезны при определении направлений дальнейшей работы автора. Перечисленные недостатки не снижают научной ценности работы в целом. Диссертация

