

Родионов Александр Владимирович

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ И ПРОГРАММ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ СВЕРХЗВУКОВЫХ  
ТЕЧЕНИЙ В ПРИЛОЖЕНИИ К АЭРОКОСМИЧЕСКИМ  
И АСТРОФИЗИЧЕСКИМ ЗАДАЧАМ

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном унитарном предприятии «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики» (ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ»)

Официальные оппоненты: Крайко Александр Николаевич,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
ФГУП «ЦИАМ имени П.И. Баранова»,  
отделение газовой динамики и теплофизики,  
начальник отдела

Босняков Сергей Михайлович,  
доктор технических наук,  
старший научный сотрудник,  
ФГУП «ЦАГИ им. Н.Е. Жуковского»,  
зам. начальника отделения аэродинамики  
силовых установок

Меньшов Игорь Станиславович,  
доктор физико-математических наук,  
старший научный сотрудник,  
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН,  
ведущий научный сотрудник

Ведущая организация: ФИЦ «Информатика и управление» РАН,  
г. Москва

Защита диссертации состоится 26 марта 2020г. в 11 часов на заседании диссертационного совета Д002.024.03 при ИПМ им. М.В. Келдыша РАН по адресу 125047, г. Москва, Миусская пл., 4, корп. А.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Автореферат разослан “\_\_” января 2020 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д002.024.03  
кандидат физ.-мат. наук

Корнилина М.А.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Неравновесные сверхзвуковые течения газовых и многофазных сред рассматриваются во многих областях науки и техники. В исследовании такого рода течений важнейшую роль играет численное моделирование, которое либо полностью заменяет эксперимент, либо его дополняет, помогая интерпретировать и обогатить полученные данные. Сверхзвуковые течения часто сопровождаются образованием газодинамических разрывов, что накладывает серьезные ограничения на применяемые методы расчета. Наличие неравновесных процессов в потоке еще более осложняет проблему выбора вычислительных алгоритмов. Таким образом, в области вычислительной газовой динамики существует актуальная проблема разработки универсальных, эффективных и надежных методов расчета неравновесных сверхзвуковых течений.

Одной из важных сфер приложения методов численного моделирования течений с физико-химическими процессами является решение ряда актуальных задач, возникающих при разработке, создании и эксплуатации аэрокосмической техники. Среди таких задач можно выделить проблему моделирования струй, истекающих из ракетных двигателей в атмосферу на различных этапах полета летательного аппарата.

Другой сферой приложения методов численного моделирования неравновесных течений является астрофизика, где одними из наиболее привлекательных объектов изучения являются кометы. На современном этапе развития непилотируемой космонавтики стало возможным проведение исследовательских миссий, нацеленных на получение детальной информации о составе, морфологии и динамике газопылевой активности комет. Подготовка и проведение таких миссий требуют решения ряда актуальных задач, к числу которых принадлежит проблема моделирования атмосферы реальной кометы.

За последние два – три десятилетия методы сквозного счета повышенной точности приобрели большую популярность и получили широкое распространение. К настоящему времени уже разработано огромное количество расчетных методик, базирующихся на точном или приближенном решении задачи Римана (методы типа Годунова). Одними из наиболее известных методов сквозного счета повышенной точности являются схемы типа MUSCL, PPM, ENO, WENO, MP, приближение ADER и разрывный метод Галеркина. Среди отечественных разработчиков большой популярностью пользуется схема КАБАРЕ, новые представления которой могут использоваться в задачах с разрывами решения. В связи с этим актуальной задачей становится проведение детальных сопоставлений и тестирований популярных схем, которые бы давали объективную информацию о степени их эффективности в решении задач различного класса.

Обладея многими достоинствами, методы типа Годунова имеют и изъяны, среди которых феномен «карбункула» (альтернативные названия проблемы – «карбункул»-неустойчивость или ударно-волновая неустойчивость) является наиболее значительным. Разработка эффективного и универсального подхода к решению этой проблемы также является актуальной задачей вычислительной газодинамики.

## **Цели и задачи диссертационной работы**

- Разработка универсальных, эффективных и надежных методов сквозного счета для моделирования течений совершенного и неравновесных газов, в том числе создание приближенной методики маршевого расчета сверхзвуковых струй с дозвуковыми областями.
- Построение комплексной математической модели продуктов сгорания типовых ракетных топлив и создание комплекса программ для расчета их истечения в атмосферу при различных режимах полета. Проведение научных и прикладных работ по моделированию струй продуктов сгорания.
- Построение математической модели многофазной атмосферы кометы (включая модель производства газопылевого потока с поверхности) и создание комплекса программ для ее расчета. Проведение цикла научных и прикладных исследований в обеспечение работ по изучению кометы Чурюмова-Герасименко (в рамках космической миссии Розетта).
- Проведение сравнительного анализа ряда популярных методов сквозного счета, базирующихся на решении задачи Римана и имеющих повышенный порядок аппроксимации, и выработка предложений по их усовершенствованию.
- Проведение цикла работ по проблеме численной неустойчивости типа «карбункул», включающего в себя подробный анализ работ в этой области, выработку универсального подхода к решению проблемы, настройку и всестороннее тестирование нового метода на схемах первого порядка с последующей его адаптацией к схемам повышенного порядка аппроксимации.

**Методы исследования.** В диссертационной работе основным методом исследования аэрокосмических и астрофизических задач является вычислительный эксперимент на базе методов вычислительной аэрогазодинамики (CFD-методов). В качестве основной расчетной схемы используется явная конечно-объемная схема сквозного счета, базирующаяся на элементах схемы Годунова и схемы Колгана и имеющая второй порядок аппроксимации. В качестве расчетных сеток применяются односвязные и многоблочные структурированные сетки. Для программной реализации используется язык программирования Fortran.

## **Научная новизна**

- Предложен оригинальный метод повышения точности схемы Годунова на базе элементов схемы Колгана и вычислительной процедуры типа предиктор-корректор. Новая схема (схема Годунова-Колгана-Родионова или схема ГКР) обобщена на случай моделирования течений неравновесного газа. Показана высокая эффективность схемы ГКР при моделировании сложных ударно-волновых течений с неравновесными физико-химическими процессами.
- На базе схемы ГКР разработана методика маршевого расчета сверхзвуковых струй, истекающих в спутный дозвуковой поток. Новая методика обобщена на случай образования локальной дозвуковой зоны в ядре потока (за диском Маха).

- Построена комплексная математическая модель течения продуктов сгорания, истекающих из типовых ракетных двигателей на жидком и твердом топливах.
- Разработанные методики и модели реализованы в комплексе программ NARJ для численного моделирования одно- и многофазных неравновесных струй продуктов сгорания, истекающих в атмосферу на различных высотах полета.
- Впервые показано, что в рамках приближения гипотезы Буссинеска (определяет форму тензора турбулентных напряжений в популярных моделях турбулентности) не удастся адекватно описать процесс затухания волновой структуры неизобарической струи, и что процедура параболизации осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса практически устраняет этот недостаток гипотезы Буссинеска. Получено строгое теоретическое объяснение обнаруженного эффекта и предложена альтернативная форма тензора турбулентных напряжений, устраняющая обнаруженную проблему в моделировании неизобарических струй.
- Развита математическая модель ближней атмосферы кометы, включающая в себя несколько моделей производства газопылевого потока с поверхности и учитывающая многофазную неравновесность и фотодиссоциацию.
- Впервые показано, что в случае истечения потока частиц с нескольких активных пятен на поверхности кометы, однофракционная модель облака частиц физически неадекватно описывает их движение. Предложена многофракционная расчетная модель, которая свободна от этого недостатка.
- Разработанные методики и модели реализованы в комплексе программ RZC, нашедшего активное применение в научно-исследовательских работах по изучению атмосферы кометы Чурюмова-Герасименко в рамках проекта Розетта.
- Предложено новое представление схемы КАБАРЕ, относящееся к классу схем типа MUSCL.
- Предложена новая низкодиссипативная реконструкция-ограничитель NOLD для схемы ГКР. Показана ее высокая эффективность в задачах с разрывами решения.
- Предложен новый вариант разрывного метода Галеркина, обладающий свойством суперсходимости.
- Впервые предложен универсальный подход к решению проблемы «карбункул»-неустойчивости в схемах типа Годунова – метод искусственной вязкости. Показана эффективность нового подхода на всесторонних тестовых примерах.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Предложенная более 30-ти лет тому назад схема Годунова-Колгана-Родионова нашла широкое признание среди отечественных специалистов и используется в различных учебных и научно-исследовательских институтах, таких как ЦАГИ им. Н.Е. Жуковского, ЦИАМ им. П.И. Баранова, ЦНИИМАШ, РФЯЦ-ВНИИЭФ, МАИ им. С. Орджоникидзе. Предложенный недавно метод искусственной вязкости для подавления численной неустойчивости типа «карбункул» отличается высокой эффективностью, универсальностью и простой программной реализации, поэтому можно

ожидать расширения практики его применения в различных организациях при решении сложных ударно-волновых задач.

Разработанные автором программы нашли практическое применение в Московском институте теплотехники, ЦНИИМАШ, РФЯЦ–ВНИИЭФ, а также в Лаборатории аэрономии Национального центра научных исследований (Франция) при выполнении работ в рамках международного космического проекта Розетта по изучению кометы Чурюмова-Герасименко (проект Европейского космического агентства).

**Достоверность результатов.** Разработанные в диссертационной работе методы сквозного счета и программы для численного моделирования неравновесных сверхзвуковых течений проходили тщательную верификацию на каждом этапе их разработки. Верификация проводилась путем сопоставления результатов расчетов с известными аналитическими и эталонными решениями тестовых задач (одномерные и многомерные задачи; решения линейных уравнений, уравнений Эйлера и уравнений Навье-Стокса), с расчетами других авторов, а также с экспериментальными данными (данные по натурным и модельным исследованиям сверхзвуковых неизобарических струй).

#### **Основные положения диссертации, выносимые на защиту**

- Математические модели:
  1. комплексная математическая модель течения продуктов сгорания, истекающих из типовых ЖРД и РДТТ;
  2. новая форма тензора турбулентных напряжений (альтернатива гипотезе Буссинеска);
  3. математическая модель газопылевой атмосферы кометы;
  4. многофракционная модель для расчета облака частиц (случай истечения с нескольких активных пятен на поверхности кометы).
- Численные методы:
  1. оригинальная схема Годунова-Колгана-Родионова (схема MUSCL-типа) для сквозного расчета течений совершенного и неравновесных газов;
  2. методика маршевого расчета сверхзвуковых струй с дозвуковыми областями (внешний дозвуковой поток и течение за диском Маха);
  3. оригинальная низкодиссипативная реконструкция NOLD для схем типа MUSCL;
  4. новое представление схемы КАБАРЕ, относящееся к классу схем типа MUSCL;
  5. новый вариант разрывного метода Галеркина, обладающий свойством суперсходимости;
  6. метод искусственной вязкости, как универсальный подход к решению проблемы «карбункул»-неустойчивости в схемах типа Годунова.
- Комплексы программ:
  1. комплекс программ NARJ для численного моделирования струй продуктов сгорания ракетных топлив;

- газодинамические коды в составе комплекса программ RZC для численного моделирования атмосферы кометы (в обеспечение работ по проекту Розетта).

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались на семинарах в ряде российских организаций, таких как РФЯЦ–ВНИИЭФ, ЦНИИМАШ, ЦАГИ им. Н.Е. Жуковского, ЦИАМ им. П.И. Баранова, ИПМ им. М.В. Келдыша, НИИ механики МГУ, ИПМ им. А.Ю. Ишлинского, а также были представлены на следующих российских и международных конференциях: IX Всесоюзная конференция по динамике разреженных газов (Свердловск, 1987), VII Всесоюзный семинар «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики» (Кемерово, 1987), IV Всесоюзная конференция «Кинетические и газодинамические процессы в неравновесных средах» (Красновидово, 1988), International school seminar «Nonequilibrium processes in gases and low temperature plasma» (Minsk, 1992), Школы-семинары и Научно-технические конференции ЦАГИ (пос. Володарского, 1992, 2009, 2010), AIAA Thermophysics Conferences (USA, 1993, 1996), AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conferences & Exhibits (USA, 1993, 1998, 2000, 2001), International conference «Modern problems of theoretical astronomy» (St.Petersburg, 1994), Sino-Russian hypersonic flow conference (China, 1994), International Aerospace Congress (Moscow, 1994), XX International Symposium on Shock Waves (USA, 1995), AIAA Aerospace Sciences Meetings & Exhibits (USA, 2001, 2002, 2003, 2005), Международные конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным средствам (Москва, 2001, 2003), IV Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях (Москва, 2002), International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (Italy, 2004; Canada, 2016), 2nd International Conference on Green Propellants for Space Propulsion (Italy, 2004), The 10th Asteroids, Comets, Meteors meeting (USA, 2008), Международные школы-семинары «Модели и методы аэродинамики» (Евпатория, 2009, 2010, 2013, 2015, 2016, 2017, 2019), Международные семинары «Супервычисления и математическое моделирование» (Саров, 2011, 2012, 2014, 2016, 2018), Всероссийские конференции «Вычислительный эксперимент в аэроакустике» (Светлогорск, 2012, 2014, 2016), International Conference on Computational Science & Computational Intelligence (USA, 2014), Всероссийская конференция по аэроакустике (Москва, 2015), Всероссийская научно-техническая конференция «Авиадвигатели XXI века» (Москва, 2015).

**Реализация и внедрение результатов работы.** Работа выполнялась в рамках научных планов ряда организаций: Московского института теплотехники (МИТ), Центрального научно-исследовательского института машиностроения (ЦНИИМАШ), Московского авиационного института им. С. Орджоникидзе (МАИ), Московского отделения Международного института проблем астероидной опасности (МО МИПАО), Лаборатории аэрономии Национального центра научных исследований, Франция (Service d' Aéronomie du CNRS, France), Российского федерального ядерного центра – Всероссийского научно-исследовательского института экспериментальной физики (РФЯЦ–ВНИИЭФ).

Разработанные автором программы внедрены в МИТ, ЦНИИМАШ, РФЯЦ–ВНИИЭФ и использовались в рамках международного космического проекта Розетта по исследованию кометы Чурюмова-Герасименко (проект ESA).

Работа автора поддерживалась грантами Российского фонда фундаментальных исследований (проекты РФФИ 05-08-18034-а, 06-08-08114-офи, 15-01-06224-а), грантом CNRS/INSU/PNP и грантом CNES/СТ.

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 48 журнальных статей в печатных изданиях, рекомендованных ВАК для опубликования основных научных результатов диссертаций [1–48] (в том числе 14 статей без соавторов), 21 публикация в трудах конференций и 4 препринта.

**Благодарности.** Автор благодарит всех соавторов и коллег за плодотворное сотрудничество. Среди них Ю.М. Липницкий, Ю.А. Пластинин, Г.Ф. Карабаджак, В.А. Михалин, А.В. Сафронов, Б.А. Хмелинин, Г.Г. Баула (ЦНИИМАШ), Г.Г. Мордвинцев (МИТ), В.Ф. Спиридонов, И.Ю. Тагирова, К.В. Циберев (РФЯЦ-ВНИИЭФ), Ж.Ф. Крифо, В.В. Захаров (CNRS, France).

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Ее объем составляет 299 машинописных листа, включая 148 рисунка, 15 таблиц и список литературы из 261 наименований.

## Содержание работы

**Во введении** определены цели диссертационной работы и сформулированы актуальность и практическая значимость рассматриваемых задач.

**В главе 1** описываются базовые элементы численного метода и принципы конструирования программ, разработанные автором в 1980-х годах. Это своего рода фундамент, на котором строится вся работа, представленная в последующих главах диссертации.

*В разделе 1.1* выписываются уравнения газовой динамики: системы уравнений Эйлера и Навье-Стокса применительно к расчету трехмерных и двумерных (плоских или осесимметричных) течений. При моделировании течений неравновесного газа (в общем случае) эти системы уравнений дополняются уравнениями для параметров  $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_M)$ , описывающих неравновесные процессы (это могут быть концентрации химических компонент, энергии колебательных степеней свободы молекул и др.).

*Раздел 1.2* посвящен численной аппроксимации выписанных уравнений, которая осуществляется в рамках метода конечных объемов. Рассматривается гладкая структурированная сетка, для описания которой используются криволинейные координаты  $\xi\eta\zeta$  (переводят сетку физического пространства  $xuz$  в кубическую сетку вычислительного пространства с сеточными интервалами  $\Delta\xi = \Delta\eta = \Delta\zeta = 1$ ).

В качестве метрических величин используются геометрические параметры сетки:  $V_{i,j,k}$  – объем ячейки;  $(\mathbf{S}_\xi)_{i+1/2,j,k}$ ,  $(\mathbf{S}_\eta)_{i,j+1/2,k}$  и  $(\mathbf{S}_\zeta)_{i,j,k+1/2}$  – вектор-площади боковых граней ячейки в трех сеточных направлениях (сеточные индексы  $i, j$  и  $k$  соответствуют координатам  $\xi, \eta$  и  $\zeta$ ). На рисунке 1 показан фрагмент расчетной сетки в двумерном случае.

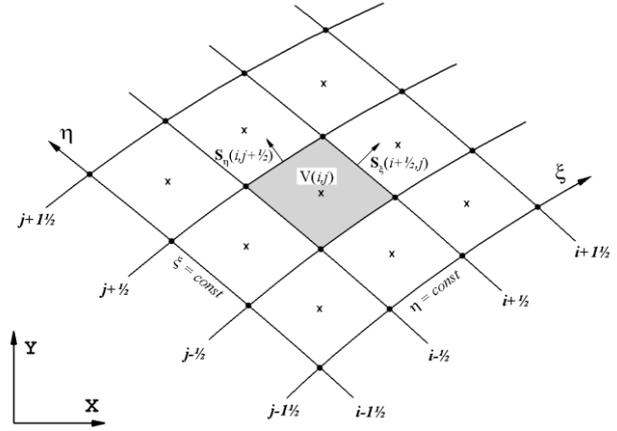


Рисунок 1. Фрагмент расчетной сетки

Схема Годунова. При аппроксимации уравнений Эйлера, записанных в виде  $\partial \mathbf{U} / \partial t + \partial \mathbf{F}_x / \partial x + \partial \mathbf{F}_y / \partial y + \partial \mathbf{F}_z / \partial z = 0$ , полагается, что в момент времени  $t = t^n$  известны осредненные по ячейке величины  $\mathbf{Q}_{i,j,k}^n \equiv (u_x, u_y, u_z, \rho, p)_{i,j,k}^n$ . Решение на момент  $t^{n+1} \equiv t^n + \Delta t$  получается после интегрирования по ячейке и по времени:

$$\mathbf{U}_{i,j,k}^{n+1} = \mathbf{U}_{i,j,k}^n - \frac{\Delta t}{V_{i,j,k}} \left[ (\mathbf{F}_\xi)_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - (\mathbf{F}_\xi)_{i-1/2,j,k}^{n+1/2} + (\mathbf{F}_\eta)_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - (\mathbf{F}_\eta)_{i,j-1/2,k}^{n+1/2} + (\mathbf{F}_\zeta)_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - (\mathbf{F}_\zeta)_{i,j,k-1/2}^{n+1/2} \right], \quad (1)$$

где  $\mathbf{U}_{i,j,k}^n = \mathbf{U}(\mathbf{Q}_{i,j,k}^n)$ ,  $\mathbf{U}_{i,j,k}^{n+1} = \mathbf{U}(\mathbf{Q}_{i,j,k}^{n+1})$ , а  $\mathbf{F}_\xi$ ,  $\mathbf{F}_\eta$  и  $\mathbf{F}_\zeta$  – векторы потоков через грани ячейки ( $\mathbf{F}_\xi = S_{\xi x} \mathbf{F}_x + S_{\xi y} \mathbf{F}_y + S_{\xi z} \mathbf{F}_z, \dots$ ).

Схема Годунова базируется на предположении о постоянстве параметров газа внутри каждой ячейки и использовании точного решения задачи Римана при вычислении потоков через их боковые грани. Функции потоков, определяемых одним из решателей задачи Римана, в общем случае записываются как

$$(\mathbf{F}_\xi)_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} = \mathbf{F}^{RS}(\mathbf{Q}_{i,j,k}^n, \mathbf{Q}_{i+1,j,k}^n, (\mathbf{S}_\xi)_{i+1/2,j,k}), \dots$$

Схема Колгана. Здесь используется предположение о кусочно-линейном распределении, которое на каждом временном слое восстанавливается по известным  $\mathbf{Q}_{i,j}^n$  (реконструкция кусочно-линейного распределения). В случае использования гладкой структурированной сетки задача сводится к вычислению величин  $\Delta_\xi \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$ ,  $\Delta_\eta \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$  и  $\Delta_\zeta \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$ , под которыми понимаются приращения параметров внутри ячейки по каждому из сеточных направлений. Тогда величины, экстраполированные на боковые грани ячейки, определяются как

$$\mathbf{Q}_{i+1/2-,j,k}^n = \mathbf{Q}_{i,j,k}^n + 0.5 \Delta_\xi \mathbf{Q}_{i,j,k}^n, \quad \mathbf{Q}_{i-1/2+,j,k}^n = \mathbf{Q}_{i,j,k}^n - 0.5 \Delta_\xi \mathbf{Q}_{i,j,k}^n, \quad \dots$$

а потоки вычисляются из соотношений:  $(\mathbf{F}_\xi)_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} = \mathbf{F}^{RS}(\mathbf{Q}_{i+1/2-,j,k}^n, \mathbf{Q}_{i+1/2+,j,k}^n, (\mathbf{S}_\xi)_{i+1/2,j,k}), \dots$

Для расчета приращений Колган сформулировал принцип минимальных значений производной, который в настоящее время называют ограничителем minmod и записывают как

$$\Delta f_i = \text{minmod}(\Delta f_{i-1/2}, \Delta f_{i+1/2}), \quad \text{minmod}(a, b) \equiv 0.5(\text{sign}a + \text{sign}b) \min(|a|, |b|). \quad (2)$$

По сравнению со схемой Годунова, схема Колгана имеет повышенный (второй) порядок аппроксимации по пространству, однако порядок аппроксимации по времени у нее остается первым.

Схема Годунова–Колгана–Родионова (схема ГКР). Для повышения порядка аппроксимации по времени предложен следующий алгоритм.

1 этап (реконструкция). Вычисление приращений  $\Delta_{\xi} \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$ ,  $\Delta_{\eta} \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$  и  $\Delta_{\zeta} \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$ .

2 этап (шаг предиктор). Расчет предварительных значений  $\tilde{\mathbf{Q}}_{i,j,k}^{n+1}$  из решения (1), когда потоки через боковые грани вычисляются по граничным экстраполированным величинам, являющихся внутренними по отношению к интегрируемой ячейке (без решения задачи Римана):  $(\mathbf{F}_{\xi})_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{F}(\mathbf{Q}_{i-\frac{1}{2},j,k}^n, (\mathbf{S}_{\xi})_{i-\frac{1}{2},j,k})$ , ...

3 этап (шаг корректор). Расчет величин  $\mathbf{Q}_{i,j,k}^{n+1}$  из решения (1), когда потоки находятся из решения задачи Римана:  $(\mathbf{F}_{\xi})_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{F}^{RS}(\mathbf{Q}_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}}, (\mathbf{S}_{\xi})_{i+\frac{1}{2},j,k})$ , ...

где  $\mathbf{Q}_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{Q}_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + 0.5\Delta_{\xi}\mathbf{Q}_{i,j,k}^n$ ,  $\mathbf{Q}_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{Q}_{i+1,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - 0.5\Delta_{\xi}\mathbf{Q}_{i+1,j,k}^n$ ,  $\mathbf{Q}_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} = 0.5(\mathbf{Q}_{i,j,k}^n + \tilde{\mathbf{Q}}_{i,j,k}^{n+1})$ , ...

Таким образом, если схема Колгана состоит из трех главных элементов – вычисление приращений, решение задачи Римана и процедура интегрирования по ячейке (решение (1)), то схема ГКР состоит из этих же элементов, но здесь интегрирование по ячейке осуществляется дважды. Простота алгоритма схемы ГКР обуславливает ее практическую привлекательность: повышение порядка аппроксимации по времени достигается при минимальных вычислительных затратах. Отличием схемы ГКР от схемы Колгана является и то, что она имеет такое же ограничение по числу Куранта, как и базовая схема Годунова:  $C_{cfl} \leq 1$ .

В качестве варианта схемы ГКР вместо minmod можно использовать более точную реконструкцию-ограничитель MC (van Leer, 1977):

$$\Delta f_i = \text{MC}(\Delta f_{i-\frac{1}{2}}, \Delta f_{i+\frac{1}{2}}), \quad \text{MC}(a, b) \equiv \min\text{mod}(0.5(a + b), 2 \min\text{mod}(a, b)). \quad (3)$$

Аппроксимация уравнений Навье–Стокса. Правые части уравнений Навье–Стокса аппроксимируются явными центрально-разностными соотношениями и добавляются в схему ГКР как источниковые члены, которые остаются постоянными (без пересчета) на всех этапах перехода от временного слоя  $n$  к слою  $n+1$ . Явная аппроксимация правых частей накладывает дополнительное ограничение на величину расчетного шага. На примере решения линейного конвективно-диффузионного уравнения вида  $\partial u / \partial t + a \partial u / \partial x = d \partial^2 u / \partial x^2$  (здесь  $a$  и  $d = \text{const} > 0$ ) можно показать, что рассматриваемая схема устойчива и монотонна при выполнении условия  $\Delta t \leq [a / \Delta x + 2d / \Delta x^2]^{-1}$ .

Моделирование неравновесных течений. В случае расчета течений неравновесного газа в схему ГКР привносятся два новых элемента.

Первый элемент касается выбора аппроксимации для источниковых членов  $\Phi_m$  в правых частях уравнений, ответственных за физико-химические процессы. Для того чтобы расчетная схема была универсальной и работала при любых временах релаксации – от химически «замороженных» до равновесных течений, была выбрана полунявная аппроксимация вида

$$\Phi_m(P, T, \mathbf{q}) \rightarrow s[\Phi_m]_{i,j,k}^n + (1-s)[\Phi_m]_{i,j,k}^{n+1}, \quad (4)$$

где  $s < 0.5$  – параметр схемы (в расчетах  $s = 0.4$ ). Заметим, что неявность аппроксимации (4) «точечная», не требующая привлечения процедур типа «прогонка».

Для ее разрешения в каждой расчетной ячейке на каждом расчетном шаге (предиктор или корректор) предлагается использовать метод Ньютона.

Второй элемент – это решение задачи Римана. Здесь выбор сделан в пользу использования предположения о «замороженности» процессов ( $\mathbf{q} = \text{const}$ ) при расчете распада разрыва, что соответствует точному решению задачи Римана в начальный момент времени ( $t \rightarrow +0$ ).

Метод маршировки по пространству. При моделировании стационарного, полностью сверхзвукового течения в рамках уравнений Эйлера можно решать задачу более экономичным способом – методом маршировки по пространству (маршевым методом). Например, в случае выполнения условия  $u_x > a$  во всей расчетной области маршевый метод заключается в последовательном переходе вдоль оси  $x$  в положительном направлении от одного сечения  $x = \text{const}$  к другому. В этом случае координата  $x$  выступает в качестве аналога времени  $t$ , а задача о взаимодействии двух равномерных сверхзвуковых потоков является стационарным аналогом задачи Римана. Применительно к схеме Годунова маршевый метод был подробно описан Ивановым, Крайко и Михайловым (1972). Его обобщение на схему ГКР вполне очевидно.

В случае моделирования вязких сверхзвуковых течений во многих практических задачах допустимо использование «параболизованного» варианта уравнений Навье-Стокса, что также делает возможным применение маршевого метода.

В разделе 1.3 описываются принципы построения программ, позволяющие перенести свойство универсальности вычислительных алгоритмов на уровень их программной реализации. Для этого вырабатывается стандарт в расположении параметров течения совершенного или неравновесного газа в массивах данных, и устанавливаются правила разбиения программ на расчетные модули. Базовыми расчетными модулями являются: газодинамические модули, которые решают уравнения газовой динамики и не зависят от вида конкретного газа; термодинамические и кинетические модули, которые определяют моделируемый газ и решают уравнения, ответственные за физико-химические процессы. При максимальной независимости расчетных модулей их совместное использование позволяет вырабатывать связанное решение полной системы уравнений.

В разделе 1.4 приводятся примеры тестовых расчетов. Один из таких тестов – течение в сверхзвуковой части осесимметричного сопла (Иванов, Крайко, Михайлов, 1972). На рисунке 2 приведены данные расчетов по схеме Годунова, схеме Колгана и схеме ГКР с двумя видами реконструкций (minmod и MC) при двух числах Куранта. Представленные результаты наглядно показывают, что при моделировании гладких течений переход от схемы Годунова на схему Колгана не приводит к принципиальному уточнению результатов, тогда как переход на схему ГКР обеспечивает существенное повышение точности. При этом вариант ГКР-MC демонстрирует наилучшее приближение к эталонному решению.

Другая тестовая задача – распространение ударной волны по неравновесному газу. Здесь моделируется одномерное движение ударной волны, за фронтом которой протекает релаксационный процесс, описываемый функцией  $\Phi = (p - q)/\tau$ , где  $p$  – давление,  $\tau$  – время релаксации. На рисунке 3 кружками приведены данные, полученные по схеме ГКР для нескольких значений времени релаксации:  $\tau$

$= 0.001, 0.03, 0.1, 0.3$  и  $1$ . Можно видеть, что распределения параметра  $q$  при всех значениях  $\tau$  хорошо согласуются с точным решением (штриховые линии), причем в расчетном варианте близком к равновесному случаю ( $\tau = 0.001$ ) профиль  $q$  повторяет профиль давления (на рисунке не приведен). Таким образом, представленные данные подтверждают эффективность выбранной аппроксимации для источниковых членов  $\Phi_m$ .

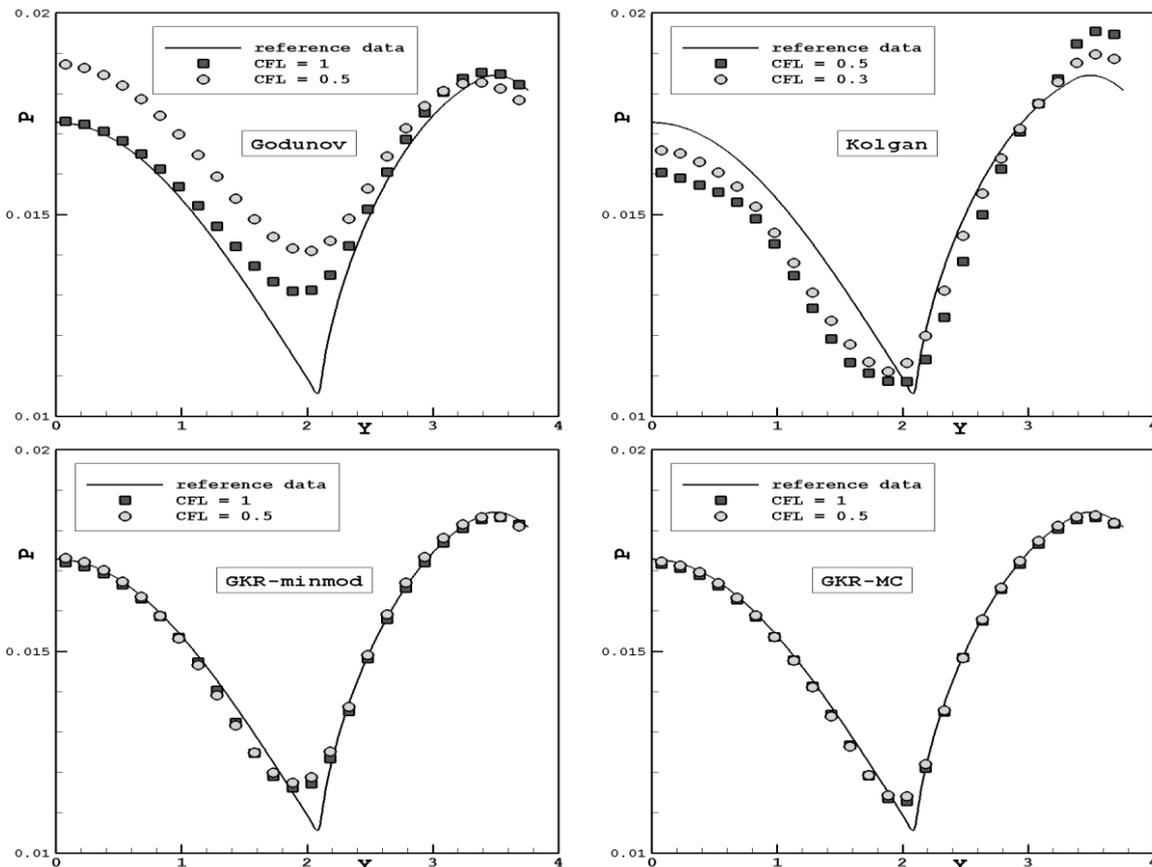
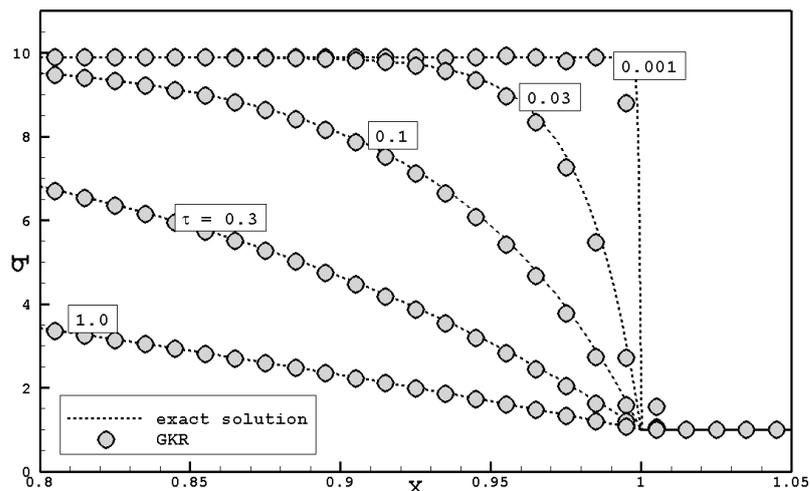


Рисунок 2. Распределение давления в сечении  $x = 6$ .

Рисунок 3. Распределение неравновесного параметра  $q$  в окрестности фронта ударной волны при различных значениях  $\tau$ .



**Глава 2** посвящена численному моделированию струй продуктов сгорания ракетных топлив и комплексу программ NARJ (Numerical Analysis of Real Jets).

В разделе 2.1 описывается объект моделирования. Рассматриваются два вида топлив: (1) топлива типа С-Н-О-Н, состоящие главным образом (исключая малые примеси) из соединений углерода, водорода, кислорода и азота, и использу-

емые в жидкостных ракетных двигателях (ЖРД); (2) топлива типа C-H-O-N-Cl-Al, состоящие из соединений углерода, водорода, кислорода, азота, хлора и алюминия, и используемые в твердотопливных ракетных двигателях (РДТТ).

Для продуктов сгорания топлив каждого вида предусмотрена возможность рассчитывать двумерные течения в сопле и в струе при различных режимах истечения (в дозвуковой, сверхзвуковой, сильно разреженный спутный поток воздуха или в вакуум).

Математическая модель течения продуктов сгорания объединяет в себе большой набор разнообразных процессов: химические реакции (активно протекают в сопле и в области смешения продуктов сгорания с атмосферным воздухом); неравновесная релаксация колебательных степеней свободы молекул (проявляется в разреженных струях и при истечении из двигателей малой тяги), гомогенная конденсация газовой фазы (наиболее заметна при истечении из больших ракетных двигателей в сильно разреженную среду или в вакуум); ламинарное и турбулентное перемешивание (в области смешения продуктов сгорания с внешним потоком); многофазность (массовая доля твердых/жидких частиц  $Al_2O_3$  в продуктах сгорания топлив типа C-H-O-N-Cl-Al составляет  $\sim 30\%$ ).

В разделе 2.2 приводится подробное описание математической модели, реализованной в комплексе программ NARJ.

Химические реакции. В продуктах сгорания топлив типа C-H-O-N учитывается 15 химических реакций среди 11-ти газовых компонент ( $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $NO$ ,  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $OH$ ,  $CO$ ,  $H$ ,  $O$ ,  $N$ ), а в продуктах сгорания топлив типа C-H-O-N-Cl-Al учитывается 21 реакция среди 14-ти компонент (дополнительно  $HCl$ ,  $Cl_2$  и  $Cl$ ).

Колебательная релаксация. При моделировании продуктов сгорания топлив типа C-H-O-N учитывается 15 процессов  $V-T$  и  $V-V$  обмена среди 6-ти колебательных мод:  $CO_2(v_1+v_2)$ ,  $CO_2(v_3)$ ,  $N_2(v)$ ,  $CO(v)$ ,  $H_2O(v_2)$ ,  $O_2(v)$ . В продуктах сгорания топлив типа C-H-O-N-Cl-Al учитывается 19 обменных процессов среди 7-и колебательных мод (дополнительно  $HCl(v)$ ).

Гомогенная конденсация. В продуктах сгорания наиболее активной конденсирующейся компонентой является  $H_2O$  (пары воды). Моделирование неравновесной конденсации проводится в гомогенном приближении с использованием классической модели, описываемой в терминах моментного метода.

Турбулентное перемешивание. При моделировании турбулентных течений используются осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса, гипотеза Буссинеска (определяет форму тензора турбулентных напряжений) и две альтернативные версии  $k-\varepsilon$  модели турбулентности: модель Молчанова (1990) и модель Саркара (1991).

Многофазность. Моделирование многофазных течений проводится в рамках полидисперсной, многотемпературной и многоскоростной модели в предположении, что частицы  $Al_2O_3$  являются сферическими, химически инертными по отношению к газовой фазе и не взаимодействующими друг с другом. Процесс охлаждения (нагрева) частиц может сопровождаться неравновесной кристаллизацией (равновесным плавлением) с высвобождением (поглощением) энергии. Учитывается, что в процессе кристаллизации частица образуется в метастабильной  $\gamma$ -фазе, но в последующем она релаксирует в стабильную  $\alpha$ -фазу.

В разделе 2.3 описываются особенности применения численных методов в комплексе программ NARJ. Поскольку основным методом расчета струй является маршевый метод на базе схемы ГКР, данный раздел начинается с вывода параболизированной формы правых частей уравнений Навье-Стокса. Затем делается дополнительная корректировка уравнений, позволяющая использовать маршевый метод и при расчете дозвуковых областей (подавление акустических волн во внешнем дозвуковом потоке). Наконец, маршевый метод распространяется на случай расчета дозвукового течения за диском Маха (здесь используется метод глобальных итераций). Отдельное внимание уделяется вопросу инициирования турбулентности в слоях смешения, образующихся за кромкой сопла и за тройной точкой диска Маха.

После проведения всех усовершенствований проводится детальное тестирование маршевого метода расчета струй. Так, на рисунке 4 показаны результаты расчета струи маршевым методом в тестовом случае с  $H = 0$  (высота полета). Приведены расчетная сетка и поля температуры, числа Маха (звуковые линии выделены штрихами) и кинетической энергии турбулентности. На рисунке 5 приведено сравнение результатов расчета этой тестовой задачи, полученных маршевым методом (базовый метод в комплексе программ NARJ) и методом установления по времени. Расчет методом установления выполнялся в рамках параболизированных уравнений Навье-Стокса без дополнительных корректировок уравнений в дозвуковых областях, но с применением процедуры инициирования слоев смешения (как и в маршевом методе). Сравнение данных, полученных двумя методами, говорит об их хорошем согласии, которое можно считать приемлемым для многих практических приложений.

Раздел 2.3 завершается подробным описанием методики расчета частиц.

Рисунок 4. Данные тестового расчета струи при  $H = 0$ : маршевый метод расчета.

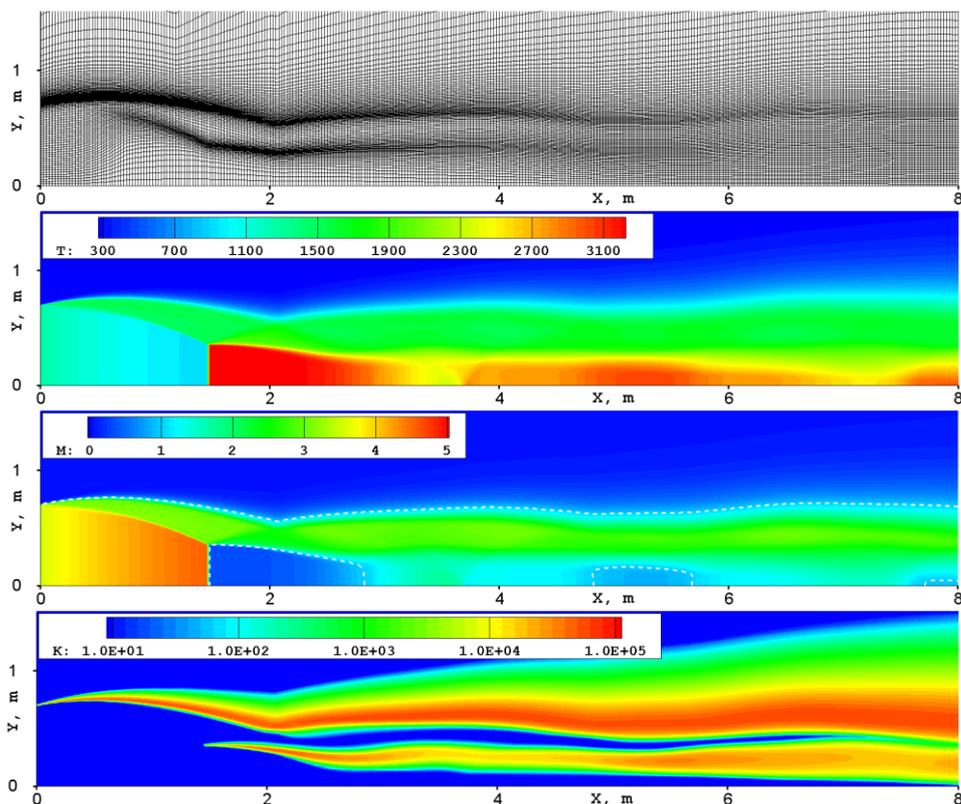
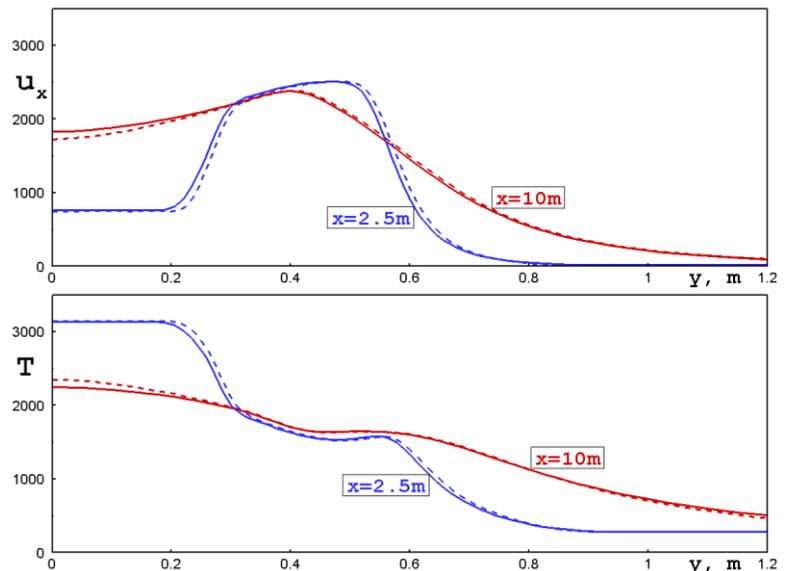


Рисунок 5. Распределения скорости и температуры в двух поперечных сечениях струи в тестовом случае с  $H = 0$ : сплошные линии – маршевый метод расчета, штриховые линии – метод установления по времени.



В разделе 2.4 приводятся примеры использования комплекса программ NARJ для моделирования течений продуктов сгорания ракетных топлив в соплах и струях. Выборочные данные расчетов показаны на рисунках 6 – 10.

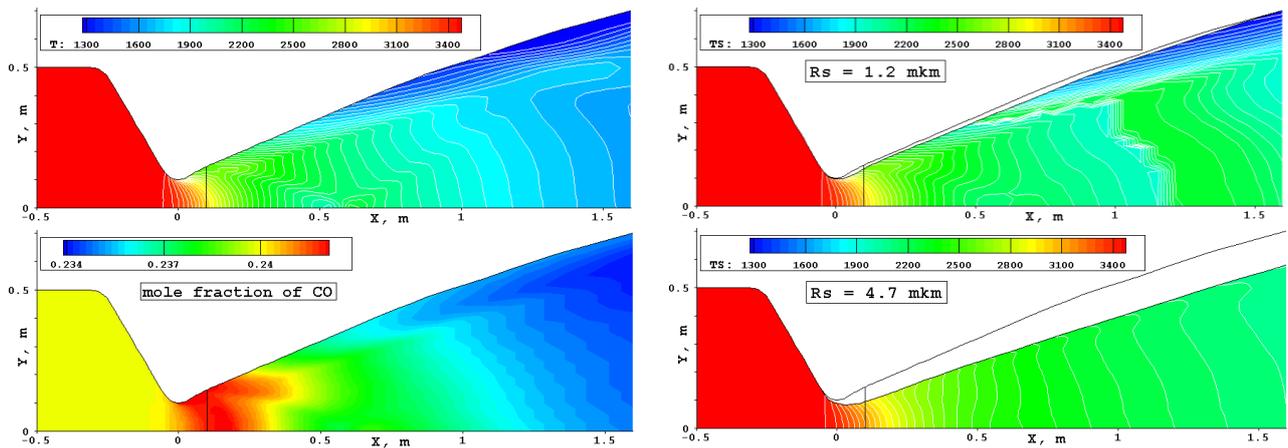


Рисунок 6. Течение продуктов сгорания в сопле типового РДТТ: поля температуры газа, мольной доли CO, температур двух фракций частиц (самых мелких с радиусом  $r_s = 1.2$  мкм и самых крупных с  $r_s = 4.7$  мкм).

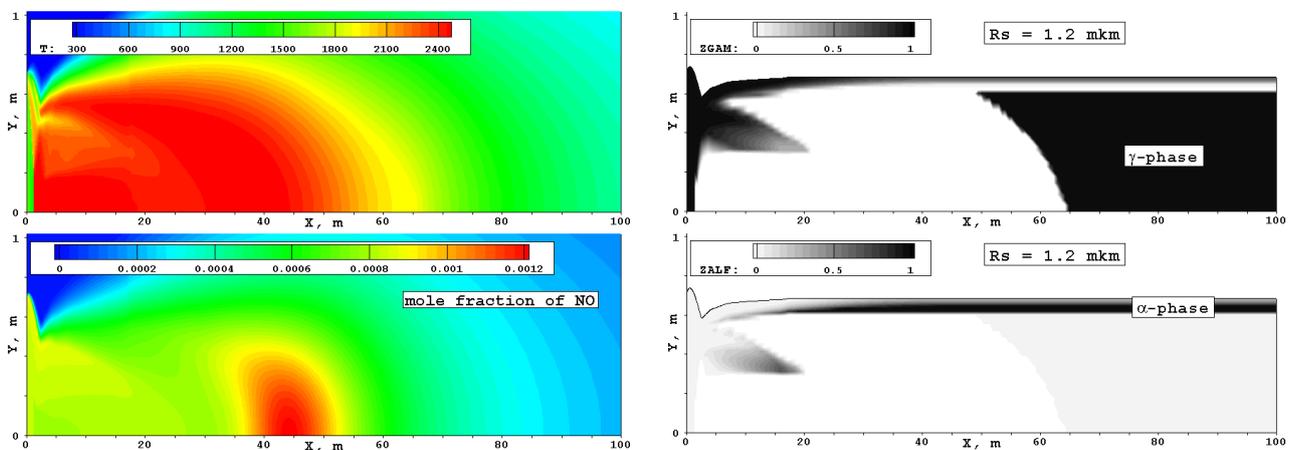


Рисунок 7. Течение в струе на высоте  $H = 10$  км: поля температуры газа, мольной доли OH, массовые доли  $\gamma$ - и  $\alpha$ -фаз в частицах с  $r_s = 1.2$  мкм.

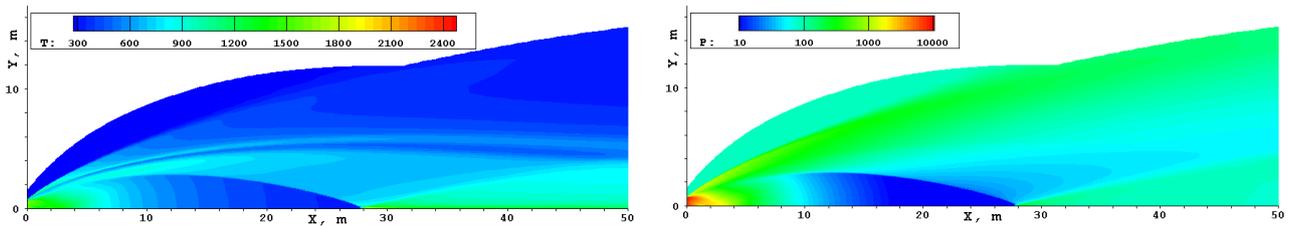


Рисунок 8. Течение в струе на высоте  $H = 50$  км: поля температуры и давления (в Па) газовой составляющей.

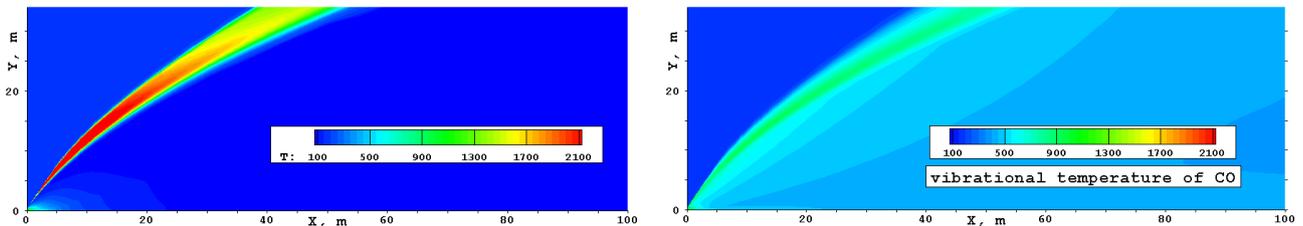


Рисунок 9. Течение в струе на высоте  $H = 100$  км: поля температур поступательно-вращательных степеней свободы и колебательной моды CO.

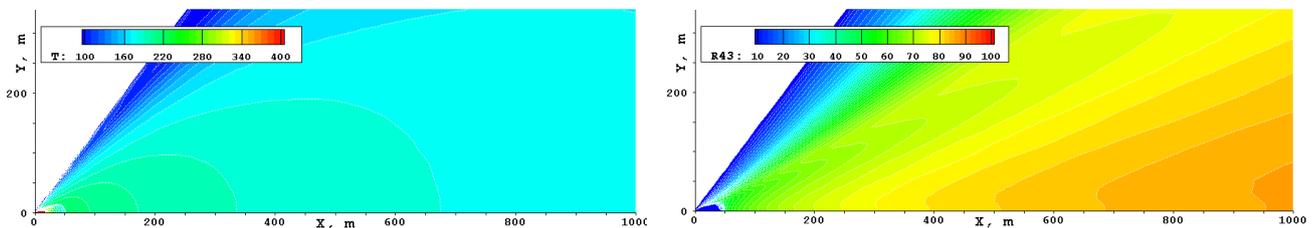


Рисунок 10. Истечение в вакуум: поля температуры газа и среднемассового радиуса капель  $H_2O$  (в Å).

Раздел 2.4 завершается описанием примеров применения комплекса программ NARJ в решении практических задач. Обсуждаются работы по: (1) решению проблем экологии, (2) сравнению расчетных и экспериментальных данных по излучению выхлопов типовых ЖРД и РДТТ, (3) сопровождению экспериментальных исследований на борту Международной космической станции (МКС).

В разделе 2.5 обсуждается одна из проблем моделирования турбулентных сверхзвуковых струй в рамках осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS). Обнаружено, что в случае расчета неизобарических струй, использование метода установления (TA = time-asymptotic) и полных уравнений Навье-Стокса (FNS = full Navier-Stokes equations) приводит не к улучшению, а к заметному ухудшению согласия с экспериментальными данными по сравнению с использованием маршевого метода (SM = space-marching technique) и параболизированных уравнений Навье-Стокса (PNS = parabolized Navier-Stokes equations).

Так, на рисунке 11 показано сравнение расчетов с эксперимен-

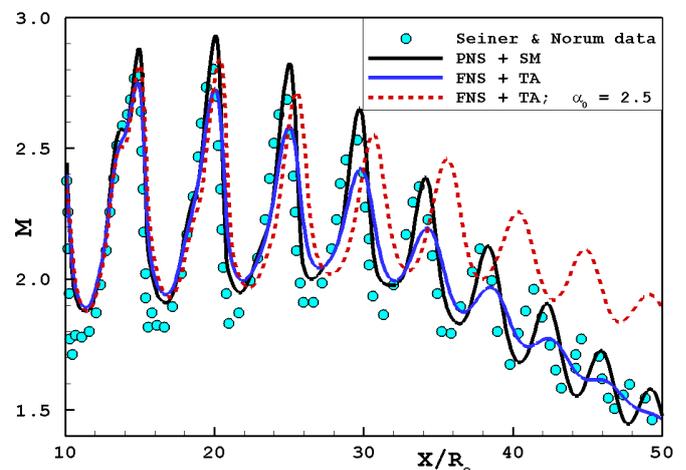


Рисунок 11. Осевое распределение числа Маха.

тальными данными (Сейнер и Норум, 1979) по распределению числа Маха вдоль оси «холодной» сверхзвуковой струи. Видно, что методика FNS+ TA не адекватно описывает процесс затухания волновой структуры струи, тогда как методика PNS+SM обеспечивает хорошее согласие с экспериментом. Если модель турбулентности Саркара (она использовалась в расчетах) подправить так, чтобы обеспечить лучшее согласие по амплитуде колебаний (штриховая линия), то образуется сильное расхождение с экспериментом по спаду числа Маха в дальнем поле струи. Аналогичные результаты получены и при использовании других моделей турбулентности, таких как модель Прандтля.

На рисунке 12 показано сравнение расчетных и экспериментальных данных (Сафронов и Хотулев, 2008) по распределению давления торможения вдоль оси «горячей» сверхзвуковой струи. Здесь также хорошо видно, что результаты, полученные по методике PNS+SM, заметно лучше согласуются с экспериментальными данными, чем результаты, полученные по методике FNS+TA. В результате детального анализа было установлено, что проблема заключается в гипотезе Бусинеска, широко используемой при моделировании различных турбулентных течений в рамках RANS: она неверно описывает процесс затухания волновой структуры струи. В то же время упрощения, связанные с параболизацией уравнений, в значительной степени компенсируют этот ее недостаток.

Дальнейшее углубление в проблему позволило прояснить природу расхождения между двумя расчетами и объяснить, почему именно параболизированные уравнения лучше описывают взаимодействие ударных волн со слоем смешения в турбулентной неизобарической струе. В результате удалось выработать и обосновать новую, альтернативную форму для тензора турбулентных напряжений, обладающую определенными преимуществами перед гипотезой Бусинеска. Она базируется на использовании тензора завихренности ( $\Omega$ ) вместо тензора скоростей деформации ( $S$ ).

Оказалось, что использование альтернативной формы в других аэродинамических задачах (моделирование до- и сверхзвукового обтекания тел) позволяет естественным образом решить одну из проблем, характерную для задач данного класса. Так, на рисунке 13 показаны примеры расчета обтекания затупленного тела с использованием  $k$ - $\varepsilon$  модели турбулентности при уровне турбуликации набегающего потока  $T_u \sim 0.5\%$ . На рисунке слева ( $M_\infty = 0.2$ ) у точки торможения происходит рост интенсивности турбулентности почти на два порядка. На правом рисунке ( $M_\infty = 1.35$ ) интенсивность турбулентности возрастает не только в окрестности точки торможения, но и на фронте головной ударной волны (до  $T_u \sim 3\%$ ). Переход на альтернативную форму для тензора турбулентных напряжений

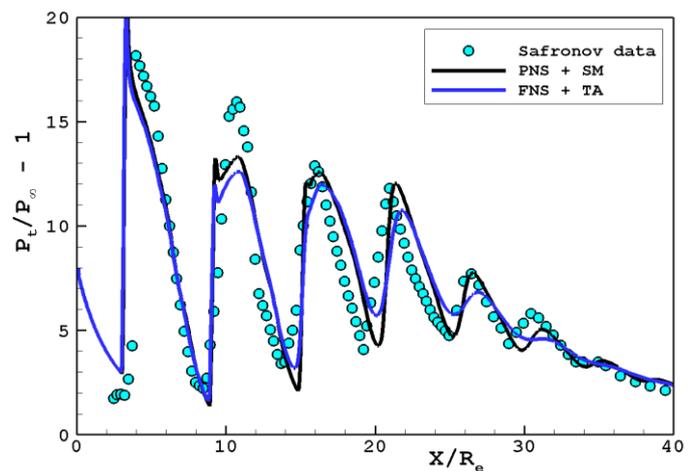


Рисунок 12. Осевое распределение давления торможения.

(вместо использования гипотезы Буссинеска) позволяет естественным образом избавиться от проблемы паразитного нарастания турбулентности перед обтекаемым телом (данные не приводятся ввиду их малой информативности).

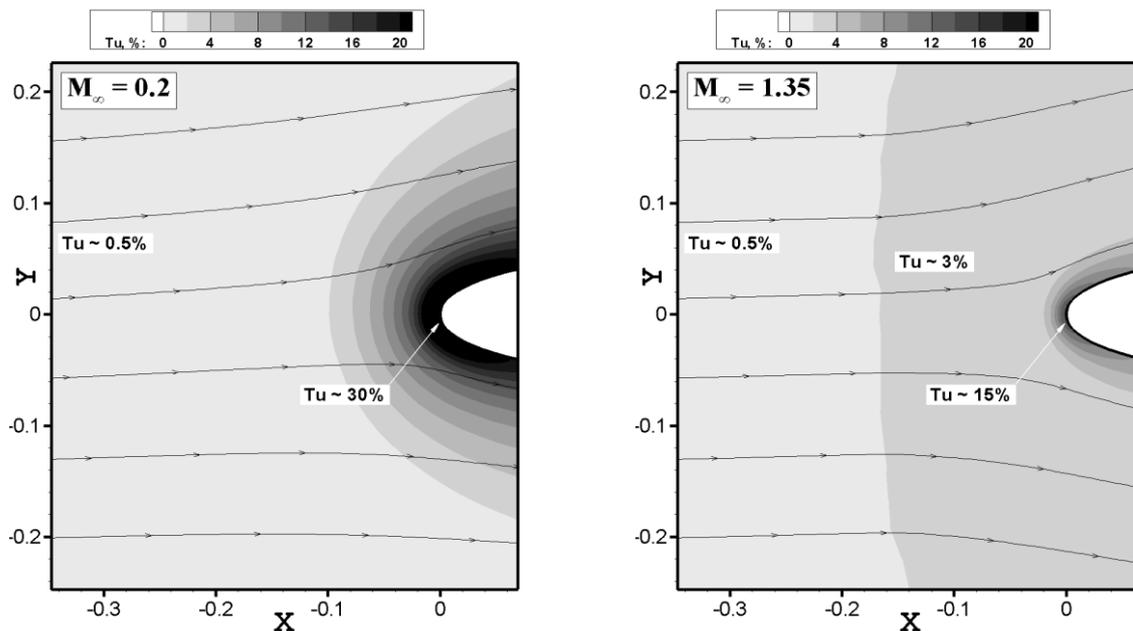


Рисунок 13. Поля интенсивности турбулентности при расчете дозвукового (слева) и сверхзвукового (справа) обтекания затупленного тела.

В главе 3 приводится описание научно-исследовательских работ по численному моделированию атмосферы комет с использованием схемы ГКР.

В разделе 3.1 дается вводная информация об объекте моделирования – атмосфере комет (ее также называют комой), которая представляет собой истекающие с поверхности ядра газопылевые струи, неограниченно растекающиеся в космическом пространстве. Предметом настоящих исследований является внутренняя кома (от поверхности ядра до  $1 \div 100$  тыс. км), где в разгоняющемся от транс- до гиперзвуковых скоростей потоке превалируют такие физико-химические процессы, как взаимодействие газа с частицами пыли и фотодиссоциация. Поскольку ядра комет и внутренняя кома недоступны телескопическим наблюдениям, получение достоверной информации о них стало возможным только в результате исследовательских миссий с помощью космических аппаратов. Наиболее детальное исследование кометы было проведено в рамках космической миссии Розетта (Rosetta mission), успешно реализованной Европейским космическим агентством (ESA) в период с 2004 по 2016 год.

Главной целью данного цикла исследований (выполненного совместно с Ж.Ф. Крифо и В.В. Захаровым) было участие в активной фазе миссии Розетта и проведение работ по моделированию атмосферы реальной кометы.

Раздел 3.2 посвящен начальному этапу работ – моделированию трехмерной газопылевой комы в постановке Китамуры (1990). В этой задаче рассматривается стационарное истечение с поверхности сферической кометы газопылевых струй, образованных сублимацией запыленного льда. Область расчета и сетка изображены на рисунке 14. Истечение происходит не со всей поверхности ядра, а только с двух активных пятен (красные линии). Параметры истечения: газ с

температурой  $T = 200$  К и плотностью  $\rho = 1.8 \times 10^{-6}$  кг/м<sup>3</sup> (числовая плотность  $n \approx 6 \times 10^{13}$  см<sup>-3</sup>); частицы пыли радиуса  $r_s = 0.1$  мкм с температурой  $T_s = 348$  К и скоростью  $u_s \ll u$  при отношении массовых расходов частиц пыли к газу  $\chi = 0.2$ ; скорость истекающего газа определяется по специальным соотношениям (Китamura, 1986). Для моделирования движения пыли в задаче Китамуры используется приближение сплошного облака частиц (оно предполагает допустимость процедуры осреднения параметров частиц по элементарному объему), описываемого системой уравнений типа уравнений Эйлера, но при отсутствии давления. Взаимодействие газа с частицами происходит в свободномолекулярном режиме и описывается классическими выражениями (Probstein, 1969).

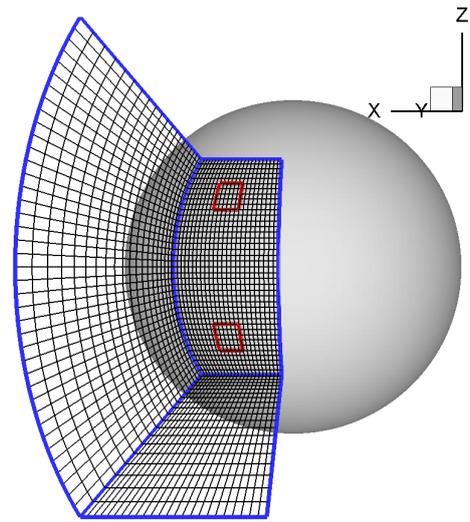


Рисунок 14.

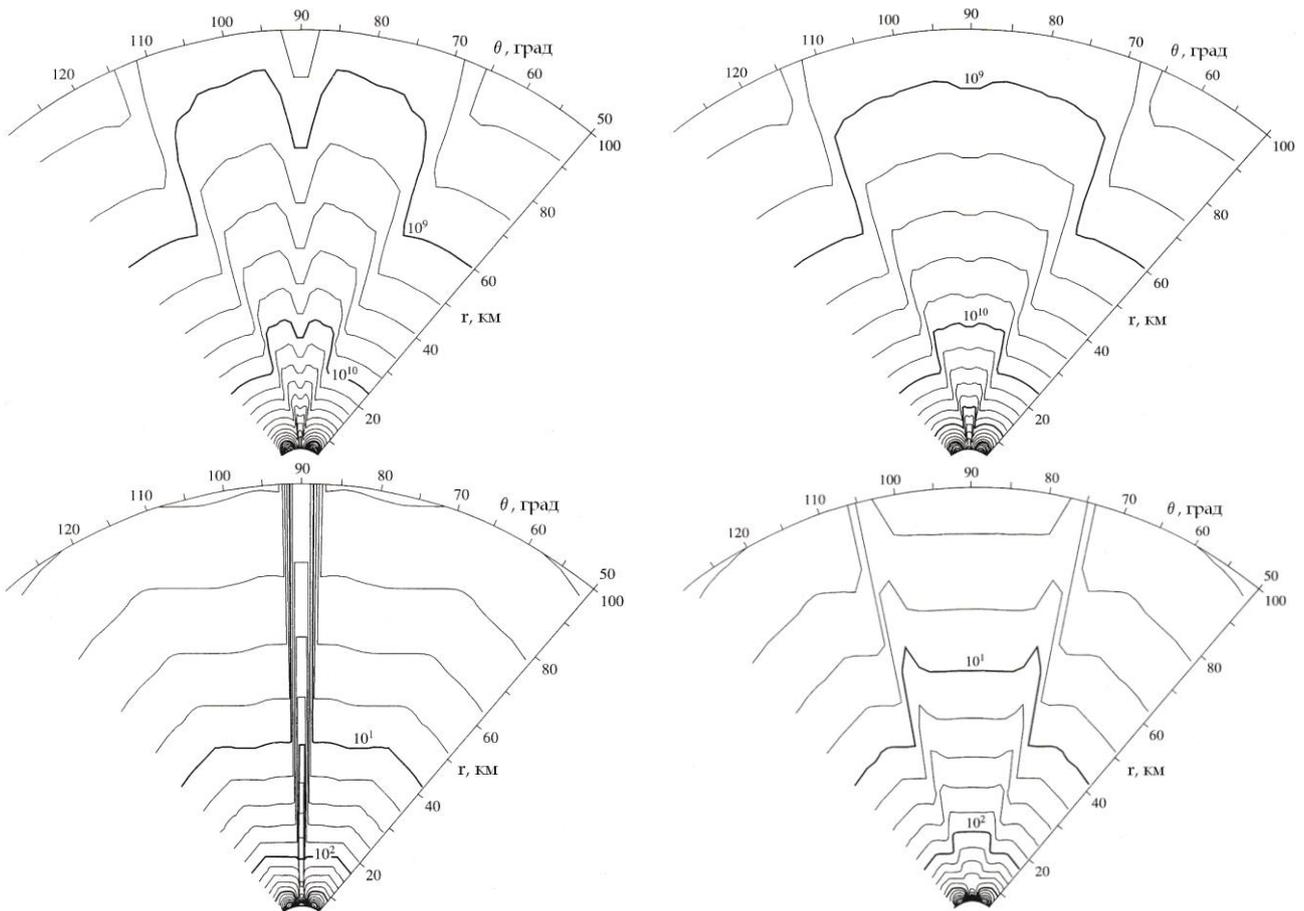


Рисунок 15. Изолинии числовой плотности газа (сверху) и пыли (снизу): однофракционная (слева) и двухфракционная (справа) модели облака частиц.

Для моделирования течения газа и облака пыли использовалась схема ГКР, адаптированная к данной задаче. Результаты расчета в плоскости, проходящей через центры активных пятен, показаны на рисунке 15 (левый ряд). Можно видеть, что в задаче Китамуры использование однофракционного приближения для облака пыли физически некорректно: вследствие осреднения параметров ча-

стиц по ячейкам происходит их скопление в плоскости между активными пятнами. Для устранения этой проблемы была предложена многофракционная модель, в которой используется несколько фракций частиц (в данной задаче – два пылевых облака), каждая из которых содержит частицы, истекающие только из одного активного пятна. Результаты расчета задачи в таком приближении показаны в правом ряду рисунка 15 (по пыли приводится суммарная плотность обеих фракций). Сравнение расчетов в двух приближениях наглядно демонстрирует неприменимость однофракционной модели Китамуры в задачах такого класса.

В разделе 3.3 описан цикл работ по эволюции модели комы и программ для ее расчета.

Модели поверхности ядра кометы. При моделировании атмосферы кометы условия на внутренней границе расчетной области являются определяющими: здесь необходимо задать форму поверхности кометы и определить параметры истекающего газопылевого потока в каждой расчетной точке. Первая физически реалистичная модель сублимации льда с поверхности кометы была предложена Крифо в (Crifo, Rodionov, 1997), где она использовалась в расчетах атмосферы кометы Виртанена (предполагаемый на тот момент объект исследования миссии Розетта). Модель сублимации льда (модель I) базируется на предположениях: (1) поверхность кометы состоит из активных участков, где под действием солнечного теплового потока происходит сублимация грязного льда и неактивных участков, где сублимирующий лед отсутствует (окаменевшие участки); (2) для каждого элемента поверхности кометы считаются известными доля активных участков и солнечный тепловой поток; (3) энергия солнечного теплового потока расходуется на тепловое излучение и сублимацию молекул  $H_2O$ ; (4) молекулы воды, вылетающие с активного участка поверхности кометы, имеют полумаксвелловское распределение по скоростям; (5) между поверхностью кометы и внутренней границей расчетной области существует тонкий кнудсеновский слой, где распределение по скоростям релаксирует к равновесному максвелловскому (приближение тонкого локально-плоского кнудсеновского слоя). При сделанных предположениях уравнение баланса энергии дополняется аналитическими выражениями для плоского кнудсеновского слоя (Черчиньяни, 1981).

Позднее была разработана модель II, описывающая истечение молекул CO с поверхности кометы (Crifo, Rodionov et al., 1999). Рассматривался случай большого удаления кометы от Солнца, когда молекулы CO доминируют в истекающем потоке. Поскольку температура сублимации CO значительно ниже, чем у  $H_2O$ , то он диффундирует из глубины кометы через поры на ее поверхности. Предполагается, что на некоторой глубине температура остается достаточно высокой даже на ночной стороне кометы, поэтому комета «газит» со всех элементов своей поверхности. Модель II включает в себя несколько свободных параметров.

Обе модели прошли тестирование и настройку, после чего были использованы в серии параметрических исследований. Варьировалась форма поверхности кометы и ее размер (рассматривались аналитически заданные поверхности, а также поверхность кометы Галлея, восстановленная по измерениям 1986 года). Варьировалось расстояние до Солнца и относительная ориентация кометы. При этом учитывалась возможность затенения одной части поверхности кометы дру-

гой ее частью (тень от «холма» или тень внутри «впадины»). Варьировалась активность поверхности комет (рассматривались пятна активности, заданные аналитически на сферической и несферической поверхностях). Варьировались также параметры частиц пыли (размер, плотность материала и распределение продуктивности  $\chi$ ). Отдельно исследовалась возможность конденсации паров воды на ночной стороне поверхности кометы. В качестве примера ниже приведены результаты расчетов для случаев сублимации грязного льда (рисунок 16) и диффузии CO (рисунок 17) с поверхности кометы типа «bean».

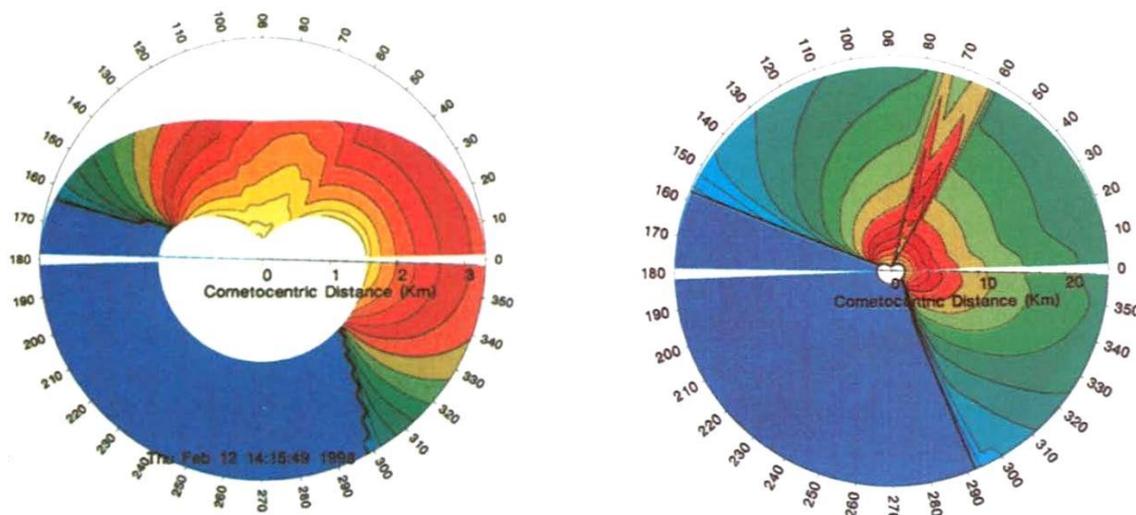


Рисунок 16. Поля числовых плотностей молекул  $H_2O$  (слева) и частиц пыли (справа) в плоскости  $y = 0$  (Crifo, Rodionov, 1999).

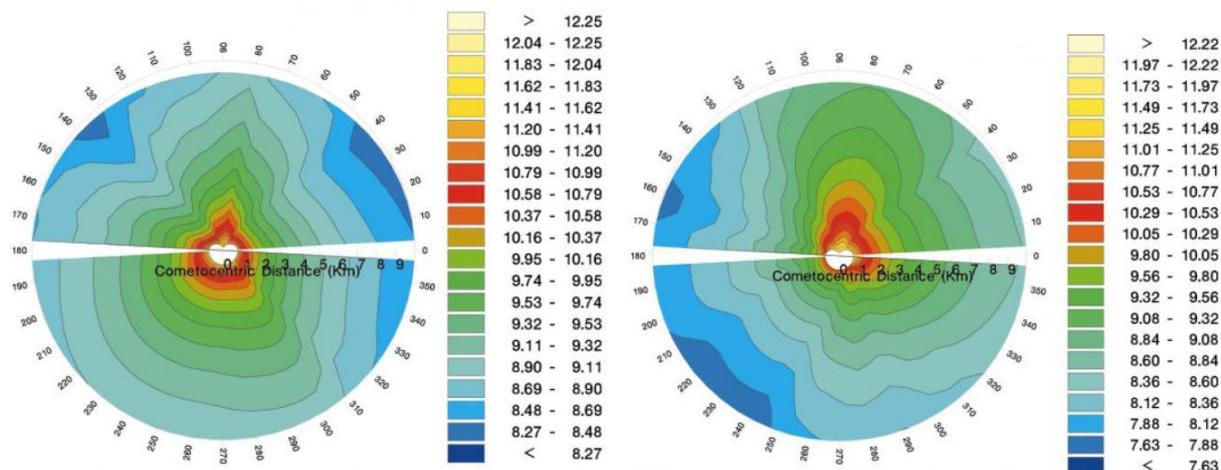


Рисунок 17. Поля числовых плотностей молекул CO для случаев изотропной (слева) и анизотропной (справа) диффузии (Crifo, Rodionov et al., 1999).

В 2004 году была разработана модель, учитывающая одновременное истечение паров  $H_2O$  (сублимация) и молекул CO (диффузия). Эта модель представляла собой суперпозицию моделей I и II. Начиная с 2012 года, в нее была добавлена диффузия молекул  $CO_2$  (аналогично CO, но со своими параметрами модели).

Моделирование неравновесной нестационарной комы. Проводились численные исследования неравновесной нестационарной комы на больших удалениях от ядра кометы. Цель работы заключалась в попытке объяснить природу слабых спиралевидных структур, обнаруженных при дистанционном наблюдении некоторых комет. На расстояниях до 100 тыс. км адекватное моде-

лирование невозможно без учета процессов фотодиссоциации в коме и ее нестационарности. Кроме того, специфика решаемой задачи диктовала необходимость применения многоблочных расчетных сеток.

При моделировании комы учитывались два процесса распада молекул под действием солнечного света (фотодиссоциация):  $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}$  и  $\text{OH} \rightarrow \text{O} + \text{H}$ . Для экономии вычислительных ресурсов и повышения точности счета решение такой задачи разделялось на (1) множественные расчеты квазистационарной комы от поверхности до 100 км (каждые  $5^\circ$  полного оборота вокруг оси вращения) и (2) расчет нестационарной комы от 100 км до 100 тыс. км. В качестве примера на рисунке 18 приведены некоторые результаты расчета нестационарной комы.

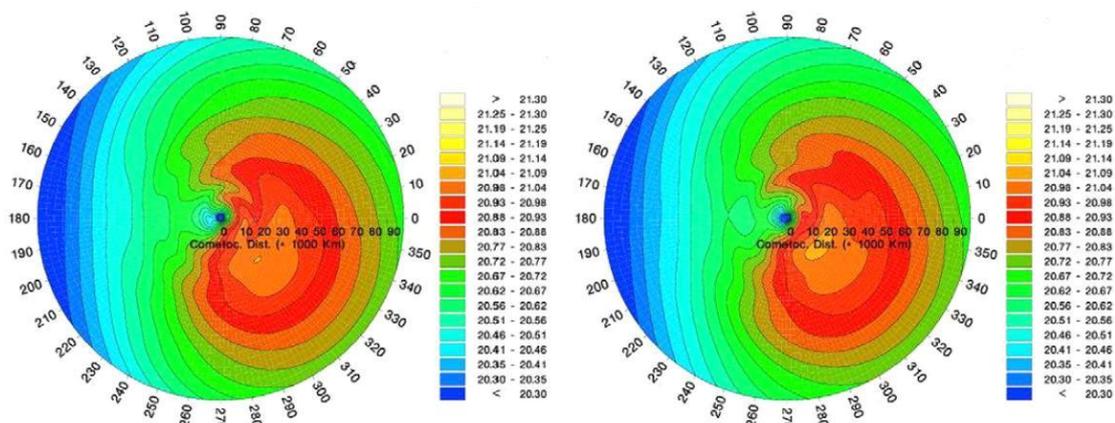


Рисунок 17. Поля интегральных числовых концентраций молекулы OH в дальней части комы с интервалом 3.8 часа (Rodionov, Crifo, 2006).

Расчеты в рамках уравнений Навье–Стокса. В цикле проводимых исследований в большинстве случаев расчеты комы осуществлялись в рамках уравнений Эйлера, однако специфика ряда задач диктовала необходимость применения вязкого приближения. Расчеты комы в рамках уравнений Навье–Стокса проводились в тех случаях, когда зоны существенных градиентов параметров (слабые ударные волны) приходились на разреженный поток. Такие ситуации возникали при расчете комы двойной кометы Хякутакэ (основное ядро и крупный осколок на удалении  $\sim 1000$  км) и при моделировании атмосферы на «ночной» стороне кометы с моделью I (сублимация  $\text{H}_2\text{O}$  с освещенной части поверхности). Было установлено, в частности, что уравнения Эйлера применимы приблизительно до *локальных* чисел Кнудсена,  $\text{Kn} = 0.1$ , тогда как в диапазоне  $0.1 < \text{Kn} < 1$  реализуется переходный режим и применимы уравнения Навье–Стокса.

Сравнение с расчетами методом Монте–Карло. Начиная с 2000 года, к данному циклу работ присоединились Г.А. Лукьянов и В.В. Захаров, дополнившие проводимые исследования комы (как ее газовой, так и пылевой составляющих) расчетами методом Монте–Карло (DSMC). Хотя применение метода DSMC требует существенно больших вычислительных ресурсов, его использование позволяет: (а) для конкретных приложений определять границу применимости приближения механики сплошной среды, и (б) получать физически корректные решения задачи в тех случаях, когда приближение сплошной среды оказывается неприменимо. Заметим, что при моделировании комы существует большая неопределенность в поверхностной модели, поэтому различие  $\sim 10\%$

между данными CFD и DSMC не является критичным.

В большой серии исследований проводилось сопоставление расчетных данных, полученных методами CFD и DSMC. Варьировались форма и активность поверхности кометы, ее размер и расстояние до Солнца. Также менялись модели поверхности и параметры частиц пыли. По результатам проведенного анализа, в частности, были сделаны следующие выводы: (1) хорошее согласие между данными CFD и DSMC наблюдается над всей дневной стороной поверхности и в той части ночной стороны, где  $Kn < 0.1$ ; (2) в тех случаях, когда на всей ночной поверхности реализуется сублимация  $H_2O$  и/или диффузия  $CO$ , согласие оказывается удовлетворительным и в областях с  $Kn > 0.1$ ; (3) в случае, когда на части ночной поверхности реализуется конденсация  $H_2O$ , расхождение между данными CFD и DSMC может оказаться слишком большим (приближение сплошной среды не работает); (4) на периферии комы может наблюдаться существенная неравновесность по вращательным и поступательным степеням свободы молекул; (5) многофракционное приближение, как правило, обеспечивает высокую точность расчета параметров пылевого потока при условии, однако, что подобрано подходящее разбиение на фракции. На рисунке 18 приведены два примера сопоставления методик (сверху – по газу, снизу – по пыли).

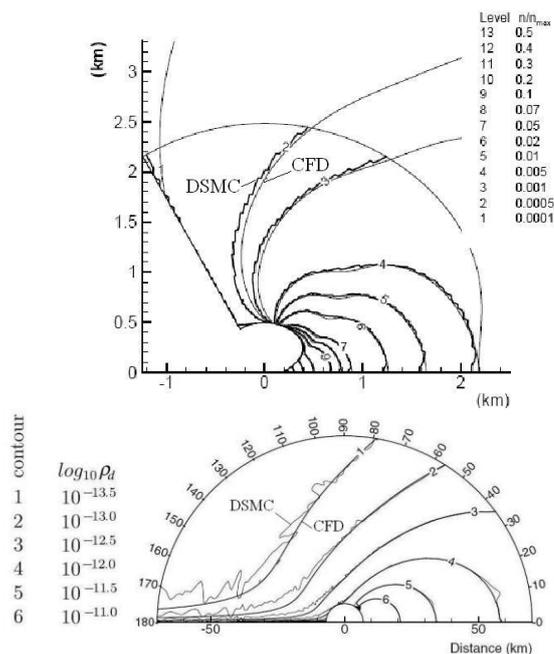


Рисунок 18. Сравнение данных CFD и DSMC.

В разделе 3.4 описаны работы в рамках космической миссии Розетта.

Начальная фаза проекта Розетта. Параллельно с работами по развитию модели внутренней комы и совершенствованию методов для ее моделирования проводились систематические расчеты в рамках проекта Розетта. В условиях полной неопределенности по форме и свойствам поверхности кометы 67P/Чурюмова-Герасименко, расчеты комы первоначально выполнялись при упрощающих предположениях. В 2003 и 2007 годах были опубликованы первые приближения для формы кометы (рисунок 19), полученные из обработки наблюдений с астрономической обсерватории Хабл. Они стали использоваться в последующих расчетах. В статье (Della Corte et al., 2014) данные моделирования комы использовались для оценки способности прибора GIADA, расположенного на борту Розетты, осуществлять измерения параметров частиц во время запланированного сопровождения кометы.

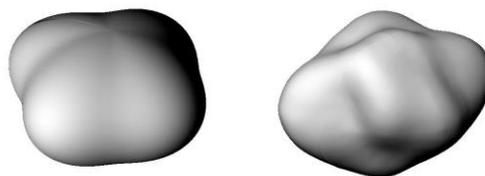


Рисунок 19. Приближения поверхности кометы 67P: (Lamy et al., 2003) и (Lamy et al., 2007).

В результате работы, проделанной по проекту Розетта до начальной фазы

изучения кометы Чурюмова-Герасименко, была отработана расчетная модель и сформирован комплекс программ, получивший название RZC (по начальным буквам фамилий авторов – Rodionov, Zakharov, Crifo) и состоящий из: (1) CFD кодов для расчета параметров газовой составляющей комы и облака частиц в газодинамическом приближении; (2) DSMC кодов для моделирования движения частиц газа и пыли в разреженной коме методом Монте-Карло; (3) модели производства газопылевого потока с поверхности кометы.

Активная фаза проекта Розетта. В августе 2014 года началась активная фаза изучения кометы 67P. В результате картографии поверхности были получены данные о форме кометы, которые стали использоваться при моделировании реалистичной комы с помощью комплекса программ RZC (см. рисунок 20). Первые расчеты реалистичной комы проводились в рамках работы по выбору места посадки спускаемого модуля Филы. Проблема выбора места посадки представляла собой комплексную задачу, включающую в себя оценку силового воздействия атмосферы на спускаемый аппарат. Место посадки должно было удовлетворять ряду требований, как по ландшафту поверхности, так и по степени ее освещенности. Выбранный в результате всестороннего анализа сценарий посадки оказался верным: 12 ноября 2014 года, спустя 7 часов после отделения от аппарата Розетта, модуль Филы достиг поверхности кометы в заданном районе, в 120 метрах от номинальной точки посадки. На рисунке 21 приведены некоторые расчетные данные, полученные в рамках этой работы.

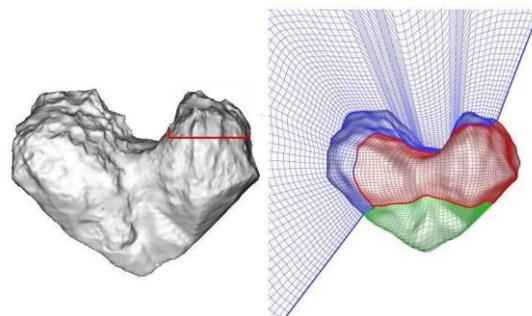
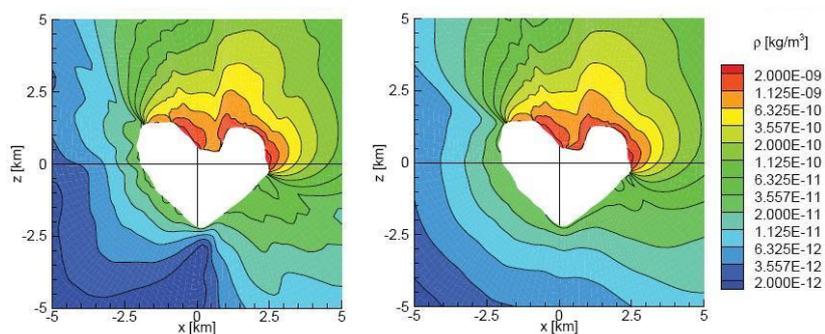


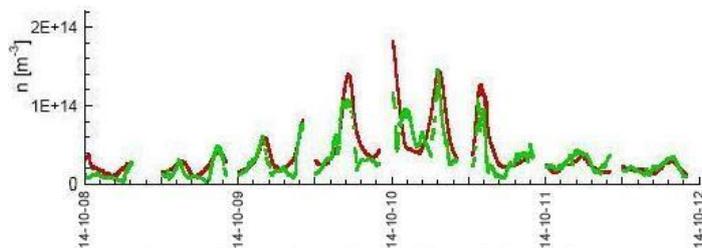
Рисунок 20. Форма поверхности кометы 67P и расчетная сетка.

Рисунок 21. Поля плотности газовой смеси: слева – уравнения Эйлера, справа – ур-я Навье-Стокса (Crifo et al., 2016).



Еще одно направление работ с использованием комплекса программ RZC заключалось в интерпретации данных, полученных прибором ROSINA, с целью создания карты активности по газу для поверхности кометы (карта свойств поверхности). Алгоритм этой сложной работы подробно описан в (Zakharov et al., 2018). Полученная карта активности была использована для финального моделирования эволюции атмосферы кометы в заданные периоды времени и сравнения расчетных данных с данными измерений атмосферы в точках траектории аппарата Розетта. На рисунке 22 показаны результаты такого сравнения для кодов CFD и периода с 8 по 12 октября; они подтверждают адекватность построенной модели и используемых расчетных методов.

Рисунок 22. Числовая плотность газа в точках траектории аппарата Розетта: зеленые точки – расчетные данные, красные точки – данные измерений. (Zakharov et al., 2018).

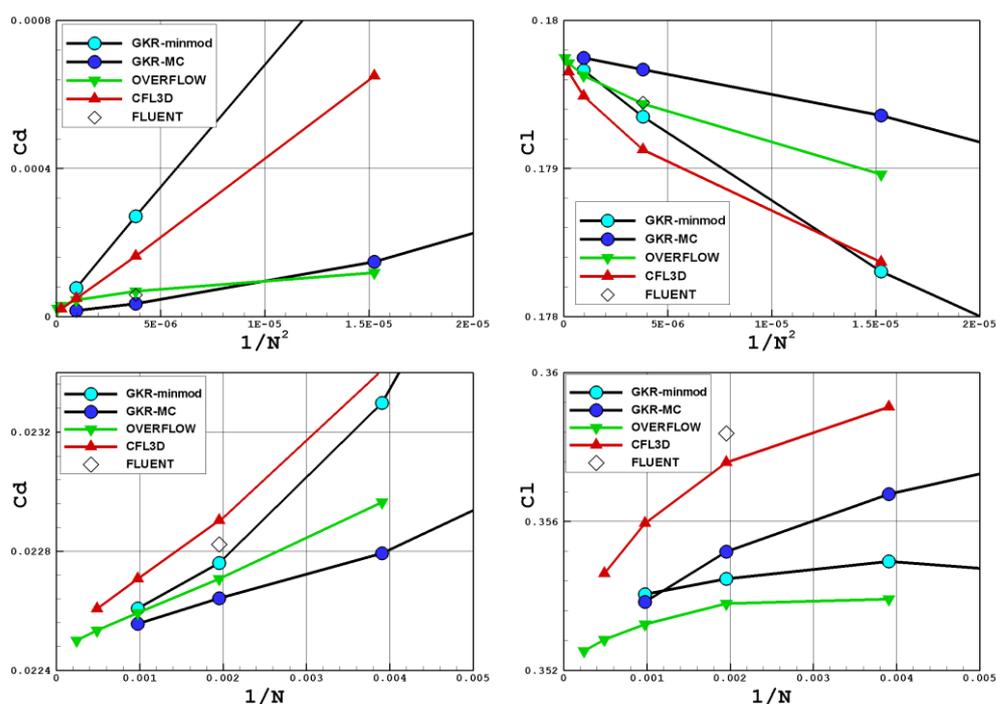


Глава 4 посвящена оценке эффективности схемы ГКР в контексте современных методов сквозного счета.

В разделе 4.1 представлено несколько примеров сравнения схемы ГКР с известными коммерческими и промышленными кодами.

Первый пример относится к расчету обтекания профиля NASA0012 в рамках уравнений Эйлера на структурированной сетке O-типа с разрешением  $N \times N$ . Рассматривались два тестовых случая: дозвуковой режим обтекания с числом Маха набегающего потока  $M = 0.5$  и трансзвуковой режим обтекания с  $M = 0.8$  (в обоих случаях угол атаки  $\alpha = 1.25^\circ$ ). Тестирование проводилось на предмет сходимости рассчитанных аэродинамических характеристик (коэффициентов лобового сопротивления и подъемной силы,  $C_d$  и  $C_l$ ) при измельчении сетки.

Рисунок 23. Обтекание профиля NASA0012. Сходимость методик по сетке: верхний ряд –  $M = 0.5$ , нижний ряд –  $M = 0.8$ .



На рисунке 23 представлены результаты расчетов по схеме ГКР с реконструкциями двух видов и по CFD-кодам: OVERFLOW, CFL3D и FLUENT (расчеты по FLUENT проводились только на сетке с  $N = 512$ ). Анализируя эти данные можно отметить, что все методики показывают сходимость по сетке к одним и тем же значениям аэродинамических коэффициентов. В первом тестовом случае ( $M = 0.5$ ): схема ГКР обеспечивает сходимость с порядком близким ко второму, а коды OVERFLOW и CFL3D демонстрируют более медленную сходимость по коэффициенту  $C_l$ ; использование реконструкции MC вместо minmod в схеме ГКР дает существенное уточнение по  $C_d$  и  $C_l$ ; код FLUENT обеспечивает примерно такую же точность, как код OVERFLOW, уступая при этом схеме

ГКР-МС. Во втором тестовом случае ( $M = 0.8$ ): схема ГКР (с любой реконструкцией) заметно превосходят по точности коммерческие коды CFL3D и FLUENT; по сравнению с кодом OVERFLOW, схема ГКР-МС дает более точные значения коэффициента  $C_d$ , но немного менее точные значения коэффициента  $C_l$ , поэтому можно сказать, что по точности схема ГКР-МС и код OVERFLOW близки.

Второй пример относится к расчету обтекания профиля NACA0012 в рамках RANS с моделью турбулентности Спаларта-Аллмараса на сетке с  $N \times M = 256 \times 480$  (со сгущением ячеек у поверхности профиля) при  $M = 0.7$ ,  $\alpha = 1.49^\circ$ . Результаты, полученные по схеме ГКР-МС и по CFD-коду FLUENT, оказались очень близкими – на рисунках (здесь не приводятся) они были визуально неразличимыми. Здесь заметим, что схема ГКР – явная схема, для которой локальное число Куранта не может превышать единицу. В стационарных задачах, решаемых методом установления, она обычно требует существенно больше машинного времени, чем при использовании неявных схем с большими числами Куранта. Поэтому основной областью применения схемы ГКР являются нестационарные задачи. К такому классу задач относится следующий тестовый пример.

Расчет вихревой дорожки Кармана. Задача по моделированию обтекание цилиндра вязким газом в ламинарном режиме хорошо подходит для тестирования CFD-кодов и используемых в них методов на адекватность моделирования ими нестационарных течений. Являясь нестационарным, течение здесь строго периодически, что удобно для анализа и сопоставления методик. Кроме того, задача эта хорошо изучена – и теоретически, и экспериментально.

В данной работе приводилось сопоставление расчетов задачи по схеме ГКР с данными по тестированию CFD-кода PAV3D в процессе его развития в NASA Langley Research Center (Massey, Abdol-Hamid, 2003). Код PAV3D использует неявную схему второго порядка точности (как по пространству, так и по времени) в двух вариантах: с «*duel time stepping*» и с «*physical time stepping*». Расчеты проводились на одинаковой блочно-структурированной сетке, фрагмент которой показан на рисунке 24; там же приведены поля чисел Маха, полученные по схеме ГКР-МС для двух тестовых случаев ( $Re = 100$  и  $1000$ ).

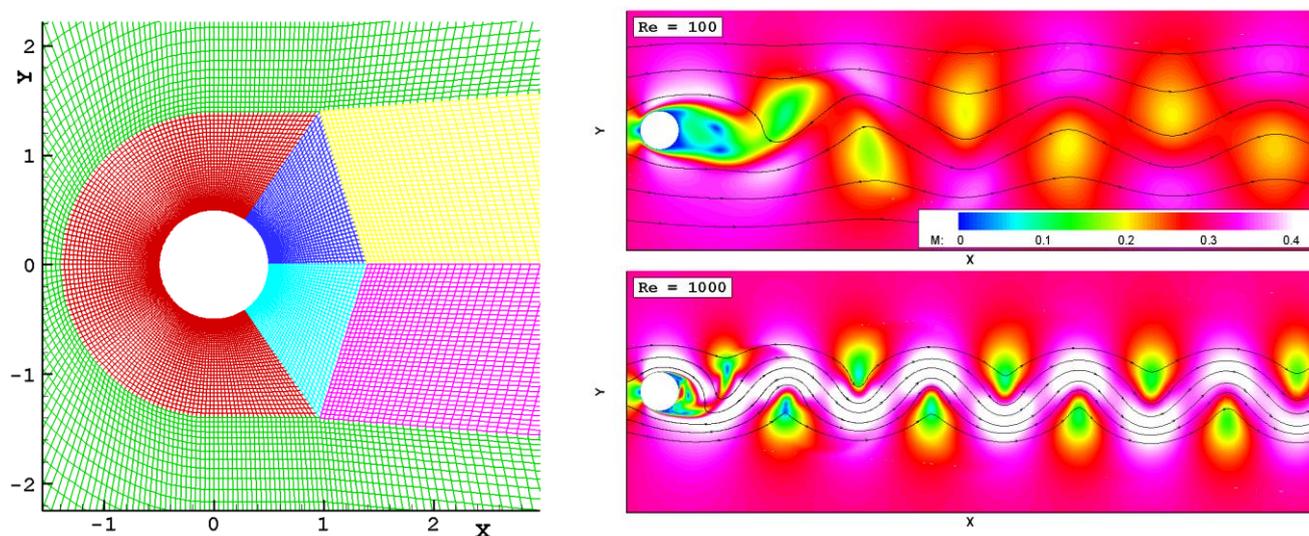


Рисунок 24. Вихревая дорожка Кармана: расчетная сетка (слева) и поля чисел Маха для случаев с  $Re = 100$  и  $1000$  (справа).

На рисунке 25 приведены зависимости числа Струхаля от числа Рейнольдса, полученные по схеме ГКР и двум вариантам кода PAB3D; они сравниваются с двумя эталонными решениями: (Henderson, 1997) и (He et al., 2000). Сравнение показывает, что: (1) данные расчетов по схеме ГКР очень хорошо согласуются с эталонными решениями; (2) данные расчетов по коду PAB3D с использованием любого из неявных алгоритмов интегрирования по времени существенно уступают в точности схеме ГКР.

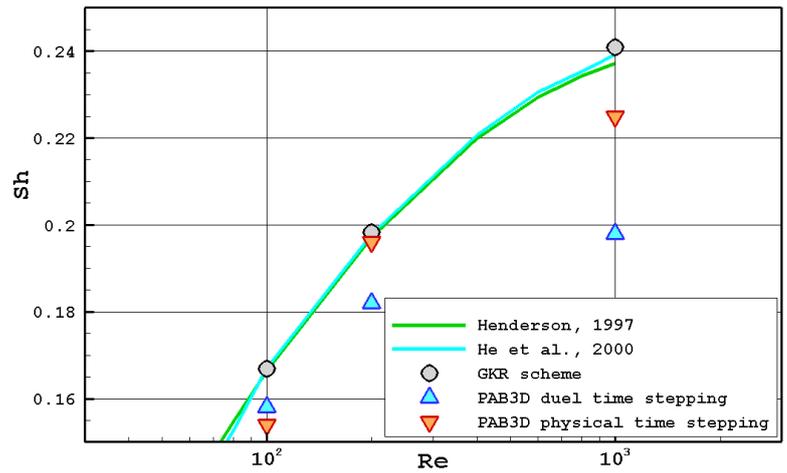


Рисунок 25. Зависимость числа Струхаля от числа Рейнольдса.

В разделе 4.2 проводится сопоставление схемы КАБАРЕ с различными вариантами схемы ГКР. Описание и анализ схем проводится на примере решения линейного уравнения переноса  $\partial u / \partial t + a \partial u / \partial x = 0$ . Выявляются общие свойства схем и показывается, что в областях гладкости решения разложение схемы ГКР-МС в ряд Тейлора с точностью до  $O(h^2)$  совпадает с разложением схемы КАБАРЕ и имеет вид:  $\partial u / \partial t + a \partial u / \partial x = Dh^2 \partial^3 u / \partial x^3 + O(h^3)$ , где  $\nu$  – число Куранта  $D = (1 - \nu)(1 - 2\nu)a / 12$ .

Для схемы КАБАРЕ предлагается новое представление, которое может рассматриваться как разновидность схемы ГКР (или схемы типа MUSCL). Для этого в схеме ГКР следует приращение функции  $\Delta u$  внутри ячейки на новом слое рассчитывать по формуле  $\Delta u_i^{n+1} = 2(u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}) - \Delta u_i^n$ , где  $u_{i+1/2}^{n+1/2}$  – «поточковые» величины, определяемые на шаге корректор из решения задачи Римана. Преимуществом нового представления схемы КАБАРЕ является то, в случае расчёта разрывных решений его дополнение одним из монотонизирующих ограничителей схем типа MUSCL позволяет расширить диапазон применимости схемы КАБАРЕ по числу Куранта с  $\nu < 1/2$  до  $\nu < 1$ .

Для схемы ГКР предлагается новая реконструкция-ограничитель NOLD (Non-Oscillatory Low-Dissipative), обладающая пониженной диссипацией при расчете разрывных решений. Она имеет вид

$$(\Delta u_i)^{\text{NOLD}} = \begin{cases} \text{median}[\Delta u_i, \Delta u_i^{\text{min2}}, \Delta u_i^{\text{max2}}], & \text{если } \Delta u_i^{\text{min2}} < \Delta u_i^{\text{max2}}; \\ \text{minmod}[\Delta u_i^{\text{min2}}, \Delta u_i^{\text{max2}}], & \text{в противном случае,} \end{cases}$$

где функция  $\text{median}(a, b, c) = a + \text{minmod}(b - a, c - a)$ , и

$$\begin{aligned} \Delta u_i^{\text{min2}} &= \max(2\Delta u_{i+1/2} - \Delta u_{i+1}^{\text{max}}, 2\Delta u_{i-1/2} - \Delta u_{i-1}^{\text{max}}), & \Delta u_i^{\text{max}} &= \max(0, \Delta u_{i-1/2}, \Delta u_{i+1/2}), \\ \Delta u_i^{\text{max2}} &= \min(2\Delta u_{i+1/2} - \Delta u_{i+1}^{\text{min}}, 2\Delta u_{i-1/2} - \Delta u_{i-1}^{\text{min}}), & \Delta u_i^{\text{min}} &= \min(0, \Delta u_{i-1/2}, \Delta u_{i+1/2}). \end{aligned}$$

В разделе 4.2 также приводятся результаты сравнительного анализа точности схемы КАБАРЕ и схемы ГКР на линейных задачах (разрывные и непрерывные профили, равномерная и неравномерная сетка), а также при расчёте сильно нелинейной задачи «blast wave» (Woodward, Colella, 1984). В последнем тестовом случае показывается (см. рисунок 26), что на грубой сетке схема КАБАРЕ показывает лучшую точность, однако по мере измельчения сетки сходимость к точному решению у нее может замедляться и даже останавливаться. Поэтому на подробной сетке лучшие результаты показывает схема ГКР.

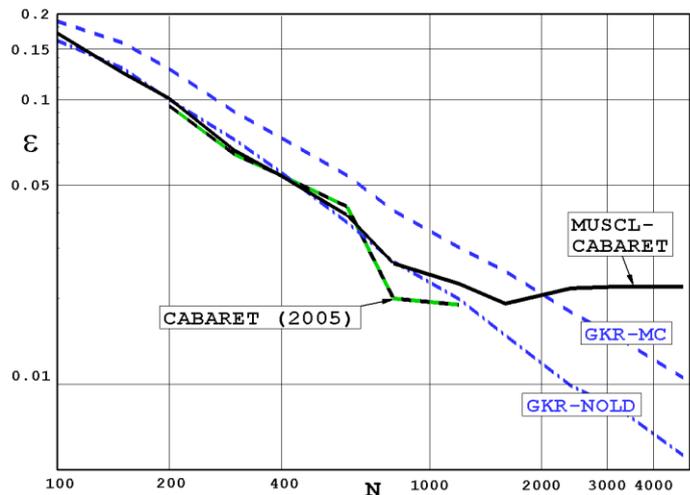


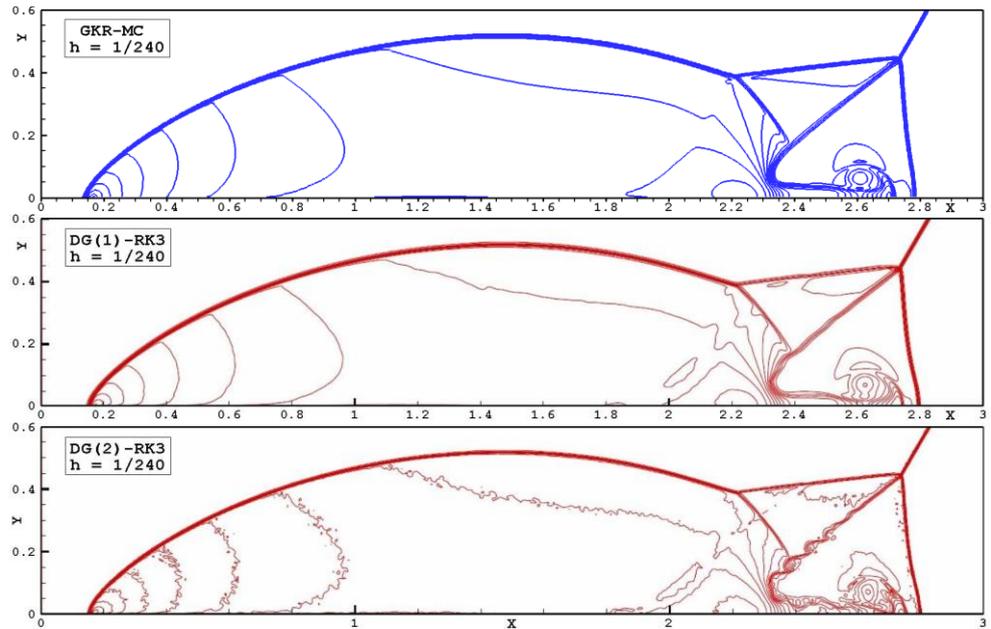
Рисунок 26. Зависимость средней относительной ошибки в плотности от количества ячеек сетки.

В разделе 4.3 дается сопоставление схем типа MUSCL (в частности, схемы ГКР) с разрывным методом Галеркина (Discontinuous Galerkin method или метод DG). Показывается, что предложенный Ван Лиром в 1977 году первый линейный прототип MUSCL-схемы (схема III) может рассматриваться как полностью дискретная форма разрывного метода Галеркина, которая обладает уникальным свойством, называемым суперсходимостью (например, при использовании базисных полиномов 1-го порядка достигается третий порядок сходимости к точному решению). Предлагается вариант обобщения этого прототипа на случай решения двумерных задач, описываемых системой нелинейных уравнений. Отмечается, что по сравнению с типичной MUSCL-схемой, полностью дискретная форма метода DG (как и другие его разновидности) обладает повышенной сложностью, что предполагает проведение вычислений в значительно больших объемах. В связи с этим ставится вопрос об оправданности таких повышенных вычислительных затрат в случае решения сложных практических задач.

Приводятся результаты сопоставления схемы ГКР с методом DG на тестовых задачах с ударными волнами. В качестве примера на рисунке 27 показаны данные расчета задачи о двойном маховском отражении, полученные по схеме ГКР-МС и по двум вариантам метода DG (с базисными полиномами 1-го и 2-го порядка) в сочетании с методом Рунге-Кутты 3-го порядка (RK3). Можно видеть, что схема ГКР-МС не уступает по точности методу DG(1)-RK3. В то же время переход на более точный вариант метода DG приводит к существенному усилению осцилляций параметров в области влияния ударных волн.

В разделе 4.4 продолжается обсуждение эффективности схем повышенного порядка аппроксимации. Для тестирования схем выбирается вариант задачи о двойном маховском отражении в вязкой постановке при  $Re = 6000$ . В этом случае исходящий из тройной точки контактный разрыв (на рисунке 27 он сворачивается в крупный вихрь) остается устойчивым, что позволяет проводить тестирование схем на предмет сходимости по сетке.

Рисунок 27. Изолинии плотности в задаче о двойном маховском отражении: схема ГКР-МС и два варианта метода DG (Zhong, Shu, 2013).



На рисунке 28 приведены данные по величине завихренности в центре такого вихря,  $\omega_0$ , в зависимости от сеточного разрешения и времени счета. Красные кривые соответствуют двум схемам, имеющим 5-й порядок аппроксимации по пространству (схемы WENO5 и MP5) в комбинации с методом RK3. Синие кривые соответствуют двум вариантам схемы ГКР. Можно видеть, что с измельчением сетки все кривые сходятся к одной величине омега  $\omega_0$ , однако темп сходимости у них разный. Если сравнивать точность схем при одинаковом сеточном разрешении, то схемы WENO5-RK3 и MP5-RK3 превосходят схему ГКР-МС. Однако если эффективность расчетного метода оценивать по вычислительным затратам, то преимущество схем повышенного порядка аппроксимации перед схемой ГКР-МС исчезает. Что касается схемы ГКР-NOLD, то она оказывается эффективнее схем WENO5 и MP5 по любому из двух рассмотренных критериев.

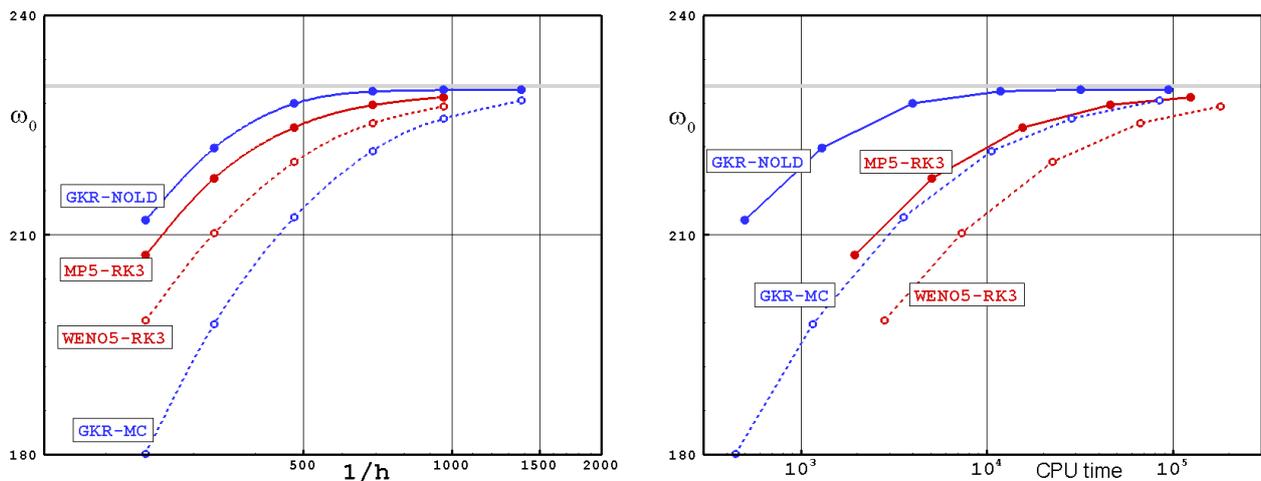


Рисунок 28. Задача о двойном маховском отражении при  $Re = 6000$ . Величина  $\omega_0$  в зависимости от сеточного разрешения (слева) и от времени счета (справа).

**Глава 5** посвящена феномену «карбункул» в схемах типа Годунова. Его принято связывать с численной неустойчивостью, появляющейся при сквозном расчете сильных ударных волн с применением низкодиссипативных решателей задачи Римана. Такая неустойчивость может проявляться как в виде пилообразных возмущений фронта ударной волны и параметров за ним, так и в виде изолированного опухолеподобного нароста на ударной волне или ее нефизического изгиба. Данную проблему также называют ударно-волновой неустойчивостью.

В разделе 5.1 дается подробный анализ публикаций по численной неустойчивости типа «карбункул» и предлагается новый подход к решению проблемы – метод искусственной вязкости. Его суть заключается том, что в базовый метод решения уравнений Эйлера добавляется некоторое количество диссипации в форме правых частей уравнений Навье-Стокса, при этом коэффициент молекулярной вязкости заменяется коэффициентом искусственной вязкости. Для коэффициента искусственной вязкости подбирается выражение, согласующееся с искусственной вязкостью фон

Неймана-Рихтмайера (1950), но имеющее свои особенности (обобщение на многомерность и введение пороговой величины). Метод искусственной вязкости обладает универсальностью: он является внешним по отношению к конкретной схеме (алгоритм расчета «невязких» потоков не меняется) и имеет широкий спектр «целительного» действия.

<p>Формула для коэффициента искусственной вязкости:</p> $\mu_{AV} = \begin{cases} C_{AV} \rho h^2 \sqrt{(\nabla \cdot \vec{u})^2 - (C_{th} a / h)^2}, & \text{если } -\nabla \cdot \vec{u} > C_{th} a / h, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases}$ <p>где <math>C_{AV}</math> – безразмерный параметр, <math>h</math> – характерный размер ячейки, <math>a</math> – скорость звука, <math>C_{th} = 0.05</math> – пороговый коэф-ент.</p>
--

искусственной вязкостью фон Неймана-Рихтмайера (1950), но имеющее свои особенности (обобщение на многомерность и введение пороговой величины). Метод искусственной вязкости обладает универсальностью: он является внешним по отношению к конкретной схеме (алгоритм расчета «невязких» потоков не меняется) и имеет широкий спектр «целительного» действия.

В разделе 5.2 проводится настройка метода искусственной вязкости и его всестороннее тестирование применительно к схемам первого порядка аппроксимации (на примере схем Годунова, Роу, Сафронова, HLLC и AUSM<sup>+</sup>). В рамках этой работы предложено несколько модификаций известной тестовой задачи Кёрка, в которых одномерная ударная волна (поступательная, отраженная или стационарная) рассчитывается в двумерном приближении. Для выявления ее неустойчивости предложено использовать величину  $\varepsilon_0$  – максимальное отклонение решения от одномерного потока (по плотности). Каждый из тестовых вариантов рассчитывается многократно: варьируется базовый коэффициент  $C_{AV}$  в модели искусственной вязкости и определяется минимальная величина  $C_{AV}^{\min}$ , необходимая для подавления ударно-волновой неустойчивости. Так, на рисунке 29 показано развитие неустойчивости в модифицированной задаче Кёрка по мере распространения поступательной ударной волны ( $x_s$  – координата фронта ударной волны). Можно видеть, что: (1) «карбункул»-неустойчивость проявляется при ударно-волновом числе Маха  $M_s > 2.2$ ; (2) случае с  $M_s = 6$  метод искусственной вязкости обеспечивает полное подавление неустойчивости при  $C_{AV} \geq 0.28$ .

В процессе настройки метода искусственной вязкости была выявлена зависимость от расчетной сетки и подобрана формула для  $h$ . Для свободного параметра модели было рекомендовано значение:  $C_{AV} = 0.6$  в двумерном случае и  $C_{AV} = 0.75$  в трехмерном случае. Также была выработана поправка на показатель адиабаты в задачах с  $\gamma \neq 1.4$ . Раздел 5.2 завершается численными примерами,

демонстрирующими эффективность применения метода к схемам первого порядка аппроксимации. Некоторые из примеров показаны на рисунке 30 (двумерный расчет сверхзвукового обтекания цилиндра) и рисунке 31 (трехмерный расчет гиперзвукового обтекания цилиндра).

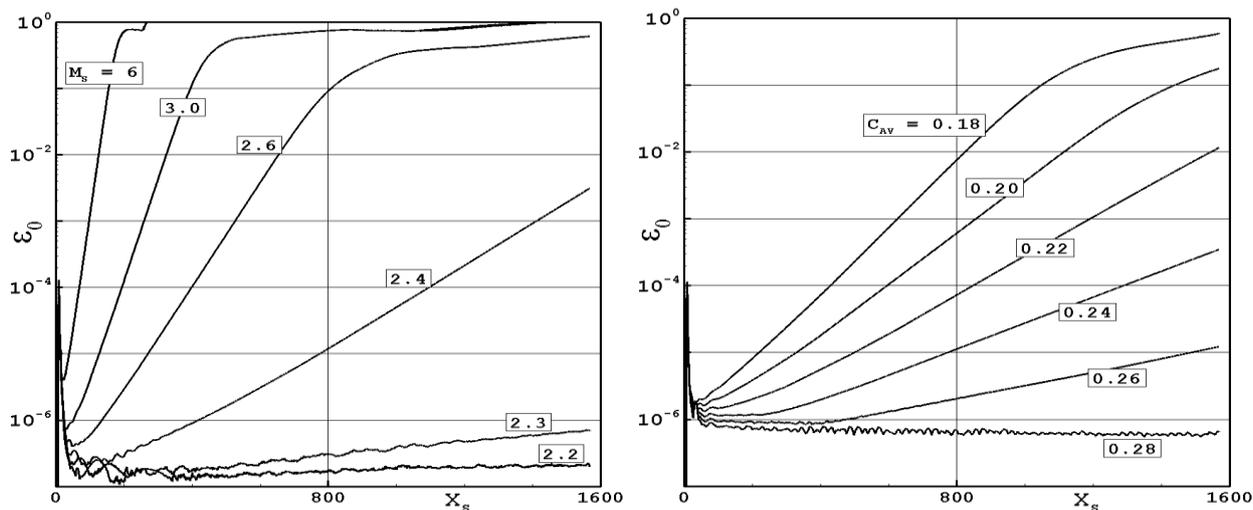


Рисунок 29. Развитие неустойчивости в модифицированной задаче Кёрка (расчет по схеме Годунова): слева – без искусственной вязкости (варьируется  $M_s$ ); справа – с искусственной вязкостью ( $M_s = 6$ , варьируется  $C_{AV}$ ).

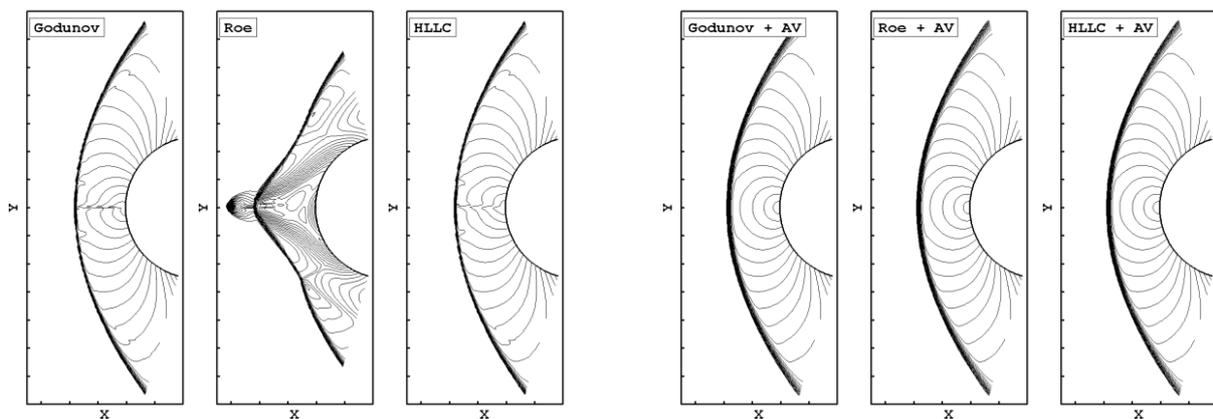


Рисунок 30. Обтекание цилиндра при  $M_\infty = 3$ . Изолинии числа Маха: оригинальные схемы (слева); те же схемы с добавлением искусственной вязкости (справа).

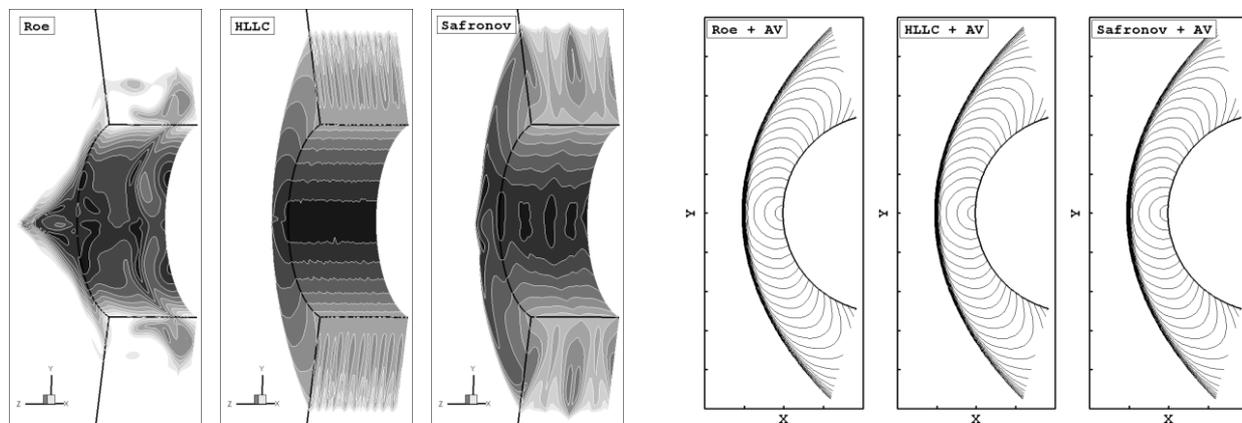


Рисунок 31. Обтекание цилиндра при  $M_\infty = 20$ . Изолинии числа Маха: оригинальные схемы (слева); те же схемы с добавлением искусственной вязкости (справа).

В разделе 5.3 проводится адаптация метода искусственной вязкости к схемам повышенного порядка аппроксимации. С практической точки зрения такое применение метода представляет наибольший интерес, однако здесь исследование проблемы осложняется двумя обстоятельствами.

Во-первых, схемы повышенной точности разнятся не только решателями задачи Римана, но и чрезвычайно разнообразными способами повышения точности по пространству и времени. Поскольку исследование всего многообразия схем данного класса не представляется возможным, были рассмотрены несколько реализаций известных схем: схема ГКР и метод RK2 с различными реконструкциями-ограничителями; схема WENO5 в сочетании с методом RK3.

Во-вторых, схемы повышенной точности могут генерировать паразитные осцилляции за фронтом ударной волны, которые не вызваны «карбункул»-неустойчивостью. Поэтому применение метода искусственной вязкости может оказаться недостаточным для подавления всех осцилляций. Решение этой проблемы должно включать в себя усовершенствование самих расчетных методов.

Всестороннее исследование на тестовых задачах, в том числе на различных модификациях задачи Кёрка, позволило сформулировать рекомендации по применению метода искусственной вязкости в схемах повышенной точности. Они заключаются в следующем: (1) в процедуре реконструкции данных внутри в ячейки следует переходить на использование характеристических переменных; (2) в ячейках, расположенных внутри фронта ударной волны следует использовать реконструкцию minmod. Тогда значение базового коэффициента в модели искусственной вязкости равно 0.5 гарантирует подавление «карбункул»-неустойчивости и существенно снижает уровень осцилляций за фронтом ударной волны. Более того, значение  $C_{AV} = 0.5$  в схемах повышенной точности можно рассматривать как универсальное: оно подходит для моделирования течений любой размерности в широком диапазоне значений показателя адиабаты газа.

Раздел 5.3 завершается численными примерами, демонстрирующими эффективность применения метода к схемам повышенного порядка аппроксимации.

Задача о двойном маховском отражении. На рисунке 32 показаны данные расчета задачи, полученные по схеме ГКР-МС (с точным решателем задачи Римана на сетке с  $h = 1/480$ ) и схеме WENO5- RK3 (с решателем HLLC и  $h = 1/330$ ). Можно видеть, что оригинальные схемы (без искусственной вязкости) демонстрируют пилообразное искажение ножки Маха и ее искривление, приводящее к нефизической структуре течения за ударной волной; эти возмущения являются проявлением «карбункул»-неустойчивости. Добавление искусственной вязкости в обоих случаях приводит к исправлению решений.

Задача о сверхзвуковом обтекании цилиндра (двумерный случай). На рисунке 33 показаны результаты расчета задачи по трем различными схемам: ГКР-minmod, RK2-МС и WENO5-RK3. Видно, что добавление искусственной вязкости приводит к исправлению решений, полученных по оригинальным схемам.

Рисунок 32. Изолинии плотности в задаче о двойном маховом отражении, полученные по схемам ГКР-МС и WENO5- RK3. Верхние ряды: оригинальные схемы, нижние ряды: те же схемы с добавлением искусственной вязкости.

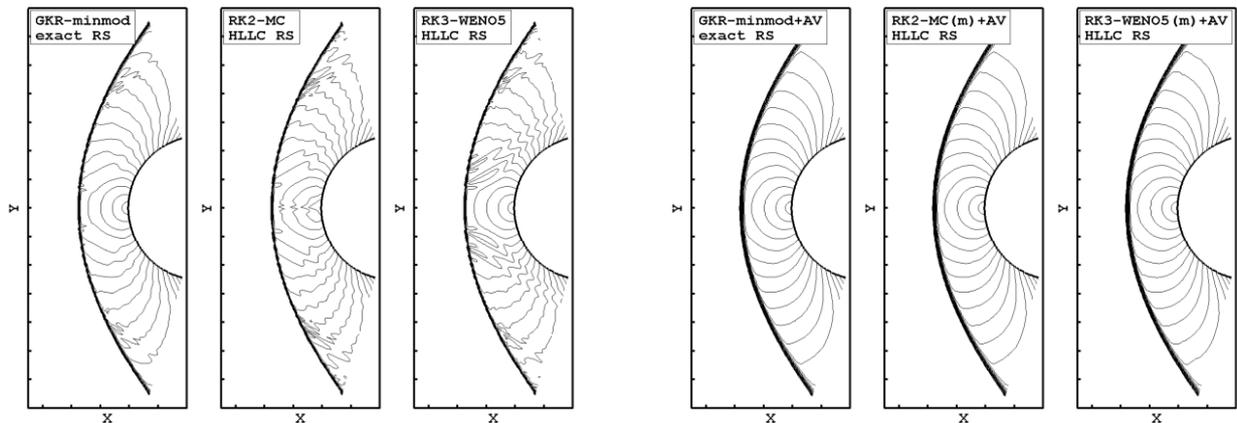
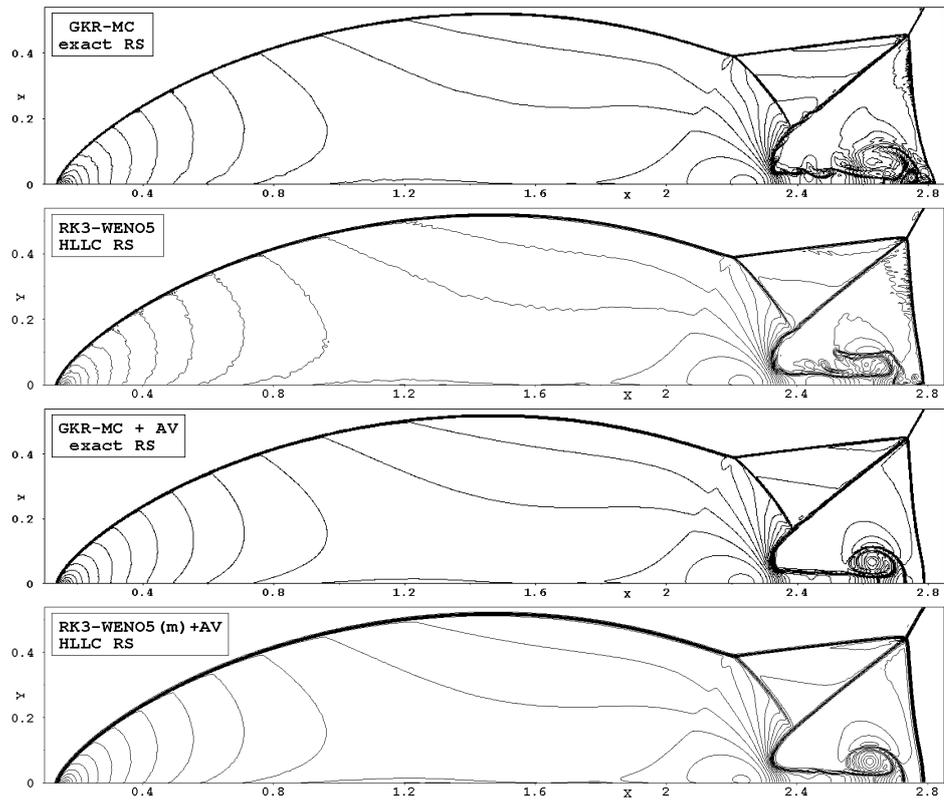


Рисунок 33. Обтекание цилиндра при  $M_\infty = 3$ . Изолинии числа Маха: оригинальные схемы (слева); те же схемы с добавлением искусственной вязкости (справа).

Вязкое гиперзвуковое обтекание цилиндра (двумерный и трехмерный случаи). При моделировании *вязкого* гиперзвукового обтекания цилиндра «карбункул»-неустойчивость может приводить к появлению аномалий в распределении теплового потока по поверхности. Начальные данные этой задачи заимствованы из (Kitamura, Shima, 2013):  $M_\infty = 8.1$ , давление набегающего потока  $p_\infty = 370.6$  Па, температура набегающего потока  $T_\infty = 63.73$  К, радиус цилиндра  $r = 0.02$  м, число Рейнольдса  $Re_r = 1.31 \times 10^5$ , температура стенки  $T_w = 300$  К. На рисунке 34 приведены изолинии числа Маха, полученные по схеме ГКР-МС с двумя решателями Роу и HLLC в двумерном и трехмерном случаях. Можно видеть значительные искажения течения во всех расчетах, полученных без использования искусственной вязкости; в то же время применение искусственной вязкости полностью решает эту проблему. Рисунок 35 демонстрирует соответствующие профили тепловых потоков на поверхности цилиндра

дра, нормированные к величине в точке торможения:  $q_{FR} = 17.5 \text{ W/cm}^2$  (Fay–Riddell’s stagnation value). Рисунок ясно показывает влияние осцилляций за ударной волной на распределение теплового потока на стенке. Хотя профиль, полученный без искусственной вязкости с решателем HLLC, в двумерном случае искажен не слишком сильно, переход на трехмерный расчет приводит к значительному ухудшению решения. И снова, применение искусственной вязкости позволяет получать качественные решения во всех расчетных случаях.

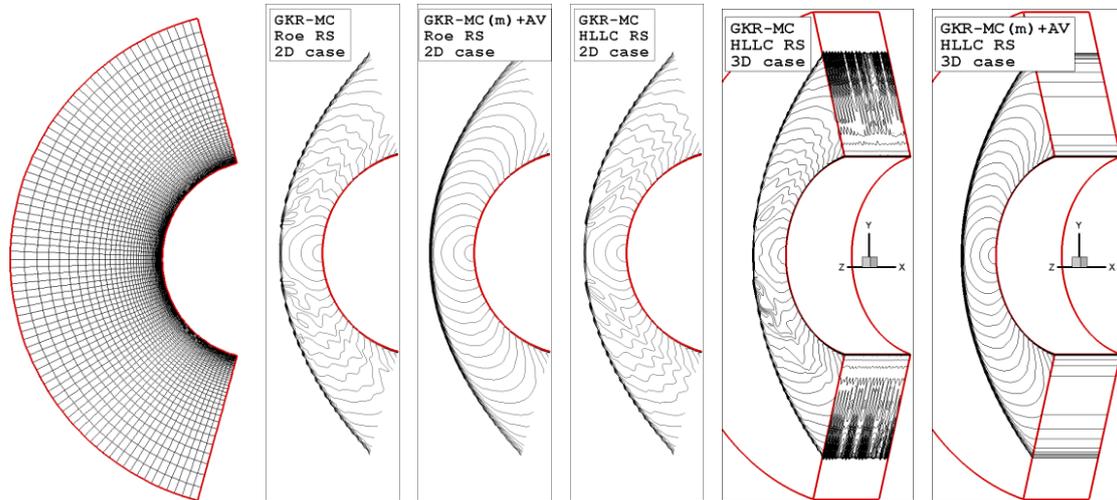


Рисунок 34. Вязкое гиперзвуковое обтекание цилиндра. Расчетная сетка (каждая вторая линия сетки) и изолинии числа Маха.

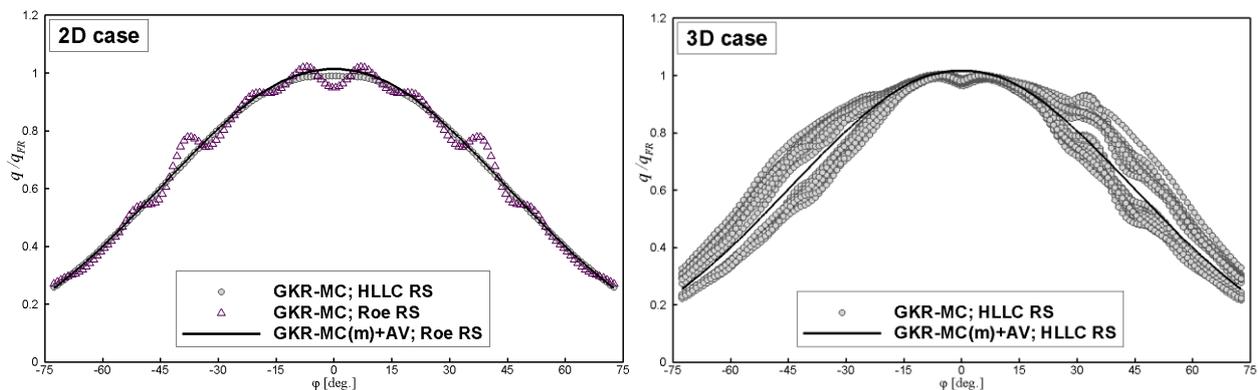


Рисунок 35. Распределение теплового потока по поверхности цилиндра.

Задача о седовском взрыве. Еще одной задачей, где ударно-волновая неустойчивость проявляется весьма наглядно, является задача о сферически симметричном взрыве, решаемая в цилиндрической системе координат. Начальное состояние газа в расчетной области  $[0, 1.1] \times [0, 1.1]$  следующее:  $(u_x, u_r, \rho, p) = (0, 0, 1, 10^{-6})$ ; исключение составляет лишь ячейка, примыкающая к началу координат, где давление равно  $4.334474 \times 10^5$ . На нижней и левой границах расчетной области ставится условие симметричности течения; на верхней и правой границах – непроницаемая стенка. При такой постановке задачи фронт ударной волны достигает радиуса  $R_{shock} = 1$  на момент времени  $t = 1$ . На рисунке 36 представлены результаты расчета задачи с использованием схем ГКР-МС и RK3-WENO5 в сочетании с решателем Roe. Как можно видеть, данные, полученные по оригинальным схемам (левые графики), искажены карбункуло-подобными изъянами вблизи обеих осей симметрии. Однако добавление искусственной вязкости в каждую из расчетных схем (правые графики) полностью устраняет проблему.

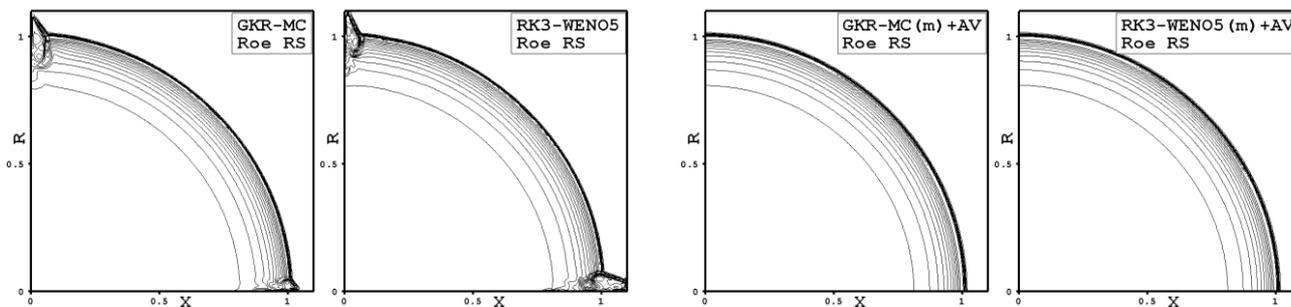


Рисунок 36. Задача о седовском взрыве. Изолинии плотности: оригинальные схемы (слева); те же схемы с добавлением искусственной вязкости (справа).

Задача Ноха. Последний тестовый случай – задача Ноха (Noh, 1987). Эта задача также одномерная, но решаемая в двумерной постановке. Результаты ее расчета по схеме ГКР-minmod с решателем HLLC показаны на рисунке 37. Левые рисунки здесь соответствуют расчетам без искусственной вязкости, правые – с добавлением искусственной вязкости. Видно, что решения, полученные с применением обсуждаемой методики, близки к одномерным, без проявлений карбункул-неустойчивости.

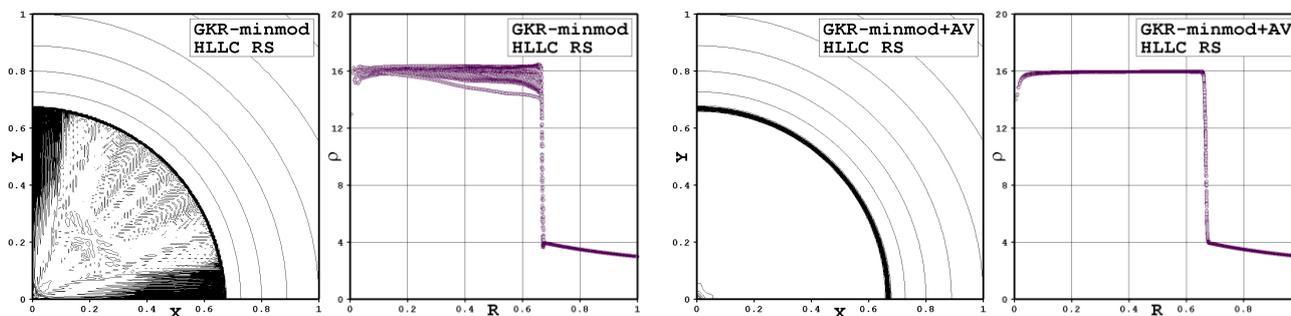


Рисунок 37. Задача Ноха: изолинии плотности в расчетной области и графики плотности в зависимости от радиуса  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Схема ГКР-minmod в оригинальном варианте (слева) и с добавлением искусственной вязкости (справа).

## Основные результаты работы

1. Предложен оригинальный метод повышения точности схемы Годунова на базе элементов схемы Колгана. Новая схема (схема ГКР) обобщена на случай расчета течений неравновесного газа. Показана ее высокая эффективность.

2. На базе схемы ГКР разработана методика маршевого расчета сверхзвуковых струй, истекающих в спутный дозвуковой поток. Новая методика обобщена на случай образования дозвуковой зоны в потоке за диском Маха.

3. Построена комплексная математическая модель неравновесного течения продуктов сгорания в струях, истекающих из типовых ЖРД и РДТТ.

4. Разработанные методики и модели реализованы в комплексе программ NARJ для численного моделирования одно- и многофазных струй продуктов сгорания, истекающих в атмосферу на различных высотах полета.

5. Показано, что в рамках приближения гипотезы Буссинеска не удается адекватно описать процесс затухания волновой структуры неизобарической струи. Получено объяснение обнаруженного эффекта и предложена альтернативная форма тензора турбулентных напряжений, устраняющая эту проблему.

6. Развита математическая модель атмосферы кометы, включающая в себя несколько моделей производства газопылевого потока с поверхности и учиты-

вающая многофазную неравновесность и фотодиссоциацию. Показано, что в случае истечения потока частиц с нескольких активных пятен на поверхности кометы, однофракционная модель облака частиц (модель Китамуры) физически неадекватно описывает их движение. Предложена многофракционная расчетная модель, которая свободна от этого недостатка.

7. Разработанные методики и модели реализованы в комплексе программ RZC, нашедшего активное применение в научно-исследовательских работах по изучению атмосферы кометы Чурюмова-Герасименко в рамках проекта Розетта.

8. Предложены: новое представление схемы КАБАРЕ (относящееся к классу MUSCL-схем), низкодиссипативная реконструкция-ограничитель NOLD для схемы ГКР и оригинальный вариант разрывного метода Галеркина, обладающий свойством суперсходимости.

9. Разработан универсальный подход к решению проблемы «карбункул»-неустойчивости в схемах типа Годунова – метод искусственной вязкости. Показана его высокая эффективность на всесторонних тестовых примерах.

### Публикации автора по теме диссертации

1. Войновский А.С., Киреев В.И., Липницкий Ю.М., Родионов А.В. Расчет истекающих в вакуум химически неравновесных струй газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1984. – Т. 24, № 9. – С. 1423–1428.
2. Липницкий Ю.М. Минин С.Н., Родионов А.В. О влиянии колебательной релаксации на параметры сверхзвуковых струй газа, истекающих в вакуум // Письма в ЖТФ. – 1984. – Т. 10, Вып. 21. – С. 1301–1304.
3. Родионов А.В. Монотонная схема второго порядка аппроксимации для сквозного расчета неравновесных течений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1987. – Т. 27, № 4. – С. 585–593.
4. Родионов А.В. Повышение порядка аппроксимации схемы С.К.Годунова // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1987. – Т. 27, № 12. – С. 1853–1860.
5. Тишин А.П., Родионов А.В. К вопросу об «экологически чистых» ракетных топливах // Известия ВУЗ. Авиационная техника. – 1993. – № 3. – С. 77–83.
6. Тишин А.П., Александров Э.Л., Родионов А.В., Шустов Г.Н. Худяков В.А., Артамонов А.К., Унэпэк Л.Б. Воздействие полетов ракет на озонный слой Земли // Химическая физика. – 1993. – Т. 12, № 9. – С. 1184–1225.
7. Rodionov A.V. A Godunov's method modification for prediction of supersonic reacting turbulent jets // La Recherche Aérospatiale. – 1995. – № 4. – P. 263–276.
8. Иткин А.Л., Крифо Ж.Ф., Родионов А.В. Исследование структуры многофазных струй, истекающих с поверхности ядра кометы // Космические исследования. – 1995. – Т. 33, № 3. – С. 268–278.
9. Crifo J.F., Itkin A.L., Rodionov A.V. The near-nucleus coma formed by interacting dusty gas jets effusing from a cometary nucleus: Part I // ICARUS. – 1995. – V. 116. – P. 77–112.
10. Родионов А.В. Численный метод решения уравнений Эйлера с сохранением аппроксимации на деформированной сетке // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1996. – Т. 36, № 3. – С. 117–129.
11. Родионов А.В. Моделирование истечения пространственных многофазных струй с поверхности ядра кометы // Астрономический вестник. – 1996. – Т. 30, № 3. – С. 265–275.
12. Crifo J.F., Rodionov A.V. The dependence of the circumnuclear coma structure on the properties of the nucleus. Part I. Comparison between a homogeneous and an inhomogeneous spherical nucleus, with application to P/Wirtanen // ICARUS. – 1997. – V. 127. – P. 319–353.
13. Crifo J.F., Rodionov A.V. The dependence of the circumnuclear coma structure on the properties of the nucleus. II. First investigation of the coma surrounding a

- homogeneous, aspherical nucleus // ICARUS. – 1997. – V. 129. – P. 72–93.
14. Rodionov A.V., Jorda L., Jones G.H., Crifo J.F., Colas F., Lecacheux J. Comet Hyakutake gas arcs: first observational evidence of standing shock waves in a cometary coma // ICARUS. – 1998. – V. 136. – P. 232–267.
  15. Fulle M., Crifo J.F., Rodionov A.V. Numerical simulation of the dust flux on a spacecraft in orbit around an aspherical cometary nucleus – Part I // Astronomy and Astrophysics. – 1999. – V. 347. – P. 1009–1028.
  16. Crifo J.F., Rodionov A.V. Modeling of the circumnuclear coma of the comets: objectives, methods and recent results // Planetary and Space Science. – 1999. – V. 47. – P. 797–826.
  17. Crifo J.F., Rodionov A.V., Bockelée-Morvan D. The dependence of the circumnuclear coma structure on the properties of the nucleus. Part III. First modeling of a CO-dominated coma, with application to comets 46P/Wirtanen and 29P/Schwassmann-Wachmann I // ICARUS. – 1999. – V. 138. – P. 85–106.
  18. Crifo J.F., Rodionov A.V. The dependence of the circumnuclear coma structure on the properties of the nucleus. Part IV. Structure of the night-side gas coma of a strongly sublimating nucleus // ICARUS. – 2000. – V. 148. – P. 464–478.
  19. Szegő K., Crifo J.F., Földy L., Lagerros J.S.V., Rodionov A.V. Dynamical effects of comet P/Halley gas production // Astronomy and Astrophysics, Letter to the Editor. – 2001. – V. 370, No. 2. – P. L35–L38.
  20. Родионов А.В. Новый маршевый метод расчета струй продуктов сгорания // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2002. – Т. 42, № 7. – С. 1093–1104.
  21. Crifo J.F., Lukianov G.A., Rodionov A.V., Khanlarov G.O., Zakharov V.V. Comparison between Navier-Stokes and direct Monte-Carlo simulations of the circumnuclear coma. Part I. Homogeneous, spherical source // ICARUS. – 2002. – V. 156. – P. 249–268.
  22. Crifo J.F., Rodionov A.V., Szego K., Fulle, M. Challenging a paradigm: do we need active and inactive areas to account for near-nuclear jet activity? // Earth Moon Planets. – 2002. – V. 90. – P. 227–238.
  23. Rodionov A.V., Crifo J.F., Szego K., Lagerros J., Fulle M. An advanced physical model of cometary activity // Planetary and Space Science. – 2002. – V. 50. – P. 983–1024.
  24. Szego K., Crifo J.F., Rodionov A.V., Fulle M. The near-nuclear coma of comet Halley in March 1986 // Earth Moon Planets. – 2002. – V. 90. – P. 435–443.
  25. Захаров В.В., Крифо Ж.Ф., Лукьянов Г.А., Родионов А.В. Моделирование внутренней атмосферы комет с несферическим ядром типа «яблоко» // Матем. Моделирование. – 2003. – Т. 15, № 6. – С. 48–52.
  26. Crifo J.F., Loukianov G.A., Rodionov A.V., Zakharov V.V. Navier-Stokes and direct Monte Carlo simulations of the circumnuclear coma. Part II. Homogeneous, aspherical sources // ICARUS. – 2003. – V. 163. – P. 479–503.
  27. Crifo J.F., Lukianov G.A., Zakharov V.V., Rodionov A.V. Physical model of the coma of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko // The new Rosetta targets. Observations, simulations and instrument performances. – Kluwer academic publishers, 2004. – P. 119–130.
  28. Crifo J.F., Loukianov G.A., Rodionov A.V., Zakharov V.V. Direct Monte Carlo and multifluid modeling of the circumnuclear dust coma: Spherical grain dynamics revisited // ICARUS. – 2005. – V. 176. – P. 192–219.
  29. Rodionov A.V., Crifo J.F. Time-dependent, three-dimensional fluid model of the outer coma, with application to the comet Hale-Bopp gas spirals // Advances in Space Research. – 2006. – V. 38. – P. 1923–1927.
  30. Lukyanov G.A., Crifo J.F., Zakharov V.V., Rodionov A.V. A new approach for modeling the dust dynamics in the near-nucleus coma // Advances in Space Research. – 2006. – V. 38. – P. 1976–1982.
  31. Zakharov V.V., Rodionov A.V., Lukyanov G.A., Crifo J.F. Navier-Stokes and direct Monte Carlo simulations of the circumnuclear coma. Part III. Spherical, inhomogeneous

- sources // ICARUS. – 2008. – V. 194. – P. 327–346.
32. Zakharov V.V., Rodionov A.V., Lukianov G.A., Crifo J.F. Monte-Carlo and mul-tifluid modelling of the circumnuclear dust coma. II. Aspherical-homogeneous, and spherical-inhomogeneous nuclei // ICARUS. – 2009. – V. 201. – P. 358–380.
  33. Rodionov A.V. On the use of Boussinesq approximation in turbulent supersonic jet modeling // Int. J. of Heat and Mass Transfer. – 2010. – V. 53. – P. 889–901.
  34. Boissier J., Bockelée-Morvan D., Rodionov A.V., Crifo J.-F. First attempt at interpreting millimetric observations of CO in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) using 3D+t hydrodynamical coma simulations // Astronomy and Astrophysics. – 2010. – V. 510, Id. A24. – 18 pp.
  35. Mysen E., Rodionov A.V., Crifo J.-F. An analysis of outgassing pressure forces on the Rosetta orbiter using realistic 3D+t coma simulations // Astronomy and Astrophysics. – 2010. – V. 512, Id. A69. – 17 pp.
  36. Rodionov A.V. Complement to the “Kolgan project” // J. Comput. Phys. – 2012. – V. 231. – P. 4465–4468.
  37. Родионов А.В., Мышкина И.Ю., Спиридонов В.Ф., Стародубов С.В., Цибереv К.В., Корнев А.В. Программный модуль для решения двумерных аэродинамических задач на основе явной схемы Годунова-Колгана-Родионова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. – 2013. – Вып. 2. – С. 19–36.
  38. Родионов А.В. Сопоставление схемы КАБАРЕ со схемами типа MUSCL // Матем. Моделирование. – 2013. – Т. 25, № 9. – С. 109–136.
  39. Della Corte V., Ivanovski S., Lucarelli F., Rotundi A., Zakharov V., Fulle M., Rodionov A.V., Crifo J.-F., Altobelli N., Mazzotta Epifani E. Simulated measurements of 67P/Churyumov-Gerasimenko dust coma at 3 AU by the Rosetta GIADA instrument using the GIPSI tool // Astronomy and Computing. – 2014. – V. 5. – P. 57–69.
  40. Родионов А.В. О взаимосвязи разрывного метода Галеркина со схемами MUSCL-типа // Матем. Моделирование. – 2015. – Т. 27, № 10. – С. 96–116.
  41. Родионов А.В., Тагирова И.Ю. Искусственная вязкость в схемах типа Годунова как метод подавления «карбункул»-неустойчивости // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. – 2015. – Вып. 2. – С. 3–11.
  42. Тагирова И.Ю., Родионов А.В. Применение искусственной вязкости для борьбы с «карбункул»-неустойчивостью в схемах типа Годунова // Матем. Моделирование. – 2015. – Т. 27, № 10. – С. 47–64.
  43. Jurado E., Martin T., Canalias E., Blazquez A., Garmier R., Ceolin T., Gaudon F., Delmas C., Biele J., Ulamec S., Remetean E., Torres A., Laurent-Varin J., Dolives B., Herique A., Rogez Y., Kofman W., Jorda L., Zakharov V., Crifo J.-F., Rodionov A., Heinisch P., Vincent J.-B. Rosetta lander Philae: Flight Dynamics analyses for landing site selection and post-landing operations // Acta Astronautica. – 2016. – V. 125. – P. 65–79.
  44. Rodionov A.V. Artificial viscosity in Godunov-type schemes to cure the carbuncle phenomenon // J. Comput. Phys. – 2017. – V. 345. – P. 308–329.
  45. Rodionov A.V. Artificial viscosity to cure the carbuncle phenomenon: The three-dimensional case // J. Comput. Phys. – 2018. – V. 361. – P. 50–55.
  46. Родионов А.В. Искусственная вязкость для подавления численной неустойчивости типа «карбункул» в расчетах трехмерных задач – Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. – 2018. – Вып. 3. – С. 44–51.
  47. Zakharov V. V., Crifo J.-F., Rodionov A.V., Rubin M., Altwegg K. The near-nucleus gas coma of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko prior to the descent of the surface lander PHILAE // Astronomy and Astrophysics. – 2018. – V. 618, Id. A71. – 16 pp.
  48. Rodionov A.V. Artificial viscosity to cure the shock instability in high-order Godunov-type schemes // Computers and Fluids. – 2019. – V. 190. – P. 77–97.