

Федеральное государственное унитарное предприятие
«Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский
научно-исследовательский институт экспериментальной физики»
ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ (ИТМФ)

На правах рукописи

Родионов Александр Владимирович

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

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Саров, 2019 год

Оглавление

Введение.....	6
1 Базовые элементы численного метода и принципы построения программ ...	22
1.1 Уравнения газовой динамики	22
1.1.1 Уравнения Эйлера	22
1.1.2 Уравнения Навье-Стокса	23
1.1.3 Двумерные течения	23
1.1.4 Течения неравновесного газа	24
1.2 Численная аппроксимация	25
1.2.1 Геометрические параметры расчетной сетки (метрика)	25
1.2.2 Схема Годунова	27
1.2.3 Схема Колгана.....	28
1.2.4 Схема Годунова-Колгана-Родионова.....	29
1.2.5 Аппроксимация уравнений Навье-Стокса.	31
1.2.6 Моделирование неравновесных течений.	32
1.2.7 Метод маршировки по пространству.....	33
1.3 Программная реализация.....	33
1.3.1 Расположение параметров в массивах.....	34
1.3.2 Разбиение программы на расчетные модули	35
1.4 Примеры тестовых расчетов	39
1.4.1 Течение в сверхзвуковой части осесимметричного сопла	39
1.4.2 Задача Сода	40
1.4.3 Распространение ударной волны по неравновесному газу	42
1.5 Выводы по главе.....	44
2 Численное моделирование струй продуктов сгорания ракетных топлив	45
2.1 Объект моделирования	45
2.1.1 Типы топлив	45
2.1.2 Перечень решаемых задач	46
2.1.3 Набор учитываемых процессов.....	48

2.2 Математическая модель.....	49
2.2.1 Химические реакции	49
2.2.2 Колебательная релаксация.....	51
2.2.3 Гомогенная конденсация паров воды	54
2.2.4 Турбулентное перемешивание	55
2.2.5 Многофазность (частицы окиси алюминия)	57
2.3 Численные методы	60
2.3.1 Параболизация уравнений Навье-Стокса.....	60
2.3.2 Маршевый расчет дозвуковых областей	63
2.3.3 Расчет дозвукового течения за диском Маха.....	66
2.3.4 Инициирование турбулентности в слоях смешения	67
2.3.5 Тестирование маршевого метода расчета струй.....	67
2.3.6 Методика расчета частиц	74
2.4 Примеры расчетов	77
2.4.1 Течение продуктов сгорания в типовом РДТТ	77
2.4.2 Течение в струе на высоте $H = 10$ км.....	80
2.4.3 Течение в струе на высоте $H = 50$ км.....	85
2.4.4 Течение в струе на высоте $H = 100$ км.....	87
2.4.5 Истечение в вакуум	89
2.4.6 Решение практических задач	91
2.5 Моделирование турбулентных сверхзвуковых струй и гипотеза Буссинеска	95
2.5.1 Особенности неизобарических струй и стратегия их расчета.	96
2.5.2 Недорасширенная струя холодного воздуха.....	99
2.5.3 Перерасширенная струя продуктов сгорания.	107
2.5.3 Гипотеза Буссинеска и альтернативная форма вязких членов.....	110
2.5.4 Другие приложения и гибридная форма вязких членов.	116
2.6 Выводы по главе.....	120
3 Численное моделирование атмосферы комет	122
3.1 Вводная информация	122
3.2 Начальный этап работ.....	124
3.2.1 Математическая модель газопылевой комы	124
3.2.2 Задача Китамуры	126
3.2.3 Адаптация численного метода	127

3.2.4	Результаты расчетов	129
3.2.5	Многофракционная модель для расчета пылевого облака	132
3.3	Эволюция модели внутренней комы и программ для ее расчета	134
3.3.1	Модели поверхности ядра кометы	135
3.3.2	Моделирование неравновесной нестационарной комы	144
3.3.3	Расчеты в рамках уравнений Навье-Стокса	148
3.3.4	Сравнение с расчетами методом Монте-Карло	151
3.4	Работы в рамках космической миссии Розетта	157
3.4.1	Начальная фаза проекта Розетта и комплекс программ RZC	157
3.4.2	Активная фаза проекта Розетта и моделирование реалистичной комы	161
3.5	Выводы по главе	166
4	Схема Годунова-Колгана-Родионова и современные методы сквозного	
	счета	168
4.1.	Сравнение с коммерческими и промышленными кодами	169
4.1.1	Расчет обтекания профиля НАСА0012 в рамках уравнений Эйлера	169
4.1.2	Расчет обтекания профиля НАСА0012 в рамках уравнений Навье-Стокса	173
4.1.3	Расчет обтекания цилиндра вязкой жидкостью (вихревая дорожка Кармана)	175
4.2	Сопоставление со схемой Кабаре	180
4.2.1	Сравнительный анализ схем КАБАРЕ и ГКР	180
4.2.2	Ограничители в схемах КАБАРЕ и ГКР	183
4.2.3	Тестирование схем КАБАРЕ и ГКР	185
4.2.4	Расчёты на неравномерной сетке	187
4.2.5	Расчёт задачи «blast wave»	189
4.3	Схемы типа MUSCL и разрывный метод Галеркина	192
4.3.1	Линейный прототип MUSCL-схемы (схема III)	193
4.3.2	Разрывный метод Галеркина (метод DG)	194
4.3.3	Взаимосвязь схемы III с методом DG	195
4.3.4	Обобщение схемы III на случай нелинейных уравнений	196
4.3.5	Обобщение схемы III на случай решения двумерных задач	198
4.3.6	Сравнение метода DG со схемой ГКР по эффективности	200
4.4	Эффективность схем повышенного порядка аппроксимации	204

4.4.1	Эффективность схемы ГКР в сравнении со схемами типа WENO	204
4.4.2	О точности схем сквозного счета в задачах с разрывами	206
4.5	Выводы по главе	207
5	Применение искусственной вязкости для подавления «карбункул»-неустойчивости в схемах типа Годунова.....	209
5.1	Феномен «карбункула» и метод искусственной вязкости	209
5.1.1	Решатели задачи Римана	209
5.1.2	Основные особенности проблемы	211
5.1.3	Возможные объяснения и способы решения проблемы	213
5.1.4	Физические корни «карбункула»	216
5.1.5	Метод искусственной вязкости как универсальное средство решения «карбункул»-проблемы	218
5.2	Адаптация метода к схемам первого порядка аппроксимации	219
5.2.1	Тестовая задача Кёрка	219
5.2.2	Введение искусственной вязкости	221
5.2.3	Модификации задачи Кёрка	224
5.2.4	Настройка метода на двумерных задачах	230
5.2.5	Настройка метода на трехмерных задачах	236
5.2.6	Численные примеры	239
5.3	Адаптация метода к схемам повышенного порядка аппроксимации	249
5.3.1	Разностные схемы и модель искусственной вязкости	249
5.3.2	Тестирование и настройка метода	251
5.3.3	Численные примеры	268
5.4	Выводы по главе	276
	Заключение	278
	Список литературы	280

Введение

Настоящая диссертация посвящена комплексной работе по развитию методов сквозного счета, созданию на их основе расчетных программ и проведению цикла научных и прикладных исследований сверхзвуковых течений совершенного и неравновесных газов применительно к аэрокосмическим и астрофизическим задачам. В диссертации изложены основные научные достижения автора за более чем тридцатилетний период.

Актуальность работы

Отличительной особенностью большинства прикладных задач, в которых реализуются течения газов со сверхзвуковыми скоростями, является образование газодинамических разрывов – ударных волн и контактных поверхностей. Для численного моделирования такого класса задач газовой динамики широко применяются так называемые методы (схемы) сквозного счета. При их использовании, имеющиеся в рассчитываемой области газодинамические разрывы не выделяются специальным образом, но «размываются» на некотором количестве ячеек расчетной сетки. Во многих прикладных задачах, в которых поля рассчитываемых газодинамических параметров имеют сложную структуру (в нестационарных течениях – развивающуюся во времени), использование методов сквозного счета позволяет отказаться от необходимости отслеживания большого количества взаимодействующих между собой ударных волн и контактных разрывов. Тогда проблема построения в расчетной области разностной сетки существенно упрощается – она становится независимой от алгоритмов интегрирования на этой сетке уравнений газовой динамики. Сами же алгоритмы интегрирования уравнений, будучи универсальными, не «привязанными» к особенностям задач и алгоритмам построения сеток, имеют очевидную привлекательность, особенно в случае использования многопроцессорных вычислений.

При построении методов сквозного счета основное внимание уделяется трем вопросам: во-первых, обеспечению как можно меньшего размывания разрывов на расчетной сетке, во-вторых, уменьшению или полному устранению нефизических осцилляций решения в окрестности разрывов, и, в-третьих, повышению точности разностной схемы в областях гладкости решения (между разрывами). Как правило, применение схем повышенного порядка аппроксимации приводит к меньшему

размыванию контактных разрывов и слабых ударных волн. Что касается сильных ударных волн, то они в методах сквозного счета обычно размываются на ограниченное количество ячеек, которое по мере движения ударной волны не возрастает. Однако критерий отсутствия осцилляций решения в окрестности разрывов накладывает определенные ограничения на использование схем повышенного порядка аппроксимации.

Вообще появление нефизических осцилляций у разрывов при сквозном счете связывается с отсутствием у используемой разностной схемы такого свойства, как монотонность. Хотя это свойство имеет строгое определение (и исследуется теоретически) только в случае решения линейных уравнений, часто разностные схемы, используемые для решения нелинейных уравнений газовой динамики, также называют монотонными (или неосциллирующими), если после линеаризации решаемых уравнений они (эти схемы) таковыми становятся строго.

В 1959 году С.К. Годунов опубликовал работу [1], целью которой был «выбор в некотором смысле наилучшей схемы, допускающей счет через ударные волны» (то есть схемы сквозного счета). Заметим, что в то время одним из наиболее перспективных направлений в конструировании методов сквозного счета считался способ введения в уравнения газовой динамики искусственной вязкости. Предложенный фон Нейманом и Рихтмайером в 1950 году метод искусственной вязкости [2] хотя и приводил к большему размыванию разрывов, но позволял существенно снизить уровень осцилляций в их окрестности при сохранении точности схемы на гладких решениях. Итак, в своей статье, ставшей впоследствии классической, Годунов доказал теорему о невозможности построения монотонной схемы с порядком аппроксимации выше первого и предложил «наиболее точную» монотонную схему первого порядка, основанную на двух предположениях: (1) в каждый дискретный момент времени параметры газа считаются постоянными внутри расчетных ячеек (кусочно-постоянное распределение параметров); (2) потоки между ячейками определяются из решения задачи о распаде произвольного разрыва (задачи Римана).

Имея ясную физическую интерпретацию, предложенная схема оказалась весьма гибкой и универсальной – она сравнительно легко обобщалась как на многомерные задачи газовой динамики, так и на другие физические задачи, описываемые уравнениями гиперболического типа [3–6]. При этом она позволяла в рамках единой методологии корректно ставить граничные условия, а при необходимости и выделять некоторые (основные) разрывы. Хотя оригинальная схема Годунова имела только первый порядок аппроксимации, благодаря отмеченным достоинствам она приобрела широкую популярность и распространение среди отечественных специалистов, работающих в

области вычислительной газовой динамики. В немалой степени этому способствовало издание в 1976 году книги [7] под редакцией С.К. Годунова в соавторстве с А.В. Забродиним, М.Я. Ивановым, А.Н. Крайко и Г.П. Прокоповым. В ней были подробно рассмотрены практически все аспекты построения и применения схемы Годунова.

Существенным вкладом в развитие схемы Годунова стала публикация в 1972 году статьи В.П. Колгана [8]. В ней автор отказался от кусочно-постоянного распределения параметров в пользу кусочно-линейного распределения и сформулировал принцип минимальных значений производной для расчета приращений величин по известным «осредненным по ячейке» величинам (алгоритм реконструкции кусочно-линейного распределения). Принципиальным моментом здесь явилось то, что алгоритм реконструкции был нелинейным, и это позволяло «примирить» повышение порядка аппроксимации базовой схемы Годунова с сохранением ее фундаментального свойства – свойства монотонности (теорема Годунова применима только к классу линейных схем).

Представление о кусочно-линейном распределении параметров в схеме Колгана приводило к тому, что при расчете потоков между ячейками возникала задача, которая, в отличие от базовой задачи Римана, была неавтомодельной. Ввиду ее громоздкости, Колган предложил ограничиться «решением задачи о распаде разрыва в начальный момент времени, когда решение в первом приближении не зависит от градиентов по обе стороны разрыва и задача автомодельна». Это привело к тому, что, обладая вторым порядком аппроксимации по пространству, схема Колгана сохраняла первый порядок аппроксимации по времени, а значит, область ее практического применения ограничивалась решением стационарных задач методом установления по времени.

*Таким образом, в 70-х годах прошлого столетия в области вычислительной газовой динамики существовала **актуальная проблема** разработки универсальной схемы сквозного счета, базирующейся на идеях схемы Годунова и схемы Колгана, и обладающей вторым порядком аппроксимации, как по пространству, так и по времени.*

В Советском Союзе работы в этом направлении велись в различных организациях, и прежде всего в ЦИАМ им. П.И. Баранова, ИПМ им. М.В. Келдыша и ЦАГИ им. Н.Е. Жуковского. Так в работе [9] В.И. Копченков и А.Н. Крайко (ЦИАМ) предложили монотонную схему второго порядка для гиперболических систем с двумя независимыми переменными. В этой схеме используется принцип минимальных значений производной Колгана, а для достижения второго порядка аппроксимации по времени применяется специфическая «связка» метода характеристик с решением задачи Римана. В работе [10] И.С. Меньшов (ИПМ) предложил свой вариант монотонной схемы второго порядка для одномерных нестационарных уравнений газовой динамики. Его схема базируется на

решении обобщенной задачи Римана, которое находится методом асимптотического приближения. В ЦАГИ в группе под руководством С.М. Босняка применялась монотонная схема, в которой второй порядок по времени достигался использованием двухэтапного алгоритма: предваряющий полушаг по схеме Годунова и завершающий шаг по схеме Колгана с опорой на предварительные данные. К сожалению, такой вариант схемы не был опубликован, автору он стал известен от С.М. Босняка при обсуждении материалов для заметки о схеме Колгана [11].

За рубежом основополагающими работами по развитию схемы Годунова стали статьи Ван Лира [12, 13], в которых автор предложил свой вариант монотонной схемы второго порядка аппроксимации. Не будучи знаком с работой Колгана [8], Ван Лир повторно выдвинул идею о замене кусочно-постоянного распределения параметров на кусочно-линейное распределение. При этом важно, что в своих работах он пошел дальше и предложил свой способ повышения порядка аппроксимации по времени. Для этого было введено разделение расчетного шага на два этапа: (1) расчет на лагранжевой сетке и (2) пересчет на эйлерову сетку с использованием метода наименьших квадратов. В случае решения многомерных задач использовался метод покоординатного расщепления. Предложенная Ван Лиром схема второго порядка получила широкую известность под именем MUSCL (Monotone Upstream-centered Scheme for Conservation Laws).

В 1985 году автор разработал оригинальный способ усовершенствования схемы Колгана: для получения второго порядка точности по времени было предложено использовать специфическую процедуру типа предиктор-корректор. Отличительной особенностью новой схемы (далее – схемы Годунова-Колгана-Родионова или схемы ГКР) было то, что она состоит только из вычислительных элементов схемы Колгана, проста в реализации, надежна, эффективна и универсальна (например, она легко распространяется на многомерные задачи). Более того, схема ГКР сразу была обобщена на случай расчета неравновесных течений, когда в моделируемой газовой среде протекает множество физико-химических процессов с разномасштабными характерными временами. После обсуждения данной работы на научных семинарах и публикации статей [14, 15], схема Годунова-Колгана-Родионова получила широкое признание и стала применяться в различных НИИ Советского Союза.

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.

Продукты сгорания высокоэнергетических ракетных топлив представляют собой многокомпонентные смеси с высокой температурой торможения ($T_0 = 2000 - 4000$ К). Они разгоняются в сопле до сверхзвуковых скоростей и истекают в атмосферу, при этом форма струи (структура ударных волн и слоев смешения) и распределение параметров ней сильно зависят от высоты и скорости полета. Течение в таких «горячих» струях сопровождается протеканием разнообразных физико-химических процессов. В первую очередь это химические реакции, турбулентное перемешивание и многофазность (в продуктах сгорания твердых топлив весовое содержание частиц окиси алюминия может составлять $\sim 30\%$). На больших высотах полета, в условиях сильного разрежения, могут оказаться существенными колебательная неравновесность (неравновесное заселение колебательных энергетических уровней молекул) и конденсация компонент газовой фазы. Детальная информация о составе и состоянии продуктов сгорания в струе оказывается необходимой при решении ряда прикладных задач, таких, как диагностика реактивных выхлопов, решение экологических проблем, определение спектроэнергетических характеристик летательных аппаратов для целей обнаружения, идентификации и слежения, а также для дистанционного контроля.

Заметим, что потребность в численном моделировании течений продуктов сгорания с учетом физико-химических процессов возникает, в первую очередь, при проектировании двигательных установок для авиационной и ракетно-космической техники. В этой области уже накоплен значительный опыт: в ряде отечественных научно-исследовательских и учебных институтов (ЦАГИ, ЦИАМ, ЦНИИМАШ, МАИ и другие) разработаны расчетные программы и выполнен большой объем научных и прикладных работ. В то же время проблема построения математической модели и разработки расчетных алгоритмов применительно к моделированию *струй продуктов сгорания* имеет свою специфику, и в этом направлении достигнуты значимые результаты специалистами МАИ (А.М. Молчанов, Л.В. Быков, Г.А. Глебов, А.П. Трунов [16–20]), ИЦ им. М.В. Келдыша (Ф.С. Завелевич, Н.Н. Ушаков и др. [21, 22]), ИФ БАН (Е.И. Виткин, Ю.В. Ходыко и др. [23, 24]). Из работ зарубежных специалистов следует выделить систематические исследования С. Дэша с коллегами, подробно описанные в главе 17 книги [25].

В 1987 году автор перешел на работу в ЦНИИМАШ и начал заниматься проблемой моделирования струй продуктов сгорания. Работа выполнялась в оптико-физическом отделе под руководством Ю.А. Пластинина, где, в частности, проводились исследования кинетики кристаллизации и оптических характеристик частиц окиси алюминия. Здесь автором была выработана комплексная математическая модель течения продуктов сгорания топлив, и на базе схемы ГКР был разработан комплекс программ NARJ для

расчета струй, истекающих из типовых ракетных двигателей на всех участках полета. Комплекс программ NARJ нашел широкое применение в научно-исследовательских и прикладных работах, проводимых в ЦНИИМАШ.

*В астрофизике 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.*

Атмосфера кометы (или кома) образуется в результате испарения под действием Солнца замороженных газов (таких, как H_2O , CO и CO_2), которые увлекают за собой частицы пыли. В условиях крайне малой гравитации газопылевой поток неограниченно растекается по пространству. Поверхность реальной кометы имеет сложную форму и неомогенные свойства (неоднородную активность), поэтому сверхзвуковые газовые потоки, истекающие с разных участков поверхности, могут сталкиваться друг с другом, образуя сложные структуры с ударными волнами и дозвуковыми областями. В дальней части атмосферы в результате фотодиссоциации может заметно меняться химический состав газовой составляющей.

Наиболее детальной и длительной программой по изучению комет с близкого расстояния стала космическая миссия Розетта, осуществленная Европейским космическим агентством в период с 2004 по 2016 год. Начальный этап проработки этой миссии проходил в первой половине 90-х годов, когда в астрофизическом сообществе еще отсутствовала цельная, физически обоснованная модель комы. В то время наиболее передовыми специалистами в этой области были Л.М. Шульман, Т.И. Гомбози, М.Р. Комби и Ж.Ф. Крифо (см., например, работы [26–35]), использовавшие сложные физические модели для расчетов атмосферы комет; эти расчеты, однако, ограничивались рамками одномерного приближения. Первой работой по моделированию атмосферы комет в трехмерной постановке была работа Китамуры [36], которая, в свою очередь, использовала упрощенную физическую модель комы.

С 1993 года началось длительное и плодотворное сотрудничество автора с французским астрофизиком Ж.Ф. Крифо в рамках проекта Розетта. В 2000 году к нему присоединились Г.А. Лукьянов и В.В. Захаров, специалисты в области динамики разреженных газов и метода DSMC. В результате этого сотрудничества был выполнен большой цикл работ, в том числе: построена единая математическая модель течения в коме, на базе схемы ГКР разработаны газодинамические коды для расчета атмосферы

комет и выполнено большое количество параметрических исследований. Разработанные модели и программы нашли активное применение в работах по изучению кометы Чурюмова-Герасименко в рамках проекта Розетта.

*За последние два – три десятилетия методы (схемы) сквозного счета повышенной точности приобрели еще большую популярность и получили дальнейшее развитие. К настоящему времени уже разработано огромное количество расчетных методик, базирующихся на точном или приближенном решении задачи Римана. 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.*

Одними из наиболее известных методов сквозного счета повышенной точности являются схемы типа MUSCL [13], PPM [37], ENO [38, 39], WENO [40–42], MP [43], приближение ADER [44, 45] и разрывный метод Галеркина [46–51]. Среди отечественных разработчиков большой популярностью пользуется схема КАБАРЕ [52–57], новые представления которой могут использоваться в задачах с разрывами решения. При решении задач, в которых требуется детальное разрешение акустических волн или турбулентных пульсаций, применяются методы сквозного счета с очень высоким порядком аппроксимации (как правило, не ниже четвертого) [58, 59].

Вместе с тем еще в 1978-м году в работе М.Я. Иванова и А.Н. Крайко [60] было показано, что для любой разностной схемы порядок сходимости решения в областях влияния размазанных разрывов в общем случае оказывается близким к первому. Известны также работы Остапенко с коллегами по этому вопросу [61, 62]. Например, в статье [61] было показано, что разностные схемы сквозного счета повышенного порядка аппроксимации приближенно имеют лишь первый порядок сходимости в гладкой части обобщенного решения за фронтом ударной волны.

За рубежом также имеются публикации на эту тему. Например в статье [63] на тестовых примерах показывается, что по критерию вычислительных затрат схема второго порядка аппроксимации может оказаться более эффективной, чем схема повышенного порядка типа WENO. Еще более значимы выводы работы [64], которая представляет собой отчет большой группы ведущих специалистов в области CFD о работе международного семинара по методам повышенной точности. Один из выводов этой работы заключается в том, что в задачах с разрывами решения такие методы не показывают высокой точности и не имеют явных преимуществ перед методами второго порядка аппроксимации, к которым принадлежит схема ГКР.

Начиная с 2011 года, автор выполнил серию работ, в которых было показано, что при решении ряда тестовых задач схема ГКР не уступает многим современным схемам повышенного порядка точности и схемам, используемым в коммерческих кодах. Кроме того удалось установить взаимосвязь схемы ГКР со схемой КАБАРЕ и разрывным методом Галеркина, и предложить новые варианты этих схем. Также удалось провести усовершенствование самой схемы ГКР, улучшающее ее диссипативные свойства при расчете задач с разрывами решения.

*Обладая многими достоинствами, схемы типа Годунова имеют и изъяны, среди которых феномен «карбункула» (также называемый «карбункул»-неустойчивостью) является наиболее значительным. Разработка эффективного и универсального подхода к решению этой проблемы является **актуальной задачей** вычислительной газодинамики.*

Феномен «карбункула» это специфический численный дефект, приводящий к существенному повреждению формы ударной волны при ее сквозном расчете. Он проявляется только при определенных условиях (расположение ударной волны относительно сетки), и только в методах сквозного счета (первого или повышенного порядка аппроксимации), использующих наиболее точные и популярные решатели задачи Римана, такие, как решатель схемы Годунова [1, 7], решатели Роу [65] и HLLC [66].

Проблема «карбункул»-неустойчивости впервые была описана в 1988 году в работе Пиэри и Имлей [67], а спустя четыре года Кёрк [68] предложил первое объяснение этого феномена применительно к ряду популярных схем первого порядка. Эти работы вызвали большой интерес специалистов в области численного моделирования, так что в последующие годы появилось большое количество публикаций по проблеме «карбункула» (см., например, обзоры по этой теме в работах [69 – 73]). Можно отметить, что к настоящему времени по некоторым аспектам этой сложной проблемы еще не сложилось консолидированного мнения. Показательно, что в 2009 году Ван Лир в своем обзоре [74] выделил «карбункул»-проблему в качестве одной из главных нерешенных проблем классических конечно-объемных схем, а Роу в своей обзорной лекции в 2013 году [75] сравнил ее со скелетом в шкафу, отметив, что причины и способы решения проблемы все еще являются предметом споров.

В 2014 году автор предложил универсальный способ подавления «карбункул»-неустойчивости в схемах типа Годунова – метод искусственной вязкости. В последующие годы этот метод прошел настройку применительно к схемам первого и повышенного порядка аппроксимации. Проведенное автором всестороннее тестирование метода показало его высокую эффективность в подавлении численной неустойчивости типа «карбункул» при решении широкого класса задач с ударными волнами.

Цели и задачи диссертационной работы

Основными целями работы являются:

- разработка универсального, эффективного и надежного метода сквозного счета для моделирования неравновесных течений;
- разработка приближенной методики маршевого расчета сверхзвуковых струй с дозвуковыми областями;
- построение комплексной математической модели течения продуктов сгорания топлив, истекающих из типовых ракетных двигателей;
- создание комплекса программ для численного моделирования высокотемпературных многокомпонентных струй, истекающих в атмосферу на различных высотах полета;
- проведение научных и прикладных работ по моделированию струй продуктов сгорания топлив;
- построение единой математической модели течения в ближней атмосфере кометы, с включением в нее нескольких поверхностных моделей (модели производства газопылевого потока с поверхности), и с учетом многофазной неравновесности и фотодиссоциации;
- адаптация расчетных методов к моделированию атмосферы кометы, разработка комплекса программ и проведение цикла научных и прикладных исследований;
- 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 принципа Колгана и вычислительной процедуры типа предиктор-корректор. Новая схема сквозного счета (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 в широком диапазоне времен релаксации неравновесных процессов.
- 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 единая 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 аэронамики 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;
 2. 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, Уральский университет, Свердловск, 1987.
- VII Всесоюзный семинар «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики», Кемеровский университет, Кемерово, 1987.
- IV Всесоюзная конференция «Кинетические и газодинамические процессы в неравновесных средах», МГУ, Краснови́дово, 1988.
- International school seminar «Nonequilibrium processes in gases and low temperature plasma», Minsk, 1992.
- Школы-семинары и Научно-технические конференции ЦАГИ, пос. Володарского, МО, 1992, 2009, 2010.
- AIAA Thermophysics Conferences: Orlando, USA, 1993; New Orleans, USA, 1996.
- AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conferences & Exhibits: Monterey, USA, 1993; Cleveland, USA, 1998; Huntsville, USA, 2000; Salt Lake City, USA, 2001.
- International conference «Modern problems of theoretical astronomy», St.Petersburg, Russia, 1994.
- Sino-Russian hypersonic flow conference, Beijing, China, 1994.
- International Aerospace Congress, Moscow, Russia, 1994.
- XX International Symposium on Shock Waves, Pasadena, USA, 1995.
- AIAA Aerospace Sciences Meetings & Exhibits, Reno, USA, 2001, 2002, 2003, 2005.
- Международные конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным средствам, МАИ, Москва, 2001, 2003.
- IV Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях / XIX Международный семинар по струйным, отрывным и нестационарным течениям, МАИ, Москва, 2002.
- International Symposium on Rarefied Gas Dynamics: Monopoli (Bari), Italy, 2004; Victoria, BC, Canada, 2016.
- 2nd International Conference on Green Propellants for Space Propulsion, Cagliari (Sardinia), Italy, 2004.
- The 10th Asteroids, Comets, Meteors meeting. Baltimore, Meryland, USA, 2008.
- Международные школы-семинары «Модели и методы аэродинамики», ЦАГИ, Евпатория, 2009, 2010, 2013, 2015, 2016, 2017, 2019.
- Международные семинары «Супервычисления и математическое моделирование», РФЯЦ ВНИИЭФ, Саров, 2011, 2012, 2014, 2016, 2018.

- Всероссийские конференции «Вычислительный эксперимент в аэроакустике», ИПМ, г. Светлогорск, 2012, 2014, 2016.
- International Conference on Computational Science & Computational Intelligence, Las Vegas, USA, 2014.
- Всероссийская конференция по аэроакустике, ИПМ, Москва, 2015.
- Всероссийская научно-техническая конференция «Авиадвигатели XXI века», ЦИАМ, 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 [11, 14, 15, 76–120] (в том числе 14 статей без соавторов), 21 публикация в трудах конференций [121–141] и 4 препринта [142–145].

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. Циберева (РФЯЦ-ВНИИЭФ), Ж.Ф. Крифо, В.В. Захаров (CNRS, France).

Краткое содержание работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы.

Первая глава посвящена построению простой и эффективной схемы второго порядка аппроксимации на базе схемы Годунова, принципа минимальных значений производной Колгана и специфической процедуры типа предиктор-корректор. Схема Годунова-Колгана-Родионова, или схема ГКР, обобщается на случай моделирования течений газа с неравновесными физико-химическими процессами. Приводятся данные тестовых расчетов, показывающие эффективность схемы ГКР при моделировании задач различного типа. В последнем разделе формулируются базовые принципы разбиения программ на универсальные расчетные модули.

Вторая глава посвящена численному моделированию одно- и многофазных струй продуктов сгорания. Здесь вырабатывается комплексная математическая модель течения продуктов сгорания ракетных топлив, истекающих из типовых ЖРД и РДТТ. Предлагается приближенная методика маршевого расчета сверхзвуковых струй с дозвуковыми областями (внешний дозвуковой поток и/или дозвуковая зона за диском Маха). На базе построенной математической модели и отобранных расчетных алгоритмов (схема ГКР и приближенная методика маршевого счета) разрабатывается комплекс программ NARJ для расчета течения продуктов сгорания в соплах и струях, истекающих в атмосферу на различных высотах. Приводятся примеры использования комплекса программ NARJ для решения модельных и практических задач. Обсуждается проблема адекватного описания волновой структуры неизобарической струи в случае использования приближения гипотезы Буссинеска для тензора турбулентных напряжений. Предлагается альтернативная форма тензора турбулентных напряжений, устраняющая обнаруженную проблему в моделировании неизобарических струй.

Третья глава посвящена численному моделированию атмосферы комет. В рамках приближения механики сплошных сред вырабатывается математическая модель течения в газопылевой атмосфере кометы с учетом многофазной неравновесности и фотодиссоциации. Модель течения в атмосфере кометы дополняется несколькими моделями производства газопылевого потока с поверхности кометы. Для расчета пылевого облака предлагается многофракционная модель. Выполняется цикл научно-исследовательских работ по моделированию газопылевой атмосферы кометы и формируется комплекс программ RZC, который используется для изучения атмосферы кометы Чурюмова-Герасименко в рамках международного космического проекта Розетта.

Четвертая глава посвящена оценке эффективности схемы ГКР в контексте современных методов сквозного счета. На примере решения нескольких тестовых задач

проводится сравнение схемы ГКР с известными коммерческими и промышленными кодами. Проводится сопоставление схемы ГКР со схемой КАБАРЕ и с разрывным методом Галеркина. Предлагаются новые варианты этих схем. Для схемы ГКР предлагается новая реконструкция-ограничитель NOLD, обладающая пониженной диссипацией. Обсуждается проблема точности схем сквозного счета при решении задач с разрывами.

Пятая глава посвящена решению «карбункул»-проблемы в схемах типа Годунова. Дается подробный анализ публикаций по численной неустойчивости типа «карбункул» и предлагается новый подход к решению проблемы – метод искусственной вязкости. Проводится всестороннее тестирование нового метода и его настройка применительно к различным схемам. Для схем повышенного порядка аппроксимации даются несколько рекомендаций по существенному снижению уровня осцилляций параметров потока за фронтом ударной волны.

1 Базовые элементы численного метода и принципы построения программ

Данная глава посвящена базовым элементам численного метода и принципам конструирования программ, разработанных автором в 1980-х годах. Это своего рода фундамент, на котором строится вся работа, представленная в последующих главах диссертации.

Немного о предыстории работы. К началу 1985 года автор закончил написание кандидатской диссертации, посвященной моделированию струй продуктов сгорания ракетных топлив с учетом химических реакций, колебательной неравновесности и излучения. При этом рассматривался только случай истечения в вакуум, без образования ударных волн. Для продолжения этой работы требовался переход на более универсальные методы – методы сквозного счета. Чтобы продвинуться в этом направлении автору помогли два фактора. Во-первых, это знакомство с так называемой «желтой» (по цвету обложки) книгой [7], в которой подробно рассмотрены все аспекты построения и применения схемы С.К. Годунова, включая ее стационарный аналог для маршевого расчета сверхзвуковых течений. Во-вторых, это посещение семинаров в ЦИАМ под руководством А.Н. Крайко, где большое внимание уделялось вопросам развития схемы Годунова, в том числе повышению точности схемы на базе принципа минимальных значений производной Колгана. На этой базе автору удалось построить весьма простую и, вместе с тем, эффективную схему сквозного счета, пригодную для моделирования неравновесных течений. Эта схема была опубликована в 1987-м году в Журнале Вычислительной Математики и Математической Физики и нашла признание среди отечественных специалистов в области вычислительной газовой динамики. Она стала главным рабочим инструментом автора в его последующей работе.

1.1 Уравнения газовой динамики

Выпишем основные уравнения газовой динамики, численное решение которых будет рассматриваться в данной диссертации.

1.1.1 Уравнения Эйлера

Уравнения динамики сжимаемого газа в декартовых координатах x, y, z имеют вид

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{F}_z}{\partial z} = \text{RHS}, \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_x \\ \rho u_y \\ \rho u_z \\ \rho h_0 - p \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_\alpha = \begin{bmatrix} \rho u_\alpha \\ \rho u_x u_\alpha + \delta_{\alpha x} p \\ \rho u_y u_\alpha + \delta_{\alpha y} p \\ \rho u_z u_\alpha + \delta_{\alpha z} p \\ \rho h_0 u_\alpha \end{bmatrix}, \quad \alpha = x, y, z, \quad (1.1)$$

где t – время, $\text{RHS} = 0$ в случае уравнений Эйлера (невязкий и нетеплопроводный газ), $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера, $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$ – вектор скорости газа и его компоненты, ρ – плотность, p – давление, h_0 – полная удельная энтальпия. Для совершенного газа полная удельная энтальпия записывается как

$$h_0 = \frac{1}{2}(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2) + h, \quad h = \frac{\gamma p}{(\gamma - 1)\rho},$$

где h – удельная энтальпия газа и γ – показатель адиабаты.

1.1.2 Уравнения Навье-Стокса

Течения вязкого теплопроводного газа описываются уравнениями Навье-Стокса. Они отличаются от уравнений Эйлера правыми частями, которые имеют следующий вид

$$\text{RHS} = \frac{\partial \mathbf{F}_x^v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_y^v}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{F}_z^v}{\partial z}, \quad \mathbf{F}_\alpha^v = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{x\alpha} \\ \tau_{y\alpha} \\ \tau_{z\alpha} \\ q_\alpha + u_x \tau_{x\alpha} + u_y \tau_{y\alpha} + u_z \tau_{z\alpha} \end{bmatrix}, \quad \alpha = x, y, z, \quad (1.2)$$

Входящие в (1.2) компоненты тензора вязких напряжений ($\tau_{\alpha\beta}$) и теплового потока (q_α) записываются как

$$\tau_{\alpha\beta} = \mu \left[\frac{\partial u_\alpha}{\partial \beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial \alpha} - \frac{2}{3} (\nabla \mathbf{u}) \delta_{\alpha\beta} \right], \quad \nabla \mathbf{u} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z},$$

$$q_\alpha = \lambda \frac{\partial T}{\partial \alpha} = \frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial \alpha} = \frac{\mu}{\text{Pr}} \left[\frac{\partial h_0}{\partial \alpha} - \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial \alpha} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial \alpha} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial \alpha} \right) \right], \quad \alpha, \beta = x, y, z.$$

где μ и λ – коэффициенты вязкости и теплопроводности, Pr – число Прандтля.

1.1.3 Двумерные течения

В случае моделирования двумерных плоских течений из выписанных выше уравнений исключаются величины u_z и все члены, содержащие производные по z . При моделировании осесимметричных течений (без закрутки) вместо (1.1) и (1.2) мы будем использовать уравнение Эйлера в виде

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y \mathbf{F}_x}{\partial x} + \frac{\partial y \mathbf{F}_y}{\partial y} - \hat{\mathbf{F}} \right) = \text{RHS},$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_x \\ \rho u_y \\ \rho h_0 - p \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_x = \begin{bmatrix} \rho u_x \\ \rho u_x^2 + p \\ \rho u_x u_y \\ \rho h_0 u_x \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_y = \begin{bmatrix} \rho u_y \\ \rho u_x u_y \\ \rho u_y^2 + p \\ \rho h_0 u_y \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{F}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ p \\ 0 \end{bmatrix},$$

и следующее выражение для правых частей уравнений Навье-Стокса

$$\text{RHS} = \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y \mathbf{F}_x^v}{\partial x} + \frac{\partial y \mathbf{F}_y^v}{\partial y} + \hat{\mathbf{F}}^v \right),$$

$$\mathbf{F}_x^v = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{yx} \\ q_x + u_x \tau_{xx} + u_y \tau_{yx} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_y^v = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ q_y + u_x \tau_{xy} + u_y \tau_{yy} \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{F}}^v = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \tau_{xx} + \tau_{yy} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Здесь также надо иметь в виду, что $\nabla \mathbf{u} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{u_y}{y}$

1.1.4 Течения неравновесного газа

Во второй главе диссертации будут рассматриваться течения продуктов сгорания высокоэнергетических топлив. В этом случае будут учитываться протекающие в газе (газовой смеси) неравновесные физико-химические процессы, такие как химические реакции и колебательная релаксация (неравновесное заселение колебательных энергетических уровней молекул). Тогда состояние газа в точке будет характеризоваться дополнительным набором безразмерных параметров $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_M)$, описывающих неравновесные процессы (например, это могут быть концентрации химических компонент), а система уравнений (1.1) и (1.2) будет дополняться уравнениями вида

$$\frac{\partial \rho q_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_x q_m}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_y q_m}{\partial y} + \frac{\partial \rho u_z q_m}{\partial z} = \frac{\partial J_{mx}}{\partial x} + \frac{\partial J_{my}}{\partial y} + \frac{\partial J_{mz}}{\partial z} + \rho \Phi_m, \quad m = 1, 2, \dots, M, \quad (1.3)$$

$$J_{mx} = \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial q_m}{\partial x}, \quad J_{my} = \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial q_m}{\partial y}, \quad J_{mz} = \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial q_m}{\partial z},$$

где J_{mx} , J_{my} , J_{mz} – компоненты диффузионного потока, Sc – число Шмидта (далее полагается $Sc = Pr$), $\Phi_m = \Phi_m(p, \rho, \mathbf{q})$ – функции, определяемые теорией неравновесных физико-химических процессов.

Заметим, что при отсутствии диффузии (приближение уравнений Эйлера) функции Φ_m есть скорости изменения параметров q_m в фиксированной частичке газа, то есть в лагранжевых координатах можно записать

$$\frac{dq_m}{dt} = \Phi_m, \quad m = 1, 2, \dots, M, \quad (1.4)$$

где $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_x \frac{\partial}{\partial x} + u_y \frac{\partial}{\partial y} + u_z \frac{\partial}{\partial z}$.

Для осесимметричных течений вместо (1.3) будем использовать уравнения вида

$$\frac{\partial \rho q_m}{\partial t} + \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y \rho u_x q_m}{\partial x} + \frac{\partial y \rho u_y q_m}{\partial y} \right) = \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y J_{mx}}{\partial x} + \frac{\partial y J_{my}}{\partial y} \right) + \rho \Phi_m, \quad m = 1, 2, \dots, M.$$

В случае использования модели неравновесного газа будет полагаться, что удельная энтальпия есть известная функция

$$h = h(T, \mathbf{q}),$$

а для замыкания системы уравнений газовой динамики будет привлекаться уравнение состояния идеального газа

$$p = \frac{\rho R T}{\bar{M}},$$

где T – температура, R – универсальная газовая постоянная, $\bar{M} = \bar{M}(\mathbf{q})$ – молекулярная масса газовой смеси.

Также в диссертации будут рассматриваться многофазные течения – течения газа с твердыми или жидкими частицами. Такие течения будут моделироваться в неравновесном приближении, т.е. в предположении, что частицы и газ имеют собственные вектор скорости и температуру. В этом случае уравнения газовой динамики дополняются уравнениями, описывающими движение частиц, и источниковыми членами, учитывающими импульсно-энергетическое воздействие частиц на газ. Эти уравнения будут выписаны в следующей главе.

1.2 Численная аппроксимация

1.2.1 Геометрические параметры расчетной сетки (метрика).

Численное решение уравнений газовой динамики будет осуществляться в рамках метода конечных объемов. При этом будет рассматриваться гладкая структурированная сетка, для описания которой будут использоваться криволинейные координаты $\xi\eta\zeta$, переводящие сетку физического пространства xuz в кубическую сетку вычислительного пространства с сеточными интервалами $\Delta\xi = \Delta\eta = \Delta\zeta = 1$. Следующие геометрические параметры сетки будут использоваться в качестве метрических величин (здесь и далее сеточные индексы i, j и k соответствуют координатам ξ, η и ζ): $V_{i,j,k}$ – объем ячейки; $(\mathbf{S}_\xi)_{i+\frac{1}{2},j,k}$, $(\mathbf{S}_\eta)_{i,j+\frac{1}{2},k}$ и $(\mathbf{S}_\zeta)_{i,j,k+\frac{1}{2}}$ – вектор-площади боковых граней ячейки в трех сеточных направлениях (каждая вектор-площадь направлена в сторону возрастания

соответствующей координаты). Для наглядности на рисунке 1.1 показан фрагмент расчетной сетки в двумерном случае, когда используются криволинейные координаты $\xi\eta$ и сеточные индексы i и j .

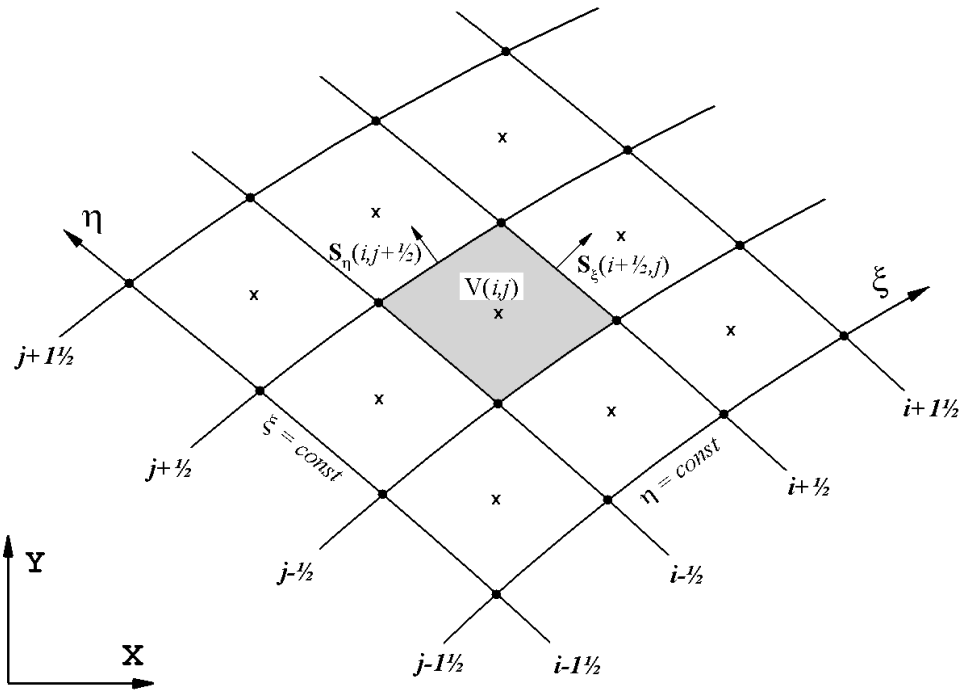


Рисунок 1.1. Фрагмент расчетной сетки.

В общем трехмерном случае вектор-площади боковых граней и объемы ячеек определяются как

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}_\xi &= (S_{\xi x}, S_{\xi y}, S_{\xi z}) = \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial \zeta} - \frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \zeta}, -\frac{\partial z}{\partial \zeta} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \zeta} \frac{\partial z}{\partial \eta}, \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \zeta} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \zeta} \right), \\
 \mathbf{S}_\eta &= (S_{\eta x}, S_{\eta y}, S_{\eta z}) = \left(-\frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \zeta} + \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \zeta}, \frac{\partial z}{\partial \zeta} \frac{\partial x}{\partial \xi} - \frac{\partial x}{\partial \zeta} \frac{\partial z}{\partial \xi}, -\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \zeta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \zeta} \right), \\
 \mathbf{S}_\zeta &= (S_{\zeta x}, S_{\zeta y}, S_{\zeta z}) = \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta}, -\frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial \xi}, \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right), \\
 V &= \left| \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(\xi,\eta,\zeta)} \right|,
 \end{aligned}$$

а в случае моделирования осесимметричных течений используются соотношения

$$\mathbf{S}_\xi = (S_{\xi x}, S_{\xi y}) = \left(y \frac{\partial y}{\partial \eta}, -y \frac{\partial x}{\partial \eta} \right), \quad \mathbf{S}_\eta = (S_{\eta x}, S_{\eta y}) = \left(-y \frac{\partial y}{\partial \xi}, y \frac{\partial x}{\partial \xi} \right), \quad V = y \left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)} \right|$$

1.2.2 Схема Годунова

Теперь обратимся к численной аппроксимации уравнений Эйлера (уравнения (1.1) при $\text{RHS} = 0$). Будем полагать, что на фиксированном временном слое n решение определено, то есть в момент времени $t = t^n$ известны осредненные по каждой ячейке величины $\mathbf{Q}_{i,j,k}^n \equiv (u_x, u_y, u_z, \rho, p)_{i,j,k}^n$. Чтобы получить решение на следующем временном слое $n+1$, проинтегрируем уравнения Эйлера по ячейке и по времени между t^n и $t^{n+1} \equiv t^n + \Delta t$. В результате получим

$$\mathbf{U}_{i,j,k}^{n+1} = \mathbf{U}_{i,j,k}^n - \frac{\Delta t}{V_{i,j,k}} \left[(\mathbf{F}_\xi)_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - (\mathbf{F}_\xi)_{i-1/2,j,k}^{n+1/2} + (\mathbf{F}_\eta)_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - (\mathbf{F}_\eta)_{i,j-1/2,k}^{n+1/2} + (\mathbf{F}_\zeta)_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - (\mathbf{F}_\zeta)_{i,j,k-1/2}^{n+1/2} \right], \quad (1.5)$$

где $\mathbf{U}_{i,j,k}^n = \mathbf{U}(\mathbf{Q}_{i,j,k}^n)$, $\mathbf{U}_{i,j,k}^{n+1} = \mathbf{U}(\mathbf{Q}_{i,j,k}^{n+1})$, \mathbf{F}_ξ , \mathbf{F}_η и \mathbf{F}_ζ – векторы потоков через грани ячейки, определяемые как

$$\mathbf{F}_\xi = S_{\xi x} \mathbf{F}_x + S_{\xi y} \mathbf{F}_y + S_{\xi z} \mathbf{F}_z, \quad \mathbf{F}_\eta = S_{\eta x} \mathbf{F}_x + S_{\eta y} \mathbf{F}_y + S_{\eta z} \mathbf{F}_z, \quad \mathbf{F}_\zeta = S_{\zeta x} \mathbf{F}_x + S_{\zeta y} \mathbf{F}_y + S_{\zeta z} \mathbf{F}_z.$$

Способ вычисления потоков зависит от конкретной схемы. Схема Годунова [1] базируется на предположении о постоянстве параметров газа внутри каждой ячейки и использовании точного решения задачи Римана при вычислении потоков через их боковые грани. Задачу Римана называют также задачей о распаде произвольного разрыва, она решается в координатах $x't$, где ось x' направлена по нормали к боковой грани. Подробное описание алгоритмов решения задачи Римана можно найти в книгах [7] и [146]. Функции потоков, определяемых одним из решателей задачи Римана (RS = Riemann solver), в общем случае можно записать как

$$\begin{aligned} (\mathbf{F}_\xi)_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} &= \mathbf{F}^{RS} \left(\mathbf{Q}_{i,j,k}^n, \mathbf{Q}_{i+1,j,k}^n, (\mathbf{S}_\xi)_{i+1/2,j,k} \right), \\ (\mathbf{F}_\eta)_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} &= \mathbf{F}^{RS} \left(\mathbf{Q}_{i,j,k}^n, \mathbf{Q}_{i,j+1,k}^n, (\mathbf{S}_\eta)_{i,j+1/2,k} \right), \\ (\mathbf{F}_\zeta)_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} &= \mathbf{F}^{RS} \left(\mathbf{Q}_{i,j,k}^n, \mathbf{Q}_{i,j,k+1}^n, (\mathbf{S}_\zeta)_{i,j,k+1/2} \right). \end{aligned}$$

Схема Годунова имеет первый порядок точности по пространству и времени. На примере решения линейного уравнения переноса типа $\partial u / \partial t + a \partial u / \partial x = 0$ (здесь $a = \text{const} > 0$) легко показывается (см., например, [7] и [146]), что она устойчива и монотонна (т.е. в процессе счета сохраняет свойство монотонности функции) при выполнении условия $\Delta t \leq \Delta x / a$. В случае использования схемы Годунова для решения уравнения Эйлера (1.1) ограничение на величину расчетного шага можно записать как

$$\Delta t = C_{cfl} \cdot \min_{i,j} \left\{ (\Delta t^{conv})_{i,j,k} \right\}, \quad \Delta t^{conv} = \frac{V}{\left| (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_\xi) \right| + \left| (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_\eta) \right| + \left| (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_\zeta) \right| + a (S_\xi + S_\eta + S_\zeta)},$$

где $S_\xi = |\mathbf{S}_\xi|$, $S_\eta = |\mathbf{S}_\eta|$ и $S_\zeta = |\mathbf{S}_\zeta|$ – площади боковых граней ячейки в трех сеточных направлениях, $a = \sqrt{\gamma p / \rho}$ – скорость звука, $C_{eff} \leq 1$ – число Куранта.

1.2.3 Схема Колгана

В работе [8] Колган предложил перейти от кусочно-постоянного распределения данных в схеме Годунова на кусочно-линейное распределение, которое на каждом временном слое восстанавливается по известным величинам $\mathbf{Q}_{i,j}^n$ (такое восстановление называют процедурой реконструкции кусочно-линейного распределения). В случае использования достаточно 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, будут определяться как

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{i+\frac{1}{2},j,k}^n &= \mathbf{Q}_{i,j,k}^n + \frac{1}{2} \Delta_\xi \mathbf{Q}_{i,j,k}^n, & \mathbf{Q}_{i-\frac{1}{2},j,k}^n &= \mathbf{Q}_{i,j,k}^n - \frac{1}{2} \Delta_\xi \mathbf{Q}_{i,j,k}^n, \\ \mathbf{Q}_{i,j+\frac{1}{2},k}^n &= \mathbf{Q}_{i,j,k}^n + \frac{1}{2} \Delta_\eta \mathbf{Q}_{i,j,k}^n, & \mathbf{Q}_{i,j-\frac{1}{2},k}^n &= \mathbf{Q}_{i,j,k}^n - \frac{1}{2} \Delta_\eta \mathbf{Q}_{i,j,k}^n, \\ \mathbf{Q}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n &= \mathbf{Q}_{i,j,k}^n + \frac{1}{2} \Delta_\zeta \mathbf{Q}_{i,j,k}^n, & \mathbf{Q}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n &= \mathbf{Q}_{i,j,k}^n - \frac{1}{2} \Delta_\zeta \mathbf{Q}_{i,j,k}^n, \end{aligned}$$

а потоки рассчитываются по соотношениям

$$\begin{aligned} (\mathbf{F}_\xi)_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{F}^{RS} \left(\mathbf{Q}_{i+\frac{1}{2},j,k}^n, \mathbf{Q}_{i+\frac{1}{2},j,k}^n, (\mathbf{S}_\xi)_{i+\frac{1}{2},j,k} \right), \\ (\mathbf{F}_\eta)_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{F}^{RS} \left(\mathbf{Q}_{i,j+\frac{1}{2},k}^n, \mathbf{Q}_{i,j+\frac{1}{2},k}^n, (\mathbf{S}_\eta)_{i,j+\frac{1}{2},k} \right), \\ (\mathbf{F}_\zeta)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{F}^{RS} \left(\mathbf{Q}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n, \mathbf{Q}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n, (\mathbf{S}_\zeta)_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right). \end{aligned}$$

Для расчета приращений (или наклонов величин, если приращения поделить на размер ячейки в соответствующем сеточном направлении) Колган сформулировал принцип минимальных значений производной (сокращенно – ПМП), который первоначально выглядел как

$$\Delta f_i = \min\text{mod}(\Delta f_{i-\frac{1}{2}}, \Delta f_{i+\frac{1}{2}}), \quad \min\text{mod}(a, b) \equiv \begin{cases} a, & \text{если } |a| \leq |b|, \\ b, & \text{если } |b| < |a|, \end{cases}$$

Позднее ПМП стали называть ограничителем $\min\text{mod}$ и в него добавили условие обнуления производной вблизи локальных экстремумов. Современная версия ограничителя $\min\text{mod}$ имеет следующий вид

$$\Delta f_i = \min\text{mod}(\Delta f_{i-\frac{1}{2}}, \Delta f_{i+\frac{1}{2}}), \quad \min\text{mod}(a, b) \equiv \begin{cases} a, & \text{если } |a| \leq |b| \text{ и } ab > 0, \\ b, & \text{если } |b| < |a| \text{ и } ab > 0, \\ 0, & \text{если } ab \leq 0. \end{cases} \quad (1.6)$$

В случае расчета многомерных задач на гладкой структурированной сетке процедура реконструкции сводится к вычислению приращений $\Delta_{\xi} \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$, $\Delta_{\eta} \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$ и $\Delta_{\zeta} \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$ по единому алгоритму (1.6) для каждого сеточного направления независимо (одномерная реконструкция).

Таким образом, процедура реконструкции в схеме Колгана позволяет уточнить параметры справа и слева от боковой грани, и эти параметры используются в качестве входных данных к задаче Римана. По сравнению со схемой Годунова, схема Колгана повышает порядок аппроксимации по пространству до второго, однако порядок аппроксимации по времени у нее остается первым. Поэтому основной областью применения схемы Колгана являются стационарные задачи, решаемые методом установления по времени. Также заметим, что схема Колгана имеет более жесткое ограничение на расчетный шаг; как правило, при ее использовании выбирают число Куранта $C_{cfl} \leq 0.5$.

1.2.4 Схема Годунова-Колгана-Родионова

В работе [14] автор предложил специальный алгоритм типа предиктор-корректор, позволяющий повысить порядок аппроксимации по времени схемы Колгана. Для определенности, и вслед за работой [147], модифицированную таким образом схему будем называть схемой Годунова-Колгана-Родионова или схемой ГКР.

Расчет по схеме ГКР состоит из трех этапов.

1. *Процедура реконструкции.* На первом этапе, как и в схеме Колгана, вычисляются приращения $\Delta_{\xi} \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$, $\Delta_{\eta} \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$ и $\Delta_{\zeta} \mathbf{Q}_{i,j,k}^n$.

2. *Шаг предиктор.* На втором этапе вычисляются предварительные значения величин $\tilde{\mathbf{Q}}_{i,j,k}^{n+1}$ на новом временном слое. Они находятся из решения системы уравнений (1.5), но в отличие от схемы Колгана здесь потоки через боковые грани вычисляются по тем граничным экстраполированным величинам, которые являются внутренними по отношению к интегрируемой ячейке. Таким образом, для ячейки (i, j, k) на этапе предиктор вектор-потоки вычисляются по простым соотношениям:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{F}_\xi)^{n+1/2}_{i-1/2,j,k} &= \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}^n_{i-1/2+,j,k}, (\mathbf{S}_\xi)_{i-1/2,j,k}\right), & (\mathbf{F}_\xi)^{n+1/2}_{i+1/2,j,k} &= \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}^n_{i+1/2-,j,k}, (\mathbf{S}_\xi)_{i+1/2,j,k}\right), \\
(\mathbf{F}_\eta)^{n+1/2}_{i,j-1/2,k} &= \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}^n_{i,j-1/2+,k}, (\mathbf{S}_\eta)_{i,j-1/2,k}\right), & (\mathbf{F}_\eta)^{n+1/2}_{i,j+1/2,k} &= \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}^n_{i,j+1/2-,k}, (\mathbf{S}_\eta)_{i,j+1/2,k}\right), \\
(\mathbf{F}_\zeta)^{n+1/2}_{i,j,k-1/2} &= \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}^n_{i,j,k-1/2+}, (\mathbf{S}_\zeta)_{i,j,k-1/2}\right), & (\mathbf{F}_\zeta)^{n+1/2}_{i,j,k+1/2} &= \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}^n_{i,j,k+1/2-}, (\mathbf{S}_\zeta)_{i,j,k+1/2}\right).
\end{aligned}$$

Подчеркнем, что на шаге предиктор предварительные значения величин на новом временном слое вычисляются без решения задачи Римана и с нарушением консервативности системы (для соседних ячеек используются различные вектор-потоки через общую грань).

3. *Шаг корректор.* На третьем этапе снова решается система уравнений (1.5) и находятся окончательные значения величин $\mathbf{Q}^{n+1}_{i,j,k}$. Однако в отличие от шага предиктор здесь вектор-потоки вычисляются на промежуточном временном слое $n+1/2$ и при этом используется решение задачи Римана. Входные параметры для задачи Римана (параметры по обе стороны от боковой грани на слое $n+1/2$) вычисляются по соотношениям

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}^{n+1/2}_{i+1/2-,j,k} &= \mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j,k} + \frac{1}{2} \Delta_\xi \mathbf{Q}^n_{i,j,k}, & \mathbf{Q}^{n+1/2}_{i-1/2+,j,k} &= \mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j,k} - \frac{1}{2} \Delta_\xi \mathbf{Q}^n_{i,j,k}, \\
\mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j+1/2-,k} &= \mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j,k} + \frac{1}{2} \Delta_\eta \mathbf{Q}^n_{i,j,k}, & \mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j-1/2+,k} &= \mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j,k} - \frac{1}{2} \Delta_\eta \mathbf{Q}^n_{i,j,k}, \\
\mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j,k+1/2-} &= \mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j,k} + \frac{1}{2} \Delta_\zeta \mathbf{Q}^n_{i,j,k}, & \mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j,k-1/2+} &= \mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j,k} - \frac{1}{2} \Delta_\zeta \mathbf{Q}^n_{i,j,k},
\end{aligned}$$

где $\mathbf{Q}^{n+1/2}_{i,j,k} = (\mathbf{Q}^n_{i,j,k} + \tilde{\mathbf{Q}}^{n+1}_{i,j,k}) / 2$.

Подчеркнем, что на шаге корректор процедура реконструкции не пересчитывается, здесь используются приращения, полученные на первом этапе для n -го временного слоя.

Таким образом, если схема Колгана состоит из трех главных элементов – вычисление приращений, решение задачи Римана и процедура интегрирования по ячейке (решение системы уравнений (1.5)), то схема ГКР состоит из этих же трех элементов, но здесь интегрирование по ячейке осуществляется дважды. Такая простота алгоритма схемы ГКР обуславливает ее практическую привлекательность: повышение порядка аппроксимации по времени в ней достигается при минимальных вычислительных затратах. Важным 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 работе автора [15] был описан вариант схемы ГКР, отличающийся способом вычисления приращений $\Delta_\xi \mathbf{Q}^n_{i,j,k}$, $\Delta_\eta \mathbf{Q}^n_{i,j,k}$ и $\Delta_\zeta \mathbf{Q}^n_{i,j,k}$ в процедуре реконструкции. В новом варианте вместо ограничителя $\min\text{mod}$ (1.6) предложено использовать ограничитель Ван Лира [12], который можно записать как

$$\Delta f_i = \text{MC}(\Delta f_{i-\frac{1}{2}}, \Delta f_{i+\frac{1}{2}}), \quad \text{MC}(a, b) \equiv \min\left(\frac{a+b}{2}, 2 \min\text{mod}(a, b)\right), \quad (1.7)$$

Здесь сокращение MC взято из книги [148] (MC = monotonized central-difference reconstruction). Применение ограничителя MC в схеме ГКР вместо ограничителя minmod позволяет существенно повысить точность расчета. В разделе 1.4 будут приведены примеры тестовых расчетов с использованием двух вариантов схемы ГКР.

1.2.5 Аппроксимация уравнений Навье-Стокса.

В случае решения уравнений Навье-Стокса конвективные члены (левые части уравнений) будут аппроксимироваться так же, как в случае решения уравнений Эйлера – согласно схеме ГКР. Дискретизация правых частей (1.2) (диффузионных членов) будет осуществляться по явным соотношениям вида

$$\text{RHS} = \frac{1}{V_{i,j,k}} \left[(\mathbf{F}_\xi^v)_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - (\mathbf{F}_\xi^v)_{i-\frac{1}{2},j,k}^n + (\mathbf{F}_\eta^v)_{i,j+\frac{1}{2},k}^n - (\mathbf{F}_\eta^v)_{i,j-\frac{1}{2},k}^n + (\mathbf{F}_\zeta^v)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - (\mathbf{F}_\zeta^v)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \right],$$

где $\mathbf{F}_m^v = S_{mx} \mathbf{F}_x^v + S_{my} \mathbf{F}_y^v + S_{mz} \mathbf{F}_z^v$, $m = \xi, \eta, \zeta$ – вязкие вектор-потоки через грани ячейки. При их вычислении будут использоваться центрально-разностные аппроксимации. Так, например, любой из параметров потока и его производные по декартовым координатам в центре грани $(i+\frac{1}{2}, j, k)$ будут рассчитываться по следующим правилам (здесь для упрощения опущен верхний индекс n)

$$f_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{1}{2}(f_{i,j,k} + f_{i+1,j,k}), \quad \left(\frac{\partial f}{\partial m}\right)_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{2}{(V_{i,j,k} + V_{i+1,j,k})} \left(S_{\xi m} \frac{\partial f}{\partial \xi} + S_{\eta m} \frac{\partial f}{\partial \eta} + S_{\zeta m} \frac{\partial f}{\partial \zeta} \right), \quad m = x, y, z,$$

где

$$S_{\xi m} = (S_{\xi m})_{i+\frac{1}{2},j,k}, \quad S_{\eta m} = \frac{1}{4} \left[(S_{\eta m})_{i,j-\frac{1}{2},k} + (S_{\eta m})_{i,j+\frac{1}{2},k} + (S_{\eta m})_{i+1,j-\frac{1}{2},k} + (S_{\eta m})_{i+1,j+\frac{1}{2},k} \right],$$

$$S_{\zeta m} = \frac{1}{4} \left[(S_{\zeta m})_{i,j,k-\frac{1}{2}} + (S_{\zeta m})_{i,j,k+\frac{1}{2}} + (S_{\zeta m})_{i+1,j,k-\frac{1}{2}} + (S_{\zeta m})_{i+1,j,k+\frac{1}{2}} \right], \quad \frac{\partial f}{\partial \xi} = f_{i+1,j,k} - f_{i,j,k},$$

$$\frac{\partial f}{\partial \eta} = \frac{1}{4} (f_{i,j+1,k} + f_{i+1,j+1,k} - f_{i,j-1,k} - f_{i+1,j-1,k}), \quad \frac{\partial f}{\partial \zeta} = \frac{1}{4} (f_{i,j,k+1} + f_{i+1,j,k+1} - f_{i,j,k-1} - f_{i+1,j,k-1}).$$

Подробное описание аппроксимации диффузионных и конвективных членов в криволинейных координатах для случая расчета осесимметричных течений можно найти в [142].

Итак, правые части уравнений Навье-Стокса аппроксимируются соотношениями явного вида и добавляются в схему ГКР как источниковые члены, которые остаются постоянными (не пересчитываются) на всех этапах перехода от временного слоя n к следующему слою $n+1$. Явная аппроксимация правых частей (1.2) 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 $\Delta t \leq [a / \Delta x + 2d / \Delta x^2]^{-1}$. В случае решения уравнений Навье-Стокса (1.1), (1.2) будет использоваться следующее ограничение на величину расчетного шага

$$\Delta t = C_{cfl} \cdot \min_{i,j} \left\{ \left[\frac{1}{(\Delta t^{conv})_{i,j}} + \frac{1}{(\Delta t^{diff})_{i,j}} \right]^{-1} \right\}, \quad \Delta t^{diff} = \frac{\min(3/4, Pr)}{2} \frac{\rho}{\mu} \frac{V^2}{(S_\xi^2 + S_\eta^2 + S_\zeta^2)}. \quad (1.8)$$

1.2.6 Моделирование неравновесных течений.

Теперь перейдем к рассмотрению течений газа с неравновесными физико-химическими процессами. Как уже говорилось в разделе 1.1.4, в этом случае к уравнениям газовой динамики (1.1) и (1.2) добавляется уравнения (1.3), описывающие неравновесные процессы. Например, в случае химических реакций это уравнения для концентраций компонент газовой смеси.

В работе [14] автор сразу описал схему ГКР применительно к расчету течений неравновесного газа. По сравнению с алгоритмом расчета течений совершенного газа здесь в схему привнесены два новых элемента.

Первый важный элемент касается выбора аппроксимации для членов Φ_m в правых частях уравнений (1.3), ответственных за физико-химические процессы. Поскольку от расчетной схемы требовалось, чтобы она была универсальной и работала при любых временах релаксации – от химически «замороженных» до равновесных течений, то выбор был сделан в пользу полунявной аппроксимации вида

$$\Phi_m(P, T, \mathbf{q}) \rightarrow s [\Phi_m]_{i,j,k}^n + (1-s) [\Phi_m]_{i,j,k}^{n+1}, \quad (1.9)$$

где $s < 0.5$ – параметр схемы (в расчетах обычно принимается $s = 0.4$).

Заметим, что неявность аппроксимации (1.9) «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. Более подробно методика совместного решения уравнений газовой динамики и уравнений (1.3) будет описана в разделе 1.3.2.

Второй важный элемент – это решение задачи Римана в случае моделирования неравновесных течений. Здесь был сделан выбор 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 ($t \rightarrow +0$). В таком случае скорость звука в задаче Римана определяется из соотношений

$$a = \sqrt{\gamma_{fr} \frac{p}{\rho}}, \quad \gamma_{fr} = \frac{C_p}{C_v}, \quad C_p = \left. \frac{\partial h(T, \mathbf{q})}{\partial T} \right|_{\mathbf{q}=\text{const}}, \quad C_v = C_p - \frac{R}{M},$$

где γ_{fr} – «замороженный» показатель адиабаты.

В разделе 1.4.3 будут представлены данные расчета тестовой задачи, демонстрирующие эффективность схемы ГКР при моделировании течений неравновесного газа в широком диапазоне времен релаксации.

1.2.7 Метод маршировки по пространству

При моделировании стационарного, полностью сверхзвукового течения в рамках уравнений Эйлера можно из уравнений (1.1) исключить производные по времени и решать задачу более экономичным способом – методом маршировки по пространству или, говоря иначе, маршевым методом. Например, в случае выполнения условия $u_x > a$ во всей расчетной области маршевый метод будет заключаться в последовательном переходе вдоль оси x в положительном направлении от одного сечения $x = \text{const}$ к другому. Можно сказать, что 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 решения стационарных задач был подробно описан Ивановым, Крайко и Михайловым в работе [5]. Его обобщение на схему Колгана или схему ГКР вполне очевидно и не требует дополнительных пояснений.

В случае моделирования вязких течений маршевый подход, строго говоря, неприменим, даже в случае отсутствия дозвуковых областей. Однако во многих практических задачах допустимо использование «параболизированного» варианта уравнений Навье-Стокса, когда из правых частей уравнений исключены все производные по продольному (маршевому) направлению. В этом случае становится возможным применение маршевого метода к расчету стационарных вязких течений. Такой подход будет активно использоваться во второй главе диссертации, где и будет дано его описание.

1.3 Программная реализация

Наряду с эффективностью и экономичностью, привлекательной особенностью изложенных в разделе 1.2 вычислительных алгоритмов является их универсальность. Это

свойство крайне важно в случае их применения к моделированию разнотипных неравновесных течений в различных прикладных задачах (независимых или связанных). Поэтому при программной реализации вычислительных алгоритмов автором были выработаны определенные принципы построения программ, поддерживающих это свойство универсальности. В данном разделе будут рассмотрены главные из этих принципов.

1.3.1 Расположение параметров в массивах

Как уже говорилось, в данной работе численное решение уравнений газовой динамики осуществляется в рамках метода конечных объемов с использованием гладкой структурированной сетки. Поэтому кажется естественным размещать информацию о параметрах течения в массивах вида: $S(L0, K0, J0, I0)$ – в трехмерных задачах, $S(L0, J0, I0)$ – в двумерных задачах, $S(L0, I0)$ – в одномерных задачах. Здесь в многомерных массивах максимальные значения индексов означают следующие: $I0, J0$ и $K0$ – количество ячеек вдоль сеточных направлений i, j и k (соответствуют координатам ξ, η и ζ), $L0$ – количество параметров, определяющих состояние газа в ячейке (в ее центре). Выбор такой последовательности индексов в многомерных массивах делает простой передачу в какую-либо подпрограмму всего набора параметров газа в конкретной ячейке. Например, в случае задания фактического параметра $S(1, K, J, I)$ при обращении к подпрограмме, в которой соответствующий формальный параметр описан как одномерный массив $S(L0)$, произойдет передача в эту подпрограмму параметров газа в ячейке с индексами I, J и K . Последовательность расположения параметров газа в массивах типа S показана ниже в таблице.

$S(1)$	$S(2)$	$S(3)$	$S(4)$	$S(5)$	$S(6)$	$S(7)$	$S(8)$...	$S(L0)$
u_x	u_y	u_z	ρ	p	γ	h_0	q_1	...	q_M

В случае расчета течений совершенного газа параметр $L0 = 7$. При моделировании течений неравновесного газа $L0 = 7 + M$, а под параметром γ понимается показатель адиабаты газа, рассчитанный в предположении о «замороженности» физико-химических процессов (он используется при вычислении скорости звука в задаче Римана). Вообще говоря, параметры γ и h_0 в массиве S являются функциями от остальных параметров, однако они хранятся вместе с независимыми параметрами: в общем случае процедура их

вычисления может быть весьма трудоемкой и ее целесообразно не повторять многократно в различных частях блочно-структурированной программы.

Изначально расчетная сетка в конкретной задаче определяется через координаты ее узлов, которые размещаются в массиве вида (здесь для определенности рассматривается трехмерный случай): $R(3, K0+1, J0+1, I0+1)$, где первый индекс отвечает за набор декартовых координат (x, y, z) одного сеточного узла. Перед началом расчета задачи по этим координатам вычисляются параметры сетки: объемы ячеек и вектор-площади боковых граней по каждому из сеточных направлений. Они размещаются в массивах вида: $VOL(K0, J0, I0)$, $SK(3, K0+1, J0, I0)$, $SJ(3, K0, J0+1, I0)$, $SI(3, K0, J0, I0+1)$.

1.3.2 Разбиение программы на расчетные модули

При осуществлении программной реализации описанных в разделе 1.2 алгоритмов численного решения уравнений газовой динамики была выработана определенная практика разбиения программ на блоки, получивших название *расчетные модули*. Под расчетным модулем здесь понимается набор взаимосвязанных подпрограмм, обеспечивающих решение одной подзадачи в составе общей задачи и обладающих максимальной (по возможности) степенью универсальности. В качестве таких отдельных подзадач были выбраны следующие:

- решение уравнений Эйлера (различные варианты в зависимости от размерности задачи и метода решения, в том числе стационарный аналог – маршевый метод);
- расчет правых частей уравнений Навье-Стокса (также в различных вариантах);
- решение задачи Римана и расчет вектор-потоков через боковую грань ячейки (различные методы решения задачи Римана, стационарный аналог задачи Римана);
- решение системы уравнений для неравновесных процессов (различные типы и наборы неравновесных процессов);
- расчет параметров сетки по ее координатам (различная размерность задачи);
- задание граничных условий (различные варианты).

В качестве примера на рисунке 1.2 показана стандартная схема сборки программы из расчетных модулей. В верхней части схемы расположен главный расчетный модуль, отвечающий за построение расчетной сетки, задание начальных данных, организацию счета и за обработку и сохранение результатов счета. Он разрабатывается под конкретную задачу и в общем случае не является универсальным. На схеме также выделены четыре расчетных модуля (газодинамический, термодинамический и кинетические расчетные модули), на которых остановимся подробнее, чтобы объяснить алгоритм получения

связанного решения полной системы уравнений при сохранении высокой степени универсальности каждого из расчетных модулей.



Рисунок 1.2. Схема сборки программы на базе расчетных модулей.

Газодинамический расчетный модуль отвечает за численное интегрирование уравнений Эйлера. Здесь заметим, что в случае решения уравнений Навье-Стокса их правые части (выражения (1.2) и диффузионные члены в уравнениях (1.3) для неравновесных течений) вычисляются в отдельном расчетном модуле (явная аппроксимация, как описано в разделе 1.2.5) и добавляются в схему расчета уравнений Эйлера в качестве источниковых членов (вместе с «диффузионным» ограничением на расчетный шаг (1.8)). Рассмотрим в качестве примера два варианта газодинамического расчетного модуля.

Вариант 1. Предположим, что схема ГКР используется для численного моделирования трехмерных нестационарных течений неравновесного газа. На каждом этапе расчета (на шаге предиктор или на шаге корректор) разностную аппроксимацию уравнений сохранения массы, импульса, энергии и уравнений для неравновесных параметров можно свести к следующей системе уравнений, записанной относительно

неизвестных величин в ячейке на новом временном слое (индексы ячейки i, j и k для удобства опустим)

$$\begin{aligned} (\rho)^{n+1} = a_1, \quad (\rho u_x)^{n+1} = a_2, \quad (\rho u_y)^{n+1} = a_3, \\ (\rho u_z)^{n+1} = a_4, \quad (\rho h_0 - p)^{n+1} = a_5, \end{aligned} \quad (1.10a)$$

$$(\rho q_m)^{n+1} = a_{5+m} + \Delta t \rho^{n+1/2} (\Phi_m)^{n+1/2}, \quad m = 1, 2, \dots M \quad (1.11a)$$

где $a_1, a_2 \dots$ – известные величины, а для аппроксимации $\rho^{n+1/2}$ используется: $\rho^{n+1/2} = \rho^n$ на шаге предиктор и $\rho^{n+1/2} = (\rho^n + \tilde{\rho}^{n+1})/2$ на шаге корректор.

Вариант 2. В случае использования стационарного аналога схемы для маршевого расчета сверхзвукового течения вдоль координаты x вместо (1.10a) и (1.11a) запишем

$$\begin{aligned} (\rho u_x)^{n+1} = a_1, \quad (\rho u_x^2 + p)^{n+1} = a_2, \quad (\rho u_x u_y)^{n+1} = a_3, \\ (\rho u_x u_z)^{n+1} = a_4, \quad (\rho u_x h_0)^{n+1} = a_5, \end{aligned} \quad (1.10б)$$

$$(\rho u_x q_m)^{n+1} = a_{5+m} + \Delta x \rho^{n+1/2} (\Phi_m)^{n+1/2}, \quad m = 1, 2, \dots M. \quad (1.11б)$$

Каждый из двух рассмотренных вариантов газодинамического расчетного модуля является универсальным по отношению к моделируемому газу: входной параметр $L0 = 7 + M$ определяет лишь наличие и количество неравновесных параметров. Аппроксимация членов $(\Phi_m)^{n+1/2}$ (если $L0 > 7$) и замыкание системы уравнений вида (1.10) – (1.11) осуществляется в термодинамическом расчетном модуле.

Термодинамический расчетный модуль ориентирован на конкретный вид моделируемого газа и универсален по отношению к обращающемуся к нему газодинамическому расчетному модулю. Такая универсальность достигается следующим образом.

При вызове термодинамического расчетного модуля в него передается стандартный набор входных параметров:

- массив $S(L0)$ с известными параметрами газа в ячейке на n -м слое;
- параметр c^* и массив параметров $\mathbf{q}^* = (q_1^*, q_2^*, \dots, q_M^*)$, которые получаются после сведения уравнений вида (1.11) к уравнениям: $c^* (q_m^{n+1} - q_m^*) = (\Phi_m)^{n+1/2}$, $m = 1, \dots M$; в рассматриваемых здесь случаях $q_m^* = a_{5+m} / a_1$, а $c^* = a_1 / (\Delta t \rho^{n+1/2})$ (вариант 1) или $c^* = a_1 / (\Delta x \rho^{n+1/2})$ (вариант 2).
- имя подпрограммы, в которой по заданному параметру $\xi = p^{n+1} / \rho^{n+1}$ (входной параметр) вычисляются искомые газодинамические величины u^{n+1} , ρ^{n+1} , p^{n+1} и

h_0^{n+1} , где $u = (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)^{0.5}$ (выходные параметры); эта подпрограмма, являясь составной частью конкретного газодинамического расчетного модуля, сводит незамкнутую систему уравнений вида (1.10) к функциям $u^{n+1}(\xi)$, $\rho^{n+1}(\xi)$, $p^{n+1}(\xi)$ и $h_0^{n+1}(\xi)$.

В термодинамическом расчетном модуле находится связанное решение полной системы уравнений. В случае моделирования неравновесного газа решение ищется итерационно, варьируя параметр ξ (глобальные итерации). На каждой итерации по имеющемуся приближению параметра ξ сначала вычисляются величины u^{n+1} , ρ^{n+1} , p^{n+1} и h_0^{n+1} , а затем осуществляется обращение к кинетическим расчетным модулям.

Кинетические расчетные модули отвечают за моделирование неравновесных физико-химических процессов. Таких расчетных модулей в составе одной задачи может быть несколько, например (как показано на рисунке 1.2), в первом расчетном модуле определяются концентрации компонент газовой смеси, а во втором – энергии колебательных степеней свободы молекул. Более подробно о математических моделях, описывающих такие неравновесные физико-химические процессы, будет рассказано во второй главе диссертации.

Итак, в кинетических расчетных модулях вычисляется набор неравновесных параметров на $n+1$ -м слое. При этом решается система уравнений

$$c^*(q_m^{n+1} - q_m^*) = [s\Phi_m(p^n, \rho^n, \mathbf{q}^n) + (1-s)\Phi_m(p^{n+1}, \rho^{n+1}, \mathbf{q}^{n+1})], \quad m = 1, 2, \dots, M,$$

относительно неизвестных величин \mathbf{q}^{n+1} . Здесь решение находится итерационно методом Ньютона (локальные итерации).

После обращения к кинетическим расчетным модулям все независимые параметры газа на $n+1$ -м слое оказываются определенными. Теперь в термодинамическом расчетном модуле вычисляется температура T^{n+1} (из уравнения состояния), находится удельная энтальпия $h^{n+1} = h(T^{n+1}, \mathbf{q}^{n+1})$ и проверяется выполнение тождества

$$h_0^{n+1} = \frac{1}{2}(u^{n+1})^2 + h^{n+1}. \quad (1.12)$$

Далее, если необходимо, находится следующее приближение для параметра ξ и глобальные итерации повторяются до достижения требуемой точности выполнения (1.12).

В результате такого объединения газодинамического, термодинамического и кинетических расчетных модулей вырабатывается связанное решение полной системы уравнений.

1.4 Примеры тестовых расчетов

В последующих главах диссертации будут подробно обсуждаться результаты применения схемы Годунова-Колгана-Родионова к моделированию различных задач газовой динамики. В данном разделе мы ограничимся лишь рассмотрением нескольких примеров, показывающих преимущество схемы ГКР перед схемами Годунова и Колгана, а также продемонстрируем эффективность схемы в случае моделирования течений неравновесного газа. Два варианта схемы ГКР (использование ограничителя (1.6) или (1.7)) будут обозначаться как ГКР-minmod и ГКР-МС.

1.4.1 Течение в сверхзвуковой части осесимметричного сопла

Эта задача взята из работы [5], где был впервые предложен стационарный аналог схемы Годунова. Задача формулируется следующим образом.

Рассматривается стационарное сверхзвуковое течение совершенного газа с $\gamma = 1.4$ в расширяющейся части осесимметричного сопла от начального сечения $x = 0$ с параметрами $(u_x, u_y, \rho, p) = (\sqrt{4.2}, 0, 1, 1)$ (здесь отношение скорости потока к критической скорости равно 1.5). Контур сопла состоит из плавно сопрягающихся дуги окружности радиуса $R_w = 2$ с центром на оси y (за характерный размер взят радиус сопла в начальном сечении) и прямой с коэффициентом наклона $\text{tg}\theta = 0.5$ по отношению к оси x . Расчет проводится маршевым методом до сечения $x = 6$.

На рисунке 1.3 приведены данные расчетов на сетке с $J = 25$ (количество ячеек в поперечных сечениях $x = \text{const}$) по различным схемам при числах Куранта: $C_{cfl} = 1$ и 0.5 для схемы Годунова и схемы ГКР; $C_{cfl} = 0.5$ и 0.3 для схемы Колгана, которая имеет более жесткое ограничение на расчетный шаг. Данные расчетов сравниваются с эталонным решением (сплошная линия), полученным по схеме ГКР-minmod на сетке с $J = 500$. Представленные результаты наглядно показывают, что при моделировании гладких течений (без разрывов параметров) 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-МС демонстрирует наилучшее приближение к эталонному решению.

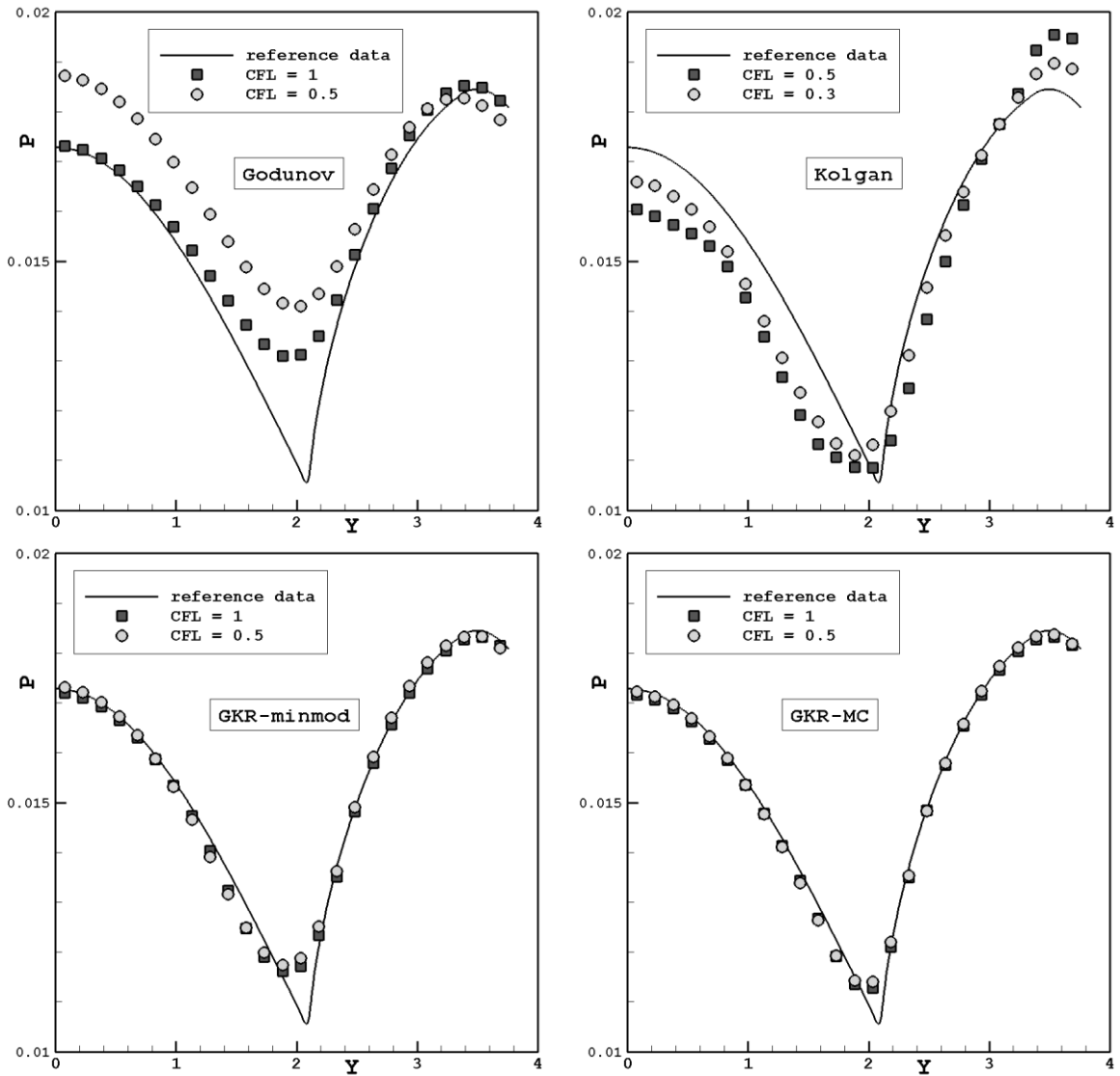


Рисунок 1.3. Распределение давления в сечении $x = 6$. Расчеты по схеме Годунова (вверху слева), схеме Колгана (вверху справа), схеме ГКР-minmod (внизу слева) и схеме ГКР-МС (внизу справа).

1.4.2 Задача Сода

В этой тестовой задаче рассчитывается одномерное течение совершенного газа с $\gamma = 1.4$ в области $0 \leq x \leq 1$ с непроницаемыми границами и со следующими параметрами на начальный момент времени ($t = 0$)

$$(u, \rho, p) = \begin{cases} (0, 1, 1), & \text{если } x < 0.5, \\ (0, 0.125, 0.1), & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

На рисунке 1.4 приведены профили плотности в задаче Сода на момент времени $t = 0.2$, полученные с использованием схем Годунова, Колгана и ГКР-minmod; пунктирная линия на рисунке соответствует точному решению задачи. Рисунок слева соответствует расчетному варианту с $N = 200$ (N – количество ячеек сетки). В этом случае схема Колгана

не уступает схеме ГКР-minmod по точности, что говорит о ее способности хорошо воспроизводить разрывные решения. На рисунке 1.5 приведены данные по относительной ошибке в плотности по норме L^1 в подобласти $0 \leq x \leq 0.5$, где расположен веер разрежения и в распределении параметров имеются только разрывы производной. Видно, что при $N = 200$ схема Колгана обеспечивает более высокую точность, чем показывает схема ГКР-minmod и сопоставимую той, что дает схема ГКР-МС, однако по мере измельчения сетки ее точность существенно падает. Ухудшение сходимости схемы Колгана объясняется тем, что с измельчением расчетной сетки она начинает порождать осцилляции в гладкой части решения. Сказанное наглядно демонстрирует фрагмент решения при $N = 1600$ на рисунке 1.4 справа. Таким образом, можно заключить, что в задаче Сода наилучшую сходимость к точному решению показывает схема ГКР, причем ее вариант с ограничителем МС демонстрирует наилучшее приближение к точному решению.

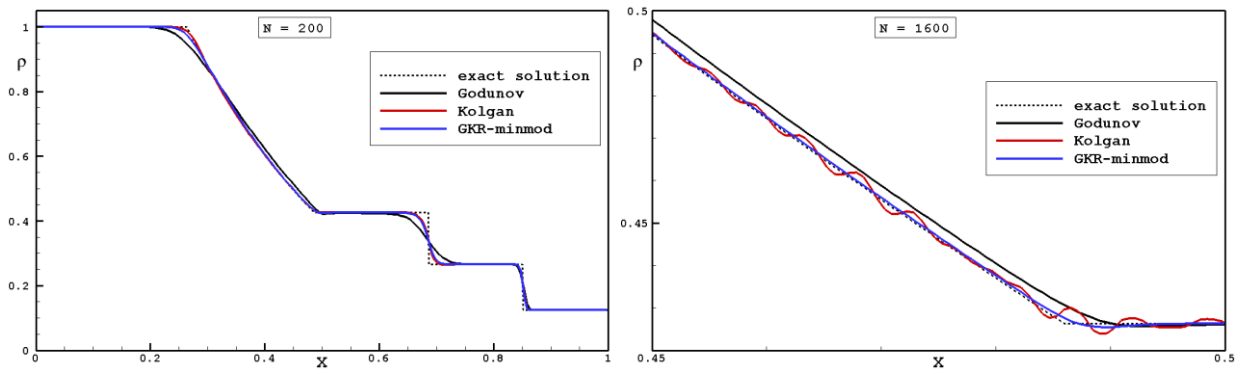


Рисунок 1.4. Распределение плотности на момент времени $t = 0.2$. Расчеты по схемам Годунова, Колгана и ГКР при $N = 200$ (слева) и при $N = 1600$ (справа, фрагмент).

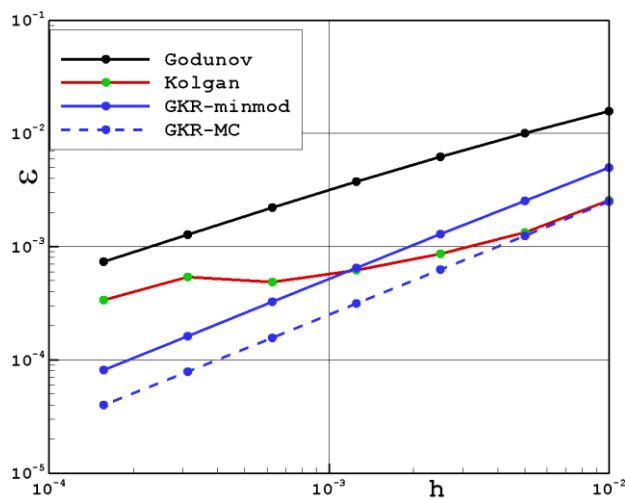


Рисунок 1.5 Средняя относительная ошибка в плотности в подобласти $x < 0.5$ в зависимости от сеточного разрешения $h = 1/N$ для схем Годунова, Колгана и ГКР.

1.4.3 Распространение ударной волны по неравновесному газу

В этой тестовой задаче моделируется одномерное движение ударной волны, за фронтом которой протекает релаксационный процесс. Постановка задачи следующая.

Расчетная область $0 \leq x \leq 1.2$ покрывается регулярной сеткой, состоящей из ячеек единичного размера ($h = 1$). В начальный момент времени ($t = 0$) в расчетной области задаются следующие параметры совершенного газа с $\gamma = 1.25$: $u = -64/27$, $\rho = 1.25$, $p = 1$. Такие же параметры задаются на границе справа (втекающий сверхзвуковой поток), а на границе слева задается непроницаемая стенка. Решение задачи представляет собой ударную волну, движущуюся от стенки со скоростью $u_{sw} = 17/27$ и с параметрами за ее фронтом: $u = 0$, $\rho = 405/68$, $p = 89/9$. В расчет задачи искусственно вводится неравновесный параметр q , начальное значение которого равно давлению (равновесное значение), а процесс релаксации описывается функцией $\Phi = (p - q) / \tau$, где τ – время релаксации. На момент времени $t = 27/17$, когда ударная волна достигает координаты $x = 1$, точное распределение параметра q описывается функцией

$$q(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \geq 1, \\ p_1 - (p_1 - p_0) \exp\left\{-\frac{27(1-x)}{17\tau}\right\}, & \text{если } x < 1, \end{cases}$$

где $p_1 = 89/17$, $p_0 = 1$.

На рисунках 1.6 и 1.7 кружками приведены данные, полученные по схеме ГКР-*minmod* на момент времени $t = 27/17$, причем распределения неравновесного параметра q (рисунок 1.7) даются для нескольких значений времени релаксации: $\tau = 0.001, 0.03, 0.1, 0.3$ и 1 . Для сравнения штриховыми линиями на рисунках показаны точные решения. Как можно видеть, распределения параметра q при всех значениях τ хорошо согласуются с точным решением, причем в расчетном варианте близком к равновесному случаю (при $\tau = 0.001$) профиль q практически повторяет профиль давления, приведенный на рисунке 1.6. Таким образом, представленные данные подтверждают эффективность выбранной в разделе 1.2.6 аппроксимации для членов Φ_m , ответственных за неравновесные процессы.

Теперь проверим другой выбор, сделанный в разделе 1.2.6 – использование предположения о «замороженности» процессов при решении задачи Римана. Для этого сделаем предположение, что рассчитываемое течение близко к равновесному с $\gamma_{eq} = 1.25$ (γ_{eq} определяет энтальпию равновесного газа), а «замороженный» показатель адиабаты, используемый при решении задачи Римана, есть $\gamma_{fr} = 1.4$ (для неравновесных течений всегда справедливо неравенство $\gamma_{fr} \geq \gamma_{eq}$). Такой вариант расчета задачи представлен на рисунке 1.6 сплошными линиями. Видно, что новое решение не сильно отличается от

базового расчета, как по профилю давления, так и по профилю плотности. Это говорит о корректности сделанного выбора и подтверждает известный теперь факт, что в схемах сквозного счета можно использовать приближенное решение задачи Римана. При этом важно, чтобы скорость распространения возмущений в приближенном случае была не меньше, чем в точном решении (в нашем случае $a_{fr} \equiv \sqrt{\gamma_{fr} p / \rho} \geq a_{eq} \equiv \sqrt{\gamma_{eq} p / \rho}$).

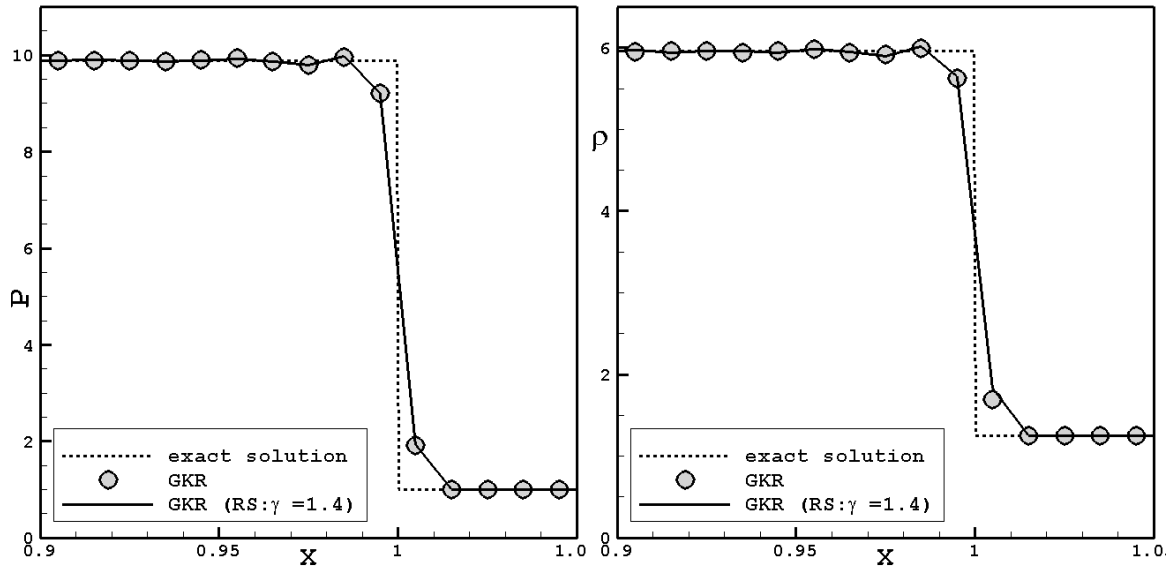


Рисунок 1.6. Распределение давления (слева) и плотности (справа) в окрестности фронта ударной волны. Расчеты по схеме ГКР-minmod, как в базовом варианте, так и с использованием $\gamma = 1.4$ в решателе задачи Римана.

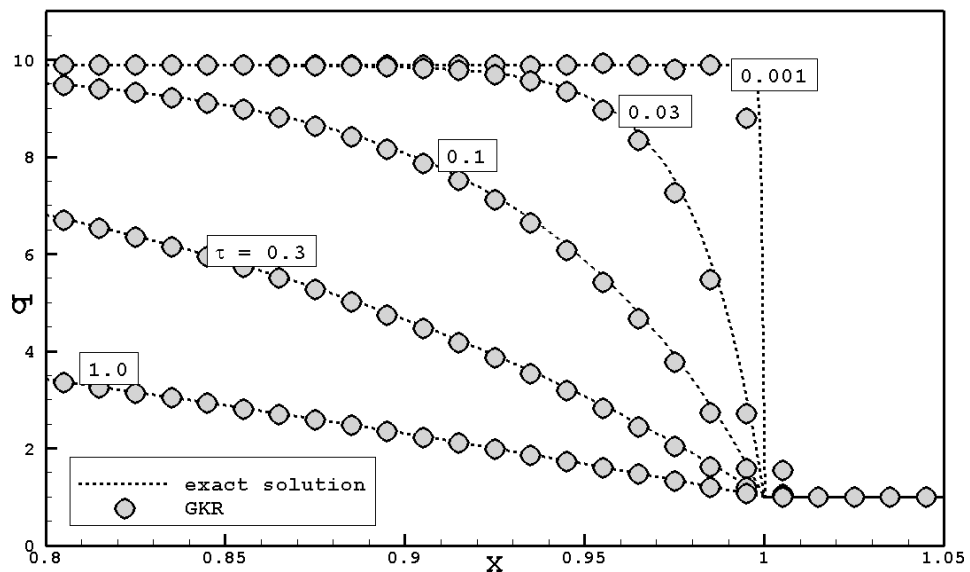


Рисунок 1.7. Распределение неравновесного параметра q в окрестности фронта ударной волны для различных значений τ . Расчеты по схеме ГКР-minmod.

1.5 Выводы по главе

В качестве основных результатов первой главы можно выделить следующее.

1. На базе схемы Годунова и принципа минимальных значений производной Колгана построена простая и эффективная схема второго порядка аппроксимации – схема Годунова-Колгана-Родионова (схема ГКР). Второй порядок аппроксимации по времени в новой схеме достигается применением специальной процедуры типа предиктор-корректор. Продемонстрировано существенное повышение точности счета при переходе от схемы Годунова и схемы Колгана на схему ГКР.

2. Схема ГКР обобщена на случай моделирования течений газа с неравновесными физико-химическими процессами. Представлены данные тестовых расчетов, показывающие эффективность схемы при моделировании неравновесных течений в широком диапазоне времен релаксации.

3. Выработаны базовые принципы разбиения программ на универсальные расчетные модули, способствующие широкому применению разработанных методик к моделированию разнотипных неравновесных течений в различных прикладных задачах.

2 Численное моделирование струй продуктов сгорания ракетных топлив

Данная глава посвящена численному моделированию струй продуктов сгорания ракетных топлив и комплексу программ NARJ (Numerical Analysis of Real Jets). Этот комплекс программ разрабатывался автором во время работы в ЦНИИМАШ, начиная с 1987 года. Специфика работы в отделе оптико-физических исследований под руководством Ю.А. Пластинина с самого начала определила направленность проводимых исследований и наполнение разрабатываемого комплекса программ.

Комплекс программ NARJ нацелен на решение научных и прикладных задач, связанных с необходимостью учета множества физико-химических процессов в высокотемпературных многокомпонентных струях, истекающих из ракетных двигателей в атмосферу на всех этапах полета летательного аппарата (от уровня моря до высот, где внешней атмосферой можно пренебречь). Детальная информация о составе и состоянии продуктов сгорания требуется при диагностике реактивных выхлопов, решении экологических проблем, определении спектроэнергетических характеристик летательных аппаратов, а также для целей дистанционного контроля.

2.1 Объект моделирования

Комплекс программ NARJ позволяет моделировать двумерные стационарные течения продуктов сгорания ракетных топлив в соплах и струях, истекающих в спутный поток воздуха или в вакуум с учетом большого количества физико-химических процессов. В нем реализованы математические модели как однофазных, так и многофазных продуктов сгорания.

2.1.1 Типы топлив

Для детальных расчетов с учетом множества физико-химических процессов используются модели продуктов сгорания двух типов топлив.

Топлива типа С-Н-О-Н. Топлива, состоящие главным образом (то есть, за исключением малых примесей) из соединений углерода, водорода, кислорода и азота, используются в жидкостных ракетных двигателях (ЖРД). Их продукты сгорания

представляют собой газовую смесь, основными компонентами которой являются CO_2 , H_2O , NO , H_2 , O_2 , N_2 , OH , CO , H , O и N .

Топлива типа C-H-O-N-Cl-Al. Топлива, состоящие главным образом из соединений углерода, водорода, кислорода, азота, хлора и алюминия используются в твердотопливных ракетных двигателях (РДТТ). Их продукты сгорания представляют собой многофазную смесь, состоящую из газовых компонент CO_2 , H_2O , NO , H_2 , O_2 , N_2 , OH , HCl , Cl_2 , CO , H , O , N , Cl и частиц окиси алюминия (Al_2O_3).

Для методических и приближенных расчетов в комплексе программ также используются две упрощенные модели продуктов сгорания: модель совершенного газа с заданным показателем адиабаты и модель совершенного газа с частицами Al_2O_3 .

2.1.2 Перечень решаемых задач

Для продуктов сгорания топлив каждого типа в комплексе программ NARJ предусмотрена возможность проведения расчетов нескольких связанных задач.

Течение в сопле. При моделировании течения в осесимметричном сопле (рисунок 2.1а) его контур задается от начального сечения $x = x_1$ в дозвуковой части (где число Маха $M \ll 1$) до выходного сечения $x = x_3$. Все параметры продуктов сгорания в начальном сечении сопла считаются равными параметрам в камере сгорания и вычисляются по заданным давлению, температуре и формуле топлива (в модели совершенного газа вместо формулы топлива задаются значения показателя адиабаты и молекулярной массы).

Расчет течения продуктов сгорания в сопле может проводиться как в одномерном, так и в двумерном приближениях. В последнем случае задача разбивается на две подзадачи. Сначала методом установления по времени рассчитывается течение в до- и трансзвуковой частях сопла (между сечениями $x = x_1$ и $x = x_2$, как показано на рисунке 2.1а), а затем маршевым методом рассчитывается течение в сверхзвуковой части сопла (от сечения $x = x_2$ до сечения $x = x_3$).

Течение в струях. В случае моделирования течения в осесимметричной струе предполагается, что в выходном сечении сопла (сечение $x = 0$ на рисунках 2.1б-г) заданы два потока – внутренний и внешний. Внутренний поток есть поток продуктов сгорания топлива, рассчитанный в одно- или двумерном приближении (задача о течении в сопле), либо заданный пользователем. Кромка сопла предполагается острой (нулевой толщины). Внешний поток есть поток воздуха (смесь N_2 и O_2), направленный вдоль оси сопла; в задаче об истечении продуктов сгорания в вакуум внешний поток отсутствует.

В зависимости от параметров внешнего потока различаются следующие задачи:

- истечение в дозвуковой поток (рисунок 2.1б);

- истечение в сверхзвуковой поток (рисунок 2.1в);
- истечение в сильно разреженный гиперзвуковой поток (рисунок 2.1г);
- истечение в вакуум.

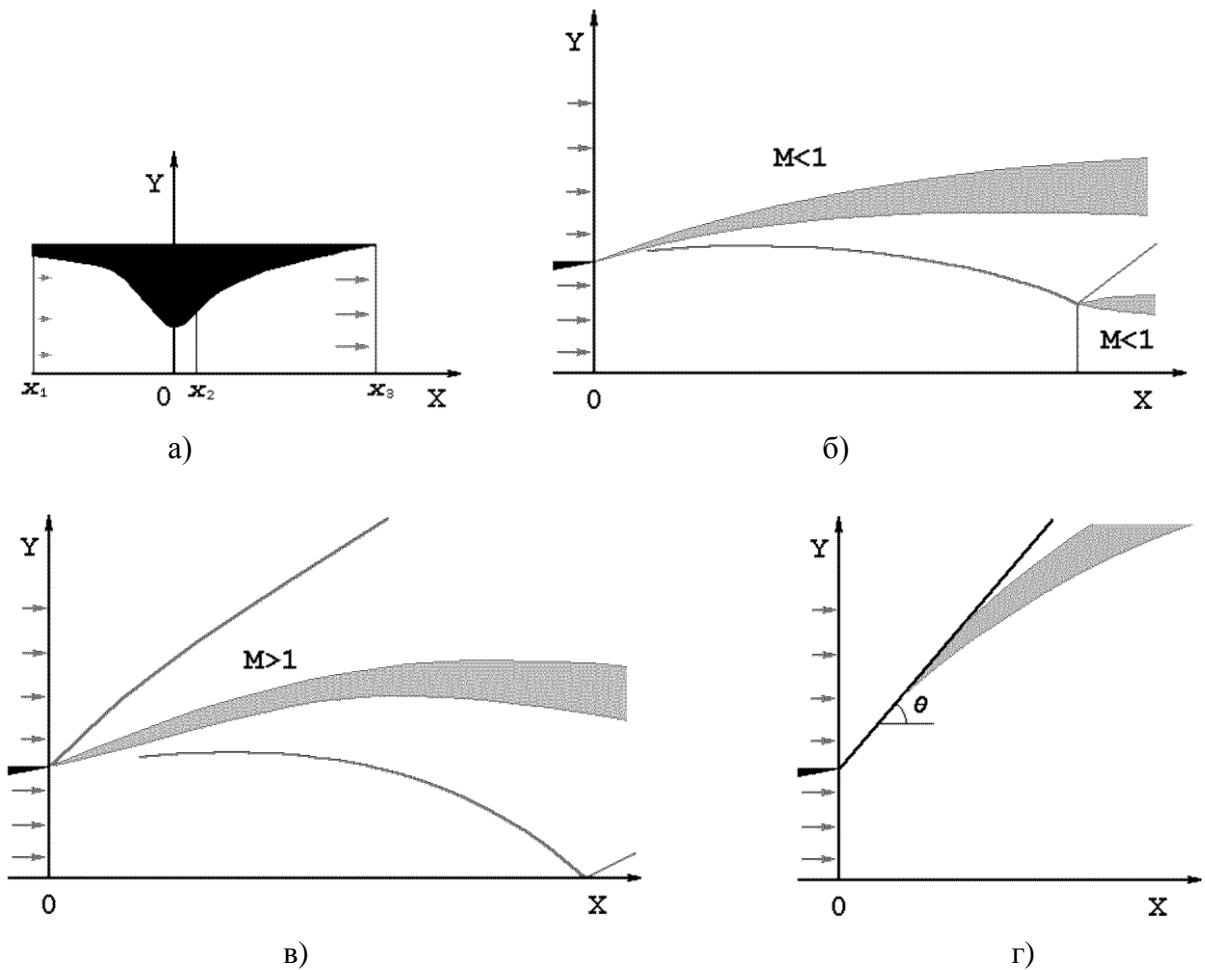


Рисунок 2.1. Схемы течения в различных задачах: а) течение в сопле; б) истечение в дозвуковой поток; в) истечение в сверхзвуковой поток; г) истечение в сильно разреженный гиперзвуковой поток.

Базовым методом моделирования струй является маршевый метод расчета стационарных сверхзвуковых течений. При наличии в расчетной области дозвуковых областей (внешний дозвуковой поток и/или дозвуковая зона за диском Маха, как показано на рисунке 2.1б) используются специальные приближения, позволяющие применять маршевый метод и в этих случаях (такие приближения будут подробно описаны в разделе 2.3). При расчете истечения в сильно разреженный гиперзвуковой поток (то есть, на больших высотах полета) используется приближение полупроницаемой границы, которая ограничивает угол разворота продуктов сгорания у кромки сопла, препятствуя тем самым образованию дозвуковой области перед струей.

2.1.3 Набор учитываемых процессов

Реализованная в комплексе программ NARJ математическая модель течения продуктов сгорания ракетных топлив в соплах и струях объединяет в себе большой набор разнообразных процессов. В данном разделе приводится их систематизированный перечень, включающий необходимые начальные сведения.

Химические реакции. Наиболее активное протекание химических реакций в газовой фазе происходит при движении продуктов сгорания в сопле и при их смешении с внешним потоком воздуха, если газ в области смешения является достаточно плотным. Моделирование химических реакций в обоих случаях осуществляется в неравновесном приближении. При рассмотрении продуктов сгорания топлив типа C-H-O-N учитывается 15 химических реакций среди 11-ти газовых компонент; в продуктах сгорания топлив типа C-H-O-N-Cl-Al учитывается 21 реакция среди 14-ти компонент.

Колебательная релаксация. Неравновесное возбуждение колебательных степеней свободы молекул газовой фазы проявляется наиболее сильно в разреженных потоках и в случае истечения из реактивных двигателей малой тяги. Учет колебательной неравновесности (отклонения энергий колебательных степеней свободы молекул от их равновесных значений) необходим для корректного расчета излучения струй в инфракрасной области спектра. Моделирование колебательной релаксации осуществляется в предположении, что энергетические уровни каждой колебательной моды молекул заселены по закону Больцмана и характеризуются своей колебательной температурой. При рассмотрении продуктов сгорания топлив типа C-H-O-N учитывается 15 процессов колебательного энергообмена среди 6-ти наиболее весомых колебательных мод; в продуктах сгорания топлив типа C-H-O-N-Cl-Al учитывается 19 процессов энергообмена среди 7-ми колебательных мод.

Гомогенная конденсация. Конденсация газовой фазы продуктов сгорания топлив может происходить при их истечении из больших ракетных двигателей в сильно разреженную среду или в вакуум. В этом случае истекающий поток охлаждается до низких температур, оставаясь при этом достаточно плотным. Наиболее активной конденсирующейся компонентой продуктов сгорания является H₂O (пары воды), тогда как для других компонент, таких как CO₂, N₂ и CO, конденсация является незначительной. Моделирование конденсации паров воды осуществляется в гомогенном приближении с использованием классической модели неравновесной конденсации, описываемой в терминах моментного метода.

Ламинарное и турбулентное перемешивание. Процессы вязкости, теплопроводности и диффузии наиболее активно протекают при смешении продуктов сгорания с внешним

потоком (хотя они проявляются и в пограничном слое у стенки сопла, но при расчете течения в струе толщиной пограничного слоя, как правило, можно пренебречь). В достаточно плотных струях процесс перемешивания протекает в турбулентном режиме. Для моделирования таких течений применяются осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса, дополненные одной из разновидностей $k-\varepsilon$ модели турбулентности (двухпараметрическая модель). В случае истечения продуктов сгорания в условиях сильного разрежения турбулентными процессами пренебрегается, и смешение моделируется в ламинарном приближении.

Жидкая и твердая фазы (частицы Al_2O_3). Продукты сгорания топлив типа C-H-O-N-Cl-Al представляют собой многофазную смесь, содержащую полидисперсные частицы Al_2O_3 . Моделирование движения таких частиц в сопле и струе осуществляется при следующих предположениях:

- все частицы имеют сферическую форму и разделены на фракции, каждая из которых характеризуется единым размером частиц;
- частицы увлекаются газовой фазой потока, причем в каждой точке своей траектории они имеют собственные параметры (вектор скорости и температуру), отличные параметров газа;
- частицы не меняют своего размера вдоль траектории движения, не взаимодействуют между собой и не имеют химического воздействия на газовую фазу;
- в разреженных струях учитывается излучение частиц за счет спонтанного объемного высвечивания;
- первоначально частицы находятся в жидком состоянии, однако по мере охлаждения в сопле и струе они могут переходить в твердое состояние;
- процесс перехода в твердое состояние протекает неравновесно и описывается движением фронта кристаллизации частицы от поверхности к центру частицы;
- в твердой частице моделируется процесс объемного перехода из метастабильной γ -фазы в стабильную α -фазу; учет этого процесса необходим для правильного расчета спектроэнергетических характеристик струи, поскольку спектры излучения частиц, находящихся в γ - и α -фазах, существенно отличаются.

2.2 Математическая модель

2.2.1 Химические реакции

Предполагается, что в газовой смеси протекает несколько независимых реакций вида

$$\sum_m C_{nm}^+ A_m = \sum_m C_{nm}^- A_m,$$

где C_{nm}^+ , C_{nm}^- – стехиометрические коэффициенты, показывающие, сколько молекул вещества A_m принимает участие в прямом и обратном направлениях n -ой реакции, соответственно. Таким образом, в результате протекания n -ой реакции в прямом (или обратном) направлении образуется (или уничтожается) $\Delta C_{nm} = C_{nm}^- - C_{nm}^+$ молекул вещества A_m .

Для уравнений химической кинетики мольно-массовые концентрации α_m (массовая доля вещества A_m , деленная на его молекулярную массу) выбираются в качестве q_m . Члены Φ_m в правых частях уравнений (1.4) имеют вид

$$\Phi_m = \frac{1}{\rho} \sum_n \Delta C_{nm} \left[K_n^+ \prod_{m'} (\rho \alpha_{m'})^{C_{nm}^+} - K_n^- \prod_{m'} (\rho \alpha_{m'})^{C_{nm}^-} \right],$$

где K_n^+ и K_n^- – константы протекания n -ой реакции в прямом и обратном направлениях; эти коэффициенты не зависят от концентраций индивидуальных веществ и являются функциями от температуры: $K_n^+ = K_n^+(T)$, $K_n^- = K_n^-(T)$.

В таблице 2.1 для топлив типа С-Н-О-Н (тип А) и С-Н-О-Н-Сl-Аl (тип В) приведен список газообразных компонент продуктов сгорания, принимающих участие в химических реакциях. Набор химических реакций с константами скоростей приведен в таблице 2.2. Они выбраны в соответствии с работами [149, Том 1] и [25, Глава 17]. Константы скоростей протекания реакций в обратном направлении $K_n^-(T)$ определяются с использованием констант равновесия $K_n(T) = K_n^+(T) / K_n^-(T)$, взятых из работы [150].

Выражение для удельной энтальпии газовой смеси записывается как

$$h = \sum_m \alpha_m h_m(T),$$

где h_m – мольная энтальпия m -ой химической компоненты включая теплоту ее образования. Функции $h_m(T)$ для индивидуальных компонент представлены в табличном виде в справочнике [150].

Таблица 2.1. Компоненты, принимающие участие в химических реакциях.

Тип А	1	2	3	4	5	6	7	-	-	8	9	10	11	-
Тип В	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Комп-та	CO_2	H_2O	NO	H_2	O_2	N_2	OH	HCl	Cl_2	CO	H	O	N	Cl

Таблица 2.2. Химические реакции и константы скоростей

$$K_n^+ = AT^{-N} \exp(-E / RT), \text{ м}^6/(\text{кмоль}^2 \cdot \text{с}) \text{ или } \text{м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$$

Тип А	Тип В	Реакция	A	N	E, кал/моль
1	1	$CO + O + M = CO_2 + M$	$3.5 \cdot 10^8$	0	2100
2	2	$OH + H + M = H_2O + M$	$1.2 \cdot 10^{14}$	1	0
3	3	$O + N + M = NO + M$	$3.3 \cdot 10^9$	0	0
4	4	$H + H + M = H_2 + M$	$1.4 \cdot 10^{14}$	1.5	0
5	5	$O + O + M = O_2 + M$	$5.5 \cdot 10^{11}$	0.87	0
6	6	$N + N + M = N_2 + M$	$2.7 \cdot 10^{10}$	0.5	0
7	7	$H + O + M = OH + M$	$3.3 \cdot 10^{12}$	0.5	0
-	8	$Cl + Cl + M = Cl_2 + M$	$3.6 \cdot 10^8$	0	-1800
-	9	$H + Cl + M = HCl + M$	$1.4 \cdot 10^{16}$	2	0
8	10	$OH + CO = CO_2 + H$	$2.5 \cdot 10^9$	0	5100
9	11	$H_2 + OH = H_2O + H$	$1.1 \cdot 10^{11}$	0	8600
10	12	$OH + OH = H_2O + O$	$1.0 \cdot 10^{10}$	0	1200
11	13	$H_2 + O = OH + H$	$1.3 \cdot 10^{10}$	0	9860
12	14	$O_2 + H = OH + O$	$2.2 \cdot 10^{11}$	0	16500
13	15	$O_2 + N_2 = NO + NO$	$5.2 \cdot 10^{10}$	0	107000
14	16	$NO + N = N_2 + O$	$3.0 \cdot 10^{10}$	0	200
15	17	$NO + O = O_2 + N$	$1.1 \cdot 10^{10}$	0	41700
-	18	$Cl + H_2 = HCl + H$	$8.4 \cdot 10^9$	0	4260
-	19	$Cl + H_2O = HCl + OH$	$3.0 \cdot 10^{10}$	0	17600
-	20	$HCl + O = OH + Cl$	$3.6 \cdot 10^9$	0	6000
-	21	$H + Cl_2 = HCl + Cl$	$9.0 \cdot 10^{10}$	0	1200

2.2.2 Колебательная релаксация

Для описания изменения колебательной энергии молекул в газовой смеси используется приближение гармонического осциллятора с больцмановским заселением уровней каждой моды.

Изменение энергии k -ой колебательной степени свободы за счет $V-T$ обмена (колебательно-поступательный обмен) записывается в виде

$$\left[\frac{de_k}{dt} \right]_{V-T} = \frac{\bar{e}_k - e_k}{\tau_k},$$

где $e_k = [\exp(\theta_k / T_k^V) - 1]^{-1}$ – безразмерная энергия k -ой колебательной степени свободы, θ_k – характеристическая колебательная температура, T_k^V – колебательная температура, $\bar{e}_k(T)$ – равновесное значение e_k (когда $T_k^V = T$), $\tau_k = (N_A \rho \sum_m \alpha_m W_{k0}^m)^{-1}$ – время релаксации V - T обмена, $W_{k0}^m(T)$ – константа скорости V - T обмена при столкновении с молекулой m -го типа, N_A – число Авогадро.

Изменение энергии k -ой колебательной степени свободы за счет V - V обмена (колебательно-колебательный обмен) с k' -ой колебательной степенью свободы записывается в виде

$$\left[\frac{de_k}{dt} \right]_{V-V} = \frac{l_k}{g_k} \cdot \frac{e_k^{l_{k'}} (e_k + 1)^{l_k} \exp[(l_{k'} \theta_{k'} - l_k \theta_k) / T] - e_k^{l_k} (e_k + 1)^{l_{k'}}}{\tau_{kk'}}.$$

Здесь g_k – кратность вырождения k -ой колебательной степени свободы, l_k и $l_{k'}$ – числа обмениваемых квантов, $\tau_{kk'}$ – время релаксации V - V обмена. Если колебания k -го и k' -го типов принадлежат одной молекуле, то $\tau_{kk'} = (N_A \rho \sum_m \alpha_m W_{kk'}^m)^{-1}$, в противном случае $\tau_{kk'} = (N_A \rho \alpha_{m(k')} W_{kk'}^m)^{-1}$, где $W_{kk'}^m(T)$ – константа скорости V - V обмена, $m(k')$ – тип молекулы, являющейся носителем колебаний k' -го типа. Для скоростей V - V обмена справедливо равенство: $W_{kk'} = W_{k'k} \exp[(l_k \theta_k - l_{k'} \theta_{k'}) / T]$.

Изменение энергии k -ой колебательной степени свободы за счет радиационной релаксации (когда она принимается в расчет) записывается в виде

$$\left[\frac{de_k}{dt} \right]_{RAD} = -\frac{e_k}{\tau_k^0},$$

где τ_k^0 – время радиационной релаксации k -ой колебательной степени свободы.

Суммируя различные процессы, получим уравнения колебательной кинетики при отсутствии диффузии

$$\frac{de_k}{dt} = \left[\frac{de_k}{dt} \right]_{V-T} + \sum_{k'} \left[\frac{de_k}{dt} \right]_{V-V} + \left[\frac{de_k}{dt} \right]_{RAD}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Эти уравнения дают выражения для членов Φ_m в правых частях кинетических уравнений (1.4), записанных для процессов колебательной релаксации; при этом безразмерные энергии колебательных степеней свободы e_k выбираются в качестве q_m .

Потери энергии за счет радиационной релаксации учитываются в уравнении энергии посредством источникового члена

$$\Phi_h = R \sum_k \alpha_{m(k)} g_k \theta_k \left[\frac{de_k}{dt} \right]_{RAD}.$$

В таблице 2.3 приведен список выбранных колебательных мод с временами их радиационной релаксации для продуктов сгорания топлив типа С-Н-О-Н (тип А) и С-Н-О-Н-Сl-Al (тип В); здесь ν_1 , ν_2 и ν_3 – соответственно симметричные, деформационные и асимметричные моды трехатомных молекул. Вследствие Ферми-резонанса между симметричной и деформационной модами молекулы CO_2 полагается, что их колебательные температуры совпадают. Поэтому в расчетах в качестве общей безразмерной энергии этих колебательных мод используется величина $e_1 \equiv e_{1a} + e_{1b} = [\exp(1920/T_{CO_2(\nu_1, \nu_2)}^V) - 1]^{-1} + [\exp(960/T_{CO_2(\nu_1, \nu_2)}^V) - 1]^{-1}$. Тогда $e_{1a} = (4e_1 + 1 - \sqrt{1 + 8e_1 + 4e_1^2})/6$ и $e_{1b} = (2e_1 - 1 + \sqrt{1 + 8e_1 + 4e_1^2})/6$.

В таблице 2.4 приведен список отобранных V-T и V-V процессов для продуктов сгорания рассматриваемых топлив. Константы скоростей для них берутся в соответствии с работами [151, 152].

Выражение для удельной энтальпии газовой смеси в случае учета колебательной неравновесности записывается как

$$h = \sum_m \alpha_m h_m + R \sum_k \alpha_{m(k)} g_k \theta_k (e_k - \bar{e}_k).$$

Таблица 2.3. Колебательные моды и времена их радиационной релаксации.

Тип А	Тип В	Колебательная мода	θ_k, K	g_k	$(\tau_k^0)^{-1}, 1/c$
1	1	$CO_2(\nu_1)$	1920	1	3
		$CO_2(\nu_2)$	960	2	
2	2	$CO_2(\nu_3)$	3380	1	420
3	3	$N_2(\nu)$	3353	1	0
4	4	$CO(\nu)$	3070	1	30
5	5	$H_2O(\nu_2)$	2300	1	19
6	6	$O_2(\nu)$	2230	1	0
-	7	$HCl(\nu)$	4160	1	40

Таблица 2.4. Процессы колебательного энергообмена.

Тип А	Тип В	Процесс
1	1	$CO_2(v_1, v_2 + 1, v_3) + M = CO_2(v_1, v_2, v_3) + M$
2	2	$CO_2(v_1, v_2, v_3 + 1) + M = \begin{cases} CO_2(v_1, v_2 + 3, v_3) + M & \text{или} \\ CO_2(v_1 + 1, v_2 + 1, v_3) + M \end{cases}$
3	3	$CO_2(v_1, v_2, v_3 + 1) + N_2(v) = CO_2(v_1, v_2, v_3) + N_2(v + 1)$
4	4	$CO_2(v_1, v_2, v_3 + 1) + CO(v) = CO_2(v_1, v_2, v_3) + CO(v + 1)$
5	5	$N_2(v + 1) + M = N_2(v) + M$
6	6	$N_2(v + 1) + CO_2(v_1, v_2, v_3) = \begin{cases} N_2(v) + CO_2(v_1, v_2 + 3, v_3) & \text{или} \\ N_2(v) + CO_2(v_1 + 1, v_2 + 1, v_3) \end{cases}$
7	7	$N_2(v + 1) + CO(v) = N_2(v) + CO(v + 1)$
8	8	$N_2(v + 1) + H_2O(v_2) = N_2(v) + H_2O(v_2 + 1)$
9	9	$CO(v + 1) + M = CO(v) + M$
10	10	$CO(v + 1) + CO_2(v_1, v_2, v_3) = \begin{cases} CO(v) + CO_2(v_1, v_2 + 3, v_3) & \text{или} \\ CO(v) + CO_2(v_1 + 1, v_2 + 1, v_3) \end{cases}$
11	11	$CO(v + 1) + H_2O(v_2) = CO(v) + H_2O(v_2 + 1)$
12	12	$H_2O(v_2 + 1) + M = H_2O(v_2) + M$
13	13	$H_2O(v_2 + 1) + O_2(v) = H_2O(v_2) + O_2(v + 1)$
14	14	$O_2(v + 1) + M = O_2(v) + M$
15	15	$O_2(v + 1) + CO_2(v_1, v_2, v_3) = O_2(v) + CO_2(v_1 + 1, v_2, v_3)$
-	16	$HCl(v + 1) + M = HCl(v) + M$
-	17	$HCl(v + 1) + CO_2(v_1, v_2, v_3) = HCl(v) + CO_2(v_1, v_2, v_3 + 1)$
-	18	$HCl(v + 1) + N_2(v) = HCl(v) + N_2(v + 1)$
-	19	$HCl(v + 1) + CO(v) = HCl(v) + CO(v + 1)$

2.2.3 Гомогенная конденсация паров воды

Кинетические уравнения, описывающие процесс неравновесной конденсации имеют вид [153]

$$\frac{d\Omega_0}{dt} = \frac{I}{\rho}, \quad \frac{d\Omega_1}{dt} = \dot{r}\Omega_0 + r_* \frac{I}{\rho}, \quad \frac{d\Omega_2}{dt} = 2\dot{r}\Omega_1 + r_*^2 \frac{I}{\rho}, \quad \dots \quad \frac{d\Omega_n}{dt} = n\dot{r}\Omega_{n-1} + r_*^n \frac{I}{\rho},$$

где r_* – радиус капли критического размера, $\dot{r} = dr/dt$ – скорость роста капель, I – скорость образования центров конденсации в пересыщенном паре (скорость ядрообразования в единице объема), $\Omega_n = \int_{r_*}^{\infty} r^n f(r) dr$, $f(r)$ – удельная функция распределения капель по размерам ($\Omega_0 = \int_{r_*}^{\infty} f(r) dr$ – удельная числовая плотность).

Входящие в кинетические уравнения параметры r_* , \dot{r} и I определяются по формулам

$$r_* = \frac{2\sigma_c M_c}{\ln(p_c / p_s) \rho_c^0 RT}, \quad \dot{r} = \frac{\alpha(p_c - p_s)}{\rho_c^0} \sqrt{\frac{M_c}{2\pi RT}}, \quad I = \frac{\alpha}{\rho_c^0} \sqrt{\frac{2\sigma_c M_c}{\pi N_A}} \left(\frac{N_A p_c}{RT}\right)^2 \exp\left(-\frac{4\pi r_*^2 \sigma_c N_A}{3RT}\right),$$

где $\alpha \approx 1$ – коэффициент конденсации, M_c – молекулярная масса конденсирующейся компоненты, σ_c – коэффициент поверхностного натяжения, ρ_c^0 – плотность сконденсировавшейся жидкости, $p_s(T)$ – давление насыщения, $p_c = p\bar{M}\alpha_c(1-C)$ – парциальное давление конденсирующегося пара, α_c – мольно-массовая концентрация конденсирующейся компоненты. Доля жидкой (сконденсировавшейся) фазы, отнесенная к общей массе конденсирующейся компоненты смеси, рассчитывается по формуле

$$C = \frac{4\pi\rho_c^0}{3\alpha_c M_c} \Omega_3,$$

а молекулярный вес газовой смеси равен

$$\bar{M} = \frac{1}{\sum_n \alpha_n - C\alpha_c}.$$

Выражение для удельной энтальпии газовой смеси в случае учета гомогенной конденсации имеет вид

$$h = \sum_m \alpha_m h_m - C\alpha_c M_c L_c,$$

где L_c – удельная теплота фазового перехода конденсирующейся компоненты.

При расчете конденсации паров воды используются следующие данные:

$$M_c = 18, \quad \sigma_c = 0.09 \text{ Н/м}, \quad \rho_c^0 = 1000 \text{ кг/м}^3, \quad L_c = 2.5 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг},$$

$$p_s = \exp(28.81 - 6125 / T) \text{ Па}.$$

2.2.4 Турбулентное перемешивание

При моделировании турбулентных течений в рамках осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS = Reynolds-averaged Navier-Stokes equations) используется та же система уравнений газовой динамики (1.1), (1.2), что и для ламинарных течений. Однако в этом случае под величинами u_x , u_y , u_z , ρ и p понимаются их осредненные по Фавру значения, а тензор вязких напряжений, тепловой и диффузионный потоки дополняются «турбулентными» составляющими:

$$\tau_{\alpha\beta}^\Sigma = \tau_{\alpha\beta} + \tau_{\alpha\beta}^\Gamma = (\mu + \mu_\Gamma) \left[\frac{\partial u_\alpha}{\partial \beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial \alpha} - \frac{2}{3} (\nabla \mathbf{u}) \delta_{\alpha\beta} \right],$$

$$q_\alpha^\Sigma = \left(\frac{\mu}{\text{Pr}} + \frac{\mu_\Gamma}{\text{Pr}_\Gamma} \right) \frac{\partial h}{\partial \alpha}, \quad J_{m\alpha}^\Sigma = \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_\Gamma}{Sc_\Gamma} \right) \frac{\partial q_m}{\partial \alpha}, \quad \alpha, \beta = x, y, z,$$

где μ_T – коэффициент турбулентной вязкости, Pr_T и Sc_T – турбулентные числа Прандтля и Шмидта (далее полагается $Pr_T = Sc_T = 0.7$).

В случае использования k - ε модели турбулентности коэффициент μ_T рассчитывается по формуле

$$\mu_T = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (2.1)$$

где k и ε – кинетическая энергия турбулентности и скорость ее диссипации, определяемые из решения двух дополнительных дифференциальных уравнений вида

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_x k}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_y k}{\partial y} + \frac{\partial \rho u_z k}{\partial z} = \frac{\partial K_x}{\partial x} + \frac{\partial K_y}{\partial y} + \frac{\partial K_z}{\partial z} + C_{\kappa 1} P_\kappa - C_{\kappa 2} \rho \varepsilon, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_x \varepsilon}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_y \varepsilon}{\partial y} + \frac{\partial \rho u_z \varepsilon}{\partial z} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_\kappa - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon), \quad (2.3)$$

где

$$P_\kappa = \sum_{\alpha, \beta} \tau_{\alpha\beta}^T \frac{\partial u_\alpha}{\partial \beta}, \quad K_\alpha = \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial k}{\partial \alpha}, \quad E_\alpha = \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha}, \quad \alpha, \beta = x, y, z.$$

В «стандартной» k - ε модели турбулентности [154, 155], используемой для моделирования несжимаемых (дозвуковых) течений, значения входящих в уравнения (2.1) – (2.3) коэффициентов следующие

$$\sigma_\kappa = 1, \quad \sigma_\varepsilon = 1.3, \quad C_{\kappa 1} = C_{\kappa 2} = 1, \quad C_{\varepsilon 1} = 1.44, \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92, \quad C_\mu = 0.09.$$

В данной работе для моделирования сверхзвуковых турбулентных струй используются две альтернативные версии k - ε модели турбулентности. В первой из них, предложенной Молчановым [156], делаются поправки на сжимаемость и осесимметричность течения (подробное описание этой модели можно найти в [127]). Согласно второй версии, предложенной Саркаром [157, 158], уравнение (2.3) описывает только «соленоидальную» составляющую скорости диссипации, ε_s . Другая ее составляющая, «сжимаемая» диссипация, записывается как

$$\varepsilon_c = \alpha_0 M_T^2 \varepsilon_s,$$

где $M_T = \sqrt{2k} / a$ – турбулентное число Маха, a – скорость звука, α_0 – коэффициент (в оригинальных работах $\alpha_0 = 1$). Поскольку в рамках модели Саркара предполагается, что в уравнения (2.1) и (2.2) входит суммарная диссипация, то ввести влияние сжимаемости в стандартную k - ε модель турбулентности достаточно просто – для этого следует считать, что два ее коэффициента являются функциями от M_T , а именно

$$C_{\kappa 2} = 1 + \alpha M_T^2, \quad C_\mu = 0.09 / (1 + \alpha M_T^2).$$

При использовании модели Саркара оставшиеся формулы стандартной k - ε модели турбулентности остаются в силе.

При расчете осесимметричных течений вместо (2.2) и (2.3) используются уравнения вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y \rho u_x k}{\partial x} + \frac{\partial y \rho u_y k}{\partial y} \right) &= \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y K_x}{\partial x} + \frac{\partial y K_y}{\partial y} \right) + C_{\kappa 1} P_\kappa - C_{\kappa 2} \rho \varepsilon, \\ \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y \rho u_x \varepsilon}{\partial x} + \frac{\partial y \rho u_y \varepsilon}{\partial y} \right) &= \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y E_x}{\partial x} + \frac{\partial y E_y}{\partial y} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_\kappa - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon). \end{aligned}$$

2.2.5 Многофазность (частицы окиси алюминия)

Для математического моделирования многофазных течений в рамках многотемпературной и многоскоростной модели требуется привлечение дополнительных уравнений, описывающих движение и термодинамику частиц Al_2O_3 . В предположении, что частицы являются сферическими, химически инертными по отношению к газовой фазе и не взаимодействующими друг с другом, такие уравнения записываются в виде

$$\frac{du_x^s}{dt} = C_f (u_x - u_x^s), \quad \frac{du_y^s}{dt} = C_f (u_y - u_y^s), \quad \frac{de_s}{dt} = C_q (T - T_s) - C_r, \quad (2.4)$$

где

$$\begin{aligned} C_f &= \frac{3C_d \rho W_s}{8r_s \rho_s^0}, \quad C_d = C_d(\text{Re}_s, M_s, \gamma, T_s / T), \quad C_r = C_r(T_s, r_s), \\ C_q &= \frac{3\text{Nu}\lambda}{2r_s^2 \rho_s^0}, \quad \text{Nu} = \frac{\text{Nu}^0}{1 + 3.42\text{Nu}^0 M_s / \text{Re}_s \text{Pr}}, \quad \text{Nu}^0 = 2 + 0.459 \text{Re}_s^{0.55} \text{Pr}^{0.33}, \\ W_s &= \sqrt{(u_x - u_x^s)^2 + (u_y - u_y^s)^2}, \quad \text{Re} = \frac{2W_s \rho r_s}{\mu}, \quad M_s = \frac{W_s}{a}. \end{aligned}$$

Здесь индекс s обозначает номер фракции частиц (все частицы одной фракции имеют одинаковый размер), u_x^s и u_y^s – компоненты вектора скорости частиц s -ой фракции (в данной главе рассматриваются только двумерные течения), $d/dt \equiv u_x^s \partial / \partial x + u_y^s \partial / \partial y$ – полная производная по времени вдоль траектории частиц, e_s и T_s – удельная внутренняя энергия и температура частиц, r_s – радиус частиц, $\rho_s^0 = 3329 \text{ кг/м}^3$ – плотность материала окиси алюминия, μ и λ – коэффициенты вязкости и теплопроводности газа, a – скорость звука в газе, C_d – безразмерный коэффициент трения частиц, C_r – член, отвечающий за излучение частиц.

Для расчета коэффициента C_d используются соотношения из работы [159], а член C_r вычисляется по формуле

$$C_r = \exp[a_0 + a_1(T/1000) + a_2(T/1000)^2 + a_3(T/1000)^3], \text{ Дж/(кг} \cdot \text{с)}.$$

Входящие в эту формулу коэффициенты a_0 , a_1 , a_2 , a_3 приведены в таблице 2.5 для нескольких значений радиусов в двух диапазонах температур; для промежуточных значений радиусов используется линейная интерполяция коэффициентов.

Таблица 2.5. Данные по коэффициентам a_0, a_1, a_2, a_3 в формуле для C_r .

r_s , мкм	$T < 1900$ К				$T > 1900$ К			
	a_0	a_1	a_2	a_3	a_0	a_1	a_2	a_3
1.5	0.9488	22.9960	-16.5130	4.1592	-5.9690	11.4180	-0.1217	-0.2448
3.0	1.2058	22.8554	-16.2106	4.0384	5.5254	0.2579	3.2110	-0.5736
4.5	1.3204	22.7970	-16.1098	3.9971	10.0423	-4.6176	4.9201	-0.7778
6.0	1.3672	22.7632	-16.0796	3.9842	11.6844	-6.4039	5.5458	-0.8552

Кристаллизация. Охлаждение частиц Al_2O_3 в сопле и струе сопровождается их переходом из жидкого состояния в твердое с высвобождением энергии кристаллизации. Этот процесс является неравновесным и описывается дополнительным параметром, а именно относительным радиусом фронта кристаллизации частиц r_s^* . Частица в жидком состоянии имеет $r_s^* = 1$, тогда как $r_s^* = 0$ соответствует твердому состоянию. Если частица находится в переходном состоянии, то $0 < r_s^* < 1$ и движение фронта кристаллизации описывается уравнением

$$r_s \frac{dr_s^*}{dt} = -a^*(T_m - T_s)^{1.8}, \quad (2.5)$$

где $a^* = 2.7 \cdot 10^{-6}$ м/(с·К^{1.8}) – константа, $T_m = 2327$ К – равновесная температура плавления. Согласно принятой модели, кристаллизация частиц начинается по достижении критической температуры $T_c = 0.83 T_m$ [160, 161]. Массовые доли жидкой фазы (Z_{liq}) и твердой фазы (Z_{sol}) частицы вычисляются как

$$Z_{liq} = (r_s^*)^3, \quad Z_{sol} = 1 - (r_s^*)^3.$$

Удельная внутренняя энергия частиц (e_s) определяется как

$$e_s = Z_{liq} e_s^{liq} + Z_{sol} e_s^{sol},$$

где e_s^{liq} и e_s^{sol} – удельные внутренние энергии частиц в жидком и твердом состояниях, соответственно. Тогда входящая в уравнение (2.4) скорость изменения e_s записывается как

$$\frac{de_s}{dt} = C_s \frac{dT_s}{dt} + h_s \frac{d(r_s^*)^3}{dt},$$

где

$$C_s(T_s, r_s^*) = (r_s^*)^3 C_s^{liq} + [1 - (r_s^*)^3] C_s^{sol}, \quad h_s(T_s) = h_s^0 + \int_{T_s}^{T_m} (C_s^{sol} - C_s^{liq}) dT.$$

Здесь $C_s^{liq} = de_s^{liq} / dT$ и $C_s^{sol} = de_s^{sol} / dT$ – удельные теплоемкости, $h_s^0 = 0.915 \times 10^6$ Дж/кг – скрытая теплота плавления при $T_s = T_m$. Согласно [150], $C_s^{liq} = 1597$ Дж/(кг·К), а C_s^{sol} является функцией от температуры частиц, которая приведена в таблице 2.6.

Таблица 2.6. Функция $C_s^{sol}(T_s)$.

T_s , К	C_s^{sol} , Дж/(кг·К)	T_s , К	C_s^{sol} , Дж/(кг·К)	T_s , К	C_s^{sol} , Дж/(кг·К)
0	0	800	1180	1600	1315
100	125.9	900	1203	1700	1331
200	501.4	1000	1221	1800	1347
300	779.1	1100	1236	1900	1363
400	943.0	1200	1249	2000	1380
500	1039	1300	1266	2100	1396
600	1106	1400	1282	2200	1412
700	1149	1500	1298	2300	1428

Плавление. Иногда частицы Al_2O_3 , частично или полностью перешедшие в твердое состояние, снова начинают плавиться. Такая ситуация, например, может возникать при попадании частиц в «горячую» область струи за диском Маха. В таком случае предполагается, что процесс плавления протекает равновесно при $T_s = T_m$, а движение фронта кристаллизации определяется не уравнением (2.5), а из энергетического баланса, записанного в виде

$$h_s \frac{d(r_s^*)^3}{dt} = C_q(T - T_s) - C_r.$$

Переход из γ -фазы в α -фазу. Предполагается, что в процессе кристаллизации частица первоначально образуется в метастабильной γ -фазе, однако в последующем она переходит в стабильную α -фазу. Для определения доли α -фазы (Z_α) в твердой частице используется следующее уравнение (см. работу [162])

$$\frac{dZ_\alpha}{dt} = Z_s a_\alpha \exp(-b_\alpha / T_s),$$

где $a_\alpha = 1.5 \cdot 10^{13}$ 1/с – эмпирический коэффициент, $b_\alpha = 58368$ К согласно работе [163].

Тогда доля γ -фазы (Z_γ) в твердой частице вычисляется как

$$Z_\gamma = Z_s - Z_\alpha$$

Если на некотором участке траектории частица подвергается плавлению, то изменение доли α -фазы в ней определяется соотношением

$$\frac{dZ_\alpha}{dt} = -\frac{dZ_{liq}}{dt} = -\frac{d(r_s^*)^3}{dt}$$

Уравнения (2.4) описывают изменение импульса и внутренней энергии частиц, находящихся в газовом потоке. Влияние частиц на газ учитывается источниковыми членами в правых частях уравнений газовой динамики, которые имеют вид

$$F_x^{part} = \sum_s \rho_s C_f (u_x^s - u_x), \quad F_y^{part} = \sum_s \rho_s C_f (u_y^s - u_y),$$

$$F_h^{part} = \sum_s \rho_s \{C_f [u_x^s (u_x^s - u_x) + u_y^s (u_y^s - u_y)] + C_q (T_s - T)\},$$

где ρ_s – массовая плотность облака частиц. Для определения ρ_s привлекается уравнение неразрывности облака частиц

$$\frac{d\rho_s u_x^s S_s}{dt} = 0,$$

где S_s – площадь поперечного сечения трубки тока частиц.

2.3 Численные методы

Схема Годунова-Колгана-Родионова, описанная в разделе 1.2, используется в комплексе программ NARJ в качестве базового численного метода. Так, ее нестационарный и стационарный варианты используются для моделирования двумерных течений продуктов сгорания в сопле: течение в до- и транзвуковой частях сопла рассчитывается методом установления по времени, а течение в сверхзвуковой части сопла – методом маршировки по пространству. Течение продуктов сгорания в струях также рассчитывается маршевым методом, однако в этом случае требуется внесение существенных изменений (доработок) в базовые уравнения и расчетные схемы. Эти вопросы, а также методика расчета многофазных течений, обсуждаются в данном разделе.

2.3.1 Параболизация уравнений Навье-Стокса

Для того, чтобы вязкие стационарные сверхзвуковые течения стало возможным рассчитывать маршевым методом, необходимо перейти от решения полных уравнений Навье-Стокса к решению их усеченного варианта – так называемых «параболизированных» уравнений Навье-Стокса. Параболизация уравнений Навье-Стокса заключается в таком усечении их правых частей, после которого исчезают все производные по «маршевой» координате, совпадающей с основным направлением течения. Такая процедура не будет приводить к заметному искажению поля течения, если процессы вязкости, теплопроводности и диффузии проявляются главным образом в узких слоях смешения, толщина которых мала по сравнению с их длиной. Покажем, как можно провести

параболизацию уравнений Навье-Стокса на примере расчета трехмерных течений, когда маршевой координатой (основным направлением потока) является ось x .

Прежде всего заметим, что параболизацию уравнений Навье-Стокса можно проводить различными способами. Например, из правых частей уравнений можно просто исключить все члены, содержащие производные по координате x . Однако применение такого способа будет иметь теоретическое обоснование только в весьма ограниченном круге задач. Поэтому рассмотрим параболизацию более общего вида; при этом будем опираться на ряд понятных теоретических предположений, формулирующихся следующим образом.

1. Правые части в уравнениях Навье-Стокса играют важную роль только в слоях смешения и/или пограничных слоях (далее, для краткости – вязких слоях), поперечный размер которых много меньше их продольного размера.

2. Поверхности вязких слоев могут иметь заметный наклон по отношению к оси x . Это означает, что ограничение $u_y^2 + u_z^2 \ll u_x^2$, обычно используемое при параболизации уравнений Навье-Стокса, ослабляется – теперь в вязких слоях допускается $u_y^2 + u_z^2 \sim u_x^2$. Течения, в которых $u_x^2 \ll u_y^2 + u_z^2$, по-прежнему не рассматриваются – в этом случае направление оси x не может использоваться в качестве основного, маршевого направления.

3. В вязких слоях параметры газа имеют малые градиенты вдоль линий тока по сравнению с градиентами поперек потока. Тогда при параболизации правых частей уравнений Навье-Стокса можно использовать соотношение

$$\frac{df}{dt} = u_x \frac{\partial f}{\partial x} + u_y \frac{\partial f}{\partial y} + u_z \frac{\partial f}{\partial z} \approx 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial f}{\partial x} \approx - \left(\frac{u_y}{u_x} \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{u_z}{u_x} \frac{\partial f}{\partial z} \right).$$

где f – любой из параметров потока (u_x, u_y, u_z, h, q_m, k или ε).

4. В вязких слоях сдвиговые напряжения преобладают над напряжениями сжатия. В этом случае в правых частях уравнений Навье-Стокса можно использовать сокращение

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \approx 0.$$

Такие предположения позволяют однозначным образом провести процедуру параболизации. В результате правые части уравнений Навье-Стокса (1.2) приводятся к следующему компактному виду

$$\text{RHS} \approx \frac{\partial \mathbf{F}_y^{\text{PNS}}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{F}_z^{\text{PNS}}}{\partial z},$$

$$\mathbf{F}_y^{\text{PNS}} = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xy}^{\text{PNS}} \\ \tau_{yy}^{\text{PNS}} \\ \tau_{zy}^{\text{PNS}} \\ q_y^{\text{PNS}} + u_x \tau_{xy}^{\text{PNS}} + u_y \tau_{yy}^{\text{PNS}} + u_z \tau_{zy}^{\text{PNS}} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_z^{\text{PNS}} = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xz}^{\text{PNS}} \\ \tau_{yz}^{\text{PNS}} \\ \tau_{zz}^{\text{PNS}} \\ q_z^{\text{PNS}} + u_x \tau_{xz}^{\text{PNS}} + u_y \tau_{yz}^{\text{PNS}} + u_z \tau_{zz}^{\text{PNS}} \end{bmatrix},$$

где

$$\tau_{\alpha y}^{\text{PNS}} = (\mu + \mu_T) \Lambda_y u_\alpha, \quad \tau_{\alpha z}^{\text{PNS}} = (\mu + \mu_T) \Lambda_z u_\alpha, \quad \alpha = x, y, z,$$

$$q_y^{\text{PNS}} = \left(\frac{\mu}{\text{Pr}} + \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T} \right) \Lambda_y h, \quad q_z^{\text{PNS}} = \left(\frac{\mu}{\text{Pr}} + \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T} \right) \Lambda_z h,$$

$$\Lambda_y = \left(1 + \frac{u_y^2}{u_x^2} \right) \frac{\partial}{\partial y} + \frac{u_y u_z}{u_x^2} \frac{\partial}{\partial z}, \quad \Lambda_z = \frac{u_y u_z}{u_x^2} \frac{\partial}{\partial y} + \left(1 + \frac{u_z^2}{u_x^2} \right) \frac{\partial}{\partial z}.$$

Здесь Λ_y и Λ_z – дифференциальные операторы, в которых учитывается наклон поверхности вязкого слоя по отношению к оси x . В случае, когда такой наклон мал и выполняется условие $u_y^2 + u_z^2 \ll u_x^2$, выписанные выражения упрощаются посредством замены операторов Λ_y и Λ_z на, соответственно, $\partial/\partial y$ и $\partial/\partial z$.

Диффузионные потоки в уравнениях (1.3) и члены в правых частях уравнений (2.2) и (2.3) в k - ε модели турбулентности в результате процедуры параболизации сводятся к виду

$$J_{my}^{\text{PNS}} = \left(\frac{\mu}{\text{Sc}} + \frac{\mu_T}{\text{Sc}_T} \right) \Lambda_y q_m, \quad J_{mz}^{\text{PNS}} = \left(\frac{\mu}{\text{Sc}} + \frac{\mu_T}{\text{Sc}_T} \right) \Lambda_z q_m,$$

$$K_y^{\text{PNS}} = \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \right) \Lambda_y k, \quad K_z^{\text{PNS}} = \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \right) \Lambda_z k,$$

$$E_y^{\text{PNS}} = \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \Lambda_y \varepsilon, \quad E_z^{\text{PNS}} = \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \Lambda_z \varepsilon,$$

$$P_\kappa \approx \sum_{\alpha=x,y,z} \mu_T \left[\frac{\partial u_\alpha}{\partial y} (\Lambda_y u_\alpha) + \frac{\partial u_\alpha}{\partial z} (\Lambda_z u_\alpha) \right].$$

Подробный вывод выписанных выше соотношений дается в [142]. Там же приводятся правые части параболизированных уравнений Навье-Стокса для случая моделирования двумерных осесимметричных течений. Они имеют следующий вид

$$\text{RHS} = \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y \mathbf{F}_y^{\text{PNS}}}{\partial y} + \hat{\mathbf{F}}^{\text{PNS}} \right), \quad \mathbf{F}_y^{\text{PNS}} = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xy}^{\text{PNS}} \\ \tau_{yy}^{\text{PNS}} \\ q_y^{\text{PNS}} + u_x \tau_{xy}^{\text{PNS}} + \tau_{yy}^{\text{PNS}} \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{F}}^{\text{PNS}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -(\mu + \mu_T) u_y / y \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{aligned}\tau_{xy}^{\text{PNS}} &= (\mu + \mu_T) \left(1 + \frac{u_y^2}{u_x^2} \right) \frac{\partial u_x}{\partial y}, & \tau_{yy}^{\text{PNS}} &= (\mu + \mu_T) \left(1 + \frac{u_y^2}{u_x^2} \right) \frac{\partial u_y}{\partial y}, \\ q_y^{\text{PNS}} &= \left(\frac{\mu}{\text{Pr}} + \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T} \right) \left(1 + \frac{u_y^2}{u_x^2} \right) \frac{\partial h}{\partial y}, & J_{my}^{\text{PNS}} &= \left(\frac{\mu}{\text{Sc}} + \frac{\mu_T}{\text{Sc}_T} \right) \left(1 + \frac{u_y^2}{u_x^2} \right) \frac{\partial q_m}{\partial y}, \\ K_y^{\text{PNS}} &= \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_K} \right) \left(1 + \frac{u_y^2}{u_x^2} \right) \frac{\partial k}{\partial y}, & E_y^{\text{PNS}} &= \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \left(1 + \frac{u_y^2}{u_x^2} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y}, \\ P_K &\approx \mu_T \left[\left(1 + \frac{u_y^2}{u_x^2} \right) \frac{\partial u_x}{\partial y} \right]^2.\end{aligned}$$

2.3.2 Маршевый расчет дозвуковых областей

В случае наличия в поле течения струи дозвуковых областей использование маршевых методов расчета задачи становится проблематичным из-за появления волновых возмущений газа, распространяющихся против направления потока. Подавление «противопотоковых» возмущений в дозвуковых областях течения возможно только путем внесения дополнительных изменений в уравнения Навье-Стокса (см., например, [80, 164, 165]). Такого рода подход, расширяя границы применимости маршевых методов, может оказаться приемлемым, если упомянутые возмущения не оказывают существенного влияния на интересующие исследователя области и параметры потока. Так, противопотоковые возмущения во внешнем дозвуковом потоке воздуха оказывают незначительное влияние на сверхзвуковой поток в ядре струи, поскольку последний обладает существенно большей энергетикой.

Обычно для подавления противопотоковых возмущений внутри дозвуковой области принимается допущение о распределении давления в ней: оно либо постоянно и наперед задано (внешний дозвуковой поток), либо равно давлению в соседней сверхзвуковой части потока и определяется в процессе расчета. Такое допущение требует исключения одного уравнения из системы параболизированных уравнений Навье-Стокса. Как правило, им является уравнение сохранения поперечной составляющей импульса [80, 164]. Образующаяся при этом новая система уравнений обладает иными характеристическими свойствами, что порождает некоторые проблемы.

Во-первых, различные вычислительные алгоритмы, используемые для до- и сверхзвуковых областей течения, должны быть подходящим образом состыкованы между собой либо в одной расчетной точке (см. [164]), либо в некоторой переходной зоне (см. [80]). Во-вторых, поперечное смещение дозвукового потока регулируется теперь не уравнением сохранения поперечной составляющей импульса (которое исключено из

рассмотрения), а уравнением неразрывности. В случае двумерного течения имеется только одно поперечное направление, тогда как в трехмерном случае их два. Поэтому не очевидно, как обобщать обсуждаемый подход на трехмерный случай.

В данной работе для подавления противопотоковых возмущений внутри дозвуковой области используется способ, предложенный автором и описанный в [93, 128]. Он заключающийся в специальной коррекции параболизированных уравнений Навье-Стокса, при которой в уравнения сохранения составляющих импульса и в формулу, определяющую полную энтальпию, вводится единый коэффициент β , зависящий от локальных параметров газа.

В случае моделирования двумерных осесимметричных течений скорректированные уравнения и формула записываются в виде

$$\frac{\partial \rho u_x^2}{\partial x} + \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y \rho u_x u_y}{\partial y} \right) + \beta \frac{\partial p}{\partial x} = \text{RHS}_x,$$

$$\frac{\partial \rho u_x u_y}{\partial x} + \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y \rho u_y^2}{\partial y} \right) + \frac{1}{\beta} \frac{\partial p}{\partial y} = \text{RHS}_y,$$

$$h_0 = \frac{1}{2} [u_x^2 + (\beta u_y)^2] + h(T, \mathbf{q}).$$

Для того чтобы маршевый расчет был возможен, следующее условие должно выполняться в каждой точке расчетной области

$$\beta < \beta_{\max}, \quad \beta_{\max} = \frac{\rho u_x^2}{p + [(\gamma - 1) / \gamma] \rho u_x^2} \equiv \frac{\gamma M_x^2}{1 + (\gamma - 1) M_x^2},$$

где $M_x = u_x/a$, $a = \sqrt{\gamma p / \rho}$, γ – “замороженный” показатель адиабаты.

Нетрудно видеть, что $\beta_{\max} > 1$ при $M_x > 1$ и $\beta_{\max} < 1$ при $M_x < 1$. В ячейках сетки, расположенных в сверхзвуковой части потока, где $M_x^2 > 1 + \delta$ (далее принимается $\delta = 0.15$), естественно положить $\beta = 1$. В ячейках, расположенных в дозвуковой части потока, где $M_x^2 < 1 - \delta$, нельзя использовать ни допущение $\beta = \beta_{\max}$, ни $\beta = 0$, так как каждое из них приводит к обнулению допустимого расчетного шага в маршевом направлении: $\Delta x = 0$. Поэтому в таких точках принимается $\beta = \beta_{\max} / 2$. В тех расчетных точках, где $1 - \delta < M_x^2 < 1 + \delta$, используется линейная непрерывная функция, как показано на рисунке 2.2.

Обобщение схемы Годунова-Колгана-Родионова на случай расчета в дозвуковой области, где используется описанный способ подавления противопотоковых возмущений, не представляет трудностей. Для этого достаточно сделать два следующих допущения.

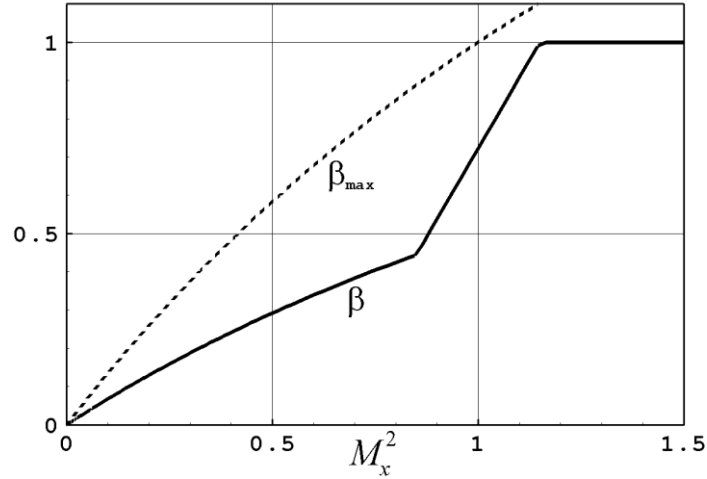


Рисунок 2.2. Функции β и β_{\max} для случая $\gamma = 1.4$.

Во-первых, в процессе интегрирования параболизированных уравнений Навье-Стокса по j -ой ячейке сетки (как на этапе предиктор, так и на этапе корректор) величина β считается постоянной внутри ячейки и определяется как

$$\beta_j = \frac{\Pi_j \beta_j^* + \Pi_{j-1/2} \beta_{j-1/2}^* - \Pi_{j+1/2} \beta_{j+1/2}^*}{\Pi_j + \Pi_{j-1/2} - \Pi_{j+1/2}},$$

где

$$\beta_{j-1/2}^* = \begin{cases} \beta_j^*, & \text{если } \Pi_{j-1/2} < 0, \\ \min\{\beta_j^*, \beta_{j-1/2}^*\} & \text{в противном случае,} \end{cases}$$

$$\beta_{j+1/2}^* = \begin{cases} \beta_j^*, & \text{если } \Pi_{j+1/2} > 0, \\ \min\{\beta_j^*, \beta_{j+1/2}^*\} & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Здесь Π_j – поток массы через ячейку на нижнем слое, $\Pi_{j-1/2}$ и $\Pi_{j+1/2}$ – потоки массы через боковые стороны ячейки (вытекание потока из ячейки соответствует случаям $\Pi_{j-1/2} < 0$ и $\Pi_{j+1/2} > 0$), величины β_j^* , $\beta_{j-1/2}^*$ и $\beta_{j+1/2}^*$ рассчитываются по параметрам потока, соответственно, на нижнем слое и на боковых сторонах ячейки.

Во-вторых, в схеме ГКР на этапе корректор для определения параметров на боковых сторонах ячейки используется решение стационарного аналога задачи Римана (задача о взаимодействии двух сверхзвуковых потоков). Если величины коэффициента β по обе стороны от разрыва полагать постоянными (не изменяющимися в процессе взаимодействия двух потоков), то задача Римана разрешается по тому же алгоритму, что и для случая $\beta = 1$. В самом деле, если в каждом из взаимодействующих потоков провести замену

$$\tilde{y} = \beta y, \quad \tilde{u}_y = \beta u_y, \quad \tilde{p} = \beta p, \quad \tilde{\gamma} = \gamma / (\gamma + \beta - \gamma\beta),$$

то скорректированные уравнения Эйлера принимают свой обычный вид. Величины β рассчитываются по параметрам газа либо перед взаимодействием потоков (в случае волны разрежения), либо после него (в случае ударной волны). Последний случай дает неявные соотношения, которые решаются итерационно.

2.3.3 Расчет дозвукового течения за диском Маха

Особого рода трудности в применении маршевых методов к расчету струй продуктов сгорания возникают при образовании в ядре струи ударно-волновой структуры с диском Маха, поток за которым является глубоко дозвуковым. Простое подавление противопотоковых возмущений здесь не обеспечивает приемлемой точности. Тем не менее, и в этом случае можно добиться хороших результатов, используя специальную процедуру расчета и глобальные итерации – глобальные по отношению к области дозвукового потока за диском Маха. Такой подход был описан автором в [93, 128], и его суть заключается в следующем.

Поток в дозвуковой области за диском Маха является высокоэнергетическим. Поэтому «маршевая» коррекция параболизированных уравнений Навье-Стокса здесь должна быть ослаблена, по крайней мере, в отношении члена $\beta \partial p / \partial x$. Только для этой дозвуковой области вводится новый член в уравнение сохранения продольной составляющей импульса

$$\frac{\partial \rho u_x^2}{\partial x} + \frac{1}{y} \left(\frac{\partial y \rho u_x u_y}{\partial y} \right) + \beta \frac{\partial p}{\partial x} + (1 - \beta) \frac{d\bar{p}}{dx} = \text{RHS}_x,$$

где осредненное по поперечному сечению дозвуковой области давление определяется как

$$\bar{p}(x) = \frac{\int p(1 - \beta) y dy}{\int (1 - \beta) y dy}.$$

Процедура расчета течения за диском Маха начинается с определения его местоположения. Для этого, следуя за движущимся к оси x «висячим» скачком уплотнения, ищется такое положение тройной точки, которое дает заданный угол выхода из нее слоя смешения. Этот угол находится подбором в результате глобальных итераций.

В рамках каждой глобальной итерации течение за диском Маха рассчитывается маршевым образом, переходя от сечения $x = x^n$ к сечению $x = x^{n+1} \equiv x^n + \Delta x$. Новый член в уравнении импульса аппроксимируется как

$$\frac{d\bar{p}}{dx} \approx \frac{\bar{p}(x^{n+1}) - \bar{p}(x^n)}{\Delta x},$$

где величина $\bar{p}(x^n)$ известна, а величина $\bar{p}(x^{n+1})$ подбирается итерационно так, чтобы удовлетворять своему определению в сечении $x = x^{n+1}$ с приемлемой точностью.

Такая аппроксимация используется до сечения, в котором на оси x достигается $M_x = 0.8$. Далее величина $d(\ln \bar{p})/dx$ замораживается (сохраняется неизменной) и расчет продолжается до сечения с $M_x = 1$, где она сравнивается с действительной величиной $\partial(\ln p)/\partial x$. Хорошее согласие показывает, что угол выхода слоя смешения из тройной точки выбран правильно. В противном случае этот угол корректируется, и задача пересчитывается от нового местоположения диска Маха.

2.3.4 Инициирование турбулентности в слоях смешения

Многочисленные тестовые расчеты струй продуктов сгорания показали, что для обеспечения качественного моделирования турбулентных слоев смешения, которые образуются за кромкой сопла и за тройной точкой диска Маха, необходимо инициировать эти слои смешения хотя бы приближенно.

В комплексе программ NARJ для инициирования слоев смешения используется гипотеза Прандтля в виде

$$\mu_T = C_m \rho k^{1/2} l = \rho l^2 \left| \frac{\partial u_x}{\partial y} \right|, \quad \varepsilon = \frac{k^{3/2}}{l}, \quad l = C_l \delta_{1/2},$$

где l – линейный масштаб турбулентности, $\delta_{1/2}$ – полуширина слоя смешения, C_m и C_l – коэффициенты.

Приведенные соотношения позволяют рассчитать начальные величины k и ε по величине полуширины слоя смешения и профилю скорости поперек него, а именно

$$k = \left[\frac{C_l \delta_{1/2}}{C_m} \left| \frac{\partial u_x}{\partial y} \right| \right]^2, \quad \varepsilon = \frac{k^{3/2}}{C_l \delta_{1/2}}.$$

В настоящей работе предполагается линейный профиль скорости в начальном сечении каждого слоя смешения и $C_m = 5$, $C_l = 0.4$, $\delta_{1/2} = \Delta y$ (Δy – сеточный интервал в окрестности слоя смешения).

2.3.5 Тестирование маршевого метода расчета струй

Для проверки работоспособности методик, изложенных в разделах 2.3.2-2.3.4, были проведены расчеты двух тестовых задач. Маршевые расчеты струй начинались от среза сопла, где задавались два потока – внутренний поток продуктов сгорания и внешний поток воздуха. Между двумя потоками задавался начальный турбулентный слой смешения, как описано в предыдущем разделе. В методических целях газы в обоих

потоках полагались совершенными, но с различными показателями адиабаты (как показали расчеты, химические процессы в струе не приносят новых газодинамических особенностей, требующих дополнительного тестирования обсуждаемых методик).

Параметры продуктов сгорания на срезе сопла определялись из расчета течения в сопле в одномерном приближении. В качестве параметров вымышленного сопла были выбраны следующие: радиус критического сечения $r_c = 0.2$ м, радиус выходного сечения $r_e = 0.7$ м, угол контура сопла на выходе $\theta_e = 23^\circ$, давление в камере сгорания $P_0 = 5 \times 10^6$ Па, температура в камере сгорания $T_0 = 3300$ К. Параметры атмосферы брались для двух высот: $H = 0$ и 8 км. В таблице 2.7 приведены исходные параметры для тестовых расчетов струй.

Таблица 2.7. Исходные параметры для тестовых расчетов.

Имя параметра	Внутренний поток	Внешний поток	
		$H = 0$ км	$H = 8$ км
p , Па	41500	101300	35240
T , К	1266	288.2	236.3
u , м/с	2711	20	410
γ	1.25	1.40	1.40
Молекулярная масса	23.0	28.9	28.9

Первый тестовый случай: высота $H = 0$ км.

На рисунке 2.3 показаны некоторые результаты расчета струи для первого тестового случая. Приведены расчетная сетка и поля температуры, числа Маха (звуковые линии выделены штрихами) и кинетической энергии турбулентности. Представленные данные получены на расчетной сетке с 95 радиальными интервалами, из которых 45 приходятся на внутренний поток в начальном сечении струи. Осевой шаг сетки, показанной на верхней панели рисунка 2.3, соответствует не расчетному шагу интегрирования, а сечениям $x = \text{const}$, в которых результаты расчета сохранялись. Сетка конструировалась со сгущением в окрестностях слоев смешения и «висячего» скачка уплотнения. Коэффициент сгущения сетки (отношение максимального сеточного интервала в ядре струи к его локальной величине) не превышал 10 и зависел от интенсивности скачка. Сконструированная таким образом сетка далее называется «номинальной сеткой» (в комплексе программ NARJ она является сеткой по умолчанию).

Влияние сетки и проверка методики инициирования турбулентности. На рисунке 2.4 приведены распределения кинетической энергии турбулентности в трех поперечных сечениях струи. Данные, полученные на номинальной сетке, показаны точками, а данные,

полученные на вдвое более подробной сетке, – сплошными линиями. Сравнение этих данных показывает, что номинальная сетка обеспечивает хорошую точность расчета турбулентных слоев смешения в струе при условии их инициирования по описанной выше методике. Проводились также расчеты, в которых коэффициенты в методике инициирования слоев смешения варьировались в пределах: $C_m = 5 \div 10$ и $C_l = 0.2 \div 0.4$. Расчеты показали, что такое варьирование не оказывает заметного влияния на параметры струи (данные этих расчетов не приводятся ввиду их визуальной неразличимости с номинальными данными). Это подтверждает малую чувствительность слоев смешения к параметрам модели их инициирования.

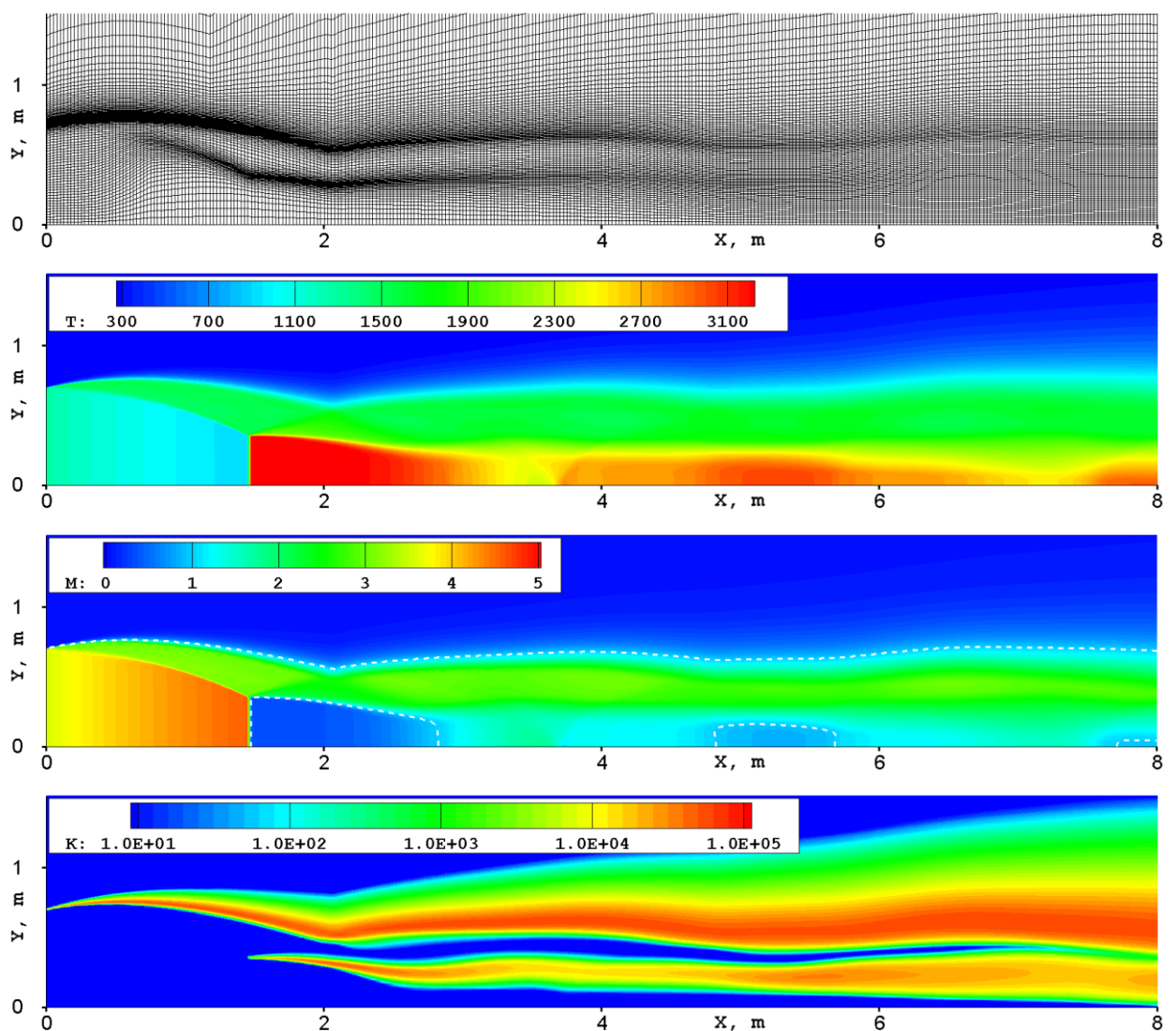


Рисунок 2.3. Данные расчета струи в первом тестовом случае ($H = 0$ км). Расчетная сетка и поля температуры, числа Маха и кинетической энергии турбулентности.

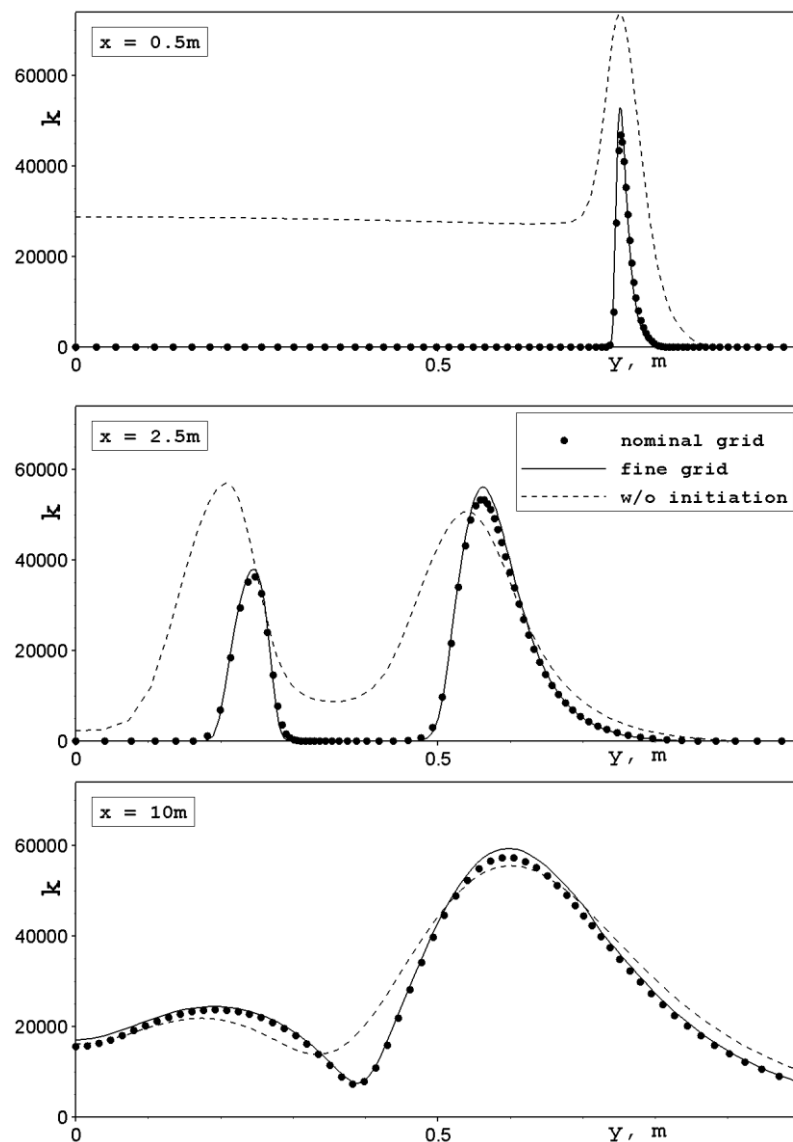


Рисунок 2.4. Распределения кинетической энергии турбулентности k (в $\text{м}^2/\text{с}^2$) в трех поперечных сечениях струи: $x = 0.5, 2.5$ и 10 м.

На рисунке 2.4 штриховыми линиями показаны данные расчета струи, полученные без применения методики инициирования слоев смешения. В этом случае слои смешения формировались за счет начальной (фоновой) турбулентности, параметры которой на выходе из сопла задавались как: $k = 0.01u_e^2$, $\varepsilon = k^{3/2} / (0.1 \cdot r_e)$. Представленные данные говорят о том, что при расчете турбулентных струй инициирование слоев смешения является важной вычислительной процедурой. Было также замечено, что отказ от инициирования слоев смешения приводит к высокой чувствительности результатов расчета к сеточному разрешению (особенно к осевому шагу интегрирования Δx).

Сравнение с методом установления. На рисунках 2.5 и 2.6 приведено сравнение результатов расчета первой тестовой задачи, полученных маршевым методом (базовый

метод в комплексе программ NARJ) и методом установления по времени. Расчет методом установления выполнялся в области $1.4 \text{ м} < x < 10 \text{ м}$ в рамках параболизированных уравнений Навье-Стокса с применением процедуры инициирования слоя смешения за диском Маха. На рисунке 2.5 сравниваются поля давления и температуры в области за диском Маха, а на рисунке 2.6 – распределения скорости и температуры в двух поперечных сечениях: $x = 2.5$ и 10 м .

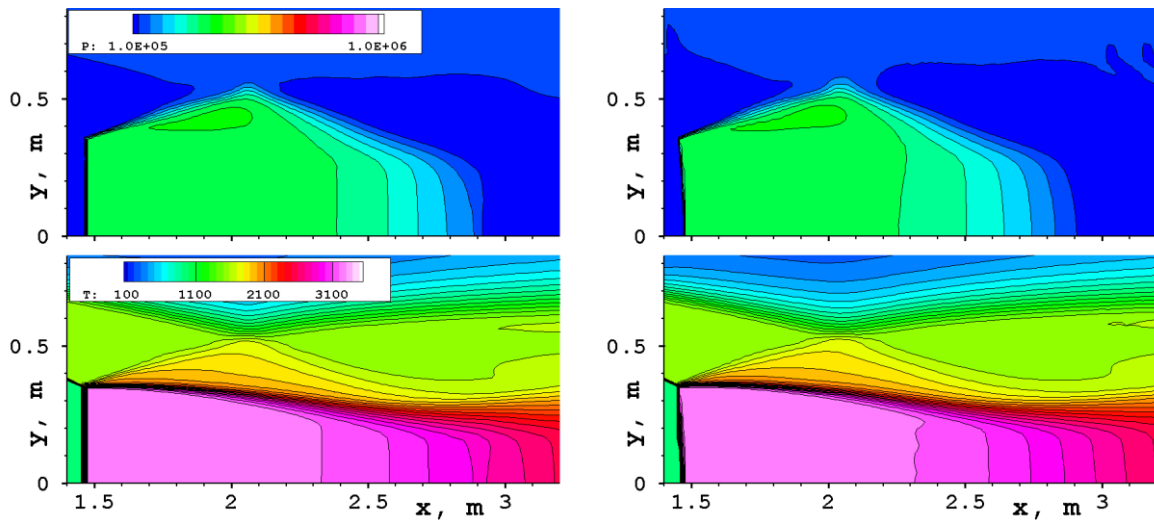


Рисунок 2.5. Поля давления (вверху) и температуры (внизу) в области за диском Маха: слева – расчет маршевым методом; справа – расчет методом установления по времени.

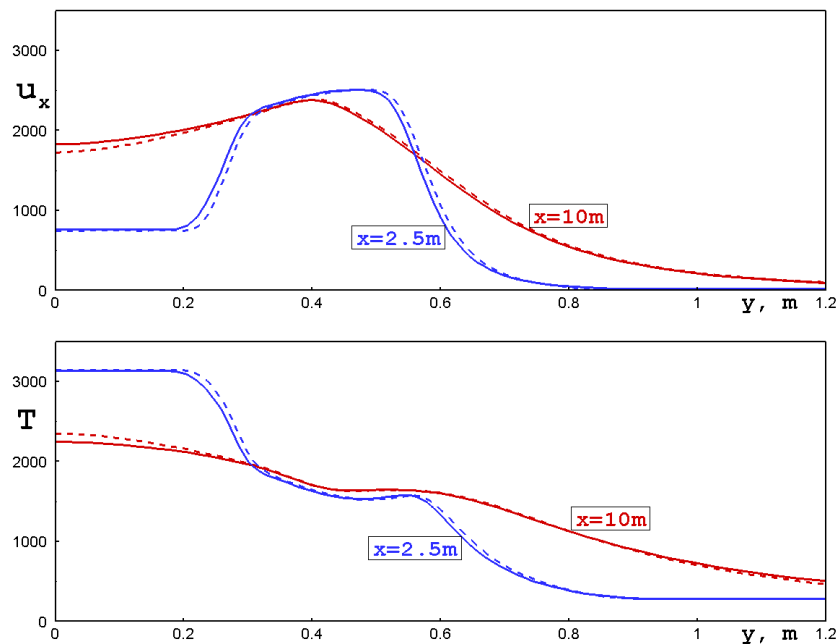


Рисунок 2.6. Распределения скорости и температуры в двух поперечных сечениях: сплошные линии – маршевый метод, штриховые линии – метод установления.

Сравнение данных, полученных двумя методами, говорит об их удовлетворительном согласии, которое можно считать приемлемым для многих практических приложений.

Второй тестовый случай: высота $H = 8$ км.

На рисунке 2.7 показаны результаты расчета струи маршевым методом для второго тестового случая. Приведены поля температуры и числа Маха (звуковые линии выделены штрихами). Хотя в данном тестовом случае внешний поток сверхзвуковой ($M = 1.329$) и диск Маха не образуется, но в поле струи все же наблюдаются две дозвуковые области: сразу за срезом сопла и после взаимодействия отраженного скачка со слоем смешения (за сечением $x = 6$ м).

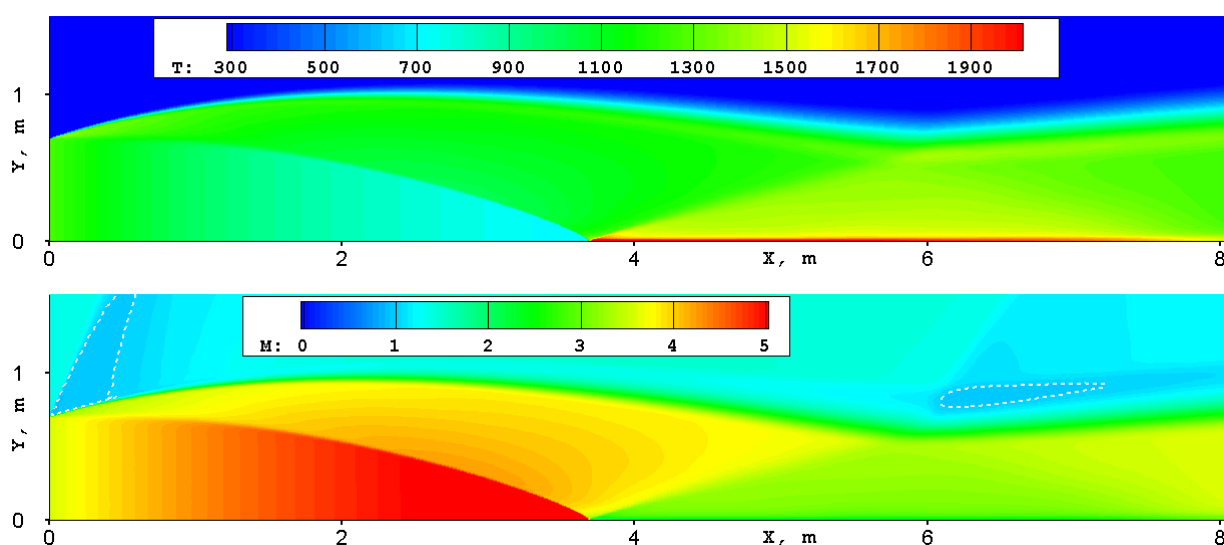


Рисунок 2.7. Данные расчета второй тестовой задачи ($H = 8$ км) маршевым методом.

Поля температуры и числа Маха.

В целях тестирования маршевого метода был выполнен расчет второй тестовой задачи методом установления по времени в рамках тех же приближений, что и в первом тестовом случае, но с одним исключением: здесь расчетная область была немного расширена в сторону $x < 0$, $y > r_e$. Результаты такого расчета приведены на рисунке 2.8. Можно видеть, что и здесь образуются две дозвуковые области. Хотя можно заметить небольшие отличия в очертаниях дозвуковых областей, полученных разными методами, но они (дозвуковые области) расположены в периферийной, низкоэнергетической части струи и их влияние на центральную часть потока мало.

На рисунке 2.9 сравниваются распределения скорости и температуры в двух поперечных сечениях, полученные маршевым методом и методом установления по времени. Видно, что данные двух методов отличаются незначительно.

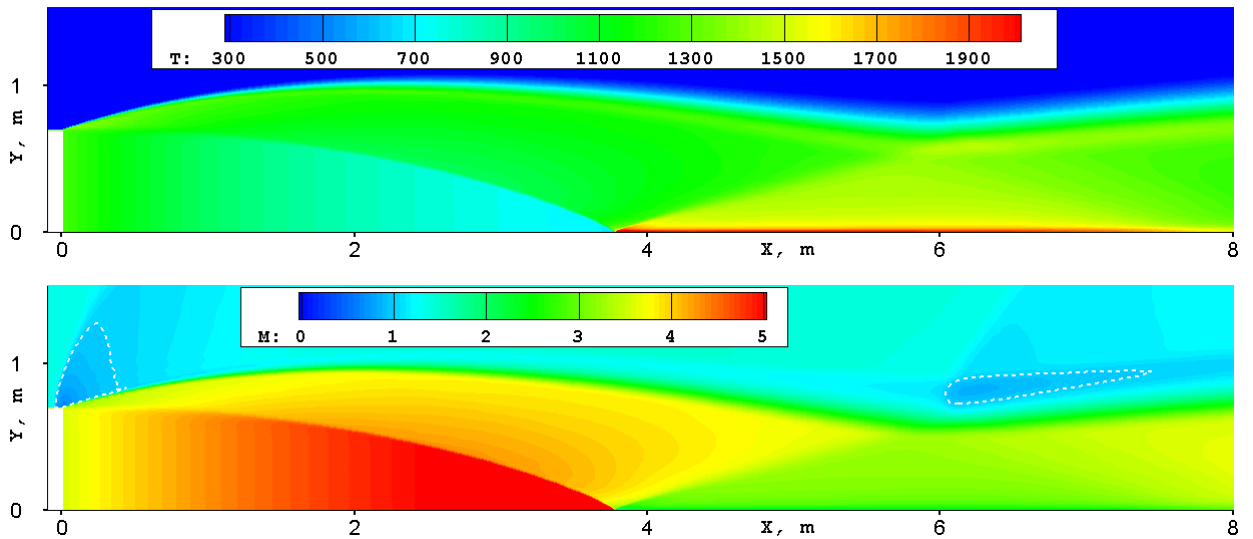


Рисунок 2.8. Данные расчета второй тестовой задачи ($H = 8$ км) методом установления по времени. Поля температуры и числа Маха.

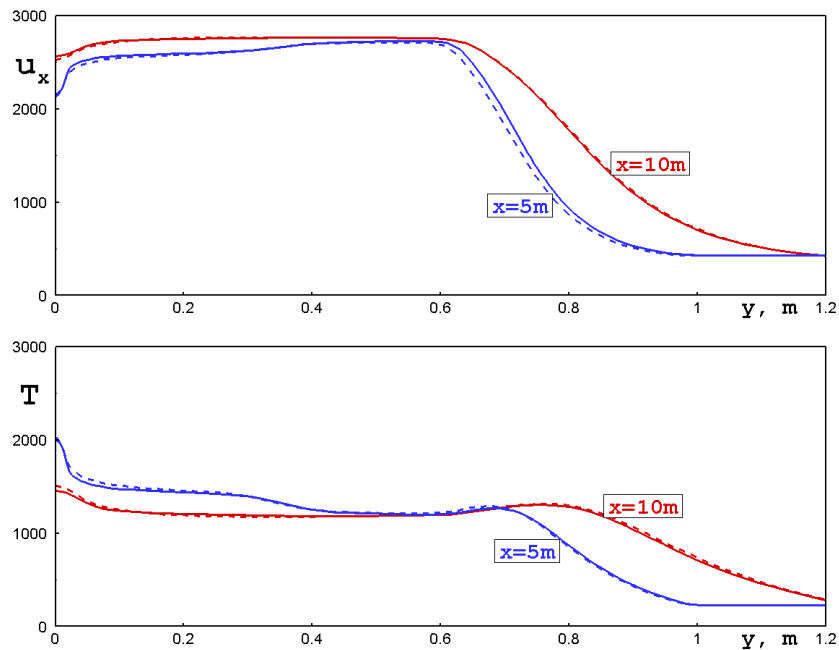


Рисунок 2.9. Распределения скорости и температуры в двух поперечных сечениях: сплошные линии – маршевый метод, штриховые линии – метод установления.

В целом по результатам сравнения в обеих тестовых задачах можно констатировать хорошее согласие данных, полученных двумя методами. С учетом того, что метод установления по времени требует намного больших компьютерных ресурсов (примерно на два порядка величин), разработанная методика маршевого расчета дозвуковых областей (включая область за диском Маха) позволяет существенно экономить

процессорное время и оперативную память при моделировании струй продуктов сгорания с учетом большого количества физико-химических процессов.

2.3.6 Методика расчета частиц

Уравнения, описывающие движение и термодинамику частиц Al_2O_3 , были выписаны в разделе 2.2.5. Их численное решение осуществляется при следующих предположениях.

- Рассматриваются только двумерные стационарные течения продуктов сгорания: течение в сопле и в струях, истекающих в спутный поток или в вакуум.
- Все частицы окиси алюминия разделены на фракции, обозначаемые индексом $s = 1, 2, \dots, s_max$. Частицы одной фракции имеют фиксированный размер r_s .
- Для каждой фракции рассчитывается движение частиц вдоль нескольких траекторий, обозначаемых номером $js = 1, 2, \dots, js_max$. Расход частиц между соседними траекториями фиксирован.

Расчет движения частиц осуществляется путем последовательного перехода от сечения $x = x^k = \text{const}$ к сечению $x = x^{k+1} = x^k + \Delta x$, где Δx – шаг интегрирования, определяемый из решения газодинамических уравнений маршевым методом. В начальном сечении все параметры частиц, включая координаты их траекторий и расходы между ними, считаются заданными.

Переход от сечения $x = x^k$ к сечению $x = x^{k+1}$ осуществляется итерационно. Перед первой итерацией полагается, что значения параметров частиц в $k+1$ -м сечении совпадают с их значениями в k -м сечении. На каждой итерации новые значения координат и параметров частиц вычисляются по формулам

$$y_{js}^{k+1} = y_{js}^k + \frac{(u_y^s)_{js}^k + (u_y^s)_{js}^{k+1}}{(u_x^s)_{js}^k + (u_x^s)_{js}^{k+1}} \Delta x, \quad (2.6)$$

$$(u_x^s)_{js}^{k+1} = \frac{(u_x^s)_{js}^k + 0.5\hat{C}_f \left[(u_x^s)_{js}^k + (u_x^s)_{js}^{k+1} (1 + \hat{C}_f) \right]}{1 + \hat{C}_f (1 + 0.5\hat{C}_f)}, \quad (2.7)$$

$$(u_y^s)_{js}^{k+1} = \frac{(u_y^s)_{js}^k + 0.5\hat{C}_f \left[(u_y^s)_{js}^k + (u_y^s)_{js}^{k+1} (1 + \hat{C}_f) \right]}{1 + \hat{C}_f (1 + 0.5\hat{C}_f)}, \quad (2.8)$$

$$(T_s)_{js}^{k+1} = \frac{(T_s)_{js}^k + 0.5\hat{C}_q \left[T_{js}^k + T_{js}^{k+1} (1 + \hat{C}_q) - \hat{C}_r \right] - \hat{C}_r}{1 + \hat{C}_q (1 + 0.5\hat{C}_q)}, \quad (2.9)$$

где

$$\hat{C}_f = 0.5\Delta t \left[(C_f)_{js}^k + (C_f)_{js}^{k+1} \right], \quad \hat{C}_q = 0.5\Delta t \left[\left(\frac{C_q}{C_s} \right)_{js}^k + \left(\frac{C_q}{C_s} \right)_{js}^{k+1} \right],$$

$$\hat{C}_r = 0.5\Delta t \left[\left(\frac{C_r}{C_s} \right)_{js}^k + \left(\frac{C_r}{C_s} \right)_{js}^{k+1} \right], \quad \Delta t = \frac{2\Delta x}{(u_x^s)_{js}^k + (u_x^s)_{js}^{k+1}}.$$

Входящие в правые части уравнений (2.6) – (2.9) параметры частиц в $k+1$ -м сечении берутся из предыдущей итерации, а параметры газа (u_x , u_y и T) в точках пересечения траекторий частиц с сечениями $x = \text{const}$ определяются интерполяцией с конечно-разностной сетки, используемой для расчета параметров газа.

Соотношения (2.6) – (2.9) используются либо до начала кристаллизации частиц, либо после ее завершения (в этом случае $(r_s^*)_{js}^{k+1} = (r_s^*)_{js}^k = 1$ или 0). На участке траектории, где происходит кристаллизация, общий шаг Δt дробится на более мелкие шаги и уравнения интегрируются по явным формулам типа

$$(T_s)_{js}^{k+1} = (T_s)_{js}^k + \hat{C}_q \left[T_{js}^k - (T_s)_{js}^k \right] - \hat{C}_r,$$

причем величина дробного шага подбирается так, чтобы выполнялись следующие условия

$$\left| (T_s)_{js}^{k+1} - (T_s)_{js}^k \right| \leq \frac{1}{4} \left| T_m - (T_s)_{js}^k \right|, \quad 0 \leq (r_s^*)_{js}^{k+1} \leq 1.$$

В твердых частицах эволюция доли α -фазы моделируется с использованием явной формулы

$$(Z_\alpha)_{js}^{k+1} = \min \left\{ 1, (Z_\alpha)_{js}^k + \Delta t (Z_\alpha)_{js}^k a_\alpha \exp(-b_\alpha / (T_s)_{js}^k) \right\}.$$

Расчет параметров воздействия частиц на газ. Поток массы частиц между двумя соседними траекториями определяется как

$$\Psi_{js+\frac{1}{2}} = \int_{y_{js}}^{y_{js+1}} 2\pi\rho_s u_x^s y dy.$$

После расчета координат траекторий и параметров частиц в $k+1$ -м сечении, определяются следующие параметры воздействия частиц на газ

$$(f_x)_{js}^{k+\frac{1}{2}} \equiv \left[\frac{C_f (u_x^s - u_x)}{u_x^s} \right]_{js}^{k+\frac{1}{2}} = \frac{(u_x^s)_{js}^k - (u_x^s)_{js}^{k+1}}{\Delta x},$$

$$(f_y)_{js}^{k+\frac{1}{2}} \equiv \left[\frac{C_f (u_y^s - u_y)}{u_x^s} \right]_{js}^{k+\frac{1}{2}} = \frac{(u_y^s)_{js}^k - (u_y^s)_{js}^{k+1}}{\Delta x},$$

$$(f_h)_{js}^{k+\frac{1}{2}} = (u_x^s f_x + u_y^s f_y)_{js}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{(e_s)_{js}^k - (e_s)_{js}^{k+1}}{\Delta x},$$

где $(u_x^s)_{js}^{k+\frac{1}{2}} = 0.5 \left[(u_x^s)_{js}^k + (u_x^s)_{js}^{k+1} \right]$ и $(u_y^s)_{js}^{k+\frac{1}{2}} = 0.5 \left[(u_y^s)_{js}^k + (u_y^s)_{js}^{k+1} \right]$.

Значения параметров F_x^{part} , F_y^{part} и F_h^{part} в центрах ячеек $(j+1/2, k+1/2)$, используемых для расчета параметров газового потока, определяются по известным значениям $(f_x)_{js}^{k+1/2}$, $(f_y)_{js}^{k+1/2}$, $(f_h)_{js}^{k+1/2}$, $\Psi_{js+1/2}$ и координатам траекторий частиц $y_{js}^{k+1/2}$. При этом в сечении $x = x^{k+1/2}$ рассматриваются сеточные интервалы $(y_j^{k+1/2}, y_{j+1}^{k+1/2})$, являющиеся зоной влияния ячеек, используемых при решении газодинамических уравнений. Осредненные по этим интервалам параметры F_x^{part} , F_y^{part} и F_h^{part} используются как источниковые члены в правых частях уравнений газовой динамики. Осреднение проводится следующим образом.

Рассмотрим поток частиц, распространяющихся между траекториями js и $js+1$. В сечении $x = x^{k+1/2}$ они воздействуют на газ, находящийся в интервале $(y_{js}^{k+1/2}, y_{js+1}^{k+1/2})$. Суммарное воздействие определяется величинами (далее верхний индекс $k+1/2$ опущен)

$$\begin{aligned} (F_x)_{js+1/2} &\equiv \int_{y_{js}}^{y_{js+1}} f_x dy = \frac{\Psi_{js+1/2}}{\pi(y_{js} + y_{js+1})} \cdot \frac{(f_x)_{js} + (f_x)_{js+1}}{2}, \\ (F_y)_{js+1/2} &\equiv \int_{y_{js}}^{y_{js+1}} f_y dy = \frac{\Psi_{js+1/2}}{\pi(y_{js} + y_{js+1})} \cdot \frac{(f_y)_{js} + (f_y)_{js+1}}{2}, \\ (F_h)_{js+1/2} &\equiv \int_{y_{js}}^{y_{js+1}} f_h dy = \frac{\Psi_{js+1/2}}{\pi(y_{js} + y_{js+1})} \cdot \frac{(f_h)_{js} + (f_h)_{js+1}}{2}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Интервал (y_{js}, y_{js+1}) либо целиком расположен в одной из зон влияния, либо имеет пересечения с несколькими из них. В последнем случае интегралы (2.10) разбиваются на несколько частей, каждая из которых относится только к одной зоне влияния. Разбиение осуществляется по формулам вида

$$(F_x)_{l+1/2} = (F_x)_{js+1/2} \frac{y_{l+1} - y_l}{y_{js+1} - y_{js}} \cdot \frac{(f_x)_l + (f_x)_{l+1}}{(f_x)_{js} + (f_x)_{js+1}},$$

где y_l, y_{l+1} – координаты части интервала, $(f_x)_l$ – значение f_x в точке с координатой y_l , определяемое линейной интерполяцией между известными значениями f_x в точках с координатами y_{js} и y_{js+1} .

Искомые величины F_x^{part} , F_y^{part} и F_h^{part} для ячейки $j+1/2$ находятся сложением всех $(F_x)_{l+1/2}$, $(F_y)_{l+1/2}$ и $(F_h)_{l+1/2}$, относящихся к интервалу (y_j, y_{j+1}) , и делением результата на $|y_{j+1} - y_j|$.

2.4 Примеры расчетов

В данном разделе будут представлены примеры использования комплекса программ NARJ для моделирования течений продуктов сгорания ракетных топлив в соплах и струях.

2.4.1 Течение продуктов сгорания в типовом РДТТ

Приведем пример моделирования многофазного многокомпонентного течения продуктов сгорания в сопле. В качестве топлива будем рассматривать вымышленное топливо с условной формулой $C_9H_{37}O_{25}N_6Cl_6Al_6$. В качестве параметров сопла Лаваля выберем следующие: радиус критического сечения $r_c = 0.1$ м, радиус выходного сечения $r_e = 0.7$ м, давление в камере сгорания $p_0 = 5 \times 10^6$ Па, температура в камере сгорания $T_0 = 3500$ К. При таких исходных данных тяга сопла составит величину ~ 300 кН, а массовая доля частиц Al_2O_3 в продуктах сгорания будет $\sim 30\%$. Будем предполагать равное по массе распределение частиц между 10-тью фракциями, имеющими следующие размеры: $r_s = 1.2, 2.1, 2.7, 3.2, 3.5, 3.8, 4.1, 4.3, 4.5$ и 4.7 мкм.

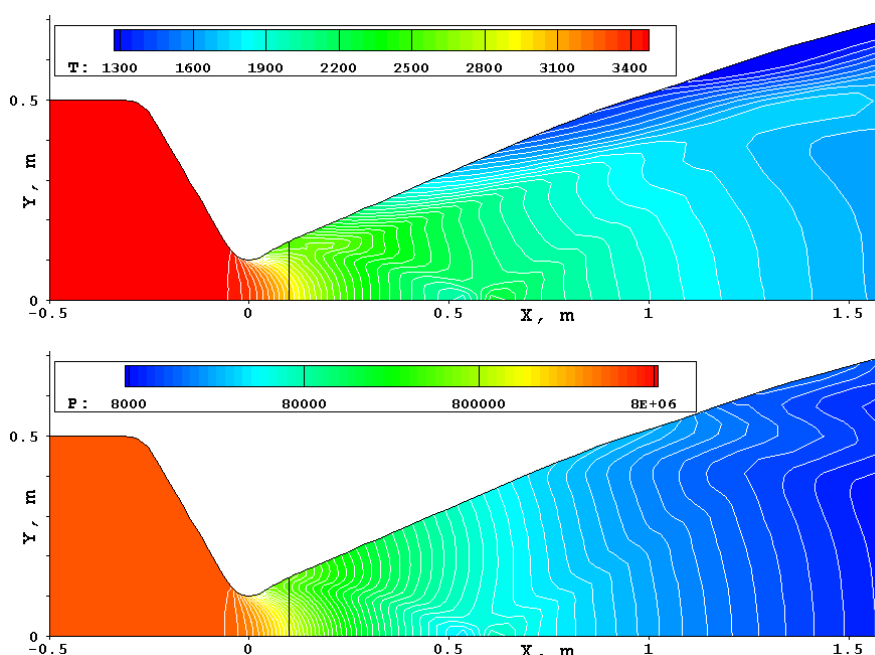


Рисунок 2.10. Поля температуры и давления газовой фазы продуктов сгорания в сопле.

Расчет течения в сопле проводился с использованием двух методов: метода установления по времени (в области $x < 0.1$ м) и маршевого метода ($x > 0.1$ м). На рисунке 2.10 приведены поля температуры и давления газовой фазы продуктов сгорания, а на

рисунке 2.11 даны поля температуры для двух фракций частиц: $r_s = 1.2$ мкм (самые мелкие частицы) и $r_s = 4.7$ мкм (самые крупные частицы).

Как можно видеть из рисунков, более крупные частицы слабее взаимодействуют с газовой фазой потока, что выражается в их более медленном остывании при движении в сверхзвуковой части сопла. Отставание от газовой фазы по скорости приводит к тому, что сепаратриса этой фракции частиц сильно отклоняется от контура сопла. Интенсивное охлаждение самых мелких частиц приводит к их кристаллизации (см. рисунок 2.12), сопровождающейся резким подъемом температуры (неравновесность).

Поскольку в сверхзвуковой части сопла вблизи стенки частицы большинства фракций отсутствуют, то охлаждение газа здесь происходит более интенсивно (см. поле температуры газа на рисунке 2.10).

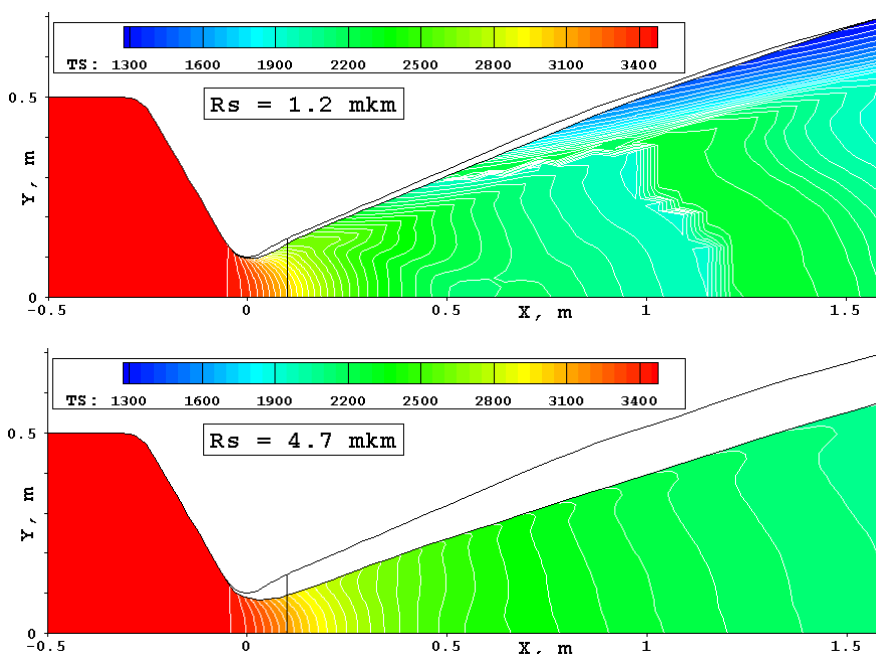


Рисунок 2.11. Поля температуры для двух фракций частиц в сопле.

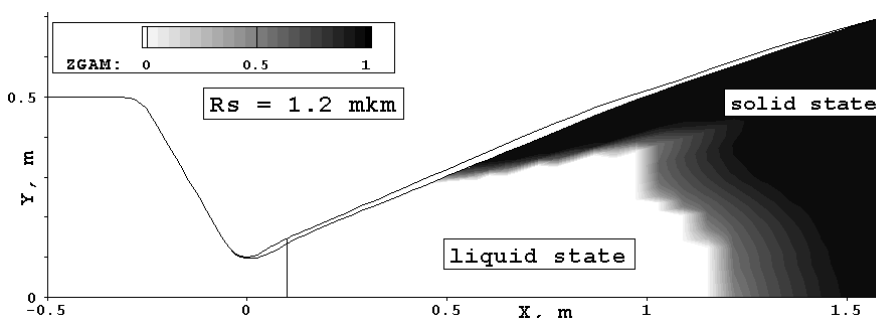


Рисунок 2.12. Доля твердой фазы для фракции мелких частиц.

Приведенные на рисунке 2.13 данные по концентрациям пяти (из 14-ти) компонент газовой смеси демонстрируют активное протекание химических реакций в сопле.

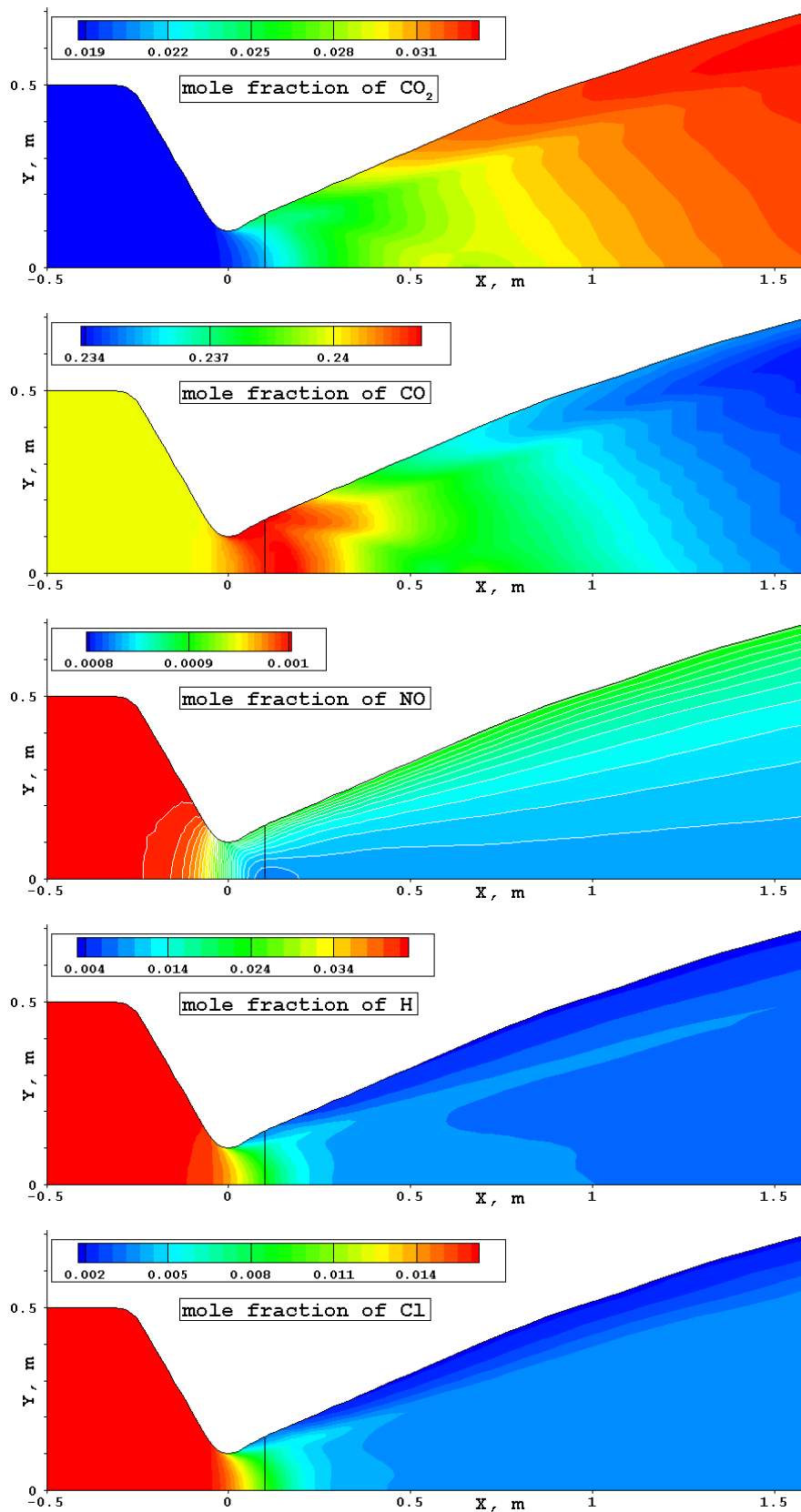


Рисунок 2.13. Поля мольных концентраций газовых компонент в сопле.

2.4.2 Течение в струе на высоте $H = 10$ км

Теперь рассмотрим пример расчета истечения продуктов сгорания из РДТТ в спутный сверхзвуковой поток воздуха на высоте $H = 10$ км. При этом будем использовать параметры многофазного многокомпонентного потока на срезе сопла, полученные из решения предыдущей задачи (раздел 2.4.1). В качестве параметров спутного потока выберем следующие: скорость $u_\infty = 750$ м/с (соответствует числу Маха $M_\infty \approx 2.5$), давление $p_\infty = 2.7 \times 10^4$ Па, температура $T_\infty = 220$ К.

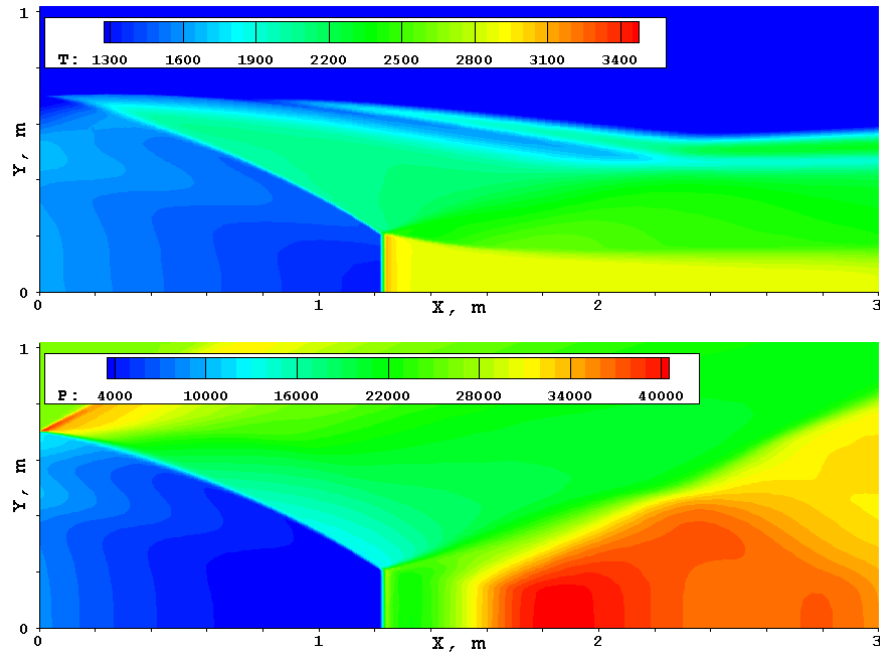


Рисунок 2.14. Поля температуры и давления газовой фазы продуктов сгорания в струе ($H = 10$ км).

На рисунках 2.14, 2.15 и 2.16 представлены некоторые расчетные данные по ближней части струи (до $x = 3$ м): на первом рисунке даются поля температуры и давления газовой фазы продуктов сгорания, на следующем – поля температуры для двух фракций частиц (самых мелких и самых крупных), и на последнем рисунке показаны массовые доли твердой фазы этих двух фракций.

Как можно видеть, в центральной части струи образуется диск Маха ($x \approx 1.2$ м), за которым резко повышаются температура (до $T \sim 3000$ К) и давление газовой фазы. В области смешения продуктов сгорания с воздухом ($y \approx 0.6$ м) также происходит небольшое повышение температуры, которое объясняется догоранием части газовых компонент при их столкновении с атмосферным кислородом.

Мелкие частицы в выходном сечении сопла находятся в твердом состоянии. Они лучше «отслеживают» температуру газа, поэтому за диском Маха они нагреваются до $T_s > 2327$ К (температура плавления) и возвращаются в жидкое состояние. В периферийной части струи мелкие частицы остаются твердыми.

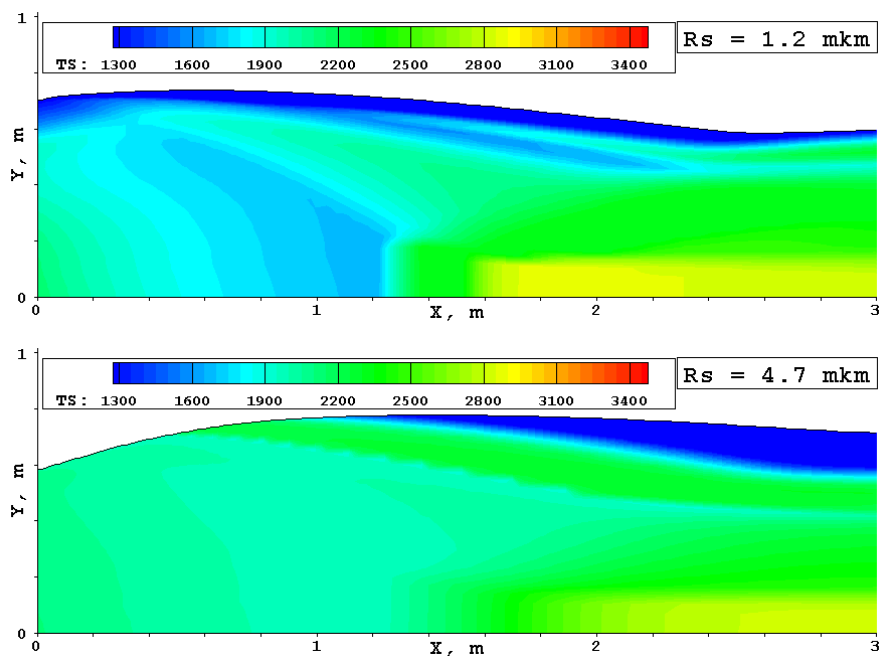


Рисунок 2.15. Поля температуры частиц в струе ($H = 10$ км).

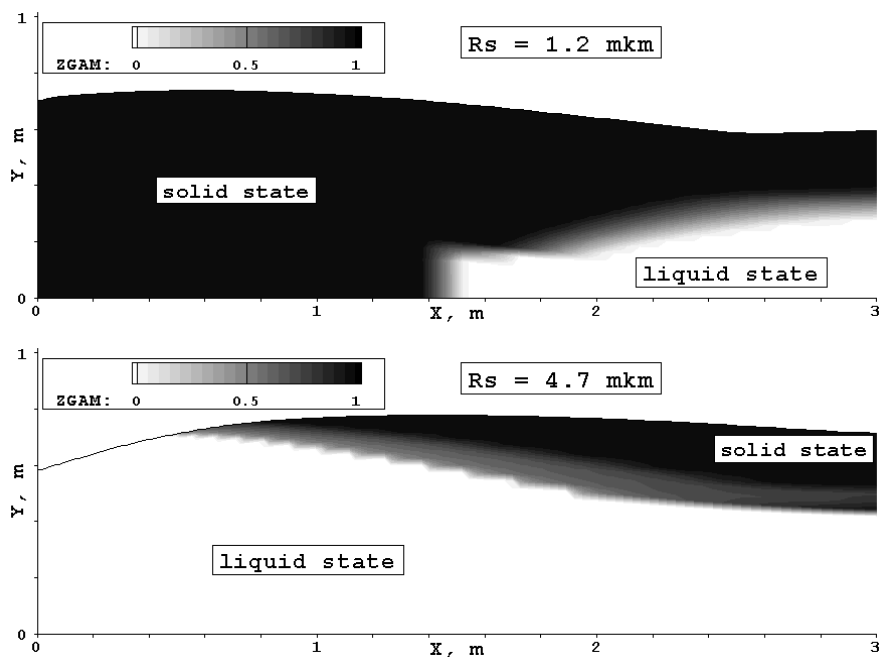


Рисунок 2.16. Доля твердой фазы частиц в струе ($H = 10$ км).

Крупные частицы в выходном сечении сопла находятся в жидком состоянии. В центральной части струи они остаются достаточно горячими, однако на периферии, попадая в холодный внешний поток, сильно остывают и кристаллизуются (поскольку кристаллизация протекает неравновесно, то наблюдается локальное повышение температуры частиц); при этом кристаллизующиеся частицы вносят свой вклад в нагрев газового потока.

На рисунках 2.17, 2.18 и 2.19 представлены расчетные данные по дальней части струи до $x = 100$ м; здесь для наглядности используются различные масштабы по координатным осям (струя сильно сжата в направлении оси x). На первых двух рисунках даются массовые доли γ - и α -фаз в затвердевших частицах для двух крайних фракций: $r_s = 1.2$ и 4.7 мкм. Можно видеть, что на участке $x > 70$ м все частицы находятся в твердом состоянии ($Z_\gamma + Z_\alpha = 1$) и движутся практически параллельно оси струи. При этом они охлаждены настолько, что интенсивность процесса перехода из γ -фазы в α -фазу крайне низка (доли γ - и α -фаз вдоль траекторий частиц почти не меняются). Однако по сечению струи наблюдается сильная неравномерность в распределении долей обеих фаз.

На рисунке 2.19 приведенные данные по температуре газовой фазы и концентрациям четырех (из 14-ти) компонент газовой смеси в дальней части струи. Эти данные указывают на активное протекание химических реакций в ядре струи до $x \approx 70$ м, когда температура потока опускается ниже 2000 К. В области $25 < x < 70$ м наблюдается интенсивное догорание молекул СО (их мольная доля падает от величины 0.235 на выходе из сопла) с образованием молекул СО₂, мольная доля которых растет вплоть до $x \approx 50$ м. Последующее снижение доли СО₂ объясняется диффузионными процессами («подмешивание» атмосферного газа), которые становятся преобладающими по отношению к химическим процессам.

Поступление в центральную часть струи атмосферного кислорода обеспечивает догорание не только СО, но и молекул Н₂, мольная доля которых на срезе сопла составляет 0.285 (эти данные на рисунках не показаны). В результате здесь происходит подогрев газа и частичный распад молекул атмосферного азота, что приводит к заметному повышению доли молекул NO. Представленные данные также показывают существенное повышение мольной доли атомарного водорода (H) в области сильно нагретого газа за диском Маха.

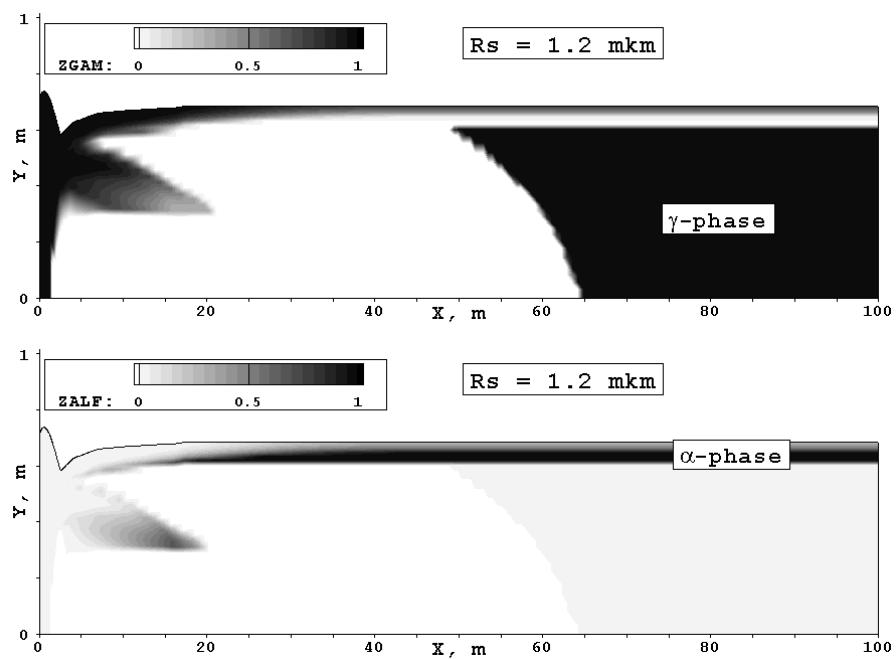


Рисунок 2.17. Доли γ - и α -фаз в мелких частицах ($H = 10 \text{ км}$).

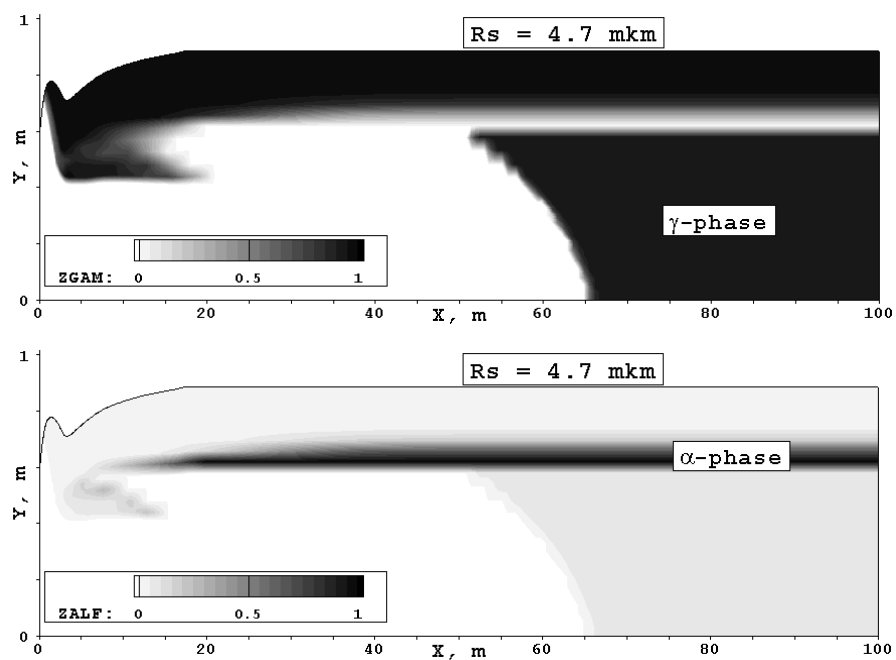


Рисунок 2.18. Доли γ - и α -фаз в крупных частицах ($H = 10 \text{ км}$).

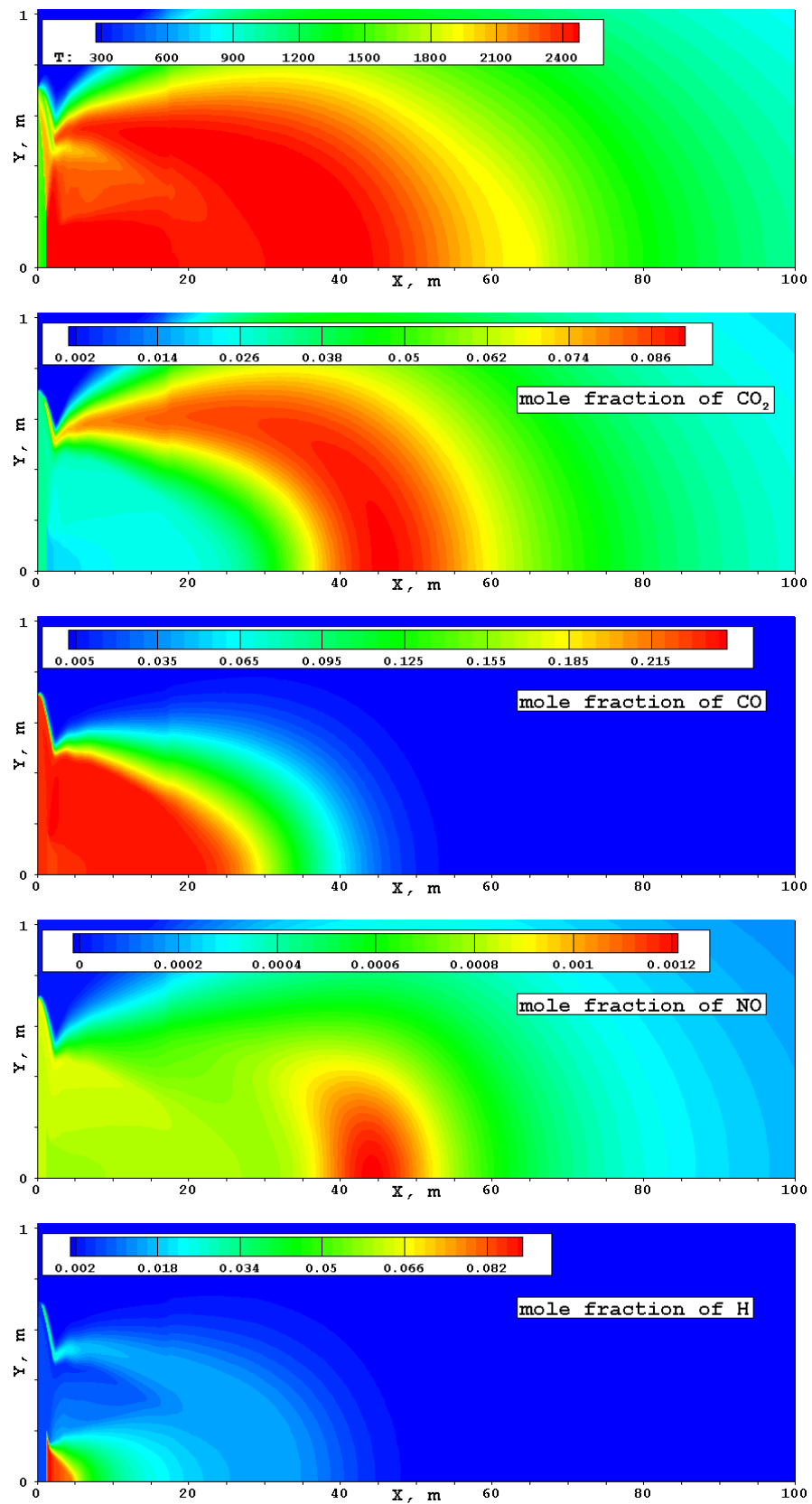


Рисунок 2.19. Поля температуры и мольных концентраций газовых компонент в дальнем поле струи ($H = 10$ км).

2.4.3 Течение в струе на высоте $H = 50$ км

Рассмотрим истечение продуктов сгорания из РДТТ в разреженный спутный сверхзвуковой поток воздуха на высоте $H = 50$ км. Здесь для примера также будем использовать параметры на срезе сопла, полученные в разделе 2.4.1. В качестве параметров спутного потока выберем следующие: скорость $u_\infty = 2200$ м/с (соответствует числу Маха $M_\infty \approx 6.7$), давление $p_\infty = 80$ Па, температура $T_\infty = 270$ К.

На рисунках 2.20, 2.21 и 2.22 приводятся некоторые результаты расчета рассматриваемой струи до $x = 50$ м. На первом рисунке представлены поля температуры и давления газовой фазы продуктов сгорания; на нем отчетливо видна ударно-волновая структура струи. Следует отметить, что температура и давление в дальней части струи ($x > 4$ м) остаются на относительно низком уровне, что обуславливает слабую интенсивность химических процессов. Поэтому поля концентраций химических компонент здесь не приводятся.

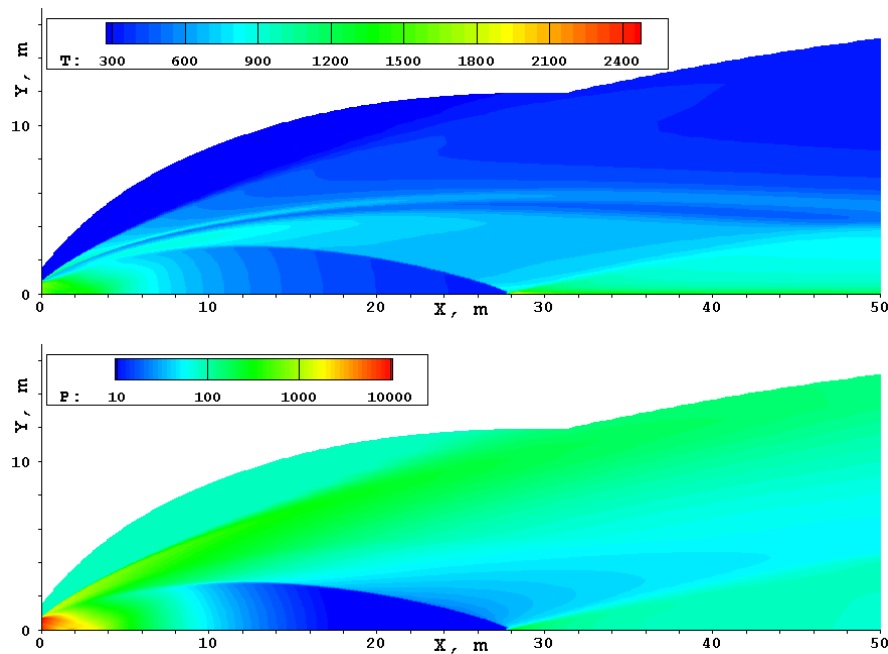


Рисунок 2.20. Поля температуры и давления газовой фазы продуктов сгорания в струе ($H = 50$ км).

Рисунок 2.21 демонстрирует поля температуры для двух фракций частиц (самых мелких и самых крупных). Видно, что из-за разреженности газовой фазы остывание частиц происходит очень медленно. Мелкие частицы в выходном сечении сопла уже находились в твердом состоянии и были достаточно охлаждены. Поэтому в струе они пребывают в γ -фазе ($Z_\gamma \approx 1$, данные на рисунках не приводятся). Самые крупные частицы

($r_s = 4.7$ мкм) затвердевают в струе, начиная от $x \approx 1.5$ м, и за счет выделения теплоты кристаллизации долго остаются в нагретом состоянии. Поэтому они успевают почти полностью перейти в α -фазу. На рисунке 2.22 приведены массовые доли γ - и α -фаз для этой фракции частиц. Видно, что в сечении $x = 50$ м только на самой периферии потока имеется небольшая доля γ -фазы.

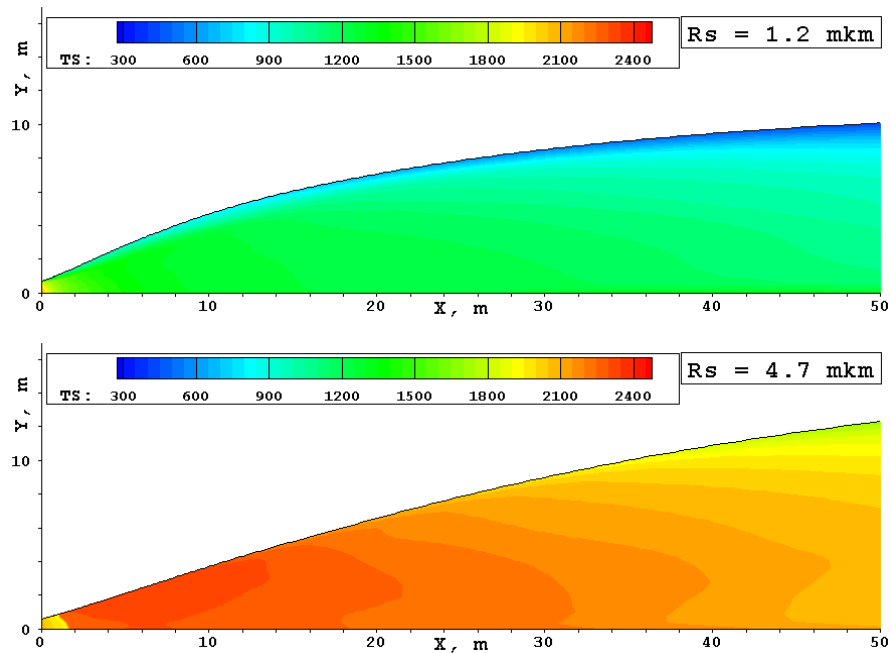


Рисунок 2.21. Поля температуры частиц в струе ($H = 50$ км).

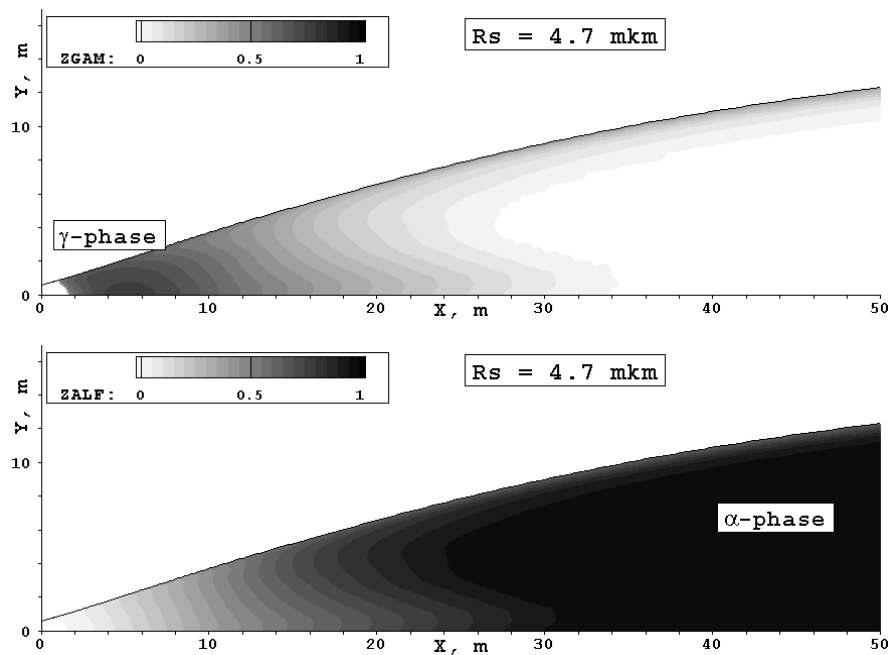


Рисунок 2.22. Доли γ - и α -фаз в крупных частицах ($H = 50$ км).

2.4.4 Течение в струе на высоте $H = 100$ км

Приведем пример расчета истечения продуктов сгорания из ЖРД в сильно разреженный спутный гиперзвуковой поток воздуха на высоте $H = 100$ км. В качестве рабочей смеси (горючее + окислитель) будем рассматривать вымышленное топливо с условной формулой $C_1H_6O_4N_4$. Базовые параметры сопла Лавала выберем следующими: радиус критического сечения $r_c = 0.05$ м, радиус выходного сечения $r_e = 0.3$ м, давление в камере сгорания $p_0 = 5 \times 10^6$ Па, температура в камере сгорания $T_0 = 3300$ К. При таких параметрах сопла его тяга составит величину ~ 75 кН. В качестве параметров спутного потока возьмем: скорость $u_\infty = 3020$ м/с (соответствует числу Маха $M_\infty \approx 11$), давление $p_\infty = 0.032$ Па, температура $T_\infty = 197$ К; мольный состав атмосферы: $O_2 = 0.186$, $N_2 = 0.780$, $O = 0.034$.

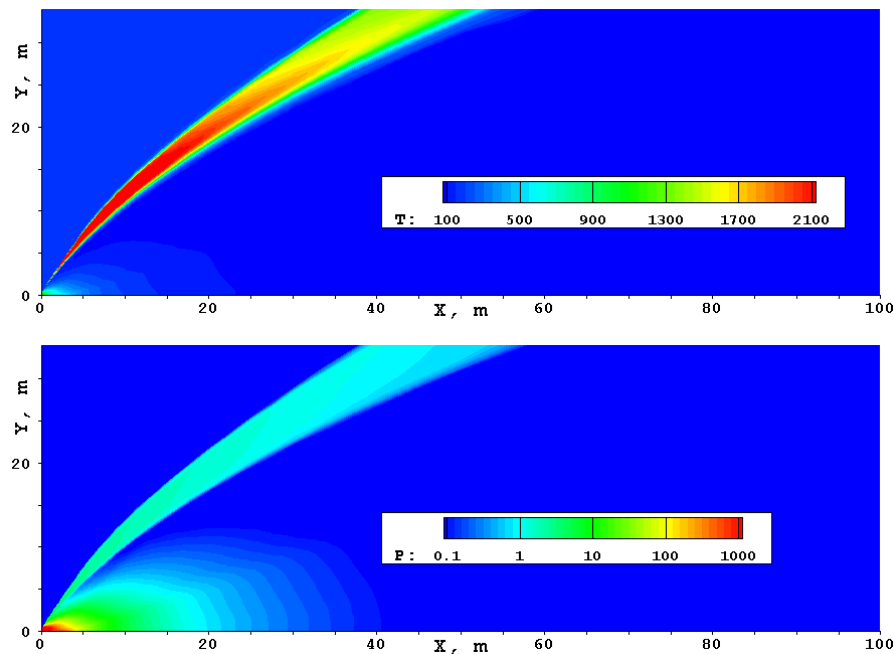


Рисунок 2.23. Поля температуры (поступательных и вращательных степеней свободы) и давления в струе ($H = 100$ км).

На рисунках 2.23 и 2.24 представлены некоторые результаты расчета рассматриваемой струи до $x = 100$ м. На первом рисунке, где приводятся поля температуры и давления, можно отчетливо различить центральную, вакуумную часть струи и область взаимодействия продуктов сгорания с разреженной атмосферой. В вакуумной области продукты сгорания быстро охлаждаются и достигают высокой разреженности, при этом они интенсивно растекаются от оси x . В периферийной части струи (где $y/x \sim 1$) продукты сгорания сталкиваются с гиперзвуковым потоком разреженной атмосферы, образуя

горячий слой смешения (в этой задаче ввиду сильной разреженности смешение потоков рассчитывалось в ламинарном приближении).

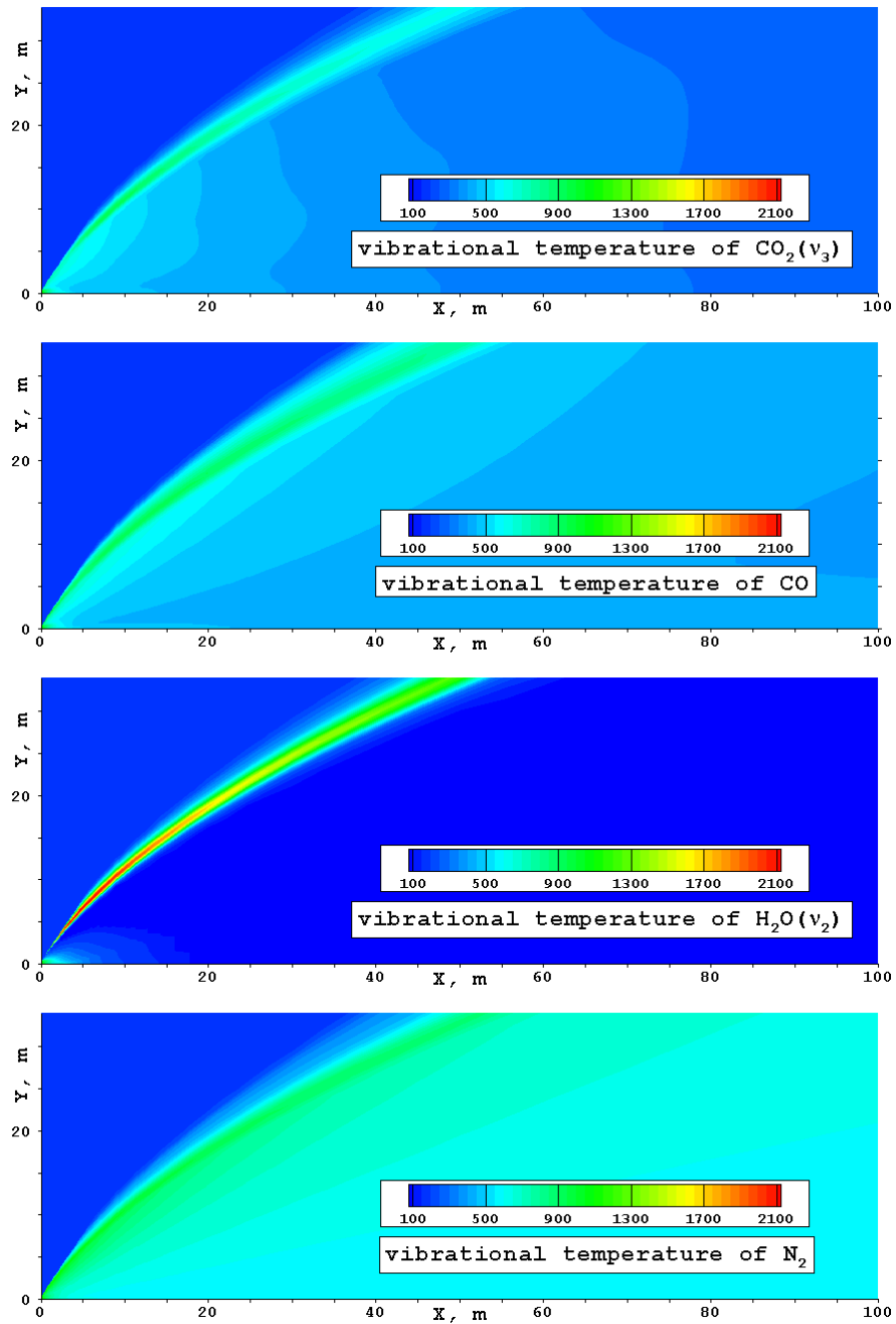


Рисунок 2.24. Поля температур колебательных степеней свободы молекул в струе ($H = 100$ км).

На рисунке 2.24 приведены поля температур четырех (из шести) колебательных мод молекул. Эти данные наглядно демонстрируют неравновесность заселения колебательных степеней свободы молекул, как в процессе охлаждения потока в вакуумной части струи, так и в процессе его нагревания в слое смешения.

Излучение истекающих из ЖРД струй в инфракрасной области спектра определяется заселением колебательных мод молекул CO_2 , H_2O CO . На рисунке 2.25 показаны поля объемной интенсивности излучения в спектральном диапазоне $\lambda = 4\div 5$ мкм. Приведены данные для двух вариантов расчета: с учетом неравновесного заселения колебательных уровней $\text{CO}_2(\nu_3)$ и в равновесном приближении ($T^v = T$). Как можно видеть, учет колебательной неравновесности очень важен с точки зрения правильного расчета излучения струй на больших высотах полета, особенно в случае моделирования истечения из двигателей с тягой < 50 кН.

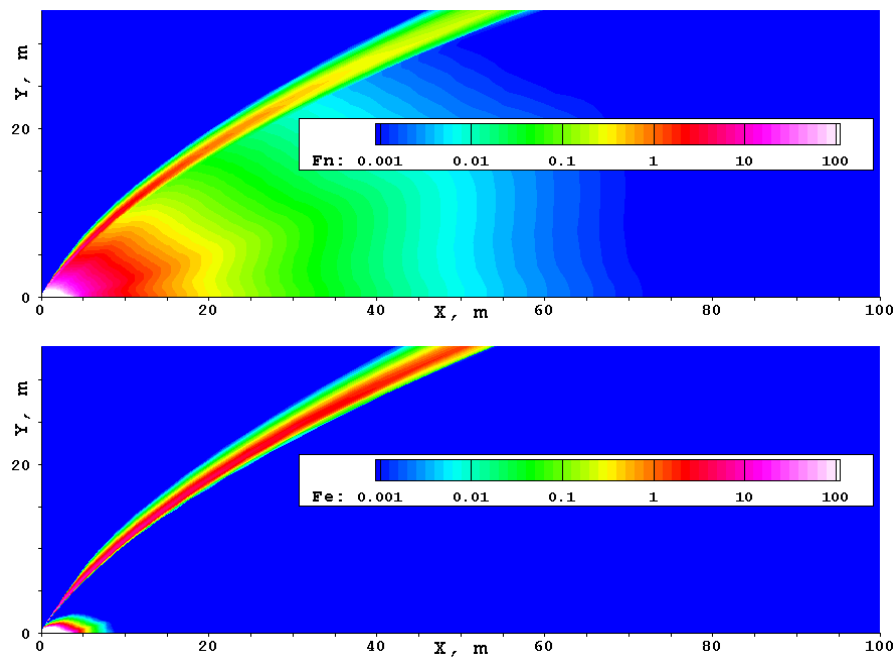


Рисунок 2.25. Поля объемной интенсивности излучения (в $\text{Вт}/\text{м}^3$) в диапазоне длин волн $\lambda = 4\div 5$ мкм, рассчитанные с учетом (верхний рисунок) и без учета (нижний рисунок) неравновесной колебательной релаксации.

2.4.5 Истечение в вакуум

Теперь обратимся к моделированию гомогенной конденсации паров воды на примере расчета истечения в вакуум продуктов сгорания из крупного водородно-кислородного ЖРД. В качестве параметров потока на выходе из сопла с $r_e = 1.4$ м возьмем: скорость $u_e = 4500$ м/с, давление $p_e = 5000$ Па, температура $T_e = 1000$ К; мольный состав продуктов сгорания: $\text{H}_2\text{O} = 0.7$, $\text{H}_2 = 0.3$. При таких параметрах сопла его тяга составит величину ~ 1000 кН. Заметим, что рассматриваемый расчетный случай очень близок к условиям истечения из ракетного двигателя Сатурн-IVB – двигателя третьей ступени космического корабля «Аполлон».

На рисунках 2.26 и 2.27 представлены некоторые результаты расчета рассматриваемой струи до $x = 1000$ м. На первом рисунке показаны поля плотности, температуры и среднемассового радиуса капель водяного пара (r_{43}), а на втором рисунке – распределение этих параметров вдоль оси струи.

Как можно видеть, конденсация паров воды начинается скачкообразно при снижении температуры потока до величины ~ 200 К; в центральной части струи такая температура достигается на расстоянии от среза сопла $x \approx 40$ м. Дальнейшее расширение продуктов сгорания сопровождается монотонным ростом размера капель. Выделяемая при этом теплота фазового перехода приводит к существенному замедлению интенсивности охлаждения потока по сравнению с темпом падения температуры, наблюдаемым до начала процесса конденсации.

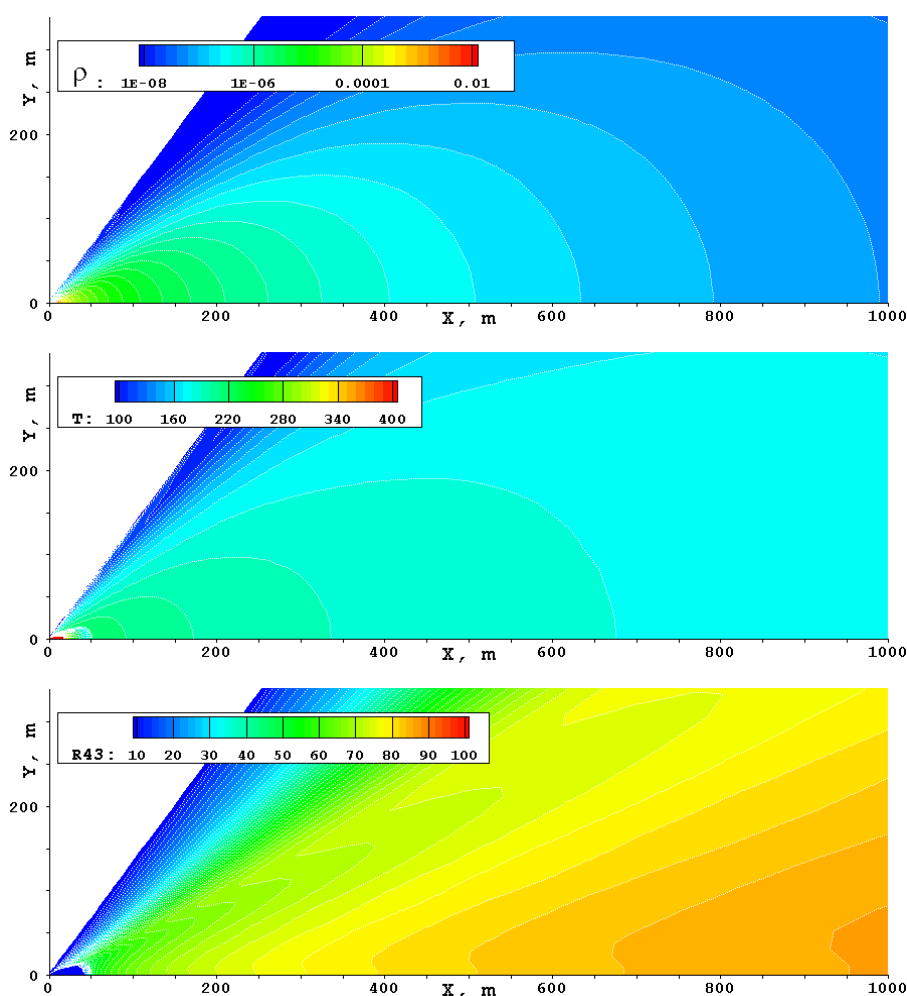


Рисунок 2.26. Поля плотности (в $\text{кг}/\text{м}^3$), температуры (в К) и среднемассового радиуса каплей H_2O (в \AA) в струе, истекающей в вакуум.

Представленные на рисунке 2.27 расчетные данные указывают на то, что в дальней части струи среднemasсовый радиус капель H_2O доходит до величины $\sim 85 \text{ \AA}$. Это хорошо согласуется с данными статьи [166], где наблюдаемая яркость струи двигателя Сатурн-IVB (полет корабля «Аполлон» в конце декабря 1968 г.) объясняется рассеянием солнечного света на облаке конденсированных частиц. В этой статье приводятся результаты вывода авторов другой работы, согласно которым средний радиус капель в струе составляет 70 – 100 \AA .

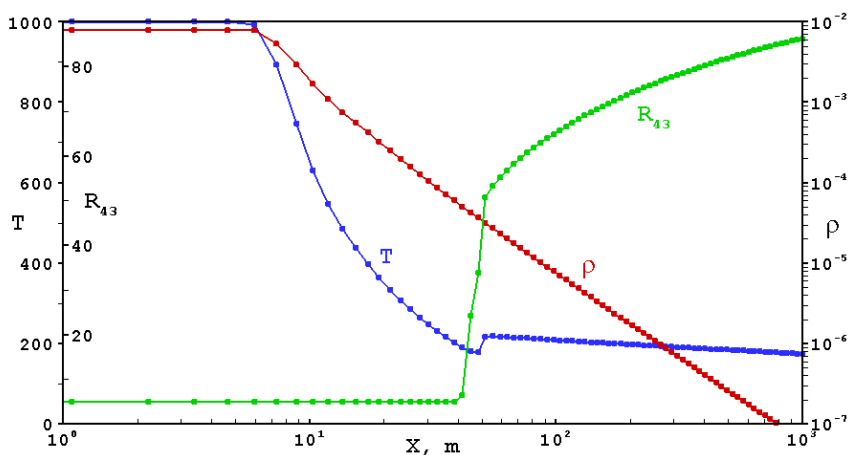


Рисунок 2.27. Распределения плотности (в кг/м^3), температуры (в К) и среднemasсового радиуса капель H_2O (в \AA) вдоль оси струи, истекающей в вакуум.

2.4.6 Решение практических задач

На всех этапах разработки комплекс программ NARJ активно использовался для решения практических задач. Упомянем здесь лишь некоторые из таких работ, нашедшие отражение в открытых публикациях.

Проблемы экологии. Продукты сгорания ракетных топлив, истекающие из двигательных установок различного типа, представляют собой один из важных факторов воздействия ракетно-космической техники на окружающую среду. При испытании двигателя на стенде или при движении ракеты на различных участках траектории выбрасываются сотни и тысячи тонн продуктов сгорания. Некоторые из их компонент, такие как вода H_2O , углекислый газ CO_2 и азот N_2 , могут быть безвредными, другие же, такие как окись углерода CO , продукты сгорания с хлором HCl и окись азота NO – заведомо опасными. При старте ракеты и при ее движении на начальном участке траектории образуется приземное облако, представляющее опасность для живого и растительного мира. В верхних слоях атмосферы возможно губительное воздействие на озоновый слой.

Вопросы влияния полетов ракет на загрязнение атмосферы рассматривались в работах [78, 79, 122, 124]. Так, в [78, 79] анализировались данные расчета выброса из ЖРД и РДТТ при их использовании в известных ракетных системах, таких как «Энергия» (двигатели РД-170, РД-0120), «Протон» (двигатель РД-253) и «Шаттл» (двигатели SRM, SSME). В частности было показано, что для оценки экологического воздействия выбросов на окружающую среду необходимо учитывать химическую неравновесность в сопле и в зоне смешения продуктов сгорания с воздухом. Было установлено, что рассчитанные для ракетных систем «Шаттл» и «Энергия» вредные выбросы в стратосферу на порядок меньше величин, приведенных ранее в отечественных и зарубежных публикациях. Следует отметить, что эта исследовательская работа проводилась по инициативе и под руководством А.П. Тишина (ЦНИИМАШ).

В качестве примера в таблице 2.8 представлены данные по поступлению в атмосферу окислов азота из двигателей РД-170 и РД-253 на различных высотах полета.

Таблица 2.8. Поступление в атмосферу окислов азота NO (в кг/с). Данные работы [78].

Двигатель	Топливо	Из двигателя	После догорания на высоте H , км				
			0	5	10	20	30
РД-170	O ₂ + керосин	2.95	23.4	15.5	7.3	3.4	2.95
РД-253	N ₂ O ₄ + НДМГ	21.7	21.7	21.7	21.7	21.7	21.7

Излучение струй продуктов сгорания. Одними из основных целей разработки комплекса программ NARJ были (1) создание комплексной газо- и термодинамической модели неравновесной струи и (2) ее использование в обеспечение адекватного моделирования излучения выхлопов типовых ЖРД и РДТТ. Характеристики излучения факелов определялись в два этапа. Сначала по кодам NARJ рассчитывались поля газодинамических и термодинамических параметров струи. Затем по полученным полям рассчитывались спектро-энергетические характеристики струи, для чего использовался комплекс программ PRCJ (PRCJ = Prediction of Radiative Characteristics of Jets). Этот комплекс программ также был разработан в отделе оптико-физических исследований ЦНИИМАШ, его авторы: Ю.А. Пластинин (рук.), Г.Г. Баула и Б.А. Хмелинин.

Выработке и обоснованию модели неравновесной кристаллизации частиц Al₂O₃ посвящены работы [123, 126, 127, 167]. В частности, в [123] моделировались условия натурального эксперимента «Bow Shock Ultraviolet 2 Flight Experiment» при полете ракеты с двигателем Star-27 на высоте $H = 114$ км. Для примера на рисунке 2.28 воспроизведено сравнение расчетных данных с данными экспериментальных измерений. Как можно

видеть, данные совместного расчета по программам NARJ и PRCJ хорошо согласуются с натурными измерениями излучения факела в УФ-области спектра.

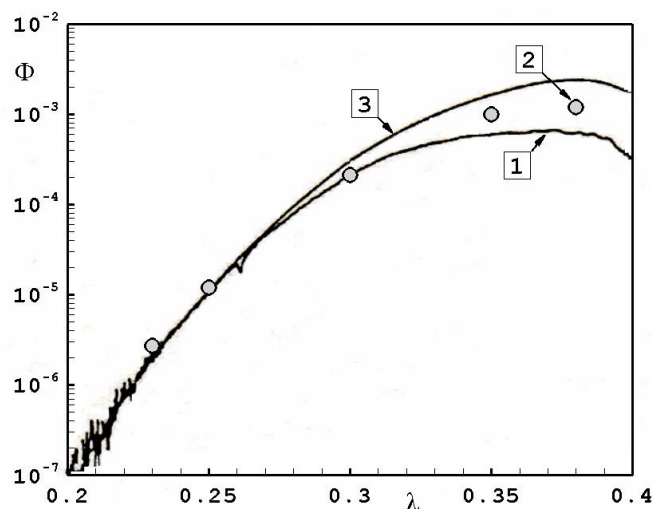


Рисунок 2.28. Сравнение рассчитанных и экспериментальных спектров: 1 – экспериментальные данные, 2 – данные расчета по кодам NARJ + PRCJ [123], 3 – расчетные данные из работы [168].

В рамках создания комплексной модели неравновесной струи был проведен цикл работ по учету влияния частиц сажи на излучение струй, истекающих из ЖРД [129 – 131, 134, 136, 168]. На момент начала исследований было экспериментально известно, что частицы сажи присутствуют в продуктах сгорания, и они дают существенный вклад в спектро-энергетические характеристики струи. В процессе проделанной работы была предложена модель горения сажи в слое смешения спутной струи, которая позволила обосновать методику дистанционного определения массового содержания сажи по спектральной интенсивности излучения факела. Эта методика была проверена на примере работы двигателей ракет-носителей «Атлас-II» и «Атлас-III». Массовая концентрация сажи на выходе из сопла оказалась равной 0.1 – 0.17%. На рисунке 2.28 приведены примеры сопоставления данных, полученных с помощью выработанной методики, с экспериментальными данными по излучению ракетных двигателей в ИК- и видимой областях спектра.

Экспериментальные исследования на МКС. Одно из направлений работ на борту Международной космической станции (МКС) заключалось в исследовании взаимодействия выхлопов двигателей транспортных кораблей «Прогресс» и «Союз» с верхней атмосферой Земли на высотах $H = 300 - 400$ км. Результаты данного

исследования были опубликованы в работах [133, 137, 169]; его основная идея заключалась в следующем.

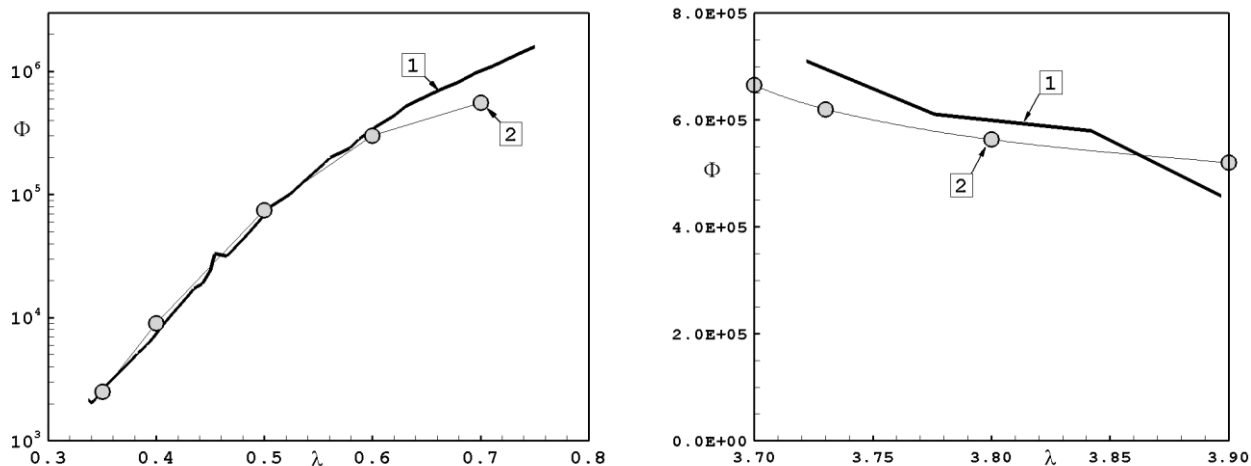


Рисунок 2.28. Сравнение измеренных (кривые 1) и рассчитанных (кривые 2) спектров излучения (λ в мкм, Φ в Вт/(мкм·ср)) для ракет-носителей «Атлас-II» (слева) и «Атлас-III» (справа). Данные работ [134, 136].

Струя продуктов сгорания направлена в сторону пилотируемой станции. Крайне разреженная атмосфера на этой высоте состоит главным образом из атомарного кислорода с длиной свободного пробега молекул ~ 16 км. При скорости станции 7.6 км/с, а продуктов сгорания ~ 3 км/с, суммарная относительная скорость оказывается достаточной для возбуждения электронных состояний атомарного кислорода с последующим высвечиванием в УФ-области спектра. В рамках данного исследования проводился анализ натуральных измерений УФ-излучения при включении двигателей СКД и ДПО и их сопоставление с расчетными данными. Расчетные данные получались как результат использования комплекса программ NARJ (расчет истечения продуктов сгорания в вакуум) и последующего моделирования взаимодействия продуктов сгорания с разреженной атмосферой в свободно-молекулярном приближении. Комплекс проведенных работ позволил определить константы сверхскоростного взаимодействия атомарного кислорода с продуктами выхлопа. Заметим, что в лабораторных условиях получение такого рода фундаментальных данных крайне затруднительно.

2.5 Моделирование турбулентных сверхзвуковых струй и гипотеза Буссинеска

В комплексе программ NARJ для моделирования истечения продуктов сгорания из реактивных двигателей используется маршевый метод расчета. Выбор такого подхода был продиктован необходимостью в оперативных расчетах сложных (с учетом большого количества неравновесных физико-химических процессов и многофазности) струйных течений на вычислительной технике среднего класса. Как уже говорилось, в этом случае требуется внесение существенных изменений в базовые уравнения газовой динамики, ключевым из которых является параболизация уравнений Навье-Стокса.

В данном разделе приводятся результаты исследования, проведенного автором при переходе с маршевого метода расчета струй на метод установления по времени. Было обнаружено, что в случае моделирования затопленных *неизобарических* струй, использование метода установления и полных уравнений Навье-Стокса приводит не к улучшению, а к заметному ухудшению согласия с экспериментальными данными (по сравнению с использованием маршевого метода и параболизированных уравнений Навье-Стокса). Для выяснения причины такого «странного» эффекта было, прежде всего, проведено тщательное тестирование использованных методик, включая проверку их сходимости по сетке и сопоставление с расчетами других авторов. После того, как достоверность полученных результатов была подтверждена, возникла настоятельная потребность в теоретическом объяснении обнаруженного эффекта.

На следующем этапе работы, в результате проведения и анализа большой серии расчетов, в которых модели турбулентности варьировались, было установлено, что проблема заключается в гипотезе Буссинеска, широко используемой при моделировании различных турбулентных течений в рамках RANS. Оказалось, что она не адекватно 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 (в рамках полных и параболизированных уравнений Навье-Стокса) и объяснить, почему именно параболизированные уравнения лучше описывают взаимодействие ударных волн со слоем смещения в турбулентной неизобарической струе.

Наконец, в заключительной части работы удалось выработать и обосновать новые, альтернативные формы для тензора турбулентных напряжений, обладающие определенными преимуществами перед гипотезой Буссинеска. Оказалось, что их

использование в других аэродинамических задачах (моделирование до- и сверхзвукового обтекания тел в рамках RANS) позволяет естественным образом решить одну из проблем, характерную для задач данного класса.

Итак, в данном разделе будут описаны основные результаты проделанной работы.

2.5.1 Особенности неизобарических струй и стратегия их расчета.

Далее будут рассматриваться сверхзвуковые турбулентные струи, истекающие из осесимметричного сопла в затопленное пространство (т.е. в неподвижную среду – обычно в воздух). Прежде всего, дадим краткую информацию об основных особенностях *сверхзвуковых затопленных струй*.

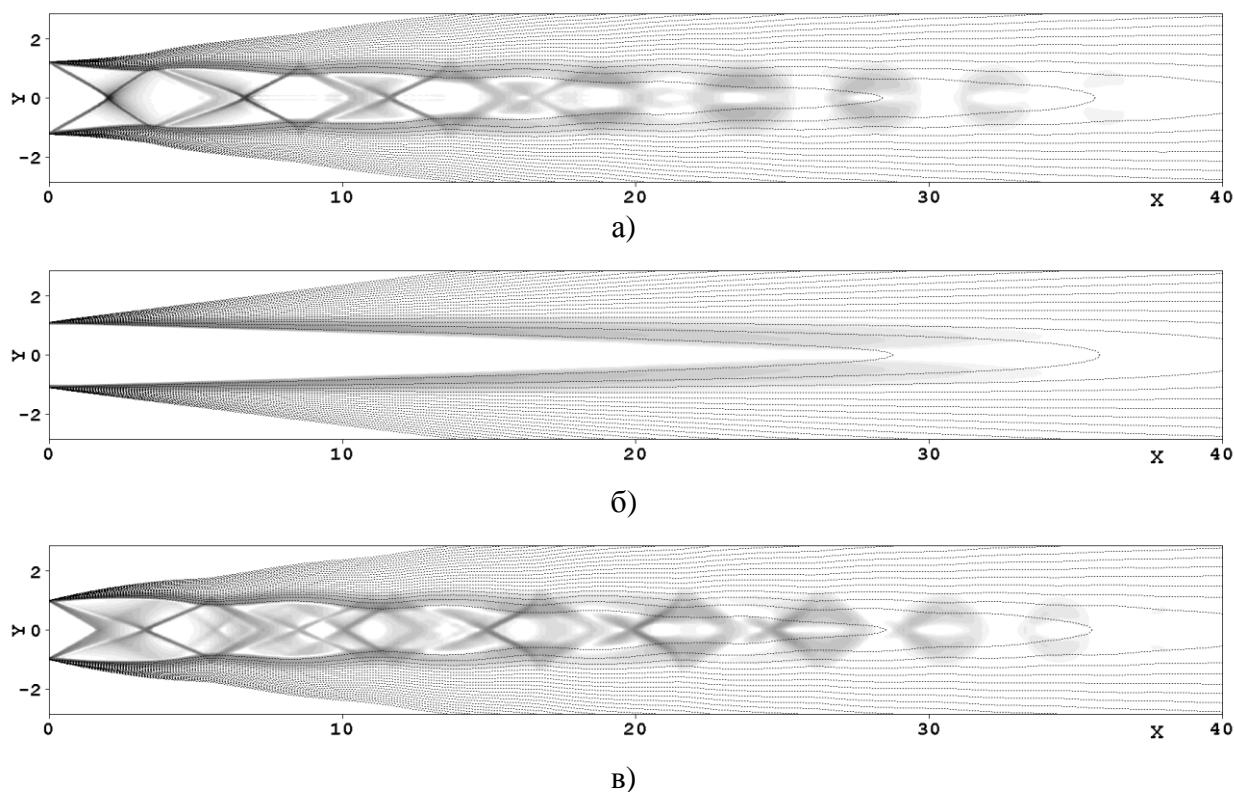
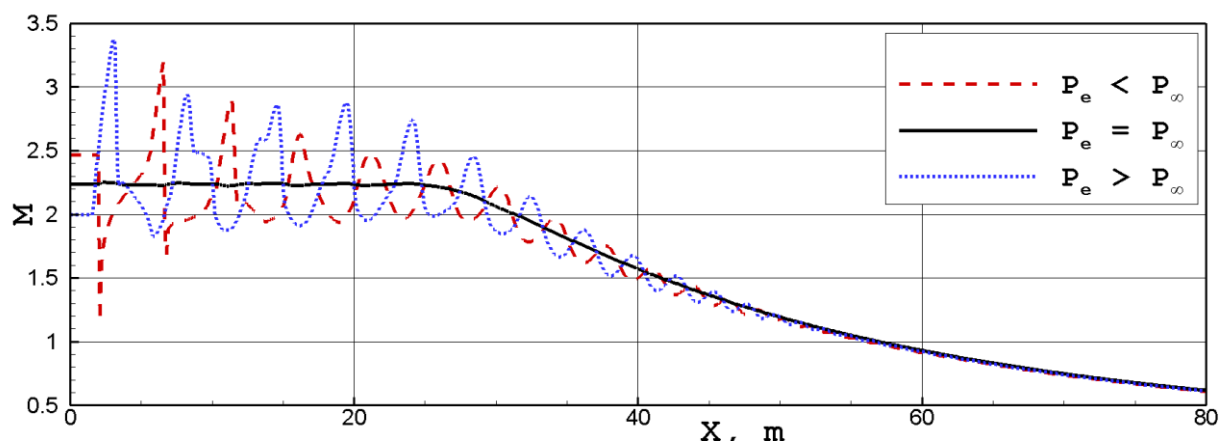


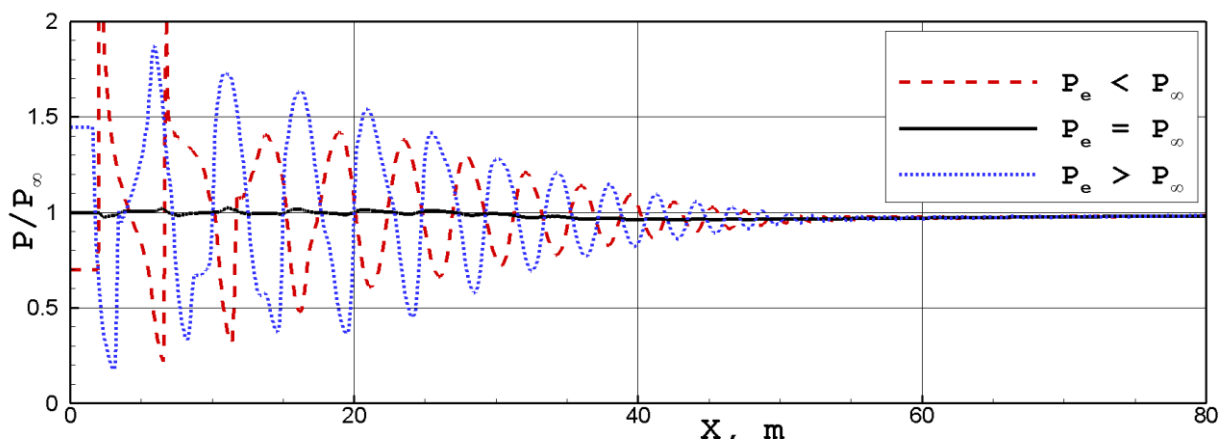
Рисунок 2.29. Слой смешения (изолинии концентрации истекающего газа) и ударно-волновая структура (поле градиента плотности) в сверхзвуковых затопленных струях: а) – перерасширенная струя; б) – изобарическая струя; в) – недорасширенная струя.

Различают *изобарические* струи, когда статическое давление потока на выходе из сопла (p_e) равно давлению окружающего пространства (p_∞), и *неизобарические* струи – *перерасширенные* ($p_e < p_\infty$) или *недорасширенные* ($p_e > p_\infty$). На рисунке 2.29 приведены расчетные данные, показывающие основные особенности таких струй: изолинии

концентрации истекающего газа демонстрируют развитие турбулентного слоя смешения (смешиваются истекающий и покоящийся газы), а поля градиента плотности выявляют ударно-волновую структуру в неизобарических струях. Данные приведены для струй, имеющих одинаковый расход истекающего газа при идентичных параметрах торможения в камере сопла. На рисунке 2.30 показаны осевые распределения числа Маха и статического давления в таких струях.



а)



б)

Рисунок 2.30. Осевые распределения числа Маха (а) и статического давления (б) в сверхзвуковых затопленных струях.

Глядя на эти данные можно заметить, что в изобарической струе параметры потока вдоль оси практически не меняются до точки смыкания слоя смешения. Далее вниз по потоку число Маха, а, следовательно, и скорость и давление торможения, интенсивно падают. В неизобарических струях в центральной, сверхзвуковой части потока формируется ударно-волновая структура, которая по мере удаления от среза сопла затухает. В дальней, уже дозвуковой части потока течение становится изобарическим.

Также различают *холодные* и *горячие* струи. В холодных струях температура торможения истекающего газа (T_0) близка к температуре окружающей среды (T_∞). В горячих струях истекающий газ представляет собой либо продукты сгорания топлива, либо предварительно подогретый газ (например, горячий воздух).

Расчеты струй проводились в области от выходного сечения сопла ($x = 0$) до сечения $x = 80r_e$ (r_e – радиус сопла на выходе). В плоскости выходного сечения сопла задавались два потока: внутренний, равномерный или неравномерный, сверхзвуковой поток «рабочего» газа, и внешний, глубоко дозвуковой поток воздуха с числом Маха $M_\infty = 0.01$. В месте стыковки двух потоков (у кромки сопла) инициировался начальный турбулентный слой смешения с полушириной равной сеточному интервалу (как описано в разделе 2.3.4). Заметим, что ни расширение области расчета для внешнего потока в сторону $x < 0$, ни варьирование его начальной скорости в пределах $M_\infty < 0.05$ не оказывало заметного влияния на параметры течения в ядре струи.

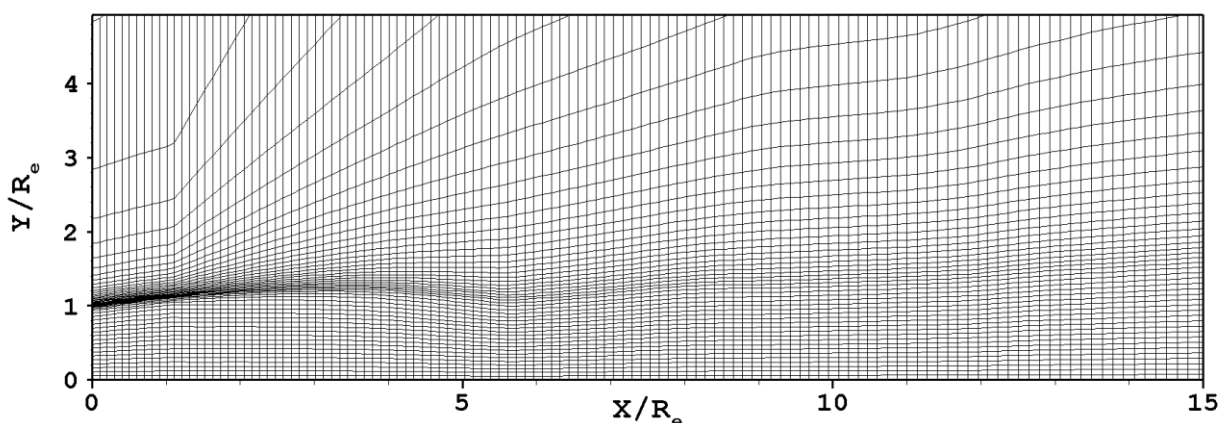


Рисунок 2.31. Фрагмент расчетной сетки.

Для каждой из рассматриваемых задач в первую очередь проводился расчет маршевым методом. При этом строилась неравномерная расчетная сетка, как показано на рисунке 2.31. На начальном участке счета одна из точек сетки отслеживала исходящую из кромки сопла линию тока; сетка в ее окрестности сгущалась. В первом сечении размер сеточного интервала вблизи выделяемой линии тока был примерно на порядок меньше, чем в ядре потока. Далее, по мере увеличения толщины слоя смешения, сгущение сетки уменьшалось. На верхней границе расчетной области задавался внешний невозмущенный поток, на нижней границе использовалось условие симметрии течения. В процессе маршевого расчета координаты сетки и параметры газа сохранялись в предписанных сечениях $x = \text{const}$.

На следующем этапе осуществлялся расчет той же задачи методом установления с использованием сетки и начальных данных, полученных маршевым методом. На верхней и нижней границах сетки использовались те же граничные условия, что и в маршевом методе. Параметры на левой (входной) границе определялись из решений задачи Римана, в которой параметры наружных (по отношению к расчетной области) потоков – начальные данные маршевого метода. Параметры на правой (выходной) границе сетки также определялись из решений задачи Римана, но здесь параметры наружных потоков полагались равными параметрам внутренних потоков, кроме давления – для него полагалось $p = p_\infty$ (внешнее давление). На этой границе также ставилось ограничение, запрещающее втекание потоков в расчетную область.

2.5.2 Недорасширенная струя холодного воздуха.

В качестве первой тестовой задачи была выбрана недорасширенная струя холодного воздуха, экспериментально исследованная Сейнером и Норумом [170]. Данные этого подробного исследования широко используются для тестирования различных моделей турбулентности (см., например, работы [164, 171 – 176]). Определяющие параметры задачи следующие.

На выходе из профилированного сопла реализуется равномерный поток воздуха ($\gamma = 1.4$) с числом Маха $M_e = 2$ и давлением $p_e = 1.446p_\infty$. Температура торможения внутреннего потока равна температуре наружного воздуха T_∞ , поэтому статическая температура на выходе из сопла $T_e = 0.5556T_\infty$.

Прежде всего, на данной задаче была проверена сеточная сходимость расчетных методик. На рисунке 2.32 приведены распределения статического давления вдоль оси струи, полученные в результате решения полных уравнений Навье-Стокса (full Navier-Stokes equations = FNS) методом установления по времени (time-asymptotic technique = TA) и параболизированных уравнений Навье-Стокса (parabolized Navier-Stokes equations = PNS) методом маршировки по пространству (space-marching technique = SM). Расчеты проводились на двух сетках: $I \times J = 400 \times 48$ и $I \times J = 800 \times 95$. Во всех случаях использовались стандартные коэффициенты k - ε модели турбулентности с оригинальной поправкой Саркара (модель Саркара).

Рисунок 2.32 наглядно демонстрирует, что: (1) по каждой из методик получены практически сеточно-независимые решения, и (2) по мере удаления от выходного сечения сопла эти решения все более расходятся между собой.

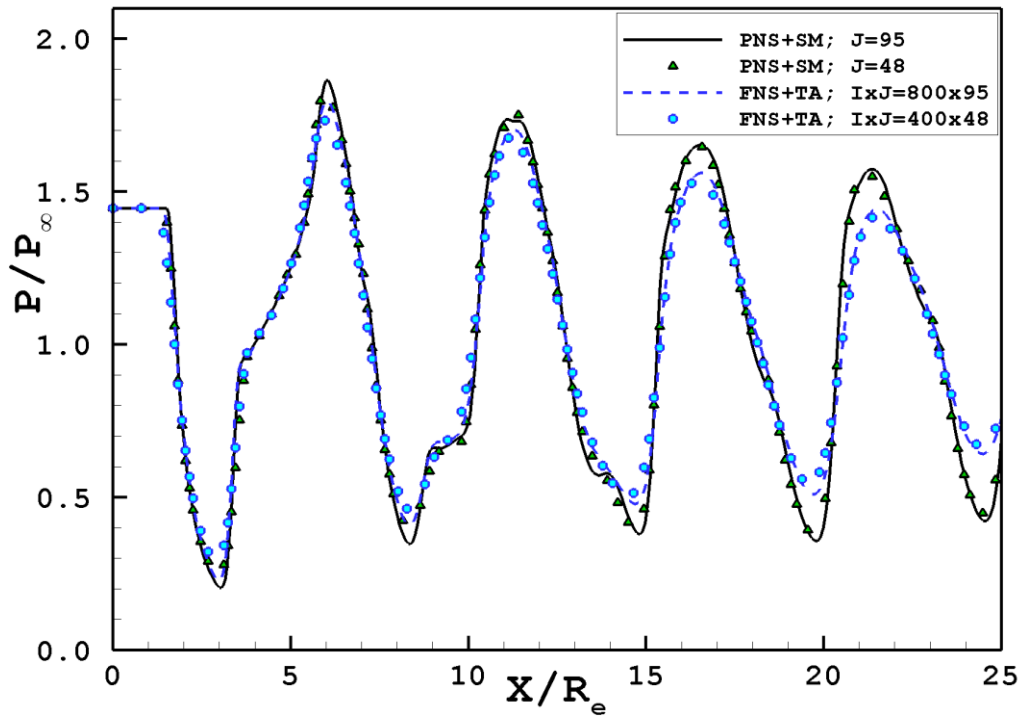


Рисунок 2.32. Распределения статического давления вдоль оси струи, рассчитанные по двум методикам с различным сеточным разрешением (модель турбулентности Саркара).

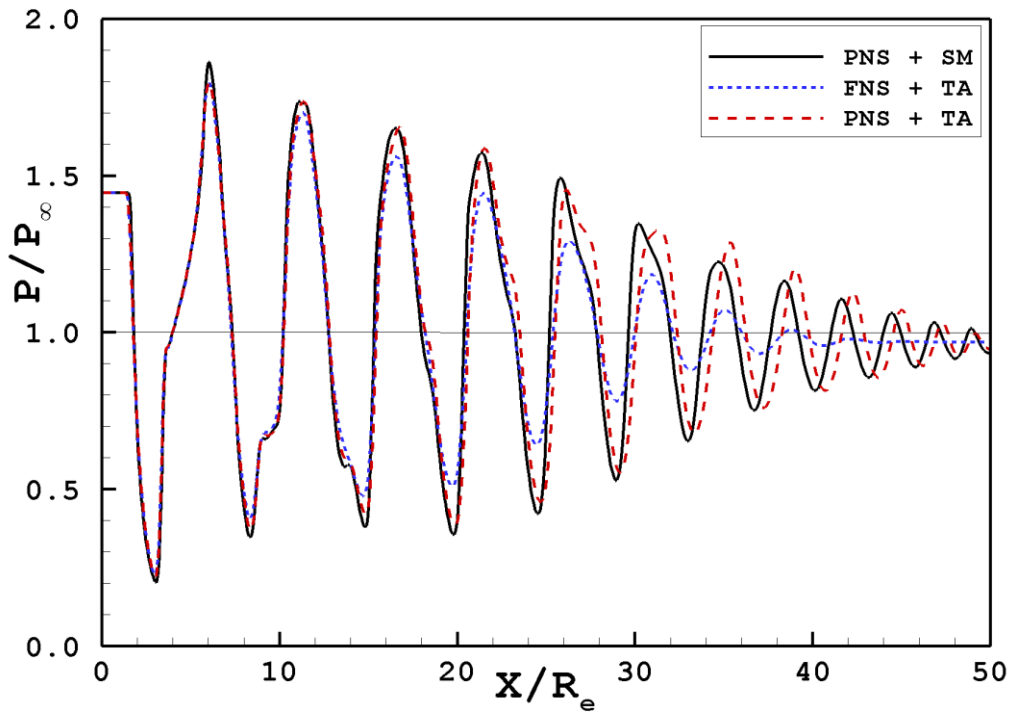


Рисунок 2.33. Распределения статического давления вдоль оси струи, рассчитанные по трем методикам (модель турбулентности Саркара).

На рисунке 2.33 показаны те же распределения давления, но на более протяженном участке струи (здесь и далее приводятся результаты расчетов на сетке $I \times J = 800 \times 95$). В дополнение к расчетам по двум основным методикам (FNS + TA и PNS + SM) показан также профиль давления, полученный в результате решения параболизированных уравнений Навье-Стокса методом установления по времени (методика PNS + TA). Сопоставляя результаты этих трех расчетов, можно сделать следующие выводы.

Во-первых, использование PNS уравнений вместо FNS уравнений (сравните штриховую и пунктирную линии) приводит к существенному снижению интенсивности затухания волновых процессов в неизобарической струе. Во-вторых, поправки, вносимые в газодинамические уравнения при расчете дозвуковых областей течения маршевым методом (поправки, касающиеся членов $\partial p / \partial x$ и $\partial p / \partial y$), оказывают гораздо меньшее влияние (сплошная линия против штриховой линии); здесь главным образом наблюдается небольшой фазовый сдвиг колебаний давления (длина волны слегка уменьшается).

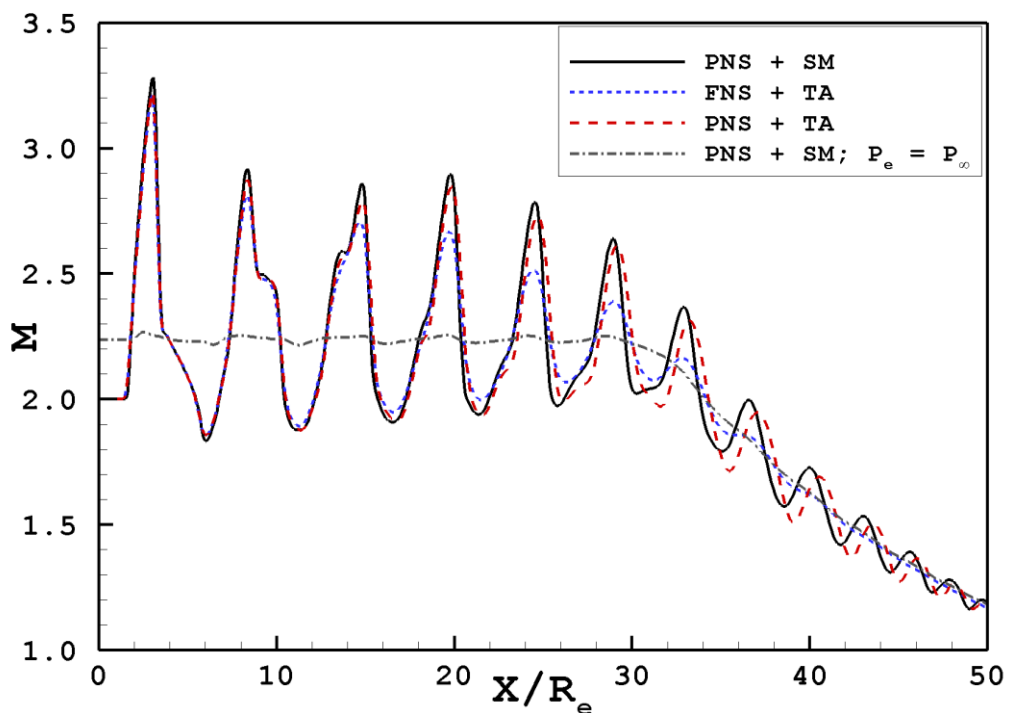


Рисунок 2.34. Распределения числа Маха вдоль оси струи, рассчитанные по различным методикам (модель турбулентности Саркара).

Распределения числа Маха вдоль оси струи для трех обсуждаемых расчетов показаны на рисунке 2.34. На нем также приведен результат расчета эквивалентной изобарической струи ($p_e = p_\infty$, для сохранения расхода и параметров торможения истекающего газа принималось: $r_{e,eqv} = 1.108r_e$, $M_e = 2.236$, $T_e = 0.5T_\infty$) по методике PNS + SM

(штрихпунктирная линия). Видно, что, несмотря на различие в моделировании ударно-волновых процессов, все четыре расчета дают практически одинаковую интенсивность спада числа Маха вдоль оси струи начиная с $x \approx 30r_e$. Это говорит о том, что во всех расчетах интегральные характеристики слоя смешения моделируются сходным образом.

Теперь можно перейти к сопоставлению результатов расчетов с экспериментальными данными, опубликованными в работе [170]. Сначала исследуем возможное влияние неравномерности потока в выходном сечении сопла на параметры течения в струе. Для этого кроме случая с равномерным потоком в выходном сечении сопла рассмотрим два других расчетных случая.

В первом случае изэнтропическое ядро потока дополняется турбулентным пограничным слоем толщиной $\delta = 0.05r_e$. Внутри пограничного слоя профиль скорости газа задается по степенному закону ($n = 1/7$), а максимальные значения параметров турбулентности составляют $k_{\max} = 0.015u_e^2$ и $\varepsilon_{\max} = k_{\max}^{3/2} / (0.06\delta)$. Параметры ядра потока задаются из условия сохранения общего расхода газа: $p_e = 1.511p_\infty$, $M_e = 1.972$, $T_e = 0.5626T_\infty$.

Во втором случае используются те же параметры, что и для равномерного потока, но течение в выходном сечении сопла задается коническим с углом полураствора $\theta_e = -2^\circ$ (обратный конус). Тем самым учитывается возможное влияние пограничного слоя на наклон вектора скорости газа в ядре потока (хотя сам пограничный слой в этом случае не задается).

На рисунке 2.35 результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными по осевому профилю статического давления на начальном участке струи. Все расчеты проводились методом маршировки по пространству. В дополнение к трем расчетам турбулентных струй (с различными потоками на выходе из сопла), на рисунке также приведен результат расчета невязкой струи (штрихпунктирная линия). Сопоставление всех представленных на рисунке данных позволяет сделать следующие выводы.

Во-первых, влияние турбулентного слоя смешения на течение в ядре струи становится существенным после сечения $x = 10r_e$ (сравните сплошную и штрихпунктирную линии). Во-вторых, в ближнем поле струи ($x < 15r_e$) неравномерность потока на выходе из сопла оказывает заметное влияние лишь на отдельных участках осевого профиля давления. Существуют два характерных участка падения давления ($1.5 < x/r_e < 2.5$ и $6.5 < x/r_e < 7.5$), где все расчеты практически совпадают; здесь наблюдается очень хорошее согласие с экспериментальными данными. Вне этих участков экспериментальные данные либо находятся в пределах «разброса» расчетных данных, либо незначительно из него выходят.

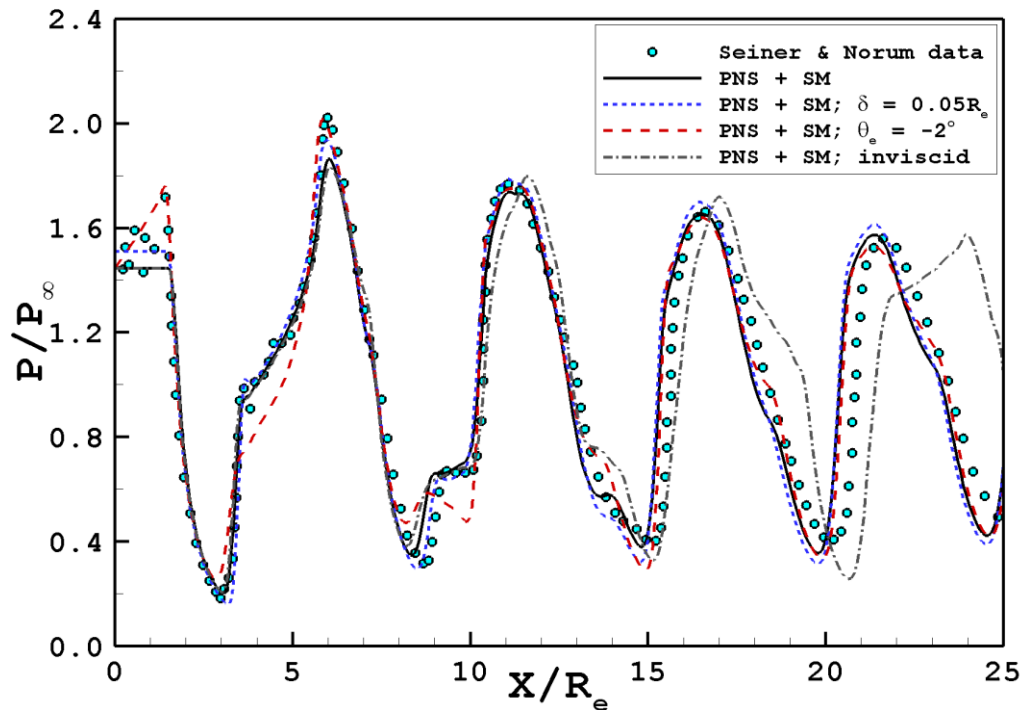


Рисунок 2.35. Сопоставление расчетных (различные потоки на выходе из сопла) и экспериментальных данных по распределению давления вдоль оси струи.

Итак, на начальном участке струи результаты расчетов хорошо воспроизводят экспериментальные данные. Теперь перейдем к рассмотрению дальнего участка струи ($x > 15r_e$), где наблюдается существенная зависимость расчетных данных от модели турбулентности и метода расчета (FNS + TA или PNS + SM). Поскольку влияние небольшой неравномерности потока на выходе из сопла здесь уже мало (сравните сплошную, штриховую и пунктирную линии в правой части рисунка 2.35), все последующие расчеты проводились с равномерным внутренним потоком в начальном сечении.

В начале следующего этапа работы модель турбулентности была скорректирована так, чтобы обеспечить согласие с экспериментальными данными по интенсивности спада числа Маха вдоль оси струи на участке $x > 30r_e$ (как было показано выше, эта характеристика струи практически не зависит от метода расчета). Для этого были изменены коэффициенты α_0 и σ_κ в модели турбулентности Саркара; в качестве новых значений для них было выбрано: $\alpha_0 = 1.4$, $\sigma_\kappa = 0.8$. Как хорошо видно из рисунка 2.36, расчеты по двум методикам (PNS+SM – сплошная линия, FNS+TA – штриховая линия) с использованием скорректированной модели турбулентности дают хорошее согласие с экспериментальными данными по спаду числа Маха в дальнейшей части струи.

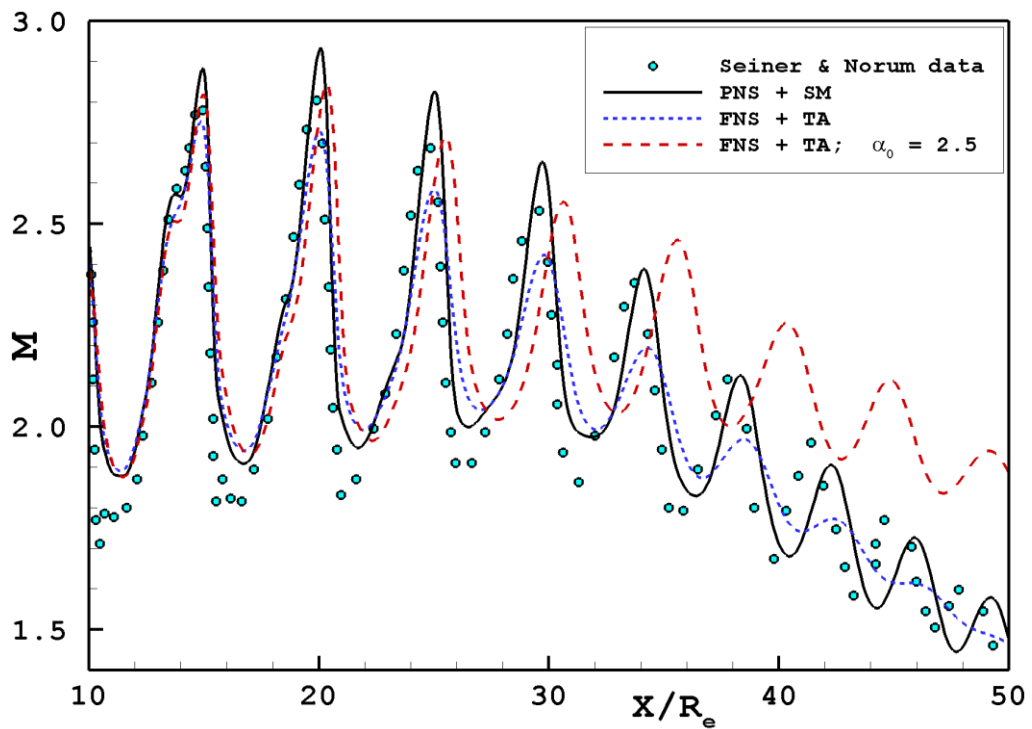


Рисунок 2.36. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных по распределению числа Маха вдоль оси струи (скорректированная модель турбулентности Саркара).

Теперь, когда модель турбулентности скорректирована, и спад числа Маха воспроизводится в расчетах адекватно, обратим внимание на затухание ударно-волновой структуры струи. Для этого рассмотрим рисунок 2.37, где приведены осевые распределения статического давления, полученные по различным расчетным методикам и экспериментально. Из сопоставления этих данных можно сделать следующие выводы.

1. Сравнивая экспериментальные данные с результатами расчета задачи в рамках FNS уравнений (кружки против пунктирной линии) не трудно заметить, что амплитуда колебаний давления в расчете затухает гораздо быстрее, чем в эксперименте. Так, по амплитуде давления на расстоянии $x = 40r_e$ наблюдается почти трехкратная разница. Такое рассогласование данных следует признать очень большим. Если же подправить модель турбулентности Саркара так, чтобы добиться лучшего согласия по амплитуде колебаний (на рисунках 2.36 и 2.37 штриховой линией показаны результаты расчета с $\alpha_0 = 2.5$), то получим сильное расхождение с экспериментом по спаду числа Маха (рисунок 2.36) и по длине волны колебаний (рисунок 2.37). Здесь уместно пояснить, что увеличение α_0 приводит к уменьшению интенсивности турбулентного перемешивания и, следовательно, к удлинению области сверхзвукового течения.

2. Что касается расчетных данных, полученных по методике PNS+SM (сплошная линия на рисунке 2.37), то они хорошо согласуются с экспериментальными данными; особо хорошее соответствие, как по амплитуде, так и по длине волны, можно отметить в области до $x \approx 40r_e$. К этому можно добавить, что результаты расчета по методике PNS+TA (на рисунках не показаны) также хорошо согласуются с экспериментом по амплитуде колебаний.

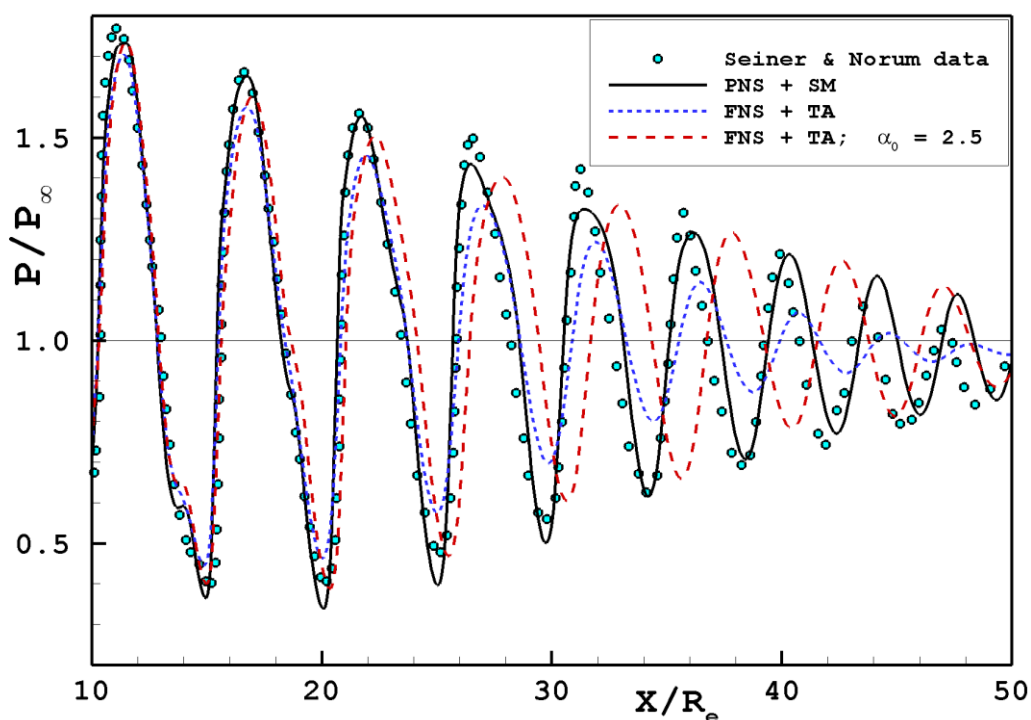


Рисунок 2.37. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных по распределению давления вдоль оси струи (скорректированная модель турбулентности Саркара).

Итак, на данном этапе исследования мы приходим к двум неожиданным выводам. Во-первых, использование полных уравнений Навье-Стокса (FNS уравнений) не позволяет адекватно смоделировать интенсивность затухания ударно-волновых процессов в неизобарической струе. Во-вторых, применение процедуры параболизации к уравнениям Навье-Стокса (урезания FNS уравнений до PNS уравнений) практически устраняет этот их недостаток.

На следующем этапе рассматриваемая тестовая задача рассчитывалась с использованием других моделей турбулентности. Здесь мы продемонстрируем результаты применения одной из самых простых и, вместе с тем, эффективных моделей – модели

турбулентности Прандтля. Согласно этой модели, коэффициент турбулентной вязкости рассчитывается по формуле

$$\mu_t = \rho l^2 \left| \frac{\partial u_x}{\partial y} \right|$$

где l – путь турбулентного смешения.

Как и в случае с моделью турбулентности Саркара, модель турбулентности Прандтля была «настроена» на рассматриваемую задачу по интенсивности спада числа Маха вдоль оси струи на участке $x > 30r_e$. В результате было получено следующее выражение для пути турбулентного смешения: $l = 0.004x(1 + 0.01x/r_e)$.

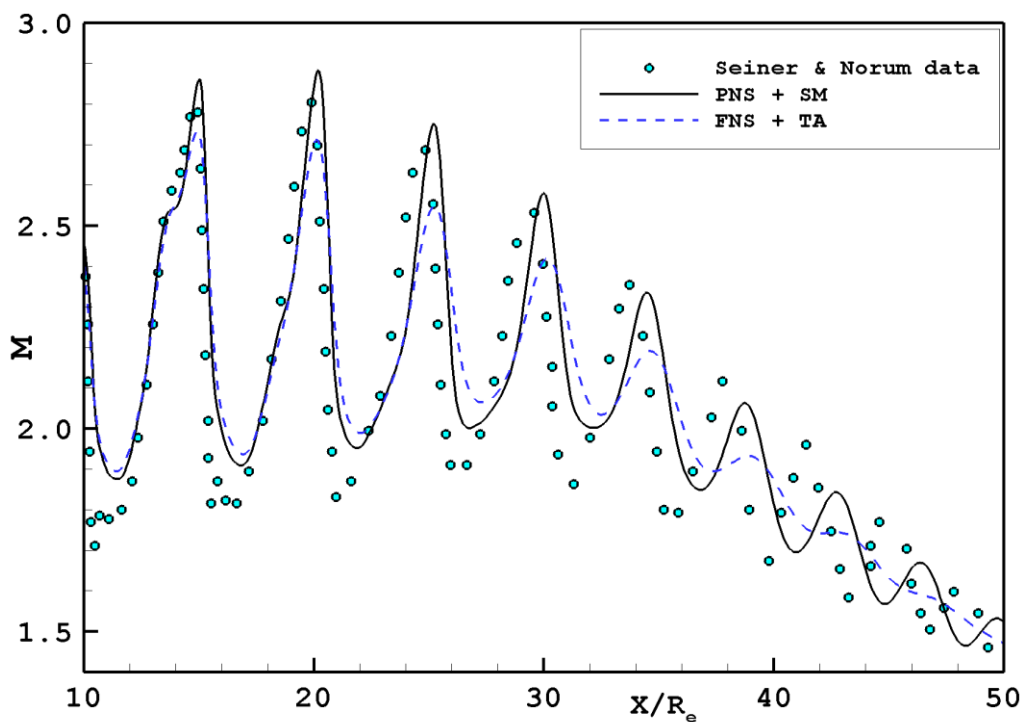


Рисунок 2.38. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных по распределению числа Маха вдоль оси струи (адаптированная модель турбулентности Прандтля).

Сопоставление экспериментальных данных с результатами расчетов, полученными по методикам FNS+TA и PNS+SM с адаптированной моделью турбулентности Прандтля, представлено на рисунке 2.38 (осевое распределение числа Маха) и на рисунке 2.39 (осевое распределение статического давления). Анализ новых результатов показывает, что применение модели турбулентности Прандтля приводит к чуть большей интенсивности затухания ударных волн, чем это наблюдалось при использовании $k-\varepsilon$ модели турбулентности. Тем не менее, и для модели турбулентности Прандтля справедливо

утверждение: результаты, полученные по методике PNS+SM, заметно лучше согласуются с экспериментальными данными, чем результаты, полученные по методике FNS+TA. Этот факт указывает на то, что обнаруженная проблема связана скорее с недостатками гипотезы Буссинеска, чем с грубостью конкретной модели турбулентности.

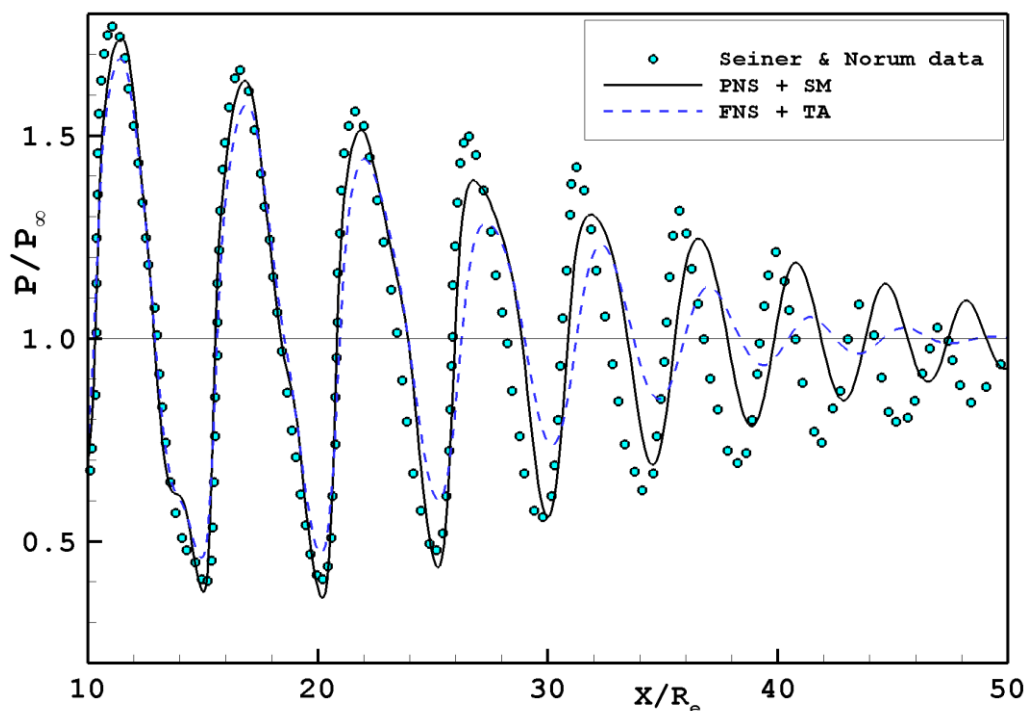


Рисунок 2.39. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных по распределению давления вдоль оси струи (адаптированная модель турбулентности Прандтля).

Прежде, чем углубиться в анализ гипотезы Буссинеска, рассмотрим еще одну тестовую задачу, существенно отличающуюся от только что рассмотренной первой тестовой задачи.

2.5.3 Перерасширенная струя продуктов сгорания.

В качестве второй тестовой задачи рассмотрим перерасширенную струю продуктов сгорания, результаты экспериментального исследования которой опубликованы в [177]. В экспериментах использовалось твердое топливо с температурой сгорания в камере $T_0 = 2840^\circ\text{K}$ при давлении $p_0 = 5.19\text{МПа}$. Коническое сопло имело степень расширения $(R_e/R_c)^2 = 9$ и полуугол раствора $\theta_e = 11^\circ$. Выполненный в одномерном, химически неравновесном приближении, расчет течения продуктов сгорания в сопле дал следующие параметры

потока в выходном сечении: $T_e = 1300^\circ\text{K}$, $p_e = 0.07\text{МПа}$, $M_e = 3.25$ (при отношении удельных теплоемкостей $\gamma = 1.25$ и молекулярной массе смеси $\bar{M} = 26.4$).

Экспериментальные данные по осевому распределению полного давления представлены на рисунке 2.40 кружками. Они подтверждают известный факт, что интенсивность турбулентного смешения в горячей струе гораздо выше, чем в холодной. Поскольку модель турбулентности Саркара этот эффект должным образом не воспроизводит, она была скорректирована в сторону уменьшения коэффициента α_0 . Было получено, что для правильного моделирования интенсивности спада полного давления в дальнем поле рассматриваемой струи следует положить $\alpha_0 = 0.4$ при $\sigma_\kappa = 0.8$. Все представленные на рисунке 2.40 расчетные данные были проведены с такими значениями коэффициентов.

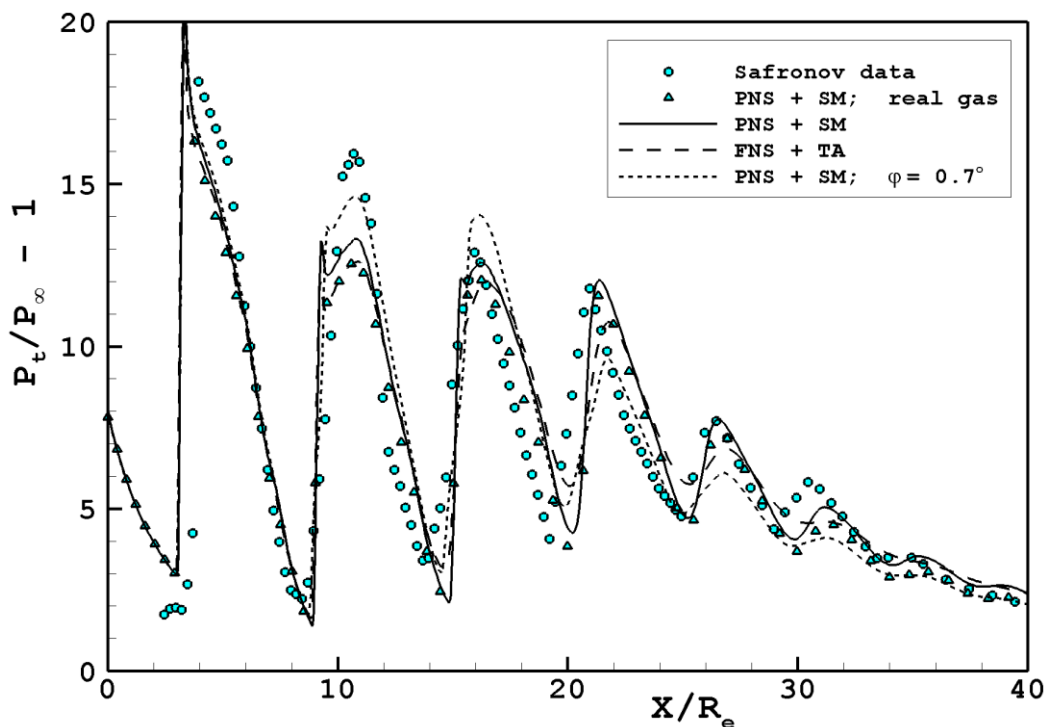


Рисунок 2.40. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных по распределению давления торможения вдоль оси струи (скорректированная модель турбулентности Саркара).

Прежде всего, рассмотрим результаты расчетов задачи маршевым методом (PNS + SM). Они проводились в двух приближениях: а) смешение двух совершенных газов с разными отношениями удельной теплоемкости (внутренний поток с $\gamma = 1.25$ и внешний поток с $\gamma = 1.4$), б) смешение многокомпонентных газов с реальной (нелинейной)

зависимостью энтальпии каждой компоненты от температуры и учетом 15 неравновесно протекающих химических реакций (приближение «real gas»).

Сопоставление результатов этих двух расчетов (сплошная линия и треугольники на рисунке 2.40) показывает, что влияние реальных свойств горячих продуктов сгорания на осевое распределение давления торможения в данном случае относительно невелико. Поэтому более затратный (требующий больших вычислительных ресурсов) расчет задачи методом установления (штриховая линия на рисунке) проводился в приближении смешения двух совершенных газов.

Сравнивая теперь результаты расчетов задачи по двум методикам (FNS+TA и PNS+SM) между собой и с экспериментальными данными можно отметить следующее. Хотя затухание колебаний в горячей неизобарической струе происходит более интенсивно, отличие между двумя расчетами успеваает отчетливо проявиться. В районе сечения $x = 25r_e$, где слой смешения уже достиг оси струи, амплитуда колебаний в расчете маршевым методом хорошо соответствует экспериментальным данным; расчет методом установления дает занижение амплитуды колебаний примерно в два раза.

На рисунке 2.40 также видно, что пики давления торможения в первых двух «бочках» (ячейках) струи воспроизводятся в расчетах не вполне адекватно. Это связано с большей (по сравнению с первой тестовой задачей) интенсивностью ударной волны перед ее первым отражением от оси струи. В этом случае экспериментально наблюдаемое «регулярное» отражение ударной волны хуже моделируется в рамках уравнений Рейнольдса, когда осредненное течение является строго двумерным и стационарным. При использовании более подробной сетки становится видно, что в расчетах реализуется «нерегулярное» отражение ударной волны с образованием небольшого диска Маха (диаметром $\approx 0.09 r_e$). Такая особенность численного моделирования, однако, не оказывает существенного влияния на течение в дальней части струи ($x > 20r_e$).

Итак, хотя второй тестовый случай по определяющим параметрам кардинально отличается от первого, сопоставление расчетных и экспериментальных данных приводит нас к аналогичному выводу: использование полных уравнений Навье-Стокса дает заметное завышение интенсивности затухания волновых процессов, тогда, как параболизированные уравнения обеспечивают хорошее согласие с экспериментом.

Прежде, чем перейти к следующему разделу сделаем два последних замечания относительно «надежности» сопоставляемых в данной задаче расчетных и экспериментальных данных.

1. Как показали дополнительные расчеты, умеренное варьирование турбулентного числа Прандтля ($Pr_T = 0.9$ вместо 0.7) не приводит к ощутимому изменению осевого распределения давления торможения.

2. Проводилась оценка возможного влияния отклонения измерительных датчиков от оси струи. Так на рисунке 2.40 показано рассчитанное по методике PNS+SM распределение давления торможения не строго вдоль оси x , а вдоль прямой, отклоненной от оси на небольшой угол $\varphi = 0.7^\circ$ (пунктирная линия). Видно, что амплитуда колебаний в дальнем поле струи при этом уменьшается (сравните пунктирную и сплошную линию), из чего можно заключить следующее.

Если предположить, что при получении используемых в данной работе экспериментальных данных было значимое отклонение измерительных датчиков от оси струи, то учет этого отклонения в рассчитанных по методике FNS+TA профилях параметров только увеличит разногласие с экспериментом (расчетная амплитуда колебаний станет еще меньше). Тем самым выявленное в данной работе рассогласование расчетных и экспериментальных данных не может быть объяснено отклонением измерительных датчиков от оси струи.

2.5.3 Гипотеза Буссинеска и альтернативная форма вязких членов

Представленные в предыдущей главе данные в частности показали, что полные и параболизированные уравнения Навье-Стокса по-разному моделируют затухание ударных волн в неизобарических турбулентных струях. Чтобы объяснить причину такого различия рассмотрим сначала простейшее сдвиговое течение – плоский турбулентный слой смешения, развивающийся в почти изобарических условиях вдоль выделенного направления, оси x . При моделировании такого течения в терминах осредненных по Рейнольдсу параметров, весьма эффективным оказалось использование следующего простого предположения относительно правой части (вязких членов) в уравнении для продольной составляющей импульса

$$\frac{\partial \rho u_x}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_x^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_x u_y}{\partial y} = \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \approx \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_T \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \quad (2.11)$$

Это предположение соответствует параболизированной форме уравнений Навье-Стокса и подразумевает, что

$$\tau_{xx} \approx 0, \quad \tau_{xy} \approx \mu_T \frac{\partial u_x}{\partial y} \quad (2.12)$$

Здесь следует заметить, что вязкие члены в уравнении для поперечной (y -) составляющей импульса могут быть либо записаны подобным образом (параболизированная форма), либо вообще обнулены – с практической точки зрения это не суть важно.

По сравнению с приближением (2.12) гипотеза Буссинеска содержит гораздо больше составляющих. Интересно, что все они могут быть получены следующим путем: к тензору турбулентных напряжений, содержащему только один ненулевой член (2.12) нужно добавлять новые члены так, чтобы в результате было обеспечено выполнение следующих свойств: симметричность тензора турбулентных напряжений ($\tau_{ij} = \tau_{ji}$) и инвариантность уравнений относительно преобразований Галилея (лорентц-инвариантность);

В рассматриваемом нами случае все эти добавочные составляющие тензора турбулентных напряжений дают пренебрежимо малый вклад в вязкие члены (по сравнению с главным членом в формуле (2.11)), поэтому полная и параболизированная формы уравнений Навье-Стокса здесь приводят к практически одинаковым результатам.

Теперь рассмотрим неизобарическое течение, в котором ударная волна взаимодействует с турбулентным слоем смешения, отражаясь от него. В процессе такого взаимодействия ударная волна существенно повышает локальные градиенты скорости, и вышеупомянутые добавочные члены становятся значимыми. В отличие от параболизированной формы тензора турбулентных напряжений (2.12), которая постулирует реакцию (диссипативного типа) только на сдвиговую деформацию, ее обобщенная форма (т.е. гипотеза Буссинеска) учитывает также и реакцию на деформацию сжатия (в полной аналогии с действием молекулярной вязкости). Поэтому диссипация ударной волны (ее ослабление) в последнем случае будет более интенсивной.

Этот простой пример объясняет, почему затухание ударных волн в неизобарических струях уменьшается после замены полных уравнений Навье-Стокса на параболизированные уравнения.

Поскольку в рассмотренных тестовых задачах результаты расчетов с использованием PNS уравнений определенно лучше согласуются с экспериментальными данными, то естественно предположить, что фактор сжимаемости оказывает слабое влияние на диссипацию ударной волны в турбулентном слое смешения. Это предположение согласуется с известным «релаксационным» эффектом турбулентности (его называют также эффектом «долгой памяти» или эффектом предыстории потока – *flow-history effect*). Действительно, локальные деформации сжатия являются кратковременными (ударная волна проходит по веществу быстро), тогда как сдвиговые деформации в слое смешения действуют долговременно.

Хотя в случае моделирования неизобарических струй PNS уравнения обеспечивают преимущество перед FNS уравнениями, они ограничены в применении – во всей расчетной области ориентация всех слоев смещения и/или пограничных слоев должна соответствовать главному направлению, оси x . Та форма параболизированных уравнений, которая была получена и используется в данной работе, допускает заметное отклонение слоя смещения (или пограничного слоя) от оси x ; тем не менее, ее определенно нельзя использовать в случаях когда $u_y^2 + u_z^2 \gg u_x^2$.

Здесь возникает вопрос: нельзя ли из сокращенной формы (2.12) получить иную xyz -инвариантную форму тензора турбулентных напряжений, в которой бы отсутствовала реакция на деформацию сжатия? Оказывается, что это возможно, но тогда придется отказаться от свойства симметричности тензора турбулентных напряжений. В этой связи уместно вспомнить и обсудить некоторые относящиеся к делу факты.

1. Еще в 1877 году Буссинеск в своей фундаментальной работе [178] получил такую симметричную, xyz -инвариантную форму для компонент тензора турбулентных напряжений, которая и по настоящее время используется в RANS-моделировании турбулентных течений несжимаемой жидкости. При этом он использовал представления, аналогичные тем, что используются в кинетической теории при выводе свойств ньютоновской жидкости. Позднее было установлено, что такая аналогия в общем случае неправомерна. Действительно, если рассмотреть элементарный объем воображаемой, осредненной жидкости, то в определенный момент времени он содержит не набор дискретных частиц жидкости, а своего рода следы тех частиц, которые за время осреднения побывали в этом объеме. Поэтому неудивительно, что для такой неньютоновской жидкости характерны дальние взаимодействия (или корреляции) и эффекты долгой памяти.

2. К настоящему времени уже установлен большой список приложений, в которых гипотеза Буссинеска терпит неудачу. В книге Вилкокса [179] (см. начало главы 6) такие приложения классифицированы по типам: 1) течения с резким изменением скоростей деформаций; 2) течения около искривленных поверхностей; 3) течения в каналах с вторичными движениями; 4) течения вращающейся жидкости; 5) трехмерные течения; 6) течения с отрывом пограничного слоя. (Кстати, рассматриваемую в данной работе проблему можно отнести к первому типу.) Получается, что гипотеза Буссинеска гарантированно хорошо работает лишь при моделировании простых сдвиговых течений, которые развиваются достаточно медленно. Отметим, что именно в таких случаях процедура параболизации уравнений Навье-Стокса является вполне оправданной.

3. Хотя тензор турбулентных напряжений в действительности является симметричным, два равных члена τ_{ij} и τ_{ji} далеко не всегда равноценны по их вкладу в моделирование турбулентного течения: они дифференцируются по разным координатам и входят в разные уравнения в сочетании с другими вязкими членами. Поэтому симметричность тензора турбулентных напряжений следует рассматривать как весьма детальное свойство; ему должны удовлетворять в первую очередь те гипотезы (приближения), которые учитывают основные природные свойства турбулентности и могут претендовать на универсальность. Что касается гипотезы Буссинеска, то она носит чисто прикладной характер и, как уже было сказано, далеко не универсальна. Вспомним также, что процедура параболизации уравнений Навье-Стокса, будучи вполне оправданной при моделировании простых сдвиговых течений, аннулирует симметричность тензора турбулентных напряжений.

Итак, если не обременяться свойством симметричности, но требовать отсутствия реакции на деформацию сжатия любого сорта (при плоском, цилиндрическом или сферическом сжатии), то можно предложить следующую альтернативную форму тензора турбулентных напряжений

$$\tau_{ij}^T = 2\mu_T \Omega_{ij}, \quad \Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.13)$$

где Ω_{ij} – тензор вращения (или тензор завихренности). Сразу заметим, что хотя такой тензор является антисимметричным, его применение сохраняет в точности ту же форму параболизированных уравнений Навье-Стокса, что была получена ранее для симметричного тензора турбулентных напряжений.

Проиллюстрируем теперь свойства альтернативной формы тензора турбулентных напряжений на примере расчета первой тестовой задачи (недорасширенная струя холодного воздуха) с использованием метода установления по времени и модели турбулентности Саркара без коррекции (т.е. с базовыми коэффициентами $\alpha_0 = 1$ и $\sigma_\kappa = 1$).

На рисунке 2.41 показаны осевые профили давления, рассчитанные с использованием различных форм уравнений Навье-Стокса (FNS или PNS уравнения) и выражений для тензора турбулентных напряжений. Как можно видеть, использование альтернативной формы тензора турбулентных напряжений (2.13) (на рисунке эти данные показаны кружками) обеспечивает наименьшее затухание ударных волн. В то же время, применение PNS уравнений дает результаты близкие к тем, что дает альтернативная форма тензора турбулентных напряжений (штриховая линия в сравнении с кружками). Это говорит о том, что процедура параболизации практически исключает влияние сжимаемости течения на вязкие члены.

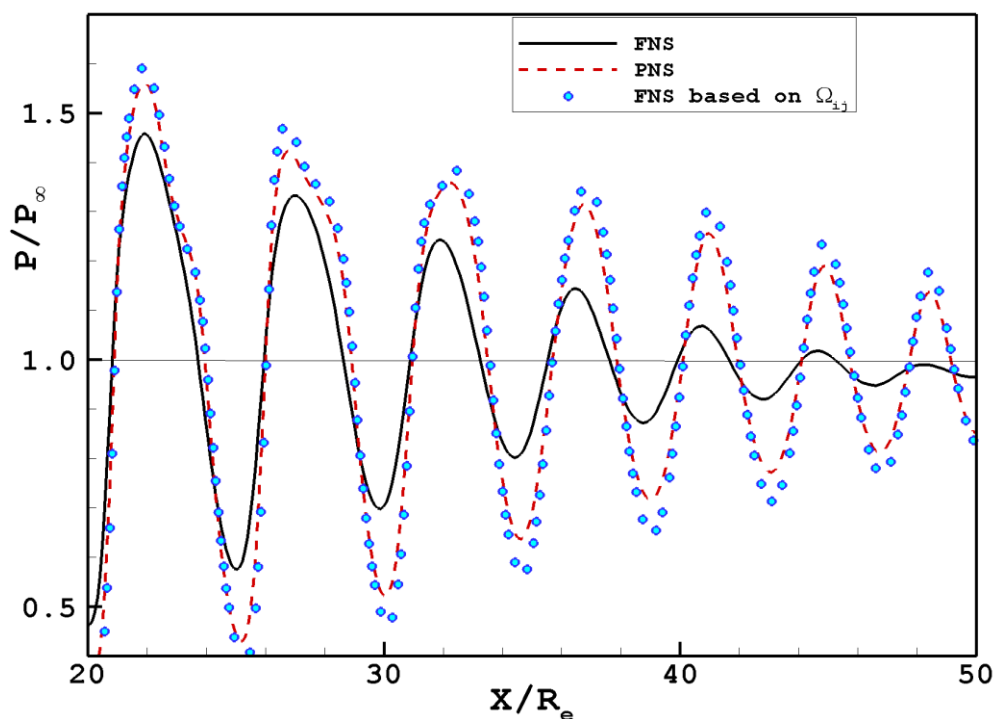


Рисунок 2.41. Первая тестовая задача. Распределения статического давления вдоль оси струи, полученные с использованием различных форм уравнений Навье-Стокса и выражений для тензора турбулентных напряжений.

Следующая иллюстрация, рисунок 2.42, представляет результаты расчетов, полученных на более детальной сетке ($I \times J = 1000 \times 190$) в области $0 < x/r_e < 12$. Здесь показана дивергенция вектора скорости газа (в единицах u_e/r_e), которая характеризует локальную интенсивность сжатия или разрежения потока (соответственно, отрицательные или положительные величины). Рисунок наглядно демонстрирует, каким образом волны разрежения (темные области) и ударные волны (светлые области) зарождаются и развиваются в сложную волновую структуру (распространяясь в сверхзвуковой, центральной части струи, волны многократно отражаются от ее границы и взаимодействуют друг с другом).

Как видно из рисунка 2.42, различие между двумя полями, полученными с использованием обычной (основанной на тензоре S_{ij}) и альтернативной (основанной на тензоре Ω_{ij}) форм тензора турбулентных напряжений (соответственно, верхняя и нижняя полуплоскости), начинает появляться вблизи точки $x/r_e = 5.6$, $y/r_e = 1$, где ударная волна первый раз взаимодействует со слоем смешения. В результате такого взаимодействия интенсивность ударной волны быстро падает, слой смешения поворачивает наружу, и образуется волна разрежения, движущаяся в противоположном направлении (то есть, отражаясь от слоя смешения, ударная волна трансформируется в волну разрежения). Как

отчетливо видно на фрагментах увеличенного масштаба, в случае использования гипотезы Буссинеска (базирующейся на тензоре S_{ij}) ударная волна достигает звуковой линии (черная штриховая линия) более ослабленной, чем в случае использования альтернативной формы тензора турбулентных напряжений. Вследствие этого, отраженная волна разрежения во втором случае имеет большую интенсивность. Возвращаясь к верхней части рисунка 2.42, можно заметить, что образованное таким образом различие между двумя решениями сохраняется и далее вниз по потоку, становясь более отчетливым после каждого последующего отражения.

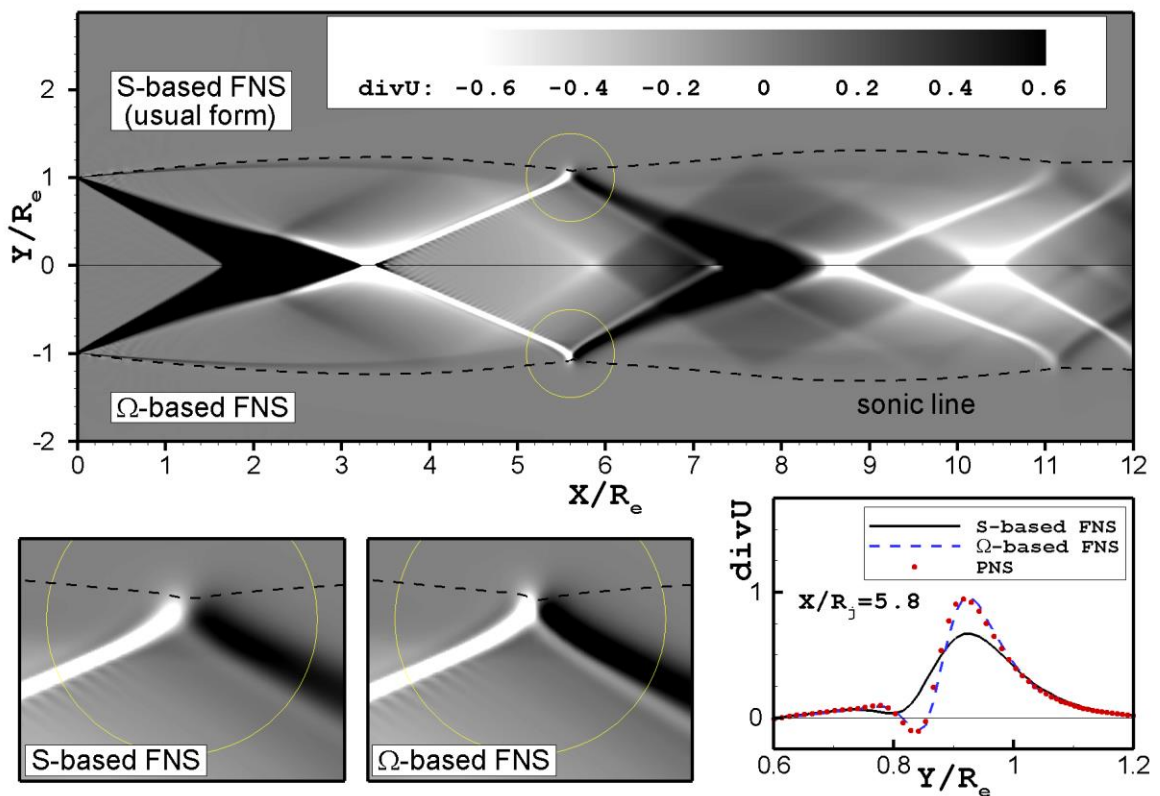


Рисунок 2.42. Поля и радиальные распределения дивергенции вектора скорости, полученные с использованием различных форм уравнений Навье-Стокса.

В правом нижнем углу рисунка 2.42 приведены также распределения дивергенции вектора скорости в сечении $x/r_e = 5.6$. Кроме уже упомянутых данных (FNS уравнения с двумя формами тензора турбулентных напряжений) здесь показаны и результаты расчета с использованием PNS уравнений (точки). Приведенные радиальные профили еще раз наглядно демонстрируют: (1) заметное различие между данными, полученными с использованием двух форм тензора турбулентных напряжений (сравните сплошную и штриховую линии), и (2) близость данных, полученных в рамках PNS уравнений, с

данными, полученными с использованием FNS уравнений и альтернативной формы тензора турбулентных напряжений (2.13).

2.5.4 Другие приложения и гибридная форма вязких членов.

Теперь мы обратимся к другим приложениям, в которых предложенная альтернативная форма тензора турбулентных напряжений, основанная на тензоре Ω_{ij} , может иметь определенные преимущества перед гипотезой Буссинеска – общепринятой формой тензора турбулентных напряжений, основанной на тензоре S_{ij} .

Существует ряд практически важных задач, в которых требуется рассчитать течение вокруг затупленных или плохообтекаемых тел при наличии значимой турбулизации набегающего потока. Течения такого типа встречаются в аэродинамических трубах, газотурбинных и реактивных двигателях, а также в задачах архитектурно-строительной аэродинамики. Уже давно различными исследователями было обнаружено, что при расчете таких течений двухпараметрические модели турбулентности, опирающиеся на гипотезу Буссинеска, дают неоправданно высокий уровень производства турбулентной энергии в окрестности точки торможения (см., например, работы [180 – 183]). Кроме этого было замечено, что если набегающий поток является сверхзвуковым, то турбулентная энергия в нем может резко возрастать при переходе через головной скачок уплотнения.

На рисунке 2.43 показаны два примера расчета обтекания затупленного тела с использованием $k-\varepsilon$ модели турбулентности при уровне турбулизации набегающего потока $T_u \sim 0.5\%$. На рисунке слева набегающий поток является дозвуковым ($M_\infty = 0.2$) и, хотя фактор сжимаемости здесь пренебрежимо мал, у точки торможения происходит рост интенсивности турбулентности почти на два порядка. На правом рисунке набегающий поток сверхзвуковой ($M_\infty = 1.35$); здесь интенсивность турбулентности возрастает не только в окрестности точки торможения, но и на фронте головной ударной волны (до $T_u \sim 3\%$).

Было установлено, что все эти эффекты связаны с членом производства турбулентной энергии P_κ , если его вычислять в строгом соответствии с теорией, то есть, используя следующее соотношение

$$P_\kappa \equiv \sum_{i,j} \tau_{ij}^r \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \approx \mu_r S^2 \quad (2.14)$$

где S – модуль тензора скоростей деформаций. Обнаруженная проблема происходит из-за ненулевых диагональных элементов тензора скоростей деформаций S_{ij} ; турбулентная энергия может чрезмерно нарабатываться в тех областях, где нормальные напряжения доминируют над сдвиговыми напряжениями (даже если течение является несжимаемым).

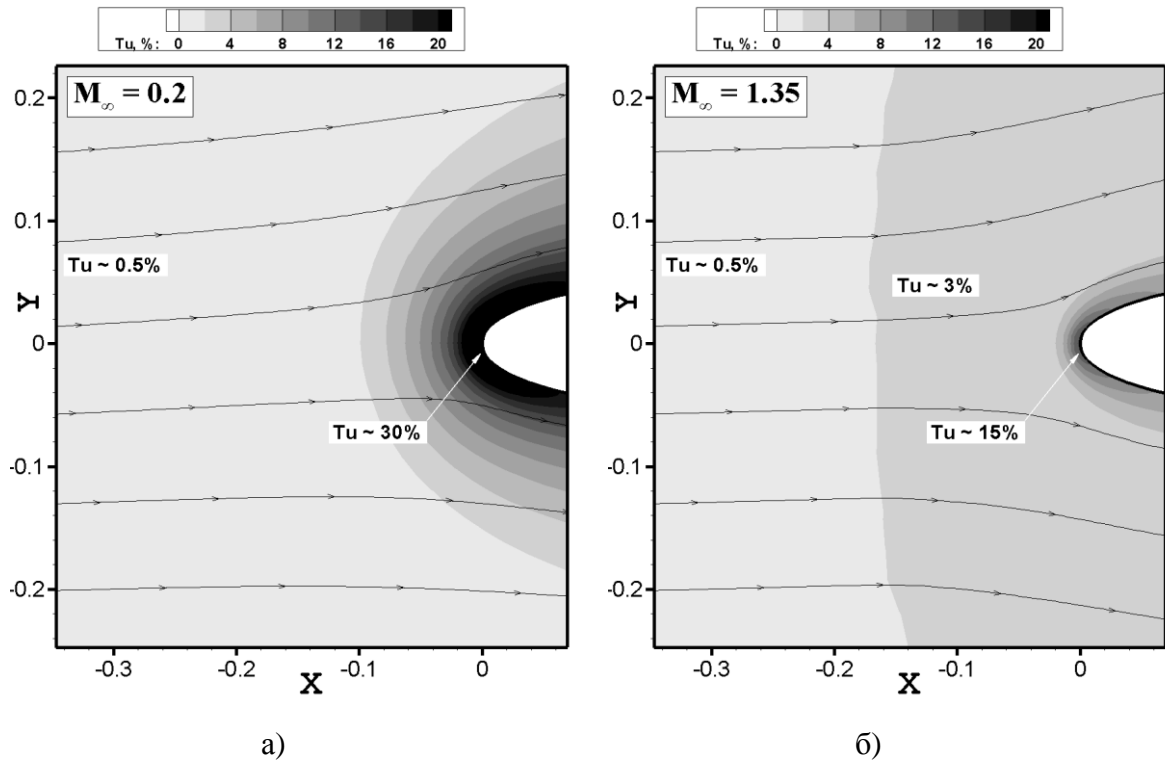


Рисунок 2.43. Поля интенсивности турбулентности при расчете обтекания затупленного тела с использованием k - ε модели турбулентности: а) $M_\infty = 0.2$; б) $M_\infty = 1.35$.

В настоящее время для преодоления отмеченной проблемы используется несколько подходов. Это либо наложение ограничения сверху на член P_κ (как предложено Менгером в SST модели турбулентности [184, 185]), либо изменение формулы для его расчета. Так, для несжимаемых течений Като и Лаундер [180] предложили изменить выражение для члена производства турбулентной энергии с $P_\kappa = \mu_t S^2$ на $P_\kappa = \mu_t S \Omega$, где Ω – модуль тензора завихренности. Использование модифицированной формулы устраняет обсуждаемую проблему, поскольку тензор завихренности имеет нулевые диагональные элементы. Заметим, что такие подходы к решению проблемы являются чисто прагматическими, поскольку их применение нарушает строгую теоретическую связь между членом P_κ и тензором турбулентных напряжений.

В этой связи интересно вспомнить, что в модели Спаларта-Аллмараса [186], одной из наиболее популярных однопараметрических моделей турбулентности, член производства турбулентной вязкости определяется через Ω , а не через S . В другой известной однопараметрической модели турбулентности, модели турбулентности Болдуина-Барча [187], член производства турбулентной вязкости изначально определялся

через S . Однако, в более поздней версии этой модели, описанной в работе [188], член производства определяется уже через $P_\nu \sim \Omega + 2 \min(0, S - \Omega)$ (использовать такую модификацию авторам работы предложил Спаларт).

Преследуя конкретные практические цели, все упомянутые модификации не касаются самого тензора турбулентных напряжений, и вид вязких членов в уравнениях Навье-Стокса остается без изменений – эти члены определяются все той же гипотезой Буссинеска. Это означает, что модификации такого рода в принципе не способны решить рассматриваемую в данной работе проблему моделирования неизобарических струй. В тоже время приложение альтернативной формы тензора турбулентных напряжений (основанной на тензоре Ω_{ij}) к задачам обтекания позволяет в них естественным образом избавиться от проблемы роста турбулентности около точки торможения и за ударной волной. Действительно, для альтернативной формы вместо формулы (2.14) запишем

$$P_\kappa \equiv \tau_{ij}^\tau \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \approx \mu_\tau \Omega^2 \quad (2.15)$$

В этом случае член производства турбулентной энергии становится пропорционален не S^2 , а Ω^2 , и нежелательные артефакты, продемонстрированные на рисунке 2.43, исчезают сами собой, без дополнительных модификаций члена P_κ .

Итак, выясняется, что с практической точки зрения использование альтернативной формы тензора турбулентных напряжений вместо гипотезы Буссинеска в ряде случаев оказывается предпочтительнее. Однако у альтернативной формы имеется одно нежелательное свойство – она реагирует на чистое вращение без сдвиговых деформаций (в противоположность общепринятой форме). В некоторых задачах, например при расчете плоского вихря, это может приводить к неоправданному (не наблюдаемому экспериментально) росту турбулентности в центральной его части, где и происходит такое чистое вращение. В таких случаях предпочтительнее использовать общепринятую форму – гипотезу Буссинеска.

Чтобы объединить преимущества обеих форм (общепринятой и альтернативной) можно предложить к использованию следующую гибридную форму тензора турбулентных напряжений

$$\left(\tau_{ij}^\tau\right)^{hybrid} = \frac{S^2 \left(\tau_{ij}^\tau\right)^{\Omega\text{-based}} + \Omega^2 \left(\tau_{ij}^\tau\right)^{S\text{-based}}}{S^2 + \Omega^2} \quad (2.16)$$

В случае расчета простых сдвиговых течений, когда $S^2 \approx \Omega^2$, гибридная форма будет давать следующее выражение для тензора турбулентных напряжений: $\tau_{ij}^\tau \approx \mu_\tau (S_{ij} + \Omega_{ij}) = \mu_\tau (\partial u_i / \partial x_j)$, что соответствует применению градиентного подхода к

каждой составляющей вектора скорости, как скалярной величине. Если тензоры завихренности и скоростей деформации сильно различаются, то гибридная форма будет тяготеть к тому из них, который имеет наименьший модуль. Для несжимаемых течений член производства турбулентности будет иметь вид: $P_\kappa = 2\mu_t S^2 \Omega^2 / (S^2 + \Omega^2)$. Все это выглядит привлекательно с точки зрения решения всех обсуждаемых в данном разделе проблем.

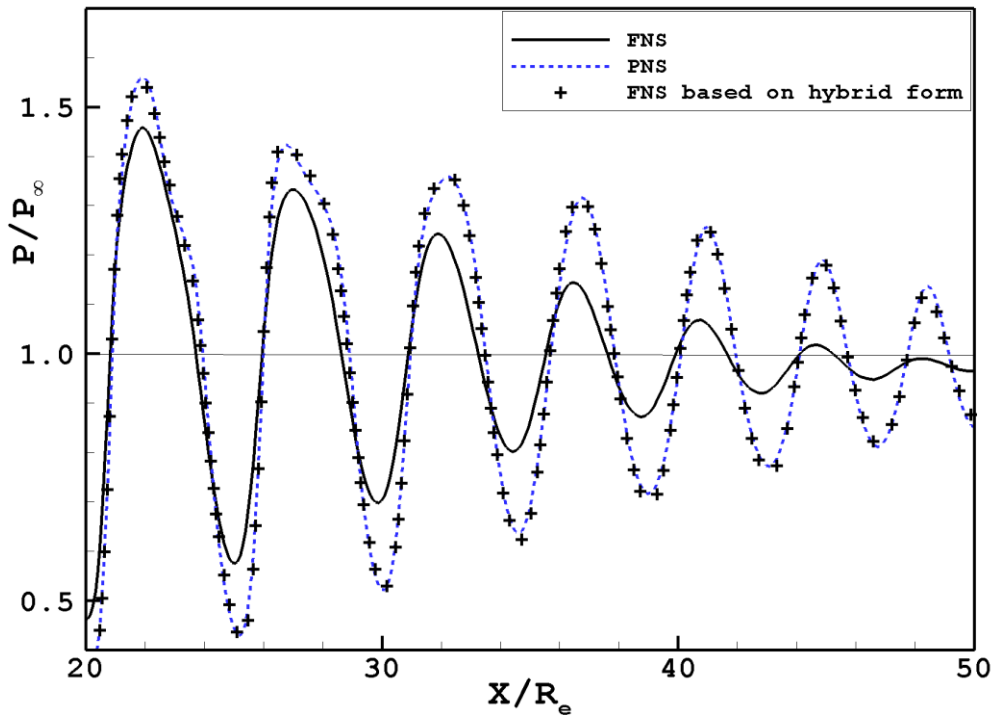


Рисунок 2.44. Первая тестовая задача. Распределения статического давления вдоль оси струи, полученные с использованием различных форм уравнений Навье-Стокса и выражений для тензора турбулентных напряжений.

Возвращаясь к струйной задаче, приведем еще раз сопоставление расчетов по осевому распределению статического давления для первой тестовой задачи. Результаты, полученные с использованием гибридной формы (2.16), показаны на рисунке 2.44 крестиками. Они практически совпадают с результатами, полученными в рамках параболизированных уравнений (штриховая линия), а значит, хорошо согласуются с приведенными ранее экспериментальными данными.

Заканчивая обсуждение данного раздела, подчеркнем, что хотя гибридная форма есть взвешенная сумма двух линейных тензоров (линейных по отношению к градиентам скорости), но сама она является нелинейным тензором, поскольку использует переменные

весовые коэффициенты. Она отличается от нелинейных турбулентных моделей, которые были ранее предложены для решения проблем иного рода (подробную информацию по таким нелинейным моделям можно найти в разделе 11.9.2 книги Поупа [189] и в разделе 6.2 книги Вилкокса [179]).

2.6 Выводы по главе

В качестве основных результатов второй главы можно выделить следующее.

1. Выработана комплексная математическая модель течения продуктов сгорания ракетных топлив, истекающих из типовых ЖРД и РДТТ. Модель объединяет большой набор физико-химических процессов, таких, как химические реакции, колебательную релаксацию, гомогенную конденсацию, турбулентное перемешивание и многофазность.

2. На базе выработанной математической модели и описанных в предыдущей главе численного метода и принципов построения программ разработан комплекс программ NARJ. Комплекс программ ориентирован на численное моделирование двумерных течений продуктов сгорания в соплах и струях, истекающих в атмосферу на всех этапах полета летательного аппарата.

3. Разработана приближенная методика маршевого расчета сверхзвуковых струй с дозвуковыми областями (внешний дозвуковой поток и/или дозвуковая зона за диском Маха), позволяющая оперативно и с высокой точностью проводить расчеты многофазных и многокомпонентных струйных течений на вычислительной технике среднего класса.

4. В рамках разработки методики маршевого расчета была проведена параболизация уравнений Навье-Стокса в двумерном и трехмерном случаях. При этом использовалось допущение, что поверхности вязких слоев могут иметь заметный наклон по отношению к маршевому направлению (оси x).

5. Из сопоставления многочисленных расчетов с экспериментальными данными было установлено, что в рамках полных уравнений Навье-Стокса не удастся адекватно описать процесс затухания волновой структуры неизобарической струи, и что причиной этому является вид тензора турбулентных напряжений, предписываемый гипотезой Буссинеска. Также было установлено, что применение параболизированных уравнений Навье-Стокса, в которых используется сокращенная форма тензора турбулентных напряжений, практически устраняет этот недостаток гипотезы Буссинеска и позволяет добиться детального согласия с экспериментальными данными.

6. Получено строгое теоретическое объяснение обнаруженного эффекта и предложена альтернативная форма тензора турбулентных напряжений, основанная на тензоре

завихренности. Ее использование позволило устранить обнаруженную проблему в моделировании неизобарических струй.

7. Было показано, что предложенная новая форма тензора турбулентных напряжений позволяет естественным образом решить другую проблему численного моделирования турбулентных течений в рамках двухпараметрических моделей – проблему чрезмерного производства турбулентной энергии при расчете обтекания затупленных тел. Для расширения диапазона применимости новой формы тензора турбулентных напряжений была предложена еще одна, гибридная форма, объединяющая преимущества общепринятой (основанной на тензоре скоростей деформаций) и альтернативной (основанной на тензоре завихренности) форм.

3 Численное моделирование атмосферы КОМЕТ

В данной главе дается подробное описание научно-исследовательских работ по моделированию атмосферы комет на базе разработанного автором численного метода. Этот цикл работ проводился преимущественно во Франции в Лаборатории аэрономии Национального центра научных исследований (Service d' Aéronomie du CNRS) по инициативе и под руководством французского астрофизика Жан-Франсуа Крифо (Jean-François Crifo).

3.1 Вводная информация

Прежде чем перейти к описанию работ по моделированию атмосферы комет, дадим немного вводной информации об объекте моделирования.

Структура кометы. Ядро кометы состоит из смеси ледяных и минеральных частиц и имеет характерный размер $1 \div 10$ км. При подлете кометы к Солнцу на расстояние $r_h \sim 3$ а.е. (1 а.е. ≈ 150 млн. км – расстояние от Земли до Солнца) ледяные частицы начинают испаряться, увлекая за собой частицы пыли. Истекающие с поверхности ядра газопылевые струи образуют атмосферу кометы, которая, вследствие малой гравитации, неограниченно растекается в космическом пространстве.

Атмосферу комет до ~ 1 млн. км называют комой, а ее центральную часть до ~ 1 тыс. км – внутренней комой. Хвост кометы образуется за счет воздействия солнечных лучей на кому: давление света искривляет траектории частиц, вытягивая их в направлении от солнца. Хвосты ярких комет могут простираться до десятков и сотен миллионов километров.

В данной работе речь будет идти главным образом о моделировании внутренней комы, где преобладают такие физико-химические процессы, как взаимодействие газа с частицами пыли и фотодиссоциация.

Исследования комет с близкого расстояния. 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. На рисунке 3.1 приведены фотографии пяти комет (Галлея, Борелли, Вильда,

Темпеля и Хартли), которые были исследованы с близких расстояний до 2014 года. В подписях к фотографиям даются полные названия комет, названия космических аппаратов и год их сближения с кометой, а также данные по размерам комет и минимальному расстоянию, с которого они наблюдались. К этому списку исследований комет следует добавить успешные «визиты» к комете Галлея, осуществленные в 1986 году отечественными космическими аппаратами «Вега-1» и «Вега-2» (расстояния сближения с кометой – 8889 и 8030 км, соответственно). Заметим, что это были краткосрочные наблюдения, выполненные во время пролета аппаратов мимо комет.

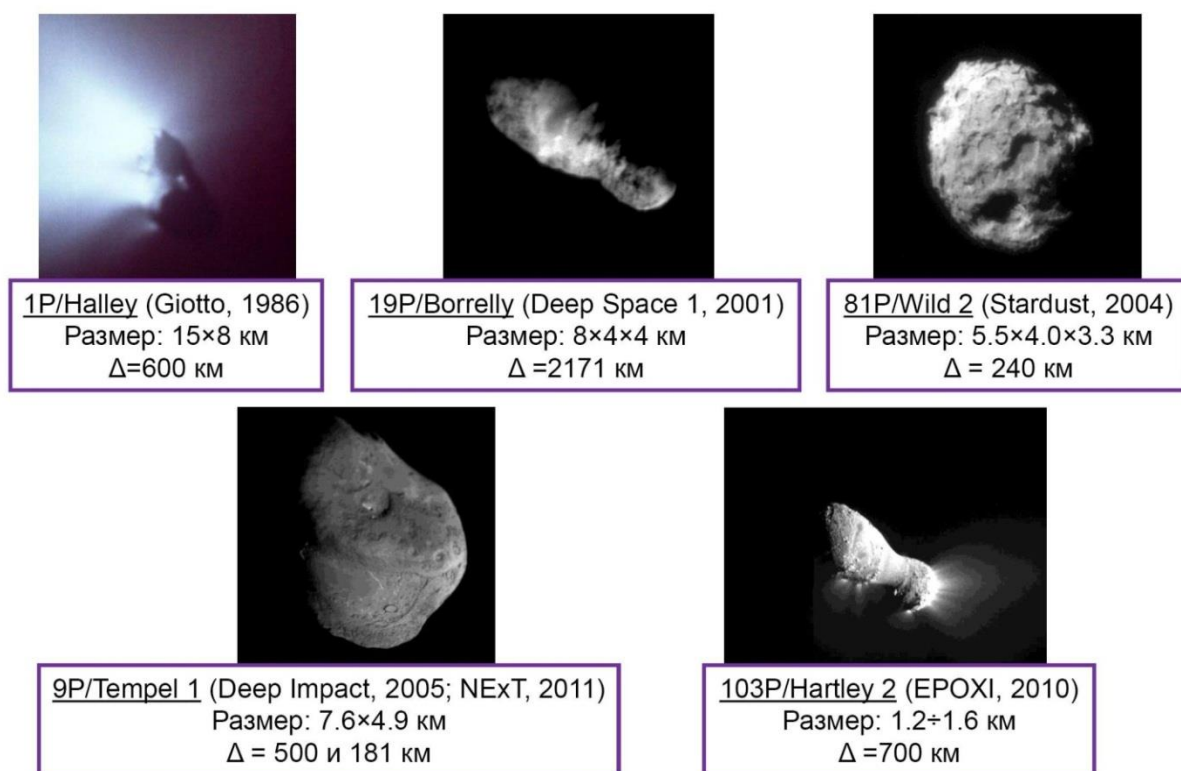


Рисунок 3.1. Фотографии комет, исследованных космическими аппаратами с близкого расстояния.

Миссия Розетта. Наиболее детальное исследование кометы было проведено в рамках космической миссии Розетта (Rosetta mission), успешно реализованной Европейским космическим агентством (European Space Agency, ESA) в период с 2004 по 2016 год. Это первая программа длительного изучения кометы в непосредственной окрестности ядра. На ранних этапах подготовки миссии Розетта в качестве объекта исследования была выбрана комета Виртанена (46P/Wirtanen). Однако из-за проблем с двигателем ракеты-носителя «Ариан-5» в конце 2002 года и переноса старта программы выбор был изменен в пользу кометы Чурюмова-Герасименко (67P/Churyumov-Gerasimenko), имеющей характерный размер 4.1×3.3×1.8 км и период собственного вращения около 12 час.

3.2 Начальный этап работ

Работа автора в области численного моделирования атмосферы комет была инициирована в 1993 году французским астрофизиком Жан-Франсуа Крифо, одним из ведущих специалистов по моделированию внутренней комы. В то время он принимал участие в начальной проработке миссии Розетта. В опубликованных им на тот момент статьях (см., например, серию работ [30 – 35]) были представлены систематические расчетные данные по газопылевым кометным струям. Эти данные были получены с использованием сложных физических моделей комы, базирующихся на анализе имеющихся экспериментальных данных. Однако, как и в большинстве работ того времени, относящихся к моделированию внутренней комы, расчеты проводились в рамках одномерных уравнений газовой динамики.

Из наблюдения комет известно, что истечение с их поверхности может иметь ярко выраженный пространственный характер. Для моделирования задачи в таком приближении требуется привлечение современных методов расчета многомерных течений неравновесных многофазных сред. Важным шагом в этом направлении явилась опубликованная в 1990 году работа Китамуры [36], в которой исследовалось трехмерное течение газопылевых потоков, порождаемых сублимацией «грязного» льда с двух близко расположенных участков поверхности сферического ядра кометы. В качестве объекта моделирования рассматривалась упрощенная модель кометы Галлея.

Итак, первый этап сотрудничества с Крифо заключался в повторении трехмерных расчетов задачи Китамуры на базе схемы Годунова-Колгана-Родионова.

3.2.1 Математическая модель газопылевой комы

Уравнения газовой динамики. Для описания течения газа в кометных струях используется система уравнений Эйлера, которая в консервативном виде записывается как

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{F}_z}{\partial z} = \mathbf{H}, \quad (3.1)$$

$$\text{где } \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_x \\ \rho u_y \\ \rho u_z \\ \rho h_0 - p \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_x = \begin{bmatrix} \rho u_x \\ \rho u_x^2 + p \\ \rho u_x u_y \\ \rho u_x u_z \\ \rho h_0 u_x \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_y = \begin{bmatrix} \rho u_y \\ \rho u_x u_y \\ \rho u_y^2 + p \\ \rho u_y u_z \\ \rho h_0 u_y \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_z = \begin{bmatrix} \rho u_z \\ \rho u_x u_z \\ \rho u_y u_z \\ \rho u_z^2 + p \\ \rho h_0 u_z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0 \\ f_x \\ f_y \\ f_z \\ f_h \end{bmatrix}.$$

Здесь компоненты матрицы-столбца \mathbf{H} представляют собой источниковые члены, учитывающие суммарный обмен импульсом и энергией газа с частицами пыли, а также изменение энергии газа за счет возможных фотохимических процессов. В случае

моделирования течения совершенного газа выражение для полной удельной энтальпии имеет вид: $h_0 = (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2) / 2 + \gamma p / (\gamma - 1) \rho$. Температуру газа можно определить из уравнения состояния: $T = p\bar{M} / \rho R$, где R – универсальная газовая постоянная, \bar{M} – молекулярная масса газа.

Уравнения динамики пыли. В случае моделирования газопылевых струй, истекающих с поверхности кометы, необходимо привлечение дополнительных уравнений, описывающих движение частиц пыли и их взаимодействие с газовой составляющей потока. При описании частиц пыли предполагается, что они имеют сферическую форму и, вследствие малой объемной концентрации, не взаимодействуют между собой. Кроме того, все частицы разбиваются на несколько монодисперсных фракций, каждая из которых имеет свой размер (радиус частиц r_s).

Если в каждой точке пространства для выбранной фракции частиц допустимо проведение процедуры осреднения, то для нее может быть введено понятие сплошного облака частиц, описываемого системой уравнений типа (3.1), но при отсутствии давления ($p = 0$). Такую систему уравнений можно записать в виде

$$\frac{\partial \mathbf{U}_s}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_{s,x}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_{s,y}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{F}_{s,z}}{\partial z} = \mathbf{H}_s, \quad (3.2)$$

$$\text{где } \mathbf{U}_s = \begin{bmatrix} \rho_s \\ \rho_s u_x \\ \rho_s u_y \\ \rho_s u_z \\ \rho_s e_s \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_{s,x} = \begin{bmatrix} \rho_s u_{s,x} \\ \rho_s u_{s,x}^2 \\ \rho_s u_{s,x} u_{s,y} \\ \rho_s u_{s,x} u_{s,z} \\ \rho_s e_s u_{s,x} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_{s,y} = \begin{bmatrix} \rho_s u_{s,y} \\ \rho_s u_{s,x} u_{s,y} \\ \rho_s u_{s,y}^2 \\ \rho_s u_{s,y} u_{s,z} \\ \rho_s e_s u_{s,y} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}_{s,z} = \begin{bmatrix} \rho_s u_{s,z} \\ \rho_s u_{s,x} u_{s,z} \\ \rho_s u_{s,y} u_{s,z} \\ \rho_s u_{s,z}^2 \\ \rho_s e_s u_{s,z} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}_s = \begin{bmatrix} 0 \\ f_{s,x} \\ f_{s,y} \\ f_{s,z} \\ f_{s,e} \end{bmatrix}.$$

Здесь s – номер фракции частиц, $\mathbf{u}_s = (u_{s,x}, u_{s,y}, u_{s,z})$ – вектор скорости частиц s -ой фракции и его компоненты, ρ_s – плотность облака частиц, $e_s = C_s T_s$ – удельная внутренняя энергия частиц, C_s – удельная теплоемкость материала частиц, T_s – температура частиц, f_s – источниковые члены, учитывающие воздействие газа на частицы, а также вклад в их тепловой баланс собственного излучения и солнечной радиации.

Взаимодействие газ-частицы. Составляющие источниковых членов в правой части системы уравнений (3.2) могут быть записаны в виде

$$\mathbf{f}_s \equiv (f_{s,x}, f_{s,y}, f_{s,z}) = \frac{3}{8} \frac{\rho_s \rho}{r_s \rho_s^0} C_d |\mathbf{u} - \mathbf{u}_s| (\mathbf{u} - \mathbf{u}_s), \quad (3.3)$$

$$f_{s,e} = 3 \frac{\rho_s \rho}{r_s \rho_s^0} C_p St |\mathbf{u} - \mathbf{u}_s| (T_r - T_s).$$

Здесь ρ_s^0 – плотность материала частиц, C_p – удельная теплоемкость газа (для совершенного газа $C_p = \gamma R / (\gamma - 1) \bar{M}$), $C_d \equiv C_d(\omega, T_s / T)$ – коэффициент сопротивления

частиц, $St \equiv St(\omega, \gamma)$ – число Стэнтона, $T_r \equiv T_r(T, \omega, \gamma)$ – температура восстановления газа, $\omega = |\mathbf{u} - \mathbf{u}_s| / \sqrt{2p/\rho}$. Классические выражения для функций $C_d(\omega, T_s/T)$, $St(\omega, \gamma)$ и $T_r(T, \omega, \gamma)$ можно найти в [190].

Исходя из законов сохранения импульса и энергии, можно записать источники члены в системе уравнений (3.1), ответственные за воздействие частиц пыли на газ:

$$\mathbf{f} \equiv (f_x, f_y, f_z) = -\sum_s \mathbf{f}_s, \quad f_h = -\sum_s [f_{s,e} + (\mathbf{u}_s \mathbf{f}_s)]. \quad (3.4)$$

Здесь мы исправили ошибку, допущенную в работе Китамуры [36] – там вместо члена $(\mathbf{u}_s \mathbf{f}_s)$ было записано $(\mathbf{u} \mathbf{f}_s)$. Хотя в рассматриваемых задачах $\mathbf{u}_s \neq \mathbf{u}$, расчеты показали крайне слабое влияние такой замены. Этот факт объясняется тем, что энергетическое воздействие частиц пыли на газ невелико и определяется главным образом членом $f_{s,e}$.

3.2.2 Задача Китамуры

В задаче Китамуры [36] рассматривается стационарное истечение с поверхности сферического ядра кометы газопылевых струй, образованных сублимацией запыленного льда. Радиус кометы составляет $R_n = 6$ км. Истечение происходит не со всей поверхности ядра, а только с двух ее участков (два активных пятна), которые в сферической системе координат $r\theta\varphi$ задаются следующим образом (см. рисунок 3.2а): $r = R_n$, $85^\circ < \varphi < 95^\circ$, $60^\circ < \theta < 70^\circ$ (первый участок) и $110^\circ < \theta < 120^\circ$ (второй участок).

Полагается, что газ, истекающий с поверхности активных пятен, имеет температуру $T = 200$ К и плотность $\rho = 1.8 \times 10^{-6}$ кг/м³ (соответствует числовой плотности молекул воды $n \approx 6 \times 10^{13}$ см⁻³). Считается, что испаряющийся газ увлекает частицы пыли одного радиуса $r_s = 0.1$ мкм с температурой $T_s = 348$ К и пренебрежимо малой скоростью у поверхности ядра (относительно скорости газа). Рассматриваются два значения отношений массовых расходов частиц пыли к газу: $\chi = 0$ и $\chi = 0.2$. Для водяного пара и частиц пыли используются следующие физические константы: $\gamma = 1.33$, $\bar{M} = 18$, $\rho_s^0 = 1000$ кг/м³, $C_s = 600$ Дж/кг·К.

Скорость истекающего газа считается направленной вдоль нормали к поверхности кометы. Для чисто газовой струи ($\chi = 0$) ее величина полагается равной локальной скорости звука $a_0 \approx 350$ м/с (число Маха $M_0 = 1$), а для газопылевых струй ($\chi = 0.2$) она определяется по специальным соотношениям, предложенным в работе Китамуры [191] (в этом случае локальное число Маха $M_0 < 1$).

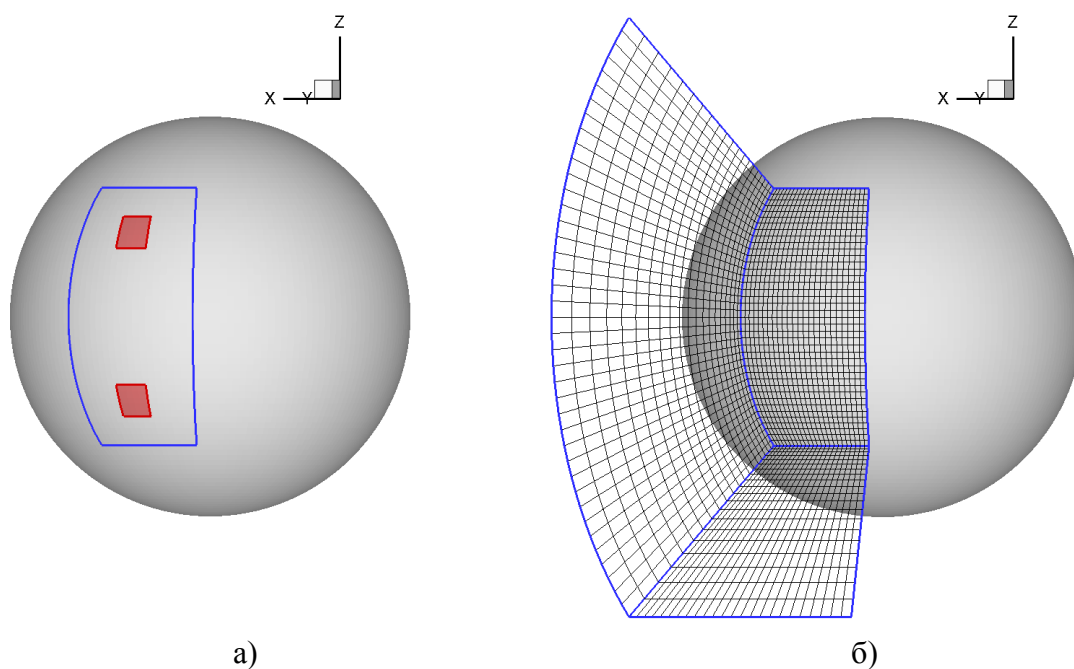


Рисунок 3.2. Задача Китамуры: а) активные пятна (красные участки) и границы расчетной области (синие линии) на поверхности кометы; б) расчетная сетка в сечениях $r = R_n$ ($j = 1$), $\varphi = 70^\circ$ ($k = 1$) и $\theta = 130^\circ$ ($i = I$).

Поставленная таким образом задача имеет две плоскости симметрии: $\theta = 90^\circ$ (плоскость взаимодействия струй, истекающих из двух активных пятен) и $\varphi = 90^\circ$ (плоскость, проходящая через центры активных пятен). Решение задачи ищется в области $R_n = 6 \text{ км} < r < 100 \text{ км}$, $50^\circ < \theta < 130^\circ$, $70^\circ < \varphi < 110$. На всех границах, кроме $r = R_n$, ставится условие свободного вытекания газа и частиц. На поверхности ядра за пределами активных пятен ставится условие непротекания, т.е. здесь газопылевой поток не испаряется и не адсорбируется. Расчетная сетка образуется путем разбиения расчетной области сечениями $r = r_j = \text{const}$ ($j = 1, \dots, J$), $\theta = \theta_i = \text{const}$ ($i = 1, \dots, I$) и $\varphi = \varphi_k = \text{const}$ ($k = 1, \dots, K$), как показано на рисунке 3.2б. Шаги разбиения по направлениям θ и φ полагаются постоянными, а по радиальному направлению – возрастающими в геометрической прогрессии с постоянным коэффициентом $q = \Delta r_{j+1} / \Delta r_j$. В представленных далее расчетах принималось: $\Delta\theta = 2^\circ$, $\Delta\varphi = 1^\circ 40'$, $q = 1.1$, $\Delta r_1 = 0.14 \text{ км}$.

3.2.3 Адаптация численного метода

В отличие от работы Китамуры в данной работе исследуемая область $6 \text{ км} < r < 100 \text{ км}$ разбивается на две подобласти: $6 \text{ км} < r < 14 \text{ км}$ и $14 \text{ км} < r < 100 \text{ км}$. В первой из них (внутренняя подобласть) присутствуют дозвуковые зоны: вблизи плоскости взаимодействия струй и (для газопылевых струй с $\chi = 0.2$) в окрестности активных пятен. Поэтому решение задачи в ней, как и в работе Китамуры, ищется методом установления

по времени, однако здесь используется схема ГКР-МС (схема Годунова-Колгана-Родионова с ограничителем МС, как описано в первой главе).

Во второй подобласти (внешняя подобласть) течение полностью сверхзвуковое в радиальном направлении. Здесь стационарное решение находится маршевым методом – от внутренней границы $r = 14$ км до внешней границы $r = 100$ км, последовательно переходя от одного сечения $r = \text{const}$ к другому. При этом используется стационарный аналог схемы ГКР-МС, обобщенный на случай, когда маршевым направлением является радиальное направление r (в предыдущих главах в качестве маршевого направления выступала ось x).

Такой подход к решению задачи (использование маршевого метода расчета) позволяет существенно сократить вычислительные затраты, поскольку для расчета параметров течения во внешней подобласти требуется на два порядка меньше процессорного времени, чем для расчета во внутренней подобласти. С методической точки зрения такой подход представляется наиболее эффективным в случае моделирования протяженной комы, когда расчетная область простирается на многие сотни или тысячи километров от поверхности кометы.

Решение уравнений динамики пыли. Для интегрирования системы уравнений (3.2) используется та же расчетная сетка, что и для системы уравнений (3.1). Кроме того, методы интегрирования уравнений динамики пыли идеологически повторяют методы решения уравнений газовой динамики. Отличия методов небольшие и обусловлены следующими причинами.

Во-первых, облако пыли не обладает собственным давлением, и частицы не взаимодействуют между собой. Поэтому аналог задачи Римана для пыли имеет простое решение, заключающееся в суперпозиции (наложении) двух равномерных потоков, относящихся к разным сторонам начального разрыва. Каждый из двух потоков может либо пересекать, либо не пересекать боковую грань ячейки. Следовательно, в зависимости от направления скоростей двух потоков пыли по отношению к нормали к поверхности боковой грани ячейки, имеются четыре различных варианта решения.

Во-вторых, частицы могут интенсивно взаимодействовать с газом, и в этом случае важным является способ аппроксимации правых частей уравнений (3.1) и (3.2), описывающих взаимодействие газ–частицы. Использование явной аппроксимации здесь может приводить к необходимости проведения вычислений с очень мелкими шагами интегрирования для обеспечения устойчивого счета быстрорелаксирующего процесса. В данной работе была принята следующая аппроксимация источниковых членов и последовательность расчета систем уравнений (3.1) и (3.2) при переходе от n -го слоя к $n+1$ -му слою.

Метод установления по времени. Сначала интегрируются уравнения динамики пыли (3.2) с аппроксимацией источниковых членов:

$$\mathbf{H}_s^{n+1/2} = \alpha \mathbf{H}_s^n + (1 - \alpha) \mathbf{H}_s^{n+1}, \quad (3.5)$$

где α – параметр схемы ($0 < \alpha < 1/2$; в расчетах обычно принимается $\alpha = 0.4$). Для решения полученной системы уравнений используется линейное разложение типа

$$\mathbf{H}_s^{n+1} = \beta_1 + \beta_2 \mathbf{U}_s^{n+1}, \quad (3.6)$$

где β_1 и β_2 – величины, вычисленные по параметрам газа и пыли на n -ом слое. После этого рассчитываются параметры обмена (3.4) и интегрируются уравнения газовой динамики (3.1).

Маршевый метод. В этом методе важна аппроксимация по маршевому направлению. Поэтому каждый проход от n -го слоя к $n+1$ -му слою осуществляется в два цикла.

На первом цикле сначала интегрируются уравнения газовой динамики с параметрами обмена, полученными на предыдущем расчетном шаге. Затем рассчитываются параметры пыли с использованием аппроксимаций (3.5) и (3.6). В отличие от метода установления здесь при расчете величин β_1 и β_2 используются уже полученные параметры газа на $n+1$ -ом слое. Далее рассчитываются параметры обмена и на этом первый цикл расчета заканчивается.

На втором цикле весь переход от n -го слоя к $n+1$ -му слою повторяется. Однако теперь при интегрировании уравнений газовой динамики используются новые значения параметров обмена, а при интегрировании уравнений динамики пыли величины β_1 и β_2 рассчитываются с использованием параметров пыли на $n+1$ -ом слое из первого цикла.

3.2.4 Результаты расчетов

Случай с $\chi = 0$ (истечение газовых струй). На рисунках 3.3 и 3.4 представлены результаты расчета газовых струй в плоскости симметрии $\varphi = 90^\circ$. Прежде всего, отметим, что данные расчетов в первой и второй подобластях (расчеты методом установления и маршевым методом, соответственно) плавно стыкуются между собой. Кроме того, представленные на рисунке 3.4 данные очень хорошо согласуются с аналогичными данными из работы Китамуры [36]. Некоторое уменьшение уровня плотности в данной работе объясняется следующим образом.

В работе Китамуры параметры газа и пыли определялись в узловых точках расчетной сетки (в данной работе они определяются в центрах ячеек). Поскольку на поверхности ядра границы активных пятен совпадают с линиями сетки, возникает вопрос о задании в этих точках параметров потока. Как показывает анализ данных, представленных Китамурой, в этих точках задавались те же параметры, что и внутри активных пятен. В

этом случае фактически происходит смещение эффективной границы активных пятен на $\frac{1}{2}$ ячейки в каждую сторону, что (при данном сеточном разрешении) увеличивает расход газа через каждое пятно в 1.4 раза. Такое увеличение расхода приводит (приблизительно) к пропорциональному увеличению плотности газа в дальней части течения. Эта величина как раз и соответствует отмеченному различию между двумя расчетами.

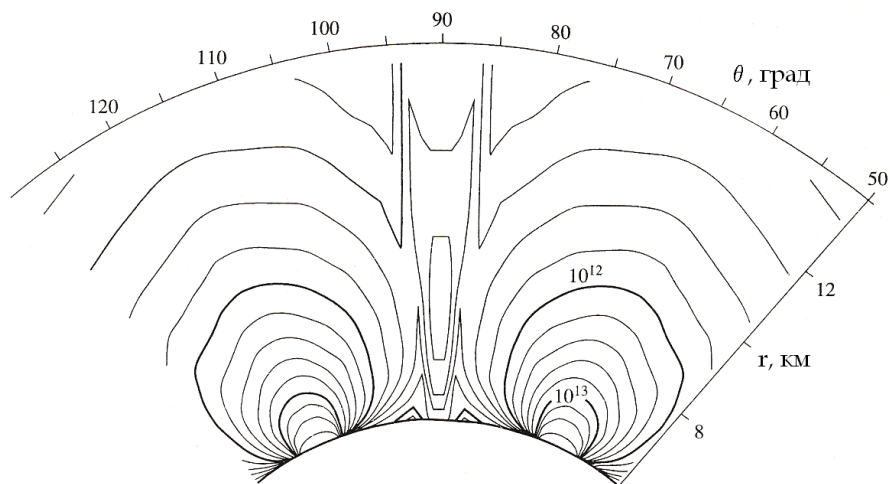


Рисунок 3.3. Изолинии числовой плотности газа (см^{-3}) в плоскости $\varphi = 90^\circ$ для случая взаимодействия газовых струй (первая подобласть; метод установления по времени).

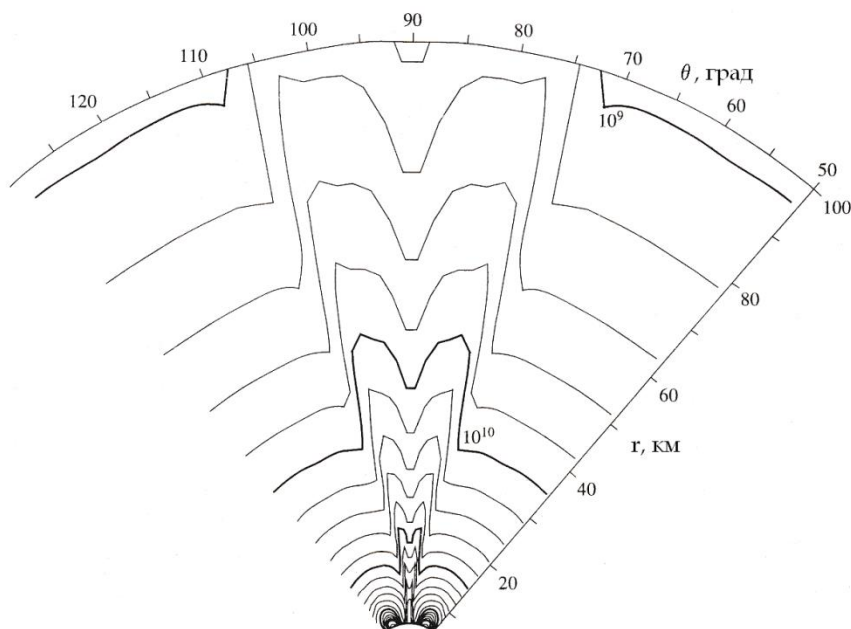


Рисунок 3.4. Изолинии числовой плотности газа (см^{-3}) в плоскости $\varphi = 90^\circ$ для случая взаимодействия газовых струй (полная расчетная область).

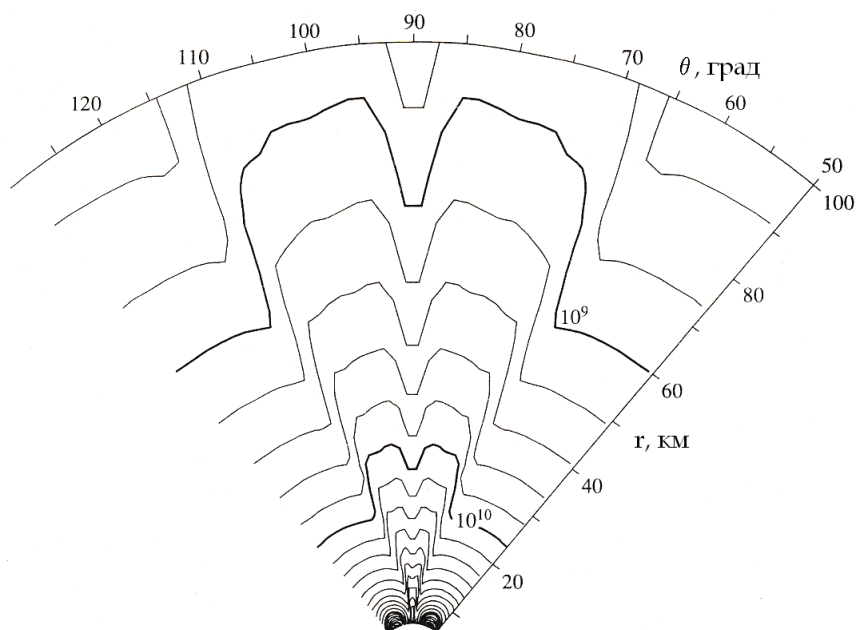


Рисунок 3.5. Изолинии числовой плотности газа (см^{-3}) в плоскости $\varphi = 90^\circ$ для случая взаимодействия газопылевых струй (полная расчетная область).

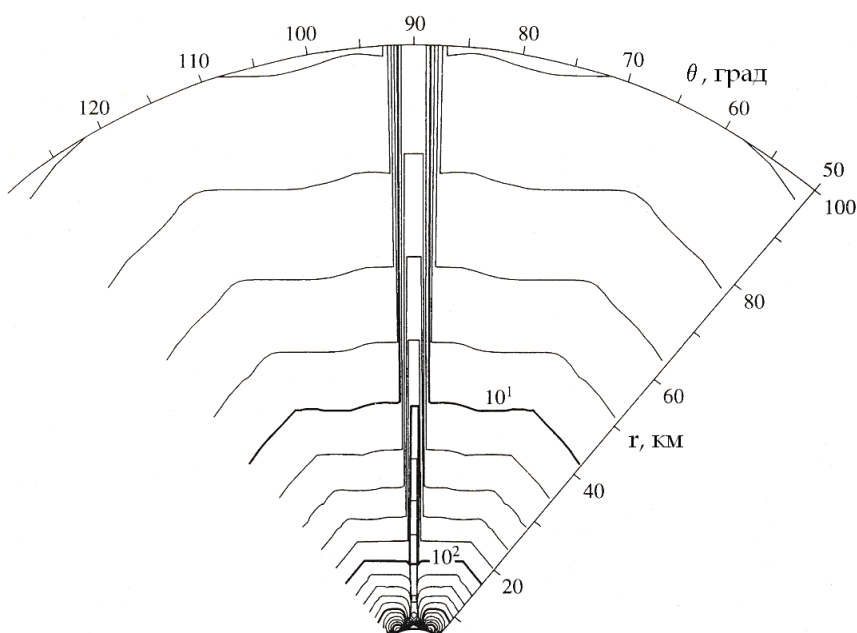


Рисунок 3.6. Изолинии числовой плотности пыли (см^{-3}) в плоскости $\varphi = 90^\circ$ для случая взаимодействия газопылевых струй (полная расчетная область).

Случай с $\chi = 0.2$ (истечение газопылевых струй). Рассмотрим теперь результаты расчета газопылевых струй. Поля числовых плотностей газа и пыли показаны на рисунках 3.5 и 3.6, соответственно. Первый из этих рисунков демонстрирует результаты, близкие к результатам работы Китамуры [36]. Небольшое уменьшение уровня плотности газа было объяснено ранее, а более интенсивное разрежение газа в плоскости взаимодействия струй вызвано большим влиянием облака пыли (главным образом подогревом газа частицами).

Предваряя анализ данных по облаку частиц заметим, что в рассматриваемой постановке задачи присутствует только одна фракция частиц. При этом не делается различий между частицами, вылетевшими из различных активных пятен. Поэтому в плоскости взаимодействия струй (плоскость симметрии $\theta = 90^\circ$) осреднение параметров частиц должно приводить к обнулению поперечной составляющей их скорости, т.е. частицы будут достигать плоскости взаимодействия, но пересечь или отразиться от нее не смогут. В результате произойдет скопление частиц в плоскости симметрии $\theta = 90^\circ$.

Данные рисунка 3.6 демонстрируют именно такое поведение облака частиц. Частицы скапливаются в расчетных ячейках, граничащих с плоскостью взаимодействия. Размывание пика плотности практически отсутствует, что говорит о хороших свойствах используемого метода (малая численная диссипация). Представленные Китамурой данные показывают заметно более умеренное скопление частиц вблизи плоскости взаимодействия. Это связано, по-видимому, с тем, что используемый в этой работе метод расчета облака частиц обладает заметным эффектом сглаживания разрывных решений. К сожалению, в работе не приводится подробного описания методик, что не позволяет сделать более определенные заключения по этому поводу.

3.2.5 Многофракционная модель для расчета пылевого облака

Итак, отмеченное скопление частиц в плоскости взаимодействия не отражает реальных процессов в газопылевых струях, а обусловлено некорректностью использования процедуры осреднения частиц, вылетающих из различных активных пятен.

Этого можно избежать, если ввести в рассмотрение две фракции частиц (два пылевых облака), каждая из которых будет содержать частицы, истекающие только из одного активного пятна. В этом случае мы будем иметь два взаимопроникающих облака частиц. Расчет газопылевой струи в приближении двухфракционной модели облака частиц можно провести с использованием тех же методик и на той же расчетной сетке. Только здесь необходимо решать систему уравнений (3.2) дважды – для каждой фракции частиц, и на каждом активном пятне задавать только потоки частиц соответствующей фракции.

Результаты расчета газопылевой комы в двухфракционном приближении показаны на рисунках 3.7 – 3.9. Видно, что распределение плотности газа в ударном слое выровнялось (сравните рисунки 3.5 и 3.7), что обусловлено устранением нефизичного скопления частиц в плоскости взаимодействия.

На рисунке 3.8 показаны изолинии числовой плотности пыли отдельно для каждой фракции частиц. Анализируя эти данные можно отметить четко выраженные сепаратриссы – поверхности, ограничивающие области распространения облака частиц

одной фракции. По мере удаления от ядра кометы плотность частиц вблизи каждой сепаратриссы ощутимо возрастает. Этот кумулятивный эффект вызван тем, что частицы, первоначально интенсивно развернувшиеся у края активного пятна и летящие вблизи сепаратриссы, проходят сквозь ударный слой газа и получают импульс, поворачивающий их в противоположном направлении. В результате траектории движения таких частиц сближаются (относительно траекторий частиц вдали от сепаратриссы), и образуются своего рода сгустки в облаке частиц.

На рисунке 3.9 показано распределение суммарной плотности частиц в случае расчета газопылевой комы в двухфракционном приближении. Отличие этих данных от данных, представленных на рисунке 3.6 (однофракционная модель Китамуры), чрезвычайно велико, что позволяет сделать вывод о неприменимости модели Китамуры для расчета облака частиц в задачах такого класса.

Результаты данного исследования подробно описаны в работах [81, 82, 84], причем в [82] кроме оригинальной задачи Китамуры рассматривались различные ее модификации, в которых варьировались следующие параметры задачи: количество активных пятен (от одного до трех), их размер и угловое отстояние друг от друга, размер частиц пыли и их весовое содержание.

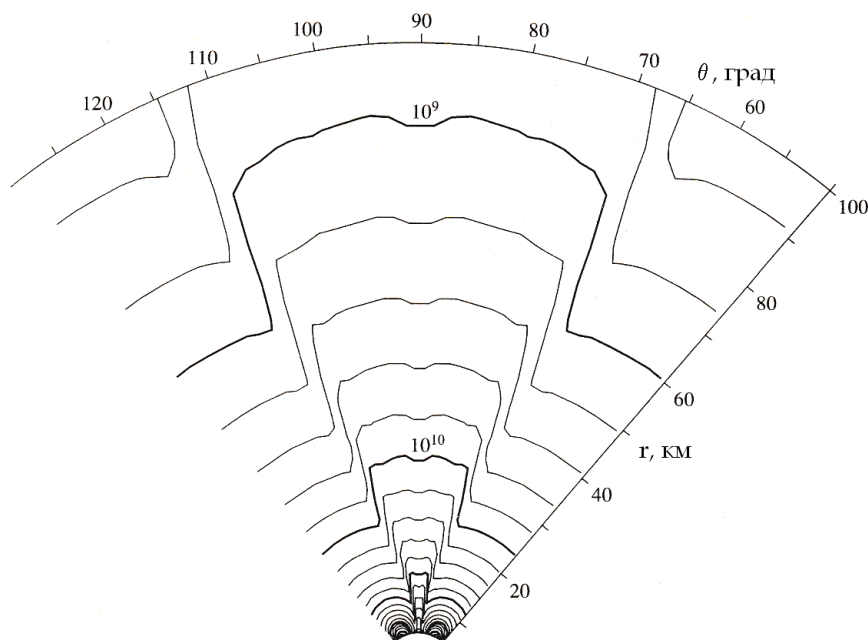


Рисунок 3.7. Изолинии числовой плотности газа (см^{-3}) в плоскости $\varphi = 90^\circ$, полученные с использованием двухфракционной модели облака частиц.

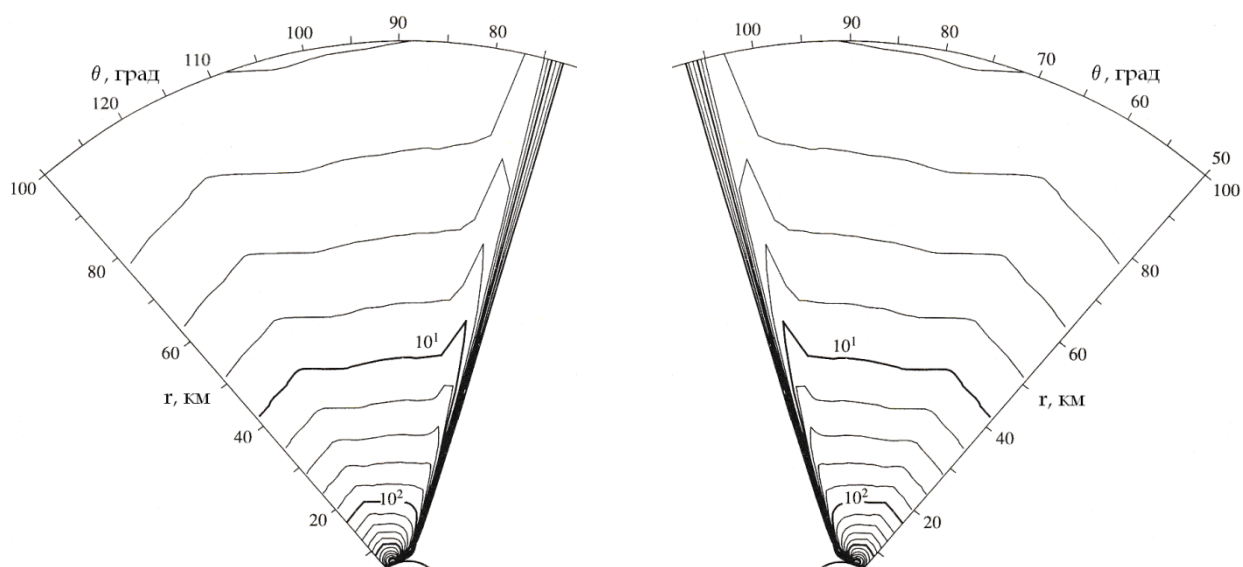


Рисунок 3.8. Изолинии числовой плотности пыли (см^{-3}) в плоскости $\varphi = 90^\circ$, показанные отдельно для каждой фракции в двухфракционной модели облака частиц.

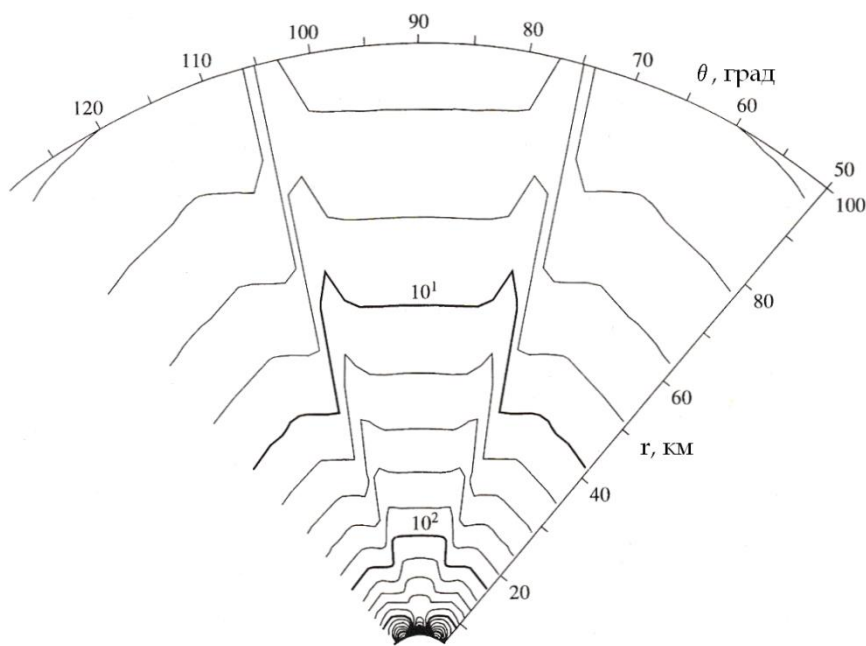


Рисунок 3.9. Изолинии суммарной числовой плотности пыли (см^{-3}) в плоскости $\varphi = 90^\circ$, полученные с использованием двухфракционной модели облака частиц.

3.3 Эволюция модели внутренней комы и программ для ее расчета

Итак, проведенное на начальном этапе детальное исследование задачи Китамуры, выявление и исправление изъянов ее оригинального решения [36] (наиболее значительным из которых является непригодность однофракционной модели пылевого

облака), положило начало длительному и плодотворному сотрудничеству автора с Жан-Франсуа Крифо. Главной целью этого сотрудничества и его кульминационным пунктом стало участие в активной фазе космической миссии Розетта и проведение работ по моделированию атмосферы кометы Чурюмова-Герасименко. На пути к этой цели был проделан большой цикл работ по совершенствованию модели внутренней комы и программ для ее расчета; каждый его этап сопровождался проведением систематических исследований, что нашло отражение в многочисленных публикациях [85 – 92, 94 – 105, 107], включая обзорные статьи [96, 100]. В данном разделе будут рассмотрены основные результаты этих исследований.

3.3.1 Модели поверхности ядра кометы

При моделировании комы (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 совместной работе [85], где она (модель) была использована в расчетах атмосферы кометы Виртанена (предполагаемый на тот момент объект исследования миссии Розетта) для случаев гомогенной и негомогенной поверхности сферического ядра. В последующих работах эта модель сублимации получила свое развитие и стала сокращенно обозначаться как «модель ВЕ» (ВЕ = Boltzmann equation approach) или просто «модель I».

Модель I (модель ВЕ). Предложенная в работе [85] эвристическая модель сублимации льда базируется на следующих принципиальных предположениях:

- поверхность кометы состоит из активных участков, где под действием солнечного теплового потока происходит сублимация грязного льда (смесь чистого льда и частиц пыли), и неактивных участков, где сублимирующий лед отсутствует (окаменевшие участки);
- для каждого расчетного элемента поверхности кометы доля активных участков, f , считается известной;
- солнечный тепловой поток, приходящийся на единицу незатененной поверхности кометы, вычисляется как $E_m = (1 - A)c_{\odot} \cos(\vartheta) / r_h^2$, где A – визуальное альbedo (обычно принималось равным 0.05), c_{\odot} – солнечный тепловой поток для Земли (т.е. при $r_h = 1$ а.е.), ϑ – угол между локальной нормалью к поверхности и направлением на Солнце;

- энергия солнечного теплового потока, поступающего на активный участок поверхности кометы, расходуется на тепловое излучение и сублимацию молекул H_2O (теплообменом с внутренними слоями ядра кометы и неактивными участками пренебрегается);
- молекулы воды, вылетающие с активного участка поверхности кометы (сублимация), имеют полумаксвелловское распределение по скоростям;
- между поверхностью кометы и внутренней границей расчетной области существует кнудсеновский слой (переходный слой, в котором распределение по скоростям релаксирует к равновесному максвелловскому), толщина которого пренебрежимо мала по сравнению с локальным радиусом кривизны поверхности (приближение тонкого локально-плоского кнудсеновского слоя)¹.

При сделанных предположениях уравнение баланса энергии дополняется аналитическими выражениями для плоского кнудсеновского слоя, полученными Черчиньяни [192] из решения уравнения Больцмана. Результирующая система соотношений принимает следующий вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_n \sigma_B T_I^4 + L_S Z_0 &= E_{in}, \\ Z_0 &= \frac{p_S(T_I)}{\sqrt{k_B T_0 / m_{H_2O}}} \sqrt{2} S \left\{ \frac{1}{2} - S \sqrt{\frac{T_0}{\pi T_I}} + \left[\left(S^2 + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{T_0}{T_I}} - \frac{S \sqrt{\pi}}{2} \right] \operatorname{erfc}(S) \exp(S^2) \right\}, \quad (3.7) \\ \sqrt{\frac{T_0}{T_I}} &= \sqrt{1 + \left(\frac{S \sqrt{\pi}}{2} \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^2} - \frac{S \sqrt{\pi}}{2} \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}, \end{aligned}$$

где T_I – температура льда на поверхности кометы, T_0 и $S = u_0 / \sqrt{2k_B T_0 / m_{H_2O}}$ – температура газа и безразмерная скорость на верхней границе кнудсеновского слоя (т.е. на внутренней границе расчетной области), Z_0 – поток массы газа с единичной площади активного участка поверхности, $p_S(T_I)$ – давление насыщенного пара (известная функция), ε_n – коэффициент излучения поверхности кометы (обычно принимался равным 0.9), σ_B – постоянная Стефана-Больцмана, L_S – скрытая теплота сублимации льда, k_B – постоянная Больцмана, m_{H_2O} – масса молекулы H_2O .

При заданной величине солнечного теплового потока, E_{in} , система уравнений (3.7) содержит четыре неизвестных величины: T_I , T_0 , Z_0 и S . Для ее разрешения необходимо задание одного параметра, определяющего влияние атмосферы кометы на истекающий с

¹ Для справки: размер кометы Виртанена составляет ~ 3 км; длина свободного пробега молекул у поверхности кометы при $r_h = 2$ а.е. составляет ~ 1 м; толщина кнудсеновского слоя составляет несколько длин свободного пробега.

поверхности кометы поток. В качестве такого параметра используется локальное число Маха, $M_0 = S\sqrt{2/\gamma}$, рассчитываемое по параметрам в приграничных ячейках (экстраполяция на границу) при наложении ограничения $M_0 \leq 1$. Тогда система уравнений (3.7) разрешается при помощи итерационного алгоритма, после чего локальные параметры газа (давление, плотность и нормальная компонента скорости) на внутренней границе расчетной области вычисляются по формулам

$$p_0 = f \frac{Z_0 \sqrt{k_B T_0 / m_{H_2O}}}{\sqrt{2S}}, \quad \rho_0 = \frac{m_{H_2O} p_0}{k_B T_0}, \quad u_0 = M_0 \sqrt{\frac{\gamma p_0}{\rho_0}}.$$

В случае расчета газопылевой комы взаимодействием частиц и молекул газа внутри кнудсеновского слоя пренебрегается. Считается, что относительный расход частиц задан, а их начальная скорость пренебрежимо мала по сравнению со скоростью газа.

Результаты моделирования ближней комы с использованием модели ВЕ были представлены в работах [85, 86, 88, 89, 91, 95].

Сферическая поверхность кометы. В работах [85, 89] рассматривалась сублимация льда с поверхности сферы радиусом $R_n = 1.4$ км (сферическое приближение кометы Галлея). Исследовались следующие модельные случаи: (1) гомогенная сфера, когда поверхность имеет одинаковые свойства и локальная интенсивность сублимации зависит только от угла ϑ (угол между нормалью к поверхности и направлением на Солнце); (2) негомогенная сфера, когда на поверхности имеется несколько активных пятен с $f = \text{const} > 0$, за пределами которых сублимирующий лед отсутствует ($f = 0$). Варьировались расстояние до Солнца (r_h), доля чистого льда на активной части поверхности (f) и размер частиц пыли (r_s). В случае негомогенной сферы также варьировался угловой размер активных пятен ($\Delta\varphi$), как показано на рисунке 3.10 (четыре активных пятна, имеющих прямоугольную форму в координатах θ, φ , закрашены; ось x направлена на Солнце). Расчеты пылевого облака проводились в многофракционном приближении, когда с каждого активного пятна истекает своя фракция частиц.

В качестве примера на рисунке 3.11 воспроизведены некоторые данные расчета комы для случая негомогенной сферы при $r_h = 1$ а.е. и $f = 0.14$. Показаны поля числовых плотностей газа (молекул H_2O) и частиц пыли радиуса $r_s = 9$ мкм (суммарно по всем фракциям) в экваториальной плоскости $z = 0$ (плоскость симметрии течения). Можно видеть, что в случае с $\Delta\varphi = 45^\circ$ (верхние рисунки) между активными пятнами наблюдаются повышенная плотность газа и пониженное содержание частиц пыли. В случае с $\Delta\varphi = 75^\circ$ (нижние рисунки) взаимодействие газовых потоков, истекающих с разных активных пятен, усиливается и в области между активными пятнами образуется локальный максимум суммарной плотности частиц.

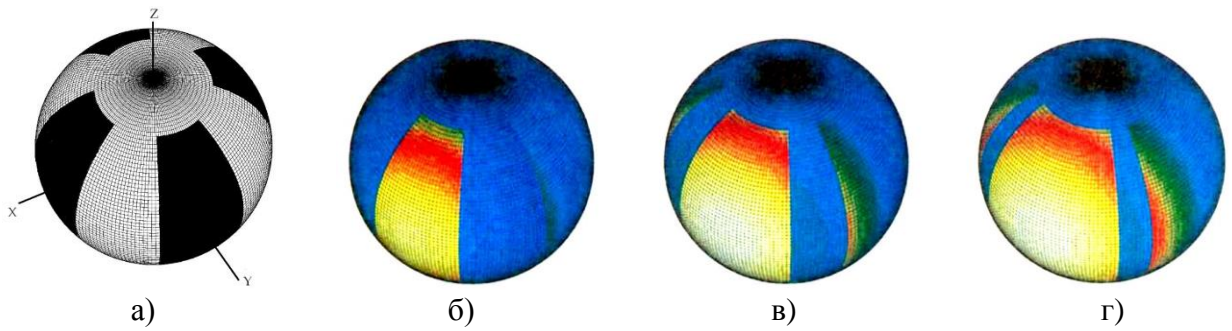


Рисунок 3.10. Негомогенная сфера: а) расчетная сетка и расположение активных участков для случая $\Delta\varphi = 45^\circ$; б), в) и г) освещенность активных участков для случаев $\Delta\varphi = 45^\circ, 60^\circ$ и 75° , соответственно.

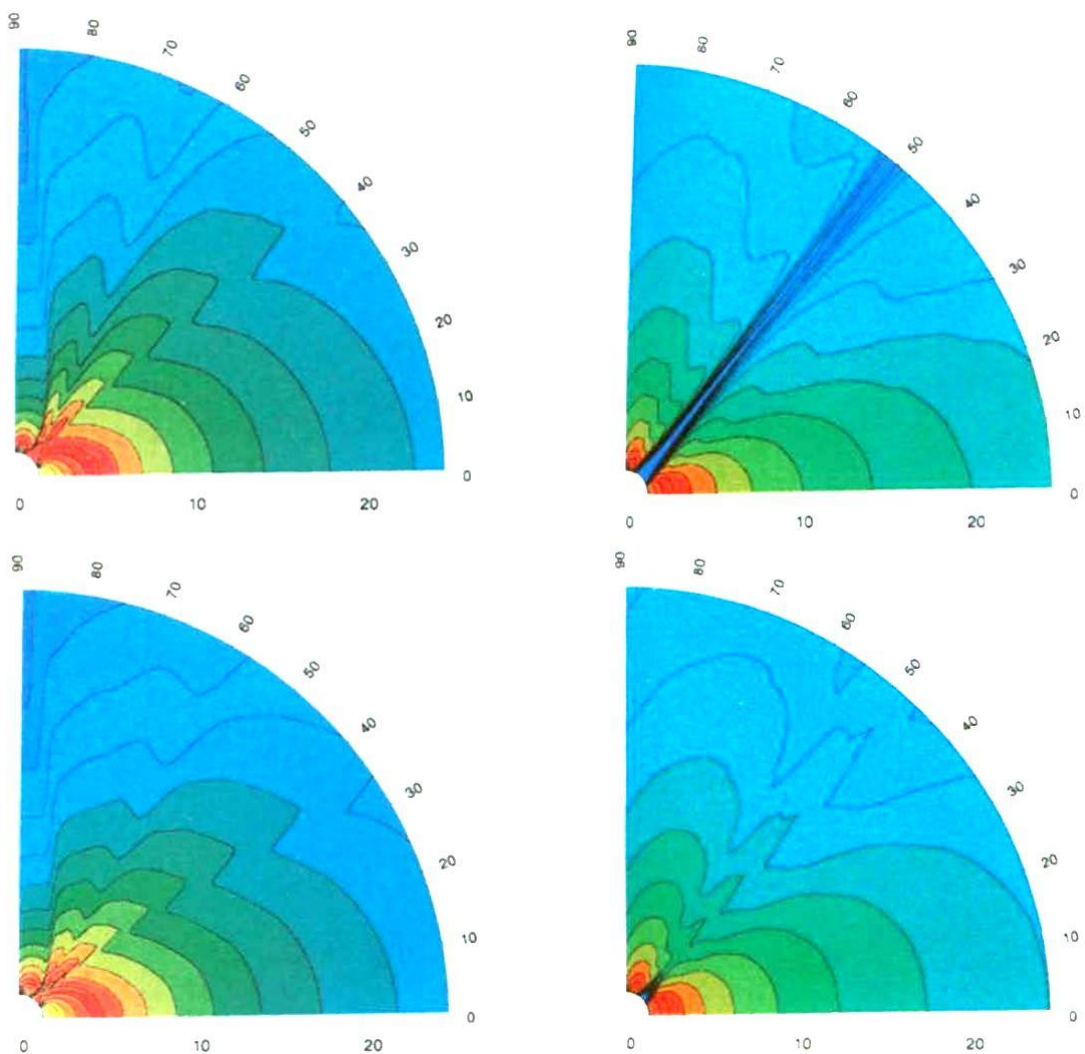


Рисунок 3.11. Поля числовых плотностей молекул H_2O (рисунки слева) и частиц пыли (рисунки справа) в экваториальной плоскости $z = 0$. Горизонтальная ось – ось x (направление на Солнце). Верхние рисунки относятся к случаю с $\Delta\varphi = 45^\circ$, нижние – к случаю с $\Delta\varphi = 75^\circ$. Данные работы [89].

Поверхность кометы типа «bean». В работе [86] исследовалась ближняя кома для случая сублимации запыленного льда с гомогенной асферической поверхности, задаваемой аналитически (поверхность типа «bean»): $r = R_n (1 - h \sin^2(\theta) \cos^2(\varphi/2))$, $h = 0.4$ и 0.8 . Рассматривался случай с $R_n = 1.546$ км, $r_h = 1$ а.е. и $f = 0.14$ (асферическое приближение кометы Галлея) при двух различных ориентациях Солнца (см. рисунок 3.12): $(\varphi, \theta) = (0, 45^\circ - \theta_{\text{sun}})$, где $\theta_{\text{sun}} = 0$ и 45° . Расчеты пылевого облака проводились в двухфракционном приближении, когда с участков поверхности $\theta < 90^\circ$ ($z > 0$) и $\theta > 90^\circ$ ($z < 0$) истекает своя фракция частиц; частицы пыли имели радиус $r_s = 9$ мкм. В работах [88, 89] также исследовалась сублимация с гомогенной поверхности типа «bean». В дополнение к расчетным случаям работы [86], здесь рассматривались варианты с $R_n = 0.75$ км, $r_h = 2$ а.е., $f = 0.9$, $r_s = 0.9$ и 13 мкм. Для ориентации Солнца рассматривались случаи с $\theta_{\text{sun}} = 0, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 75^\circ, 135^\circ$ и 180° (полное вращение кометы вокруг оси y).

Представленные в [86, 88, 89] исследования в частности показали, что даже в случае гомогенной поверхности кометы (т.е. при ее одинаковых свойствах), истекающие с разных участков газовые потоки могут взаимодействовать между собой, образуя ударные волны и дозвуковые области в приповерхностной части течения. Траектории частиц также могут пересекаться, приводя к появлению ярко выраженных неоднородностей. В качестве примера на рисунке 3.13 приведены данные одного расчетного варианта для сублимации грязного льда с поверхности кометы типа «bean». Таким образом, в данном цикле работ было впервые установлено, что отсутствие на поверхности кометы неоднородностей в виде чередования активных и неактивных участков не гарантирует от появления неоднородностей в атмосфере кометы.

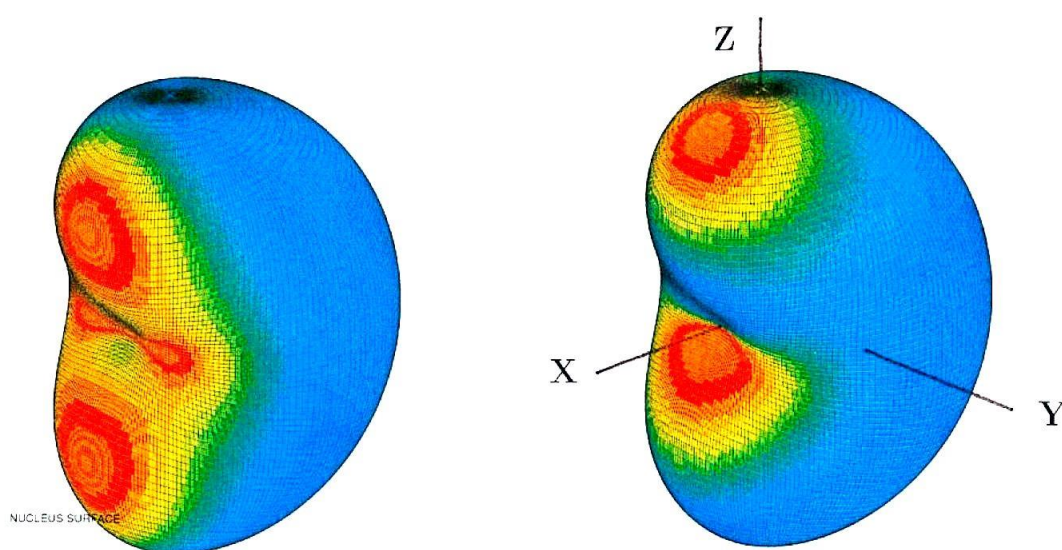


Рисунок 3.12. Освещенность поверхности типа «bean» при $h = 0.8$ и двух ориентациях Солнца: $\theta_{\text{sun}} = 0$ (слева) и 45° (справа).

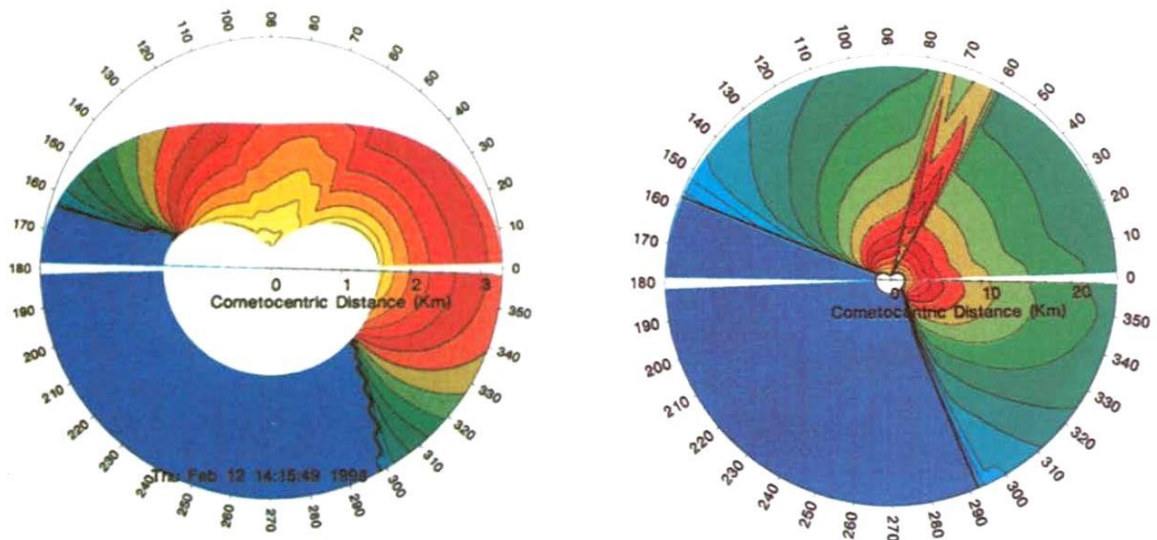


Рисунок 3.13. Поля числовых плотностей молекул H_2O (слева) и частиц пыли (справа) в плоскости $y = 0$ для расчетного варианта с $h = 0.8$, $\theta_{\text{sun}} = 45^\circ$, $R_n = 1.546$ км, $r_h = 1$ а.е., $r_s = 9$ мкм. Данные работы [89].

Моделирование атмосферы на «ночной» стороне кометы. В работе [91] исследовалась возможность конденсации паров воды на ночной стороне кометы. При этом рассматривались два вида гомогенной поверхности: сфера и эллипсоид. Для ночной стороны кометы был введен параметр подогрева, k , определяющий поток энергии от внутренних слоев ядра кометы (этот поток учитывается только на ночной стороне) по отношению к потоку энергии E_{in} в точке зенита ($\vartheta = 0$) на дневной стороне кометы. В расчетах безразмерный параметр k варьировался от нуля (подогрев отсутствует) до 0.05. В качестве примера на рисунке 3.14 приведены вектора скорости и поля чисел Маха для четырех вариантов расчета в случае сублимации молекул H_2O с поверхности гомогенной сферы при $R_n = 6$ км, $r_h = 1$ а.е. и $f = 1$. Проведенное исследование в частности показало, что при $k < 0.02$ газ, поступающий с дневной стороны на ночную сторону кометы, может частично конденсироваться на поверхности. При $k > 0.025$ конденсация на ночной поверхности отсутствует, однако в области взаимодействия потоков, истекающих с дневной и ночной сторон, могут возникать слабые ударные волны.

Моделирование атмосферы кометы Галлея. В работе [95] представлены данные расчетов ближней комы кометы Галлея, полученные с использованием «реальной» формы поверхности (восстановленной по снимкам с космических аппаратов Giotto, Вега-1 и Вега-2), а также ее разложений по сферическим гармоникам (рисунок 3.15,а). Рассматривались случаи гомогенной и негомогенной поверхности. В случае негомогенной поверхности

задавались несколько пятен с гауссовским распределением активности относительно постоянного фонового уровня функции f (рисунок 3.15,б).

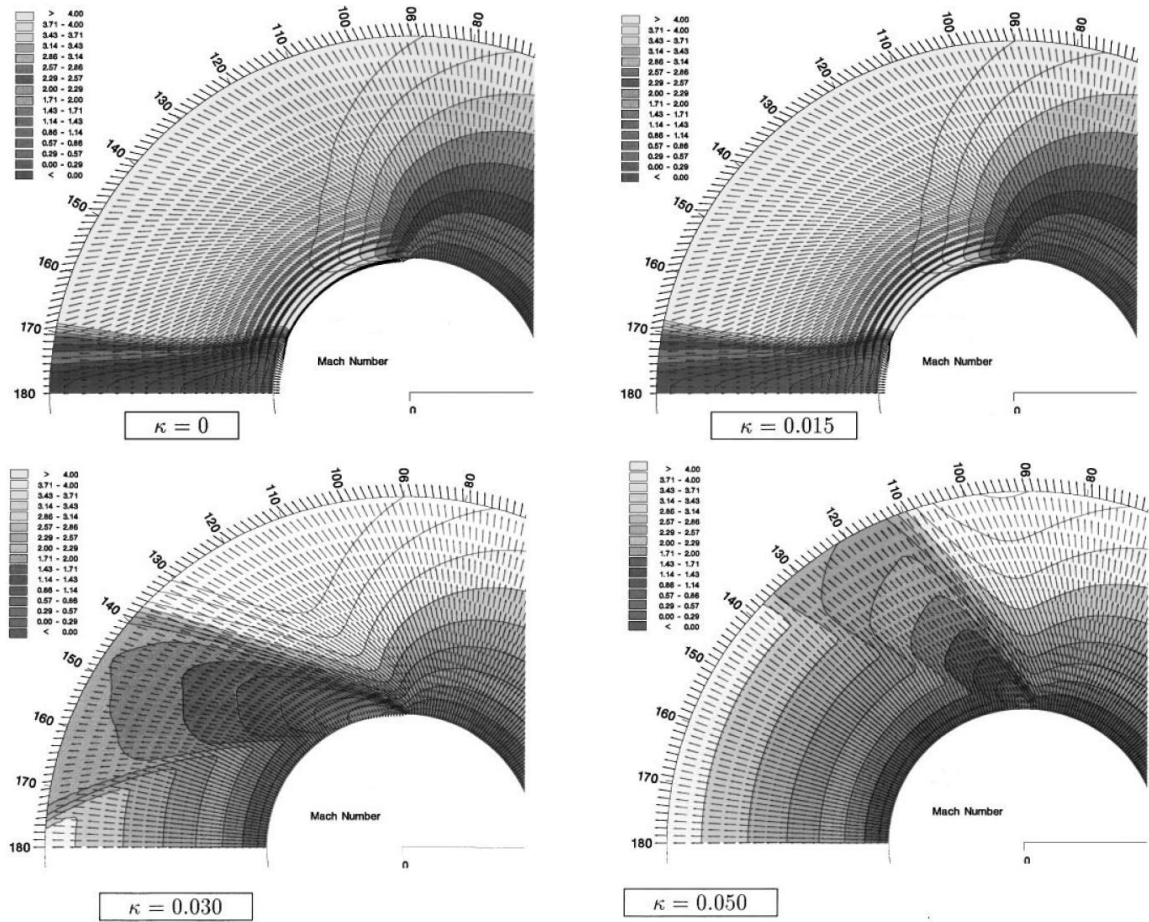


Рисунок 3.14. Вектора скорости и поля чисел Маха на ночной стороне сферической гомогенной поверхности при различных значениях параметра подогрева k . Данные работы [91].

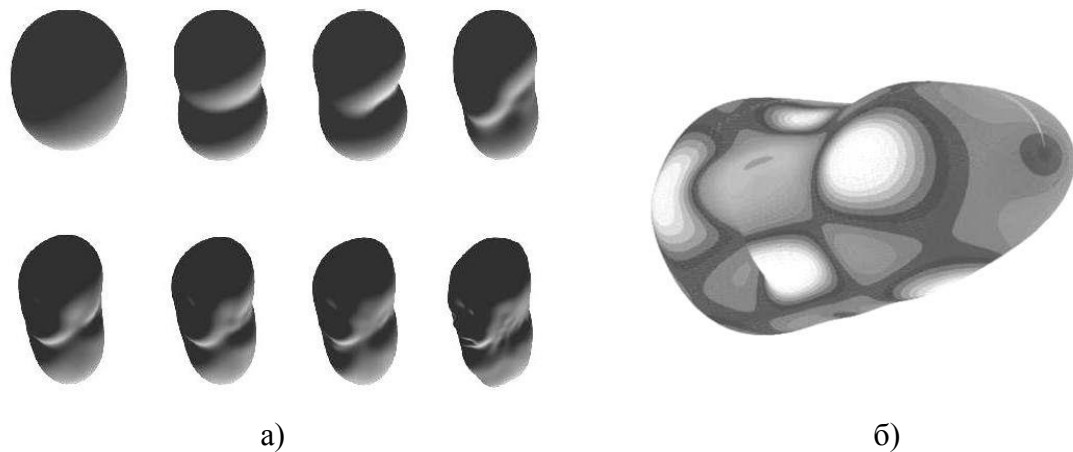


Рисунок 3.15. Поверхность кометы Галлея: а) разложения по сферическим гармоникам; б) распределение функции f в случае негомогенной поверхности.

Для анализа влияния топографии поверхности кометы Галлея проводилась серия расчетов, в которой варьировалось количество учитываемых сферических гармоник поверхности, причем сама поверхность полагалась гомогенной. Для анализа влияния неоднородностей в свойствах поверхности (в распределении функции f по поверхности) предыдущая серия расчетов дополнялась выборочными расчетами в негомогенном приближении. Оказалось, что увеличение количества учитываемых гармоник (большая детализация поверхности) приводит к заметному усложнению структуры ближней комы. В тоже время эффект негомогенности поверхности оказался значительно слабее [95].

Заметим, что при моделировании атмосферы кометы Галлея учитывалась возможность затенения одной части поверхности кометы другой ее частью (тень от «холма» или тень внутри «впадины»). Такая процедура была стандартной в цикле проводимых работ – она использовалась во всех расчетах с несферической формой поверхности кометы, включая упомянутую ранее форму «bean».

Модель II. В работе [90] была разработана модель истечения молекул CO (монооксид углерода) с поверхности кометы при ее достаточно большом удалении от Солнца ($r_h \geq 3$ а.е.). Рассматривался случай, когда молекулы CO доминируют в истекающем потоке. Поскольку температура сублимации монооксида углерода значительно ниже, чем у воды, то он диффундирует из глубины кометы через поры на ее поверхности. Полагается, что на некоторой глубине температура остается достаточно высокой даже на ночной стороне кометы, поэтому комета «газит» со всех элементов своей поверхности. Согласно модели II, величина потока, истекающего с единичной площади поверхности, описывается функцией

$$Z = Q \left\{ \frac{a_0}{A_{ext}} + \frac{(1-a_0)}{A_{\odot}} \max[0, \cos(\mathcal{G})] \right\}, \quad (3.8)$$

где Q – полный поток массы CO с поверхности кометы (входной параметр модели), A_{ext} и A_{\odot} – полная площадь поверхности кометы и площадь ее проекции на плоскость, нормальную к направлению на Солнце, a_0 – свободный параметр модели ($0 \leq a_0 \leq 1$).

В модели II также полагается, что температура газа, T_0 , равна температуре поверхности и вычисляется как

$$T_0 = \left(\frac{E_{in} + c_{cond}}{\varepsilon_n \sigma_B} \right)^{1/4},$$

где $E_{in} = (1-A)c_{\odot} \max[0, \cos(\mathcal{G})] / r_h^2$ – локальный солнечный тепловой поток, c_{cond} – поток энергии, поступающий на поверхность кометы из ее внутренних слоев (задаваемый параметр модели при условии, что $c_{cond} \ll c_{\odot} / r_h^2$). Тогда при заданном числе Маха, M_0 , параметры газа на внутренней границе расчетной области определяются из соотношений

$$u_0 = M_0 \sqrt{\frac{\gamma k_B T_0}{m_{CO}}}, \quad \rho_0 = Z / u_0, \quad p_0 = \frac{\rho_0 k_B T_0}{m_{CO}},$$

где m_{CO} – масса молекулы CO, $\gamma = 1.4$.

В работе [90] модель II использовалась для расчета истечения молекул CO с поверхностей различной формы: сферической, эллипсоидальной и формы «bean». В качестве примера на рисунке 3.16 приведены данные расчетов для поверхности формы «bean» при следующих входных параметрах: $R_n = 0.58$ км, $h = 0.8$, $r_h = 3$ а.е., $\theta_{sun} = 45^\circ$, $Q = 5 \times 10^{25}$ 1/с, $c_{cond} = 0.005 c_\odot / r_h^2$, $a_0 = 0.9$ (почти изотропная поверхность) и 0.1 (существенно анизотропная поверхность).

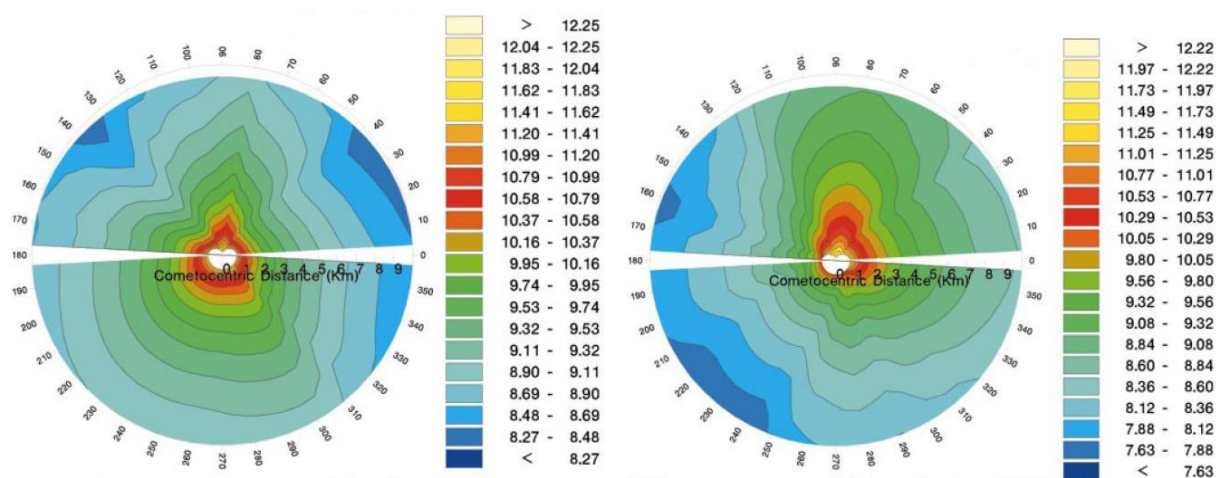


Рисунок 3.16. Поля плотности (шкалы относятся к величине $\lg(\rho/m_{CO})$) в плоскости $y = 0$ для расчетных случаев с $a_0 = 0.9$ (слева) и 0.1 (справа). Данные работы [90].

Модель III. В работе [100] была разработана модель, учитывающая одновременное истечение паров воды и угарного газа: сублимация H_2O с ледяной поверхности и диффузия CO из внутренних слоев ядра кометы через поры. Поскольку здесь рассматривается течение смеси газов, то уравнения газовой динамики дополняются уравнением для концентрации одной из компонент (конкретно – компоненты CO), концентрация второй компоненты определяется из соотношения $c_{H_2O} + c_{CO} = 1$, где c_{H_2O} и c_{CO} – массовые концентрации H_2O и CO. Модель III, по сути, является суперпозицией моделей I и II, каждая из которых дает величины скорости, давления и плотности для соответствующей компоненты смеси. Результирующие параметры газовой смеси на внутренней границе расчетной области вычисляются по формулам:

$$\rho = \rho_{H_2O} + \rho_{CO}, \quad p = p_{H_2O} + p_{CO}, \quad u = \frac{u_{H_2O} \rho_{H_2O} + u_{CO} \rho_{CO}}{\rho_{H_2O} + \rho_{CO}}, \quad c_{CO} = \frac{u_{CO} \rho_{CO}}{u_{H_2O} \rho_{H_2O} + u_{CO} \rho_{CO}}. \quad (3.9)$$

Первые результаты применения модели III к моделированию атмосферы реальных комет были продемонстрированы в [100], где рассматривались различные приближения поверхности кометы Чурюмова-Герасименко при $r_h = 3$ а.е. (см. раздел 3.4.1).

3.3.2 Моделирование неравновесной нестационарной комы

В работе [102] были представлены результаты численного исследования неравновесной нестационарной комы на большом удалении от ядра кометы (до 100 тыс. км). Цель работы заключалась в попытке объяснить природу слабых спиралевидных структур, обнаруженных при удаленном наблюдении некоторых комет. Конкретно, моделировалась комета Хейл-Бопп, для которой спиралевидные структуры были наиболее заметны.

По сравнению с расчетом ближней атмосферы комет, адекватное моделирование комы на расстояниях до нескольких десятков тысяч километров невозможно без дополнительного учета двух факторов – процессов фотодиссоциации в коме и ее нестационарности. Кроме того, специфика решаемой задачи диктует необходимость применения многоблочных расчетных сеток.

Процессы фотодиссоциации. В [102] для задания граничных условий на поверхности кометы использовалась модель III (сублимация H_2O и диффузия CO). При моделировании комы учитывались два процесса распада молекул под действием солнечного света (фотодиссоциация): $H_2O \rightarrow OH + H$ и $OH \rightarrow O + H$. Уравнения, описывающие изменение массовых концентраций компонент смеси, имели следующий вид

$$\frac{dc_{CO}}{dt} = 0, \quad \frac{dc_{H_2O}}{dt} = -\beta_1 c_{H_2O}, \quad \frac{dc_{OH}}{dt} = \frac{17}{18} \beta_1 c_{H_2O} - \beta_2 c_{OH},$$

$$c_H = \frac{1}{17} (1 - c_{H_2O} - c_{OH} - c_{CO}), \quad c_O = 16c_H.$$

где $\beta_1 = 1.3 \times 10^{-5} / r_h^2$ и $\beta_2 = 2\beta_1$ – скорости двух процессов фотодиссоциации (r_h измеряется в а.е., β_1 и β_2 – в $1/c$). Заметим, что при $r_h = 1$ а.е. (расчетный случай) и $u^* \approx 500$ м/с (характерная скорость газа в коме), процессы фотодиссоциации оказывают существенное влияние на химический состав комы начиная с расстояний ~ 10 тыс. км от ядра кометы.

Нестационарная кома. Период вращения кометы Хейл-Бопп составляет $T \approx 11.4$ часа и, следовательно, за время полного оборота кометы истекающий с ее поверхности газ преодолевает расстояние в ~ 20 тыс. км. Поэтому задача о моделировании комы до 100 тыс. км представляет собой нестационарную задачу. Для экономии вычислительных ресурсов и повышения точности счета решение такой задачи разбивалось на три этапа.

На первых двух этапах осуществлялись расчеты стационарной комы методом установления по времени (первый этап) и методом маршировки по пространству (второй этап), как это было описано ранее в разделе 3.2.3. Расчеты стационарной комы проводились от поверхности кометы до расстояния 100 км для 72-х положений ядра (каждые 5° полного оборота вокруг оси вращения). Поскольку за время прохождения газа от поверхности до 100 км ядро кометы поворачивается всего на $\sim 1.75^\circ$, используемое в таких расчетах приближение квазистационарности течения является оправданным.

На третьем этапе осуществлялось моделирование нестационарной комы в области от 100 км до 100 тыс. км, причем расчет проводился на многоблочной сетке, а полученные на втором этапе квазистационарные решения использовались в качестве исходных данных (параметров газа на внутренней границе $r = 100$ км). При этом на каждом расчетном шаге, для конкретного момента времени, параметры газа на границе $r = 100$ км интерполировались по двум ближайшим по времени квазистационарным решениям.

Использование многоблочной сетки. Начиная с первых работ по моделированию атмосферы комет и до настоящей работы, расчеты трехмерной комы проводились на односвязной сетке с равномерным разрешением по угловым координатам θ и φ . В случае полного покрытия поверхности ядра кометы такая сетка имеет два полюса ($\theta = 0$ и 180°), у которых ячейки сгущаются. Вблизи такого рода сеточных сингулярностей схема ГКР (как и другие явные схемы) работает менее эффективно, поскольку малый размер ячейки в одном из сеточных направлений приводит к необходимости использовать малый шаг интегрирования (заметим, что с измельчением сетки эта проблема обостряется). В случае решения стационарных задач методом установления по времени использование максимально допустимых локальных шагов интегрирования помогает существенно ускорить сходимость к стационарному решению, однако в нестационарных задачах такая техника неприменима – шаг интегрирования по времени должен быть единым (здесь не рассматриваются специальные методы дробных шагов).

Для решения возникшей проблемы было принято решение об использовании многоблочных сеток на третьем этапе решения задачи (нестационарный расчет), что потребовало проведения модификации программных кодов.

На рисунке 3.17 показаны расчетные сетки, которые использовались в работе [102] для моделирования квазистационарной и нестационарной комы. В квазистационарных расчетах (первый и второй этапы) применялась традиционная односвязанная сетка с количеством ячеек $I0 \times J0 \times K0 = 27 \times 36 \times 72$, что соответствовало угловому разрешению 5° в направлениях θ и φ (рисунок 3.17,а). В нестационарных расчетах (третий этап)

применялась многоблочная сетка (рисунок 3.17,б), состоящая из шести блоков одинаковой размерности $10 \times K0 \times K0 = 108 \times 30 \times 30$ с угловым разрешением $3^\circ \times 3^\circ$.

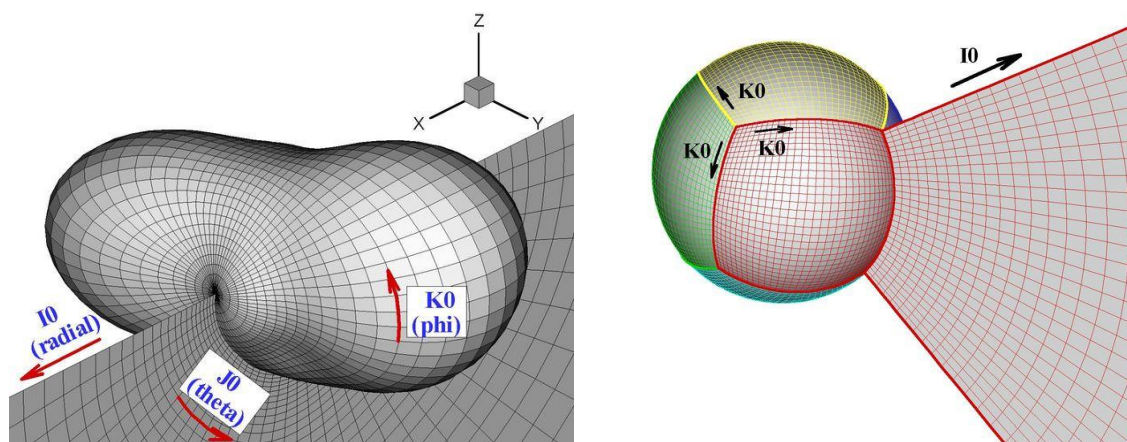


Рисунок 3.17. Расчетная сетка для квазистационарной комы (слева) и нестационарной комы (справа). Сеточное направление I соответствует направлению от центра кометы.

Поскольку форма поверхности кометы Хейл-Бопп была неизвестна, использовалось одно из приближений поверхности кометы Галлея, дополненное предположением о ее однородности (гомогенности). При этом форма поверхности кометы Галлея была масштабирована – увеличена в размере до среднеобъемного радиуса 25 км. Заметим, что в данной задаче использование несферической формы поверхности является принципиальным, поскольку приближение гомогенной сферы не позволяет обнаруживать нестационарные структуры в коме.

На рисунке 3.18 представлены некоторые данные расчета ближней части комы (квазистационарные решения). Показаны распределения числовых концентраций истекающих с поверхности кометы компонент (молекулы воды и угарного газа) в одной из плоскостей трехмерного решения с интервалом 3.8 часа. На рисунке 3.19 представлены данные расчета нестационарной части комы (до 100 тыс. км). Показаны распределения функции RN_{OH} , где N_{OH} – интеграл числовой плотности компоненты OH вдоль линии наблюдения (перпендикуляр к плоскости рисунка в конкретной его точке), R – расстояние от центра координат (ядро кометы) до конкретной точки на плоскости рисунка.

Результаты моделирования нестационарной комы были также использованы в работе [107] для интерпретации измерений кометы Хейл-Бопп в миллиметровом диапазоне длин волн. Было установлено, что активность поверхности кометы (более конкретно, карта продуктивности молекул CO) является существенно неоднородной.

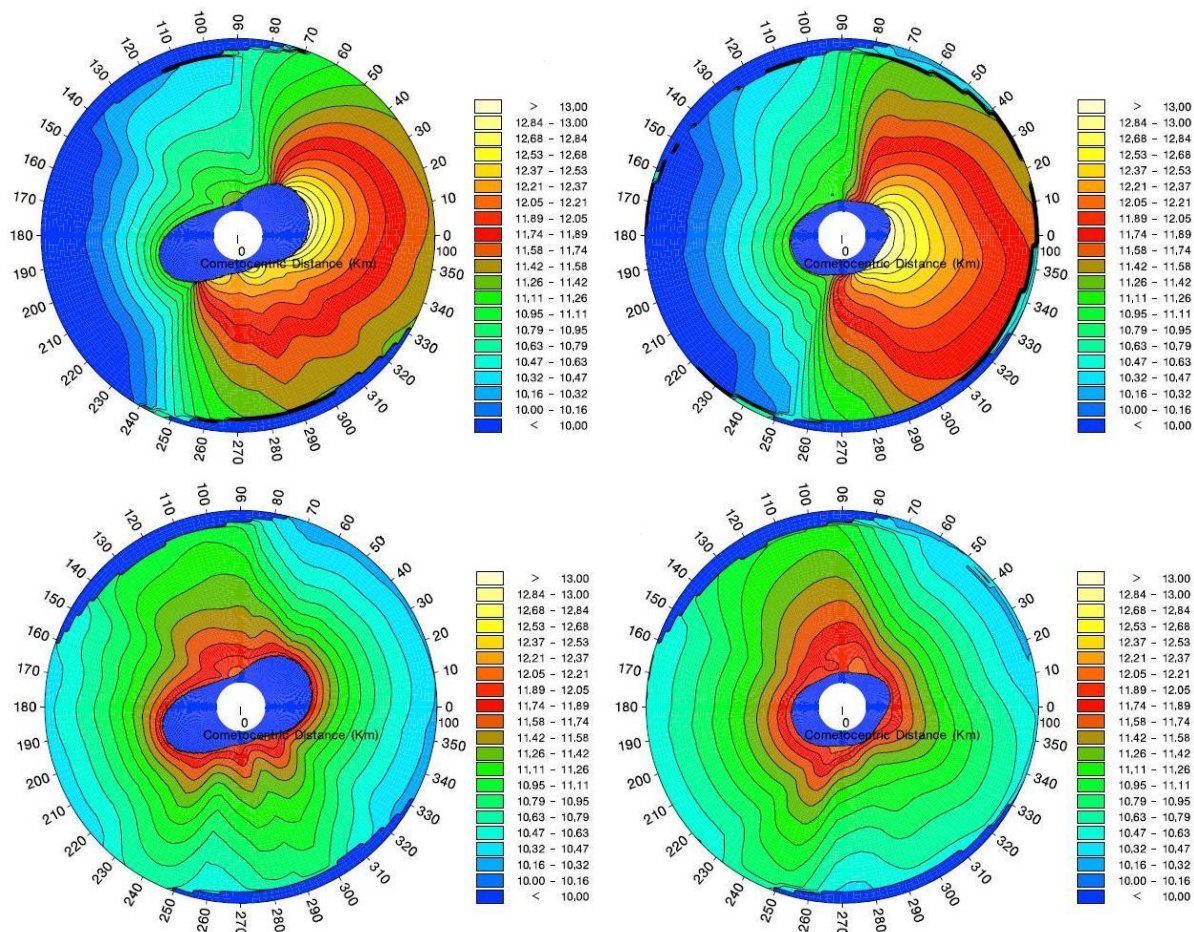


Рисунок 3.18. Числовые концентрации молекул H_2O (верхние рисунки) и CO (нижние рисунки) в ближней части комы с интервалом 3.8 часа (шкалы относятся к логарифмам величин). Данные работы [102].

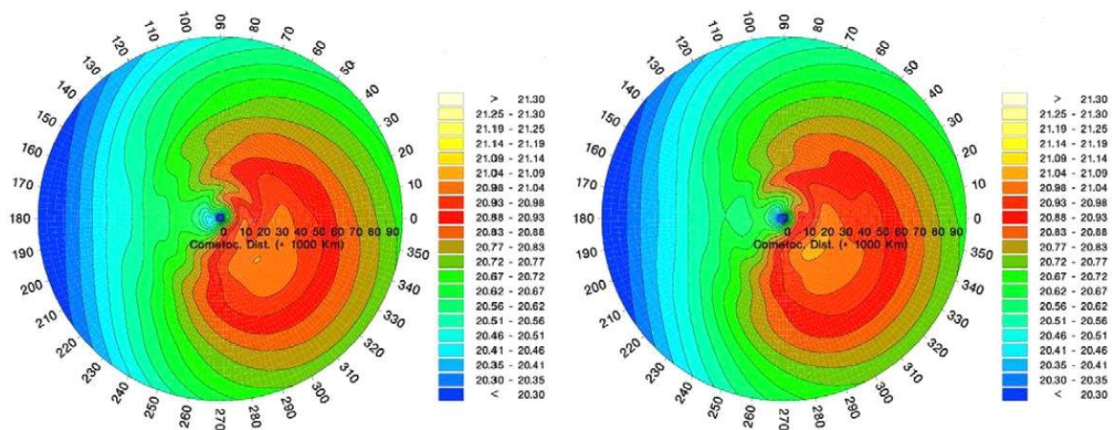


Рисунок 3.19. Поля интегральных числовых концентраций молекулы OH в дальней части комы с интервалом 3.8 часа (шкалы относятся к величинам $\lg(RN_{OH})$). Данные работы [102].

3.3.3 Расчеты в рамках уравнений Навье-Стокса

В цикле проводимых исследований в большинстве случаев расчеты комы осуществлялись в рамках уравнений Эйлера. Как правило, вблизи ядра кометы атмосфера была достаточно плотной (речь идет о расчетных вариантах, где $r_h \leq 3$ а.е.), а неоднородности в потоке, если и возникали (вследствие негомогенности и/или несферичности поверхности), то их интенсивность быстро падала по мере удаления от поверхности. Поэтому использование уравнений Эйлера обычно было оправдано. Однако специфика ряда задач все же требовала перехода на следующий уровень моделирования сплошной среды, и использовать вязкое приближение, когда расчеты комы проводятся в рамках уравнений Навье-Стокса. Прежде чем рассмотреть эти задачи, сделаем ряд общих замечаний.

В случаях, когда комета имеет слабую активность и истекающий с поверхности газ сильно разрежен, приближение сплошной среды может оказаться неприменимым и для адекватного моделирования комы необходимо привлечение таких методов, как метод прямого моделирования Монте-Карло (DSMC = direct Monte Carlo simulation). Результаты применения этого метода к моделированию комы будут обсуждаться в следующем разделе.

В случаях, когда активность кометы значительна и в ближней части комы оправдано использование уравнений Эйлера, течение на большом удалении от ядра кометы может достигать существенной разреженности и переходить в свободномолекулярное течение. На таких расстояниях решение уравнений Эйлера будет приближаться к гиперзвуковому течению от источника, когда для параметров газа вдоль выделенной линии тока (почти прямая линия, направленная от ядра кометы) справедливо следующее приближение: радиальная скорость газа $u \approx \text{const}$, плотность $\rho \approx \text{const}/r^2$, давление $p \ll \rho u^2$, температура $T \approx 0$. Если нас интересует главным образом пространственное распределение плотности газа, то использование невязкого приближения будет вполне оправданным и при моделировании дальней части комы (здесь оно согласуется с приближением свободномолекулярного течения). Однако если для моделирования комы на больших расстояниях от ядра кометы использовать приближение уравнений Навье-Стокса, то можно столкнуться с ситуацией, когда число Рейнольдса упадет до уровня $\text{Re} \ll 1$ и такой расчет станет проблематичным (по крайней мере, с применением явных методов). Поэтому в рамках проводимых исследований при моделировании дальней части комы не практиковался переход с решения уравнений Эйлера на решение уравнения Навье-Стокса.

Далее мы рассмотрим два типа задач, где невязкое приближение оказывалось слишком грубым, и для моделирования комы привлекалась система уравнений Навье-

Стокса. Заметим, что в этом случае коэффициенты вязкости, теплопроводности и диффузии рассчитывались по следующим формулам

$$\mu = 9.25 \times 10^{-6} \left(\frac{T}{300} \right)^{1.1}, \quad \lambda = \frac{\mu C_p}{Pr}, \quad D = \frac{\mu}{\rho Sc},$$

где C_p – удельная теплоемкость газа при постоянном давлении, Pr и Sc – безразмерные числа Прандтля и Шмидта (в расчетах принималось, что $Pr = Sc = 0.72$).

Моделирование атмосферы кометы Хякутакэ. В работе [87] была предпринята попытка объяснить природу аркообразных структур кометы Хякутакэ (Hyakutake), которые наблюдались в областях спектра, ответственных за малые компоненты, такие, как ОН. Было сделано предположение, что от кометы откололся крупный активный осколок и наблюдаемые аркообразные структуры вызваны взаимодействием потоков, истекающих из двух ядер кометы (основного и осколка). Поскольку считалось, что активные ядра расположены на удалении ~ 1000 км друг от друга, и, следовательно, взаимодействующие потоки имели существенное разрежение, то при решении данной задачи использовались уравнения Навье-Стокса. Для упрощения задачи полагалось, что основное ядро и осколок имеют сферическую форму и расположены на одной прямой с Солнцем (если смотреть со стороны Солнца, то осколок располагался позади основного ядра, поэтому газ, истекающий с дневной стороны осколка, взаимодействовал с газом, истекающим с ночной стороны основного ядра).

При моделировании истечения с поверхностей двух ядер использовалась модель I (сублимация H_2O), кроме того в потоке учитывалась фотодиссоциация $H_2O \rightarrow OH + H$. Хотя на расстояниях ~ 1000 км массовая доля ОН остается малой по сравнению с долей H_2O , процесс фотодиссоциации играет решающую роль в пространственном распределении молекул ОН. В качестве примера на рисунке 3.20 представлены данные одного расчетного варианта задачи. Видно, что область взаимодействия двух потоков представляет собой аркообразную структуру, внутри которой параметры газа имеют достаточно гладкие распределения. Отсутствие разрывов (скачков уплотнения) в области взаимодействия говорит о существенном влиянии вязкости и подтверждает необходимость использования в данной задаче уравнений Навье-Стокса.

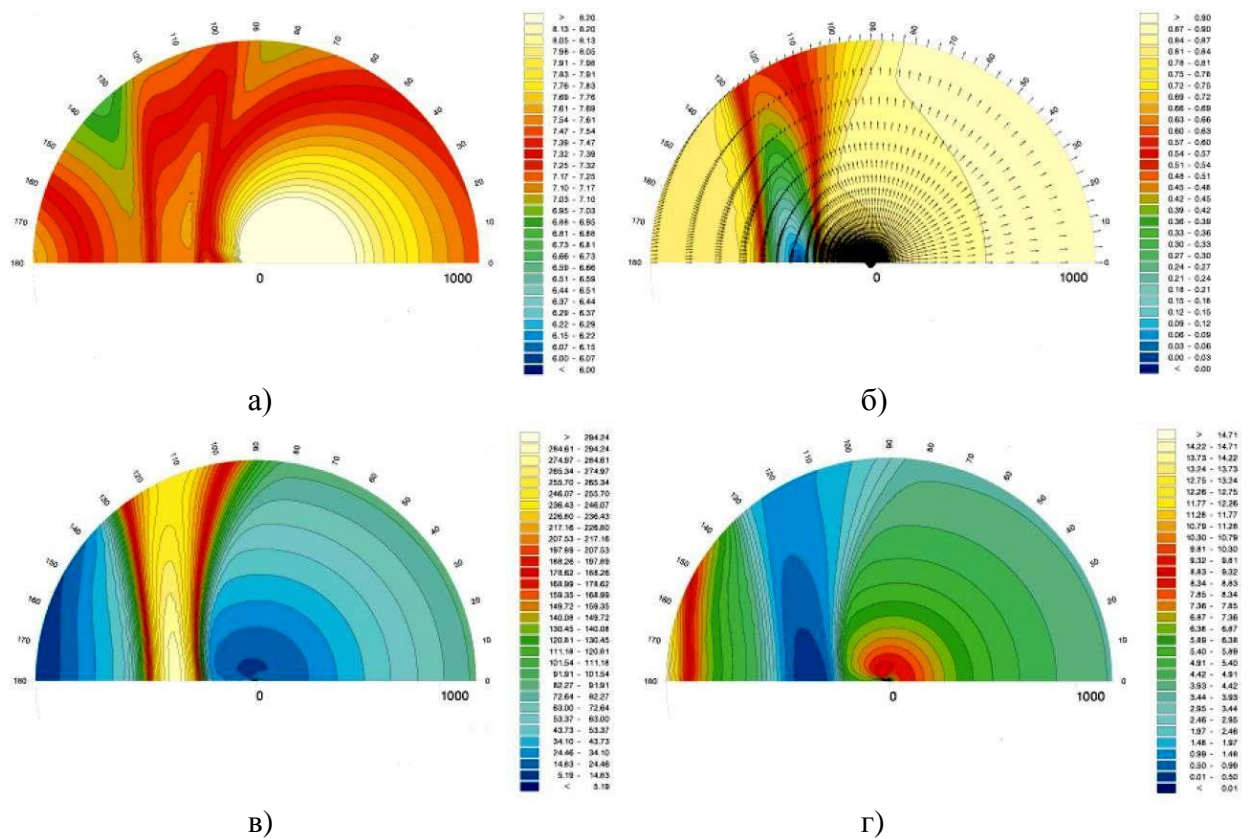


Рисунок 3.20. Моделирование взаимодействия потоков, истекающих из двух ядер (основного ядра и осколка) кометы Хякутакэ: а) числовая плотность молекул H_2O ; б) скорость газа; в) температура; г) число Маха. Данные работы [87].

Моделирование атмосферы на «ночной» стороне кометы. В разделе 3.3.1 уже обсуждались данные работы [91] по исследованию возможности конденсации паров воды на ночной стороне кометы (см. рисунок 3.14). Теперь заметим, что эти результаты были получены в рамках уравнений Навье-Стокса. Необходимость учета процессов вязкости и теплопроводности в данной задаче была обусловлена тем, что в случае слабого подогрева ночной стороны кометы разворот потока вблизи оси симметрии течения происходит в условиях большой разреженности. Поэтому формирующаяся ударная волна оказывается размытой, что меняет условия конденсации газа на поверхности.

Для подтверждения сказанного на рисунке 3.21 приводятся сравнение данных, полученных с использованием уравнений Эйлера и уравнений Навье-Стокса; показаны данные для расчетного варианта, когда подогрев ночной стороны кометы отсутствует ($k = 0$). Сравниваются поля температуры и *локальных* чисел Кнудсена, Kn (определение Kn будет дано в следующем разделе). Видно, что согласие между двумя расчетами очень хорошее за исключением приосевой области ночной стороны кометы. Из этих и других данных в работе [91] делается заключение о том, что при моделировании атмосферы

комет уравнения Эйлера применимы приблизительно до $Kn = 0.1$, тогда как в диапазоне $0.1 < Kn < 1$ реализуется переходный режим (уравнения Навье-Стокса).

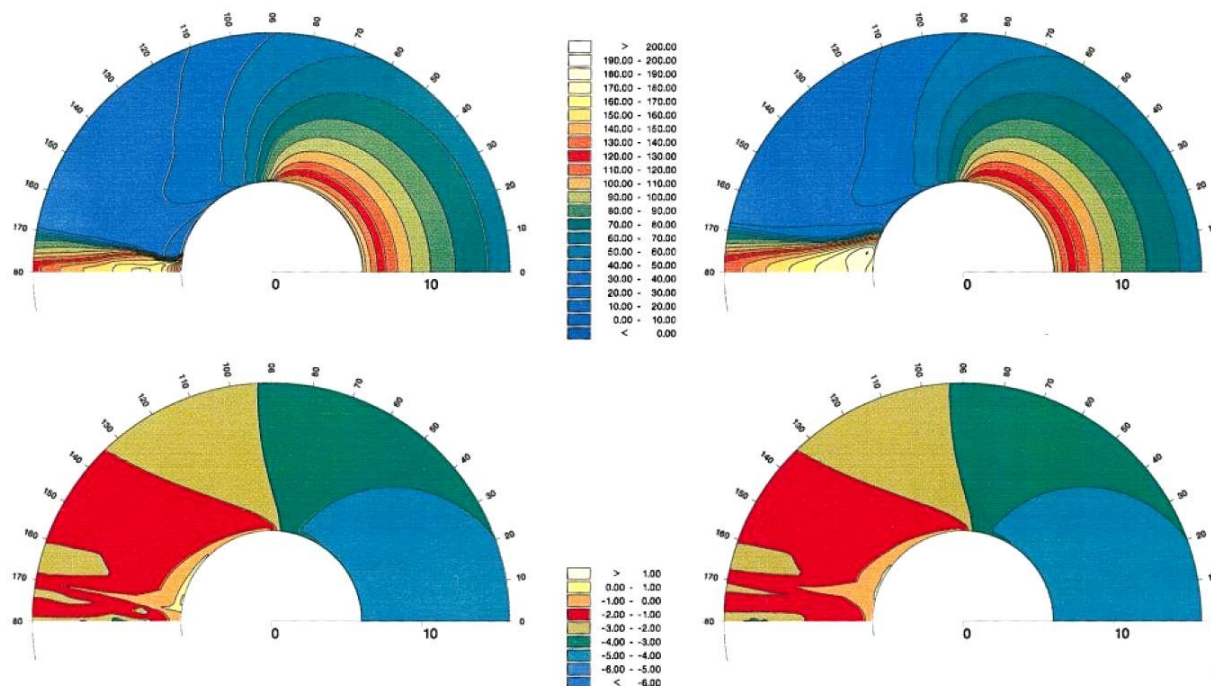


Рисунок 3.21. Сравнение решений, полученных в рамках уравнений Эйлера (слева) и уравнений Навье-Стокса (справа): поля температуры (сверху) и локальных чисел Кнудсена (снизу; шкала относится к $\lg(Kn)$). Данные работы [91].

3.3.4 Сравнение с расчетами методом Монте-Карло

Начиная с 2000 года, к данному циклу работ присоединились ученые из Санкт-Петербурга – профессор Г.А. Лукьянов и его аспирант В.В. Захаров. Они дополнили численные исследования атмосферы комет расчетами методом DSMC (метод Монте-Карло). Метод DSMC моделирует на ЭВМ решение уравнений Больцмана путем статистических испытаний движения частиц газа в разреженной среде. Хотя по сравнению с методами численного интегрирования уравнений механики сплошных сред (методы CFD; CFD = computational fluid dynamics) применение метода DSMC требует существенно больших вычислительных ресурсов (машинного времени и памяти), его использование позволяет:

- для конкретных приложений определять границу применимости приближения механики сплошных сред;
- получать физически корректные решения задачи в тех случаях, когда приближение сплошной среды оказывается неприменимо.

Сопоставление данных CFD и DSMC по газу. Прежде всего заметим, что при моделировании комы существует большая неопределенность в поверхностной модели, поэтому различие $\sim 10\%$ между данными CFD и DSMC не является критичным.

Первые сопоставления расчетов комы по двум методам (CFD и DSMC) были продемонстрированы в работе [94] на примере кометы сферической формы, когда на освещенной (дневной) части поверхности использовалась модель I (сублимация H_2O), а на ночной части поверхности задавался подогрев, определяемый безразмерным параметром k (как описано в разделе 3.3.1). Рассчитывались варианты задачи в широком диапазоне определяющих параметров: $R_n = 0.5 - 25$ км, $r_h = 1 - 5$ а.е., $f = 0.03 - 1$, $k = 0.01 - 0.6$. При этом число Кнудсена, рассчитанное по длине свободного пробега молекул вблизи наиболее освещенной точки поверхности и радиусу сферы R_n , варьировалось в диапазоне $10^{-7} < Kn_* < 10^{-3}$. При обработке полученных данных и выявлении границы применимости CFD-метода анализировалось локальное число Кнудсена, определяемое как

$$Kn = \max(Kn_0, Kn_H), \quad Kn_0 = \frac{\Lambda |\nabla n|}{n}, \quad Kn_H = \frac{\mathbf{u} \cdot \nabla n}{\nu n},$$

где Kn_0 и Kn_H – локальные числа Кнудсена в покоящемся и подвижном газе, соответственно (см. работу Бёрда [193]), n – числовая плотность молекул газа, Λ – длина свободного пробега молекул, ν – частота столкновений молекул, \mathbf{u} – вектор скорости газа.

По результатам проведенного анализа были сделаны следующие выводы:

- приближение ВЕ в модели I (аналитические выражения для плоского кнудсеновского слоя у поверхности кометы) хорошо работает во всем исследованном диапазоне Kn_* ;
- над дневной стороной поверхности всегда наблюдается хорошее согласие между данными, полученными по двум методикам;
- над ночной стороной поверхности в областях, где локальное число Кнудсена $Kn < 0.1$, также наблюдается хорошее согласие;
- в тех случаях, когда на всей ночной поверхности реализуется сублимация H_2O , согласие между данными CFD и DSMC оказывается удовлетворительным и в областях с $Kn > 0.1$;
- в тех случаях, когда на части ночной поверхности реализуется конденсация H_2O , в областях с $Kn > 0.1$ расхождение между данными, полученными методами CFD и DSMC, может оказаться слишком большим (приближение сплошной среды не работает).

В качестве примера на рисунке 3.22 воспроизведены некоторые результаты сопоставления данных CFD и DSMC для расчетных вариантов с $R_n = 25$ км, $r_h = 1$ а.е., $f =$

1, $k = 0.01$ и 0.03 . Показаны линии тока на ночной стороне кометы, полученные в рамках приближений CFD и DSMC.

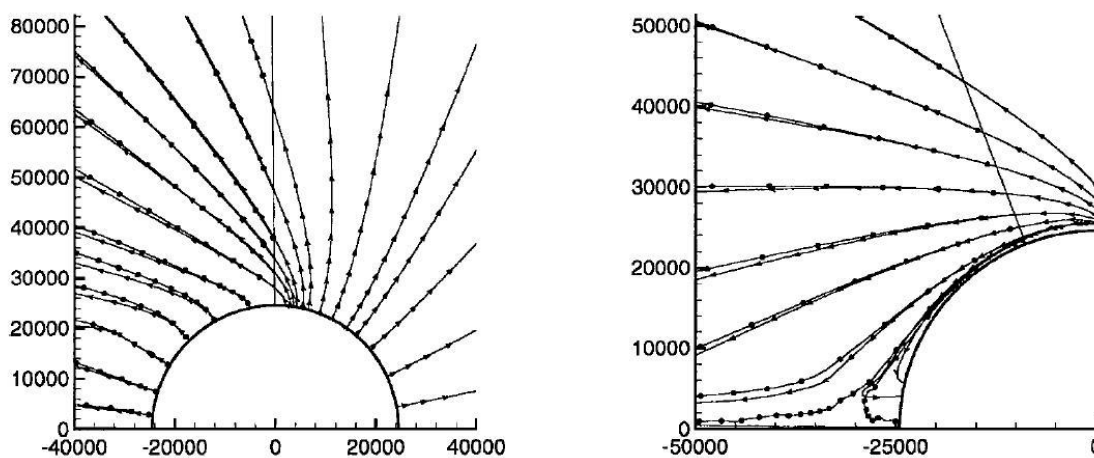


Рисунок 3.22. Сравнение линий тока на ночной стороне сферической кометы, полученных в рамках приближений CFD (линии со стрелками) и DSMC (с точками) при параметре подогрева $k = 0.03$ (слева) и 0.01 (справа). Данные работы [94].

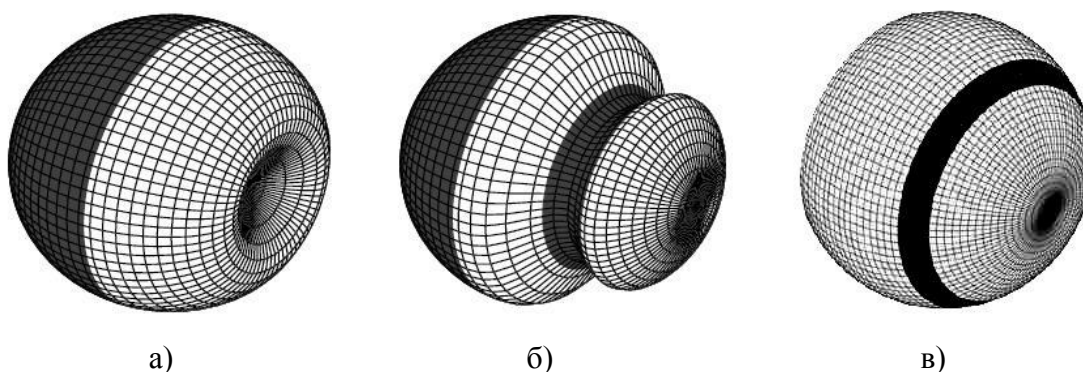


Рисунок 3.23. Модельные поверхности комет: а) типа «apple»; б) типа «top»; в) негомогенная сфера.

В работах [98, 99, 135] проводилось сопоставление расчетов методами CFD и DSMC для различных вариантов гомогенной несферической поверхности кометы; рассматривались аналитические осесимметричные поверхности типа «apple» и типа «top», как показано на рисунке 3.23 (темным цветом показана область тени). В работе [104] исследовался случай негомогенной сферы, когда активные области имеют кольцевую форму (рисунок 3.23,в). Как и в работе [94] с гомогенной сферой, здесь рассматривались только случаи осесимметричного течения (в каждой из задач Солнце располагалось на оси симметрии), что позволяло избегать обременительных вычислительных расходов при

моделировании методом DSMC. В данной серии задач, однако, в отличие от случая с гомогенной сферой, значительная часть «ночной» комы (над ночной стороной поверхности) была исключена из расчетной области. По результатам проведенных сопоставлений были сделаны выводы, главные из которых заключаются в следующем:

- в целом наблюдается хорошее согласие между данными, полученными по двум методикам, даже внутри впадин на поверхности, где локальное число $Kn \approx 1$;
- на периферии комы данные методов CFD и DSMC удовлетворительно согласуются между собой по распределению числовой плотности молекул, однако по вращательным и поступательным степеням свободы молекул может наблюдаться существенная неравновесность.

В качестве примера на рисунке 3.24 воспроизведены данные расчета комы для поверхности типа «apple» при $R_n = 0.5$ км, $r_h = 2.5$ а.е., $f = 0.06$, $k = 0.01$. Показаны изолинии плотности и полной температуры, а также поля коэффициентов неравновесности вращательной и поступательной температур (отношения T_{tr}/T_{rot} и T_{\perp}/T_{\parallel}).

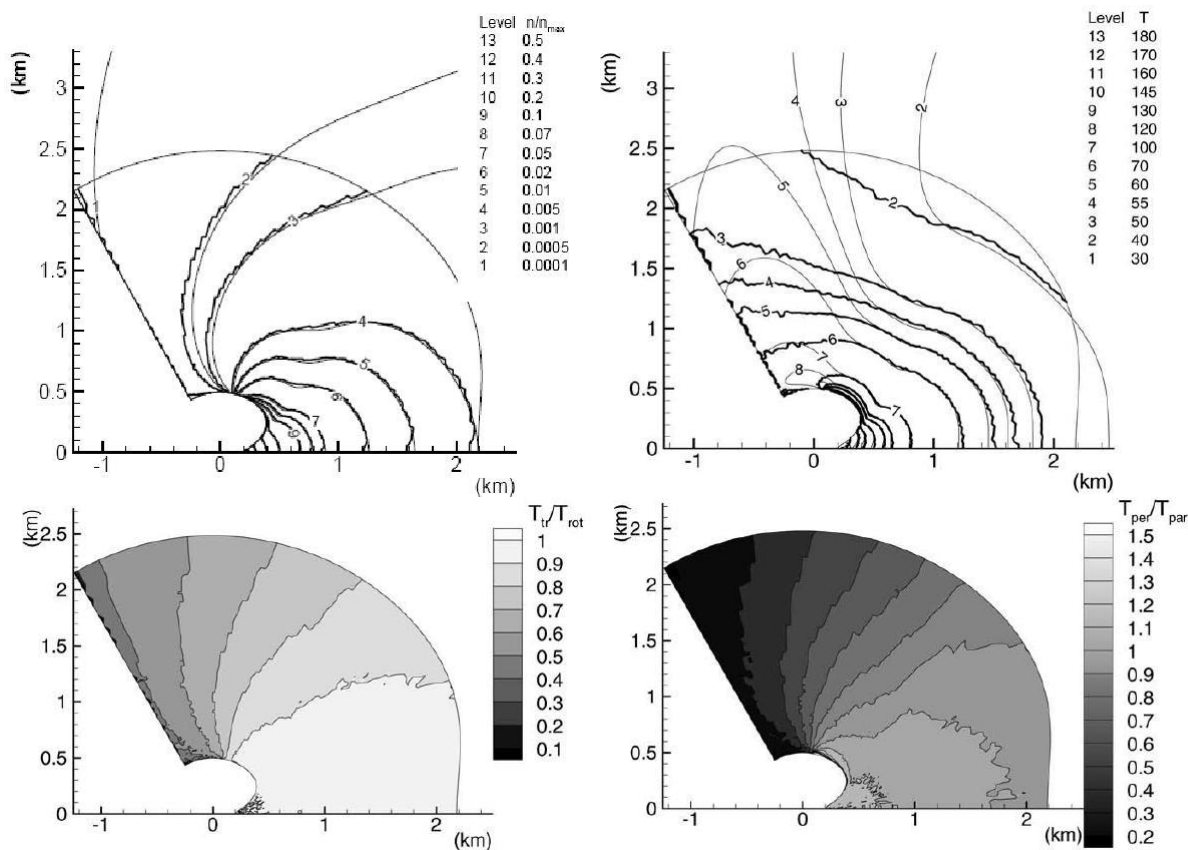


Рисунок 3.24. Распределения параметров в плоскости симметрии течения для поверхности типа «apple»: верхний ряд – изолинии плотности и полной температуры (тонкие линии – метод CFD, жирные линии – метод DSMC); нижний ряд – поля коэффициентов неравновесности вращательной и поступательной температур (метод DSMC). Данные работы [99].

В работе [100] было приведено сопоставление расчетных данных, полученных методами CFD и DSMC для случая сферического ядра кометы с поверхностной моделью II (диффузия CO). Главные выводы этой работы оказались аналогичными тем, что были сделаны для вариантов с использованием поверхностной модели I (сублимация H₂O).

Сопоставление данных CFD и DSMC по частицам пыли. В серии работ [101, 103, 105] были представлены результаты детального исследования и сопоставления данных по пылевой составляющей комы, полученных методами типа CFD и DSMC. Все расчеты проводились в предположении, что влияние частиц на газовую составляющую комы пренебрежимо мало (имеющиеся данные по составу атмосферы комет подтверждают это предположение [33]). Метод типа CFD для расчета динамики пыли в приближении сплошного облака частиц (далее метод DMF, dust multi-fluid method) был описан ранее (см. раздел 3.2). Метод типа DSMC для моделирования динамики дискретных частиц пыли (далее метод DMC, dust Monte Monte Carlo method) отличается от базового метода DSMC для расчета динамики газа тем, что в методе DMC частицы между собой не сталкиваются, но их движение определяется тремя силами: (1) аэродинамическим воздействием газовой составляющей, (2) гравитацией (притяжение ядра кометы) и (3) радиационным давлением (воздействие солнечных лучей).

В работах [101, 103] проведено сопоставление расчетов, сделанных методами DMF и DMC, на примере истечения с гомогенной сферической поверхности кометы. Было получено очень хорошие согласие между двумя методиками в случаях, когда траектории частиц одной фракции не имеют пересечений. Также было установлено, что радиационное давление может оказывать сильное влияние на динамику частиц и их распределение на ночной стороне кометы. В качестве примера на рисунке 3.25 представлены расчетные данные для частиц радиуса 9 мкм, истекающих с поверхности кометы при определяющих параметрах задачи: $R_n = 7$ км, $r_h = 5.8$ а.е., $f = 1$, $k = 0.6$, $Kn_* = 7 \times 10^{-4}$.

В работе [105] сравнивались расчетные данные по пылевой составляющей комы для случаев истечения с негомогенной сферы (кольцевые активные области) и гомогенных поверхностей типа «apple» и типа «top» (см. рисунок 3.23). Здесь метод DMF использовался в двух вариантах: однофракционное приближение (как предложено Китамурой в [36]) и многофракционное приближение (как предложено автором в [84]). Детальное сравнение подтвердило выводы, сделанные ранее для гомогенной сферы, и показало высокую точность метода DMF при условии, что подобрано подходящее разбиение на фракции (каждая фракция объединяет частицы, истекающие с определенной части активной поверхности). В качестве примера на рисунке 3.26 приведены данные расчетов двух вариантов задачи: крупные частицы пыли ($r_s = 91$ мкм) в атмосфере

высокоактивной кометы типа «top» ($r_h = 1$ а.е., $R_n = 5$ км, $f = 0.3$, $k = 0.01$), и мелкие частицы пыли ($r_s = 0.062$ мкм) в атмосфере слабоактивной кометы типа «apple» ($r_h = 5.8$ а.е., $R_n = 7$ км, $f = 1$, $k = 0.6$). В работе [105] также было показано, что причиной появления отчетливо выраженных структур в пылевой составляющей комы могут быть как негомогенность (неоднородная активность), так и несферичность (рельефность) поверхности. При этом невозможно однозначно определить природу этих структур, опираясь только на дистанционные измерения комы.

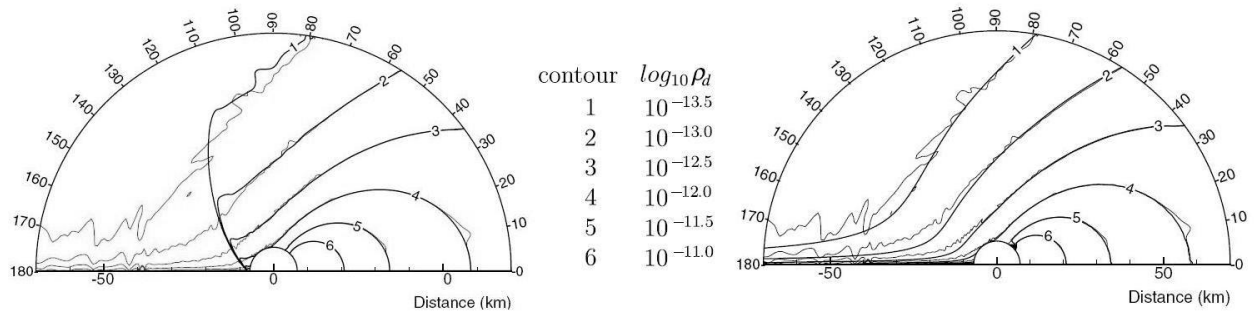


Рисунок 3.25. Изолинии плотности облака пыли ($\text{кг}/\text{м}^3$) для $r_s = 9$ мкм: жирные линии – расчет методом CFD без учета (слева) и с учетом (справа) солнечного давления; тонкие линии – расчет методом DSMC с учетом солнечного давления (справа и слева). Данные работы [103].

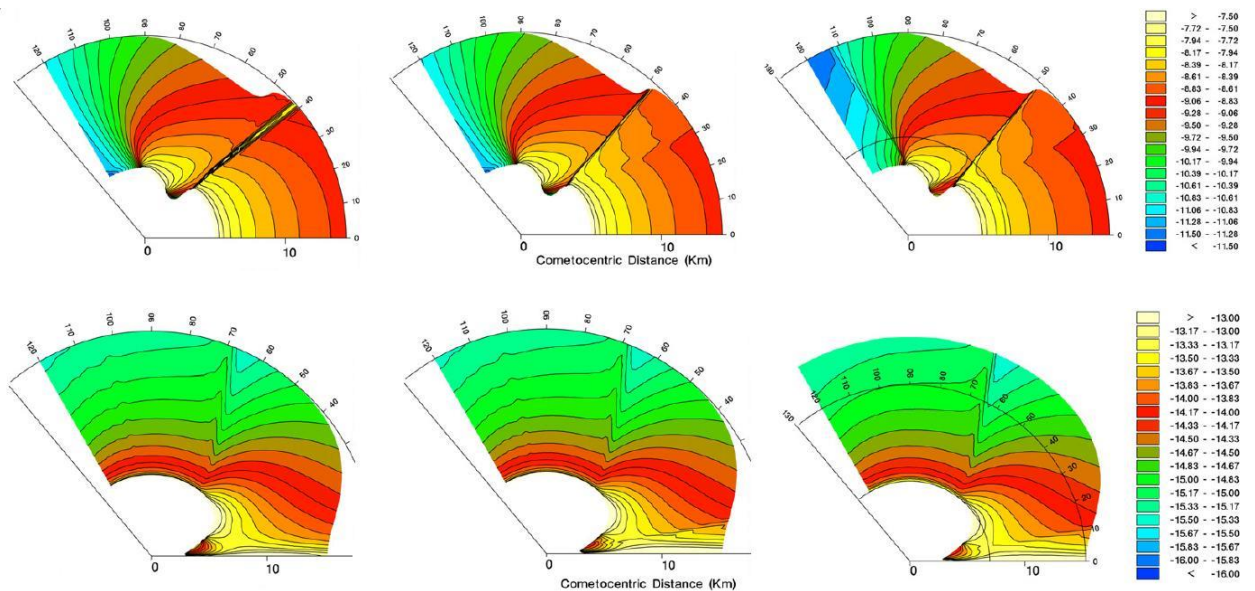


Рисунок 3.26. Поля плотности облака пыли ($\lg \rho_s$) в ближней коме: верхний ряд – поверхность типа «top»; нижний ряд – поверхность типа «apple»; слева – метод CFD, однофракционная модель; в центре – метод CFD, многофракционная модель; справа – метод DSMC. Данные работы [105].

Итак, сопоставление данных, полученных по двум принципиально различным методикам, показало, в каких случаях расчеты комы в рамках приближения сплошной среды оправданы, а когда следует переходить на использование метода Монте-Карло.

3.4 Работы в рамках космической миссии Розетта

Программа миссии Розетта включала в себя следующие этапы:

- 2 марта 2004 года – запуск космического аппарата с космодрома Куру;
- длительное движение по сложной траектории с осуществлением гравитационных маневров вблизи Солнца, Марса и (трижды) Земли;
- наблюдение за астероидами, в том числе сближение с астероидами Штейнс (Šteins) в сентябре 2008 года и Лютеция (Lutetia) в июле 2010 года;
- с мая 2011 года по январь 2014 года – бездействие аппарата;
- с января по июль 2014 года – сближение аппарата с кометой Чурюмова-Герасименко;
- август 2014 года – выход на орбиту кометы ($r_h \approx 3.5$ а.е., расстояние от аппарата до кометы $\Delta \approx 100$ км);
- с августа по ноябрь 2014 года – картографирование кометы и сбор данных о ее атмосфере ($\Delta \sim 30$ км);
- 12 ноября 2014 года – посадка спускаемого модуля Филы (Philae lander) на поверхность кометы ($r_h \approx 3$ а.е., $\Delta \approx 10$ км);
- с ноября 2014 года по сентябрь 2016 года – сопровождение кометы ($r_h = 3 \rightarrow 1.24 \rightarrow 4$ а.е., $\Delta \approx 100$ км);
- 30 сентября 2016 года – контролируемое столкновение аппарата с кометой (конец миссии).

Главные научные цели миссии Розетта заключались в определении свойств ядра кометы (состав, морфология), изучении динамики ее активности и измерении физических характеристик газа и частиц пыли во внутренней коме.

3.4.1 Начальная фаза проекта Розетта и комплекс программ RZC

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 Чурюмова-Герасименко, расчеты комы первоначально выполнялись при упрощающих предположениях: сферическая или эллипсоидальная поверхность с гомогенными или

негомогенными (аналитически заданные активные пятна) свойствами. В 2003 году были опубликованы первые данные о форме кометы Чурюмова-Герасименко, полученные из обработки наблюдений с орбитальной астрономической обсерватории Хабл (Hubble Space Telescope) [194]. Эта форма поверхности стала использоваться в последующих расчетах по проекту Розетта; она показана на рисунке 3.27 под названием «starfish».

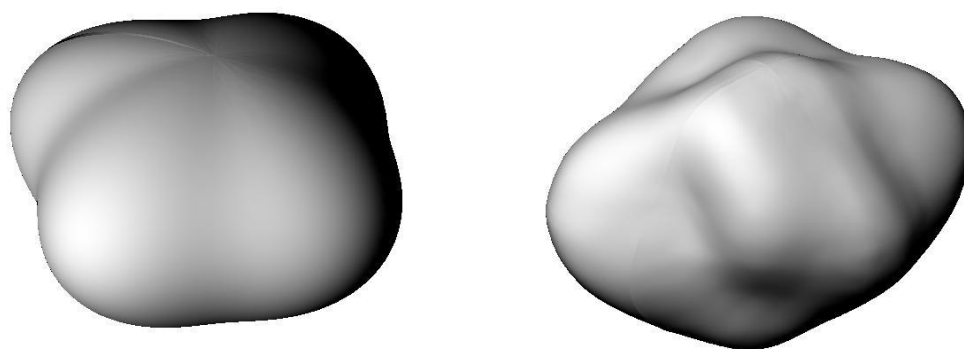


Рисунок 3.27. Первые приближения поверхности кометы Чурюмова-Герасименко: слева – «starfish» (Lamy et al., 2003); справа – «67P/C-G» (Lamy et al., 2007).

В 2004 году в сборнике «The new Rosetta targets. Observations, simulations and instrument performances» была опубликована статья [100], в которой был дан обзор физических моделей и расчетных методик, разработанных к тому времени авторским коллективом (Крифо, Лукьянов, Захаров и Родионов) в рамках проекта Розетта. В этой статье также были представлены некоторые расчетные данные по атмосфере кометы Чурюмова-Герасименко. На рисунке 3.28 воспроизведен один из таких примеров для случая гомогенной поверхности типа «starfish» с использованием модели III (сублимация H_2O и диффузия CO) при $r_h = 3$ а.е.

В 2007 году была предложена новая аппроксимация поверхности кометы Чурюмова-Герасименко [195]; она показана на рисунке 3.27 под названием «67P/C-G». Начиная с этой поверхности, все программы расчета ближней квазистационарной комы были переведены на использование многоблочной сетки (ранее сетка такого типа уже использовалась для расчета дальней нестационарной комы). Такой переход привел к более равномерному (без сингулярностей) сеточному описанию поверхности кометы (см. рисунок 3.29) и позволил существенно уменьшить вычислительные затраты на расчет задачи методом установления (в особенности, при использовании очень подробной сетки на рельефной поверхности). В результате, с точки зрения удобства практического применения программ в больших расчетных циклах (полное вращение кометы) оказалось

целесообразным отказаться от практики разбиения расчетной области на две подобласти и использования метода маршировки по пространству в одной из них (см. раздел 3.2.3).

Для аппроксимационной поверхности типа «67P/C-G» было проведено несколько расчетных циклов, в которых моделировалась газопылевая атмосфера кометы: ближняя кома (до 100 км) в квазистационарном приближении и дальняя кома (до 200 тыс. км) в нестационарном приближении и с учетом фотодиссоциации. Полученные данные были использованы в работе [108] для анализа возможного силового воздействия атмосферы кометы Чурюмова-Герасименко на космический аппарат Розетта. В качестве примера на рисунке 3.30 приведены данные одного из расчетных вариантов при $r_h = 3$ а.е.

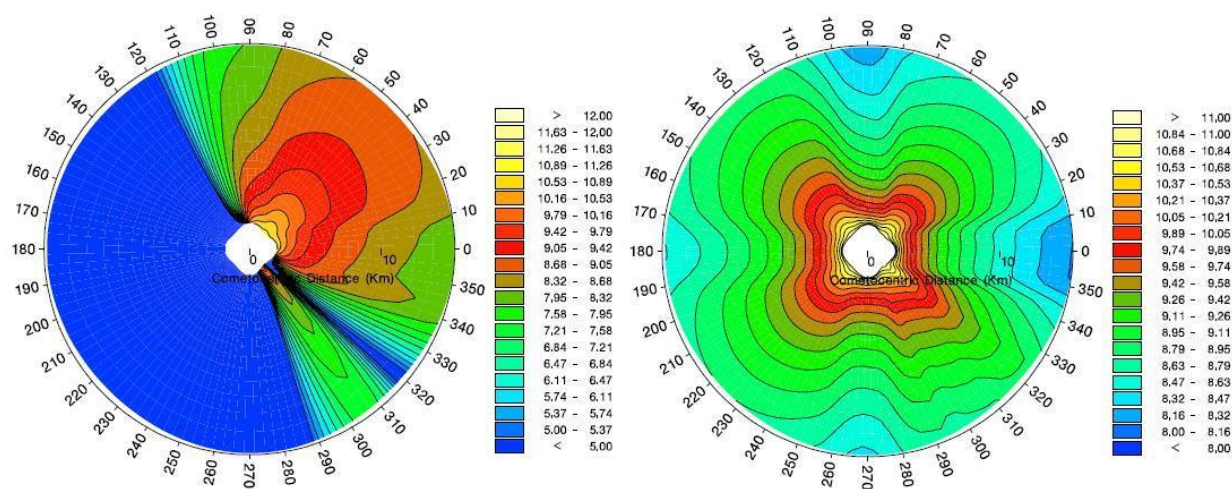


Рисунок 3.28. Данные моделирования ближней комы для поверхности типа «starfish»: числовые концентрации молекул H_2O (левый рисунок) и CO (правый рисунок). Шкалы относятся к логарифмам величин. Данные работы [100].

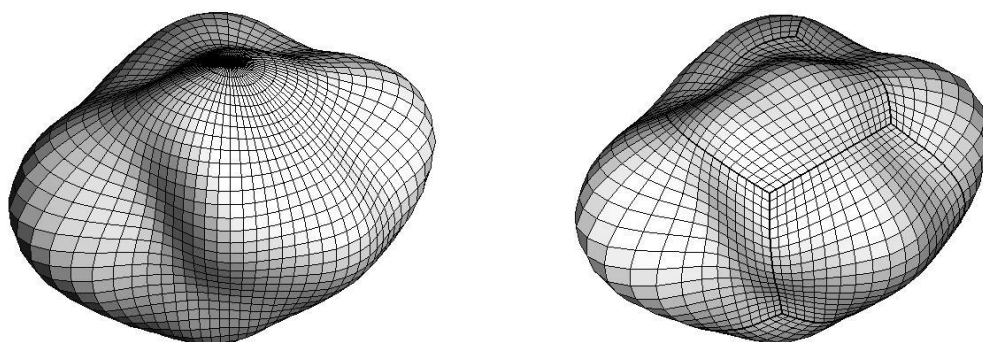


Рисунок 3.29. Поверхность типа «67P/C-G», покрытая односвязной сеткой (слева) и многоблочной сеткой (справа) при одинаковом угловом разрешении $5^\circ \times 5^\circ$.

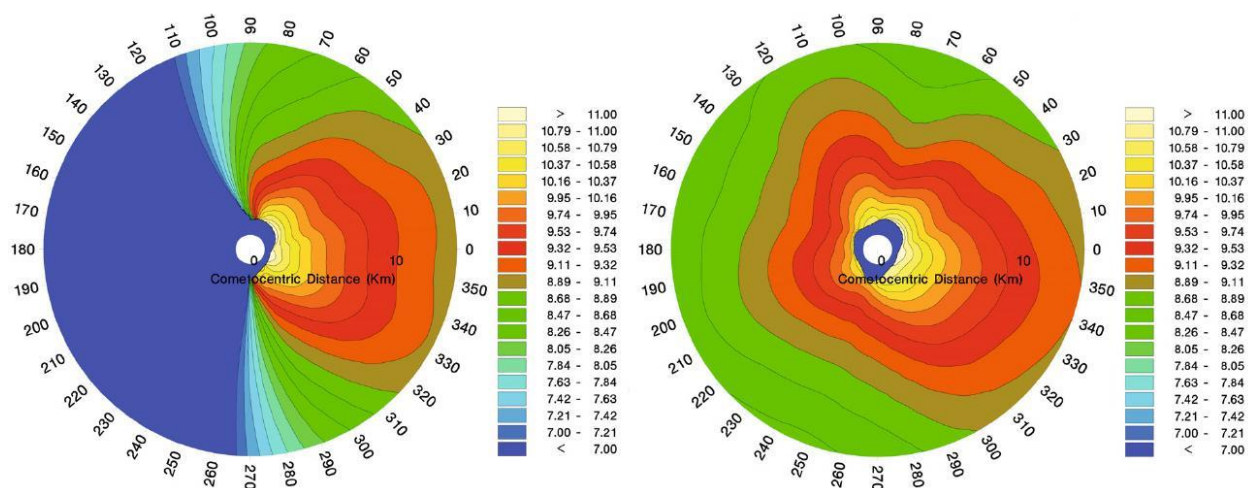


Рисунок 3.30. Данные моделирования ближней комы для поверхности типа «67P/C-G»: числовые концентрации молекул H_2O (левый рисунок) и CO (правый рисунок). Шкалы относятся к логарифмам величин. Данные работы [108].

В статье [111] данные моделирования пылевой составляющей комы были использованы для оценки способности расположенного на борту Розетты прибора GIADA (Grain Impact Analyzer and Dust Accumulator) осуществлять измерения параметров частиц (массы и скорости одиночных частиц, а также суммарного потока массы пыли) во время запланированного сопровождения кометы Чурюмова-Герасименко.

В 2012 году была модифицирована модель производства газопылевого потока с поверхности кометы. По сравнению с моделью III (сублимация H_2O и диффузия CO) в новой модели добавлена третья газовая компонента – углекислый газ. При этом полагается, что молекулы CO_2 , также как и молекулы CO , диффундируют из глубины кометы через поры и их поток определяется формулой вида (3.8), но со своими параметрами модели: Q^{CO_2} – полный поток массы CO_2 с поверхности кометы, $a_0^{\text{CO}_2}$ – параметр анизотропии поверхности относительно производства молекул CO_2 ($0 \leq a_0^{\text{CO}_2} \leq 1$). Результирующие параметры трехкомпонентной газовой смеси на внутренней границе расчетной области вычисляются по формулам вида (3.9).

Комплекс программ RZC. 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). Комплекс программ RZC состоит из:

- газодинамических кодов (CFD коды) для расчета параметров газовой составляющей комы (газовой смеси H_2O , CO и CO_2) в рамках уравнений Эйлера или Навье-Стокса и облака частиц в газодинамическом приближении;
- кинетических кодов (DSMC коды) для моделирования движения частиц газа (молекул H_2O , CO и CO_2) и частиц пыли в разреженной коме методом статистических испытаний (метод Монте-Карло);
- модели производства газопылевого потока с поверхности кометы в зависимости от локальных свойств поверхности и падающей энергии солнечного теплового потока.

3.4.2 Активная фаза проекта Розетта и моделирование реалистичной комы

В августе 2014 года началась активная фаза изучения кометы Чурюмова-Герасименко в рамках проекта Розетта. В результате картографии поверхности были получены данные о форме кометы, которые стали использоваться при моделировании реалистичной комы с помощью комплекса программ RZC. Для расчетов была построена блочно-структурированная сетка с угловым разрешением $5^\circ \times 5^\circ$ (7776 ячеек на поверхности), как показано на рисунке 3.31. В радиальном направлении сетка состояла из 100 интервалов, причем расчетная область простиралась на 130 км от поверхности кометы и полностью покрывала зоны орбитального расположения и маневрирования аппарата Розетта.

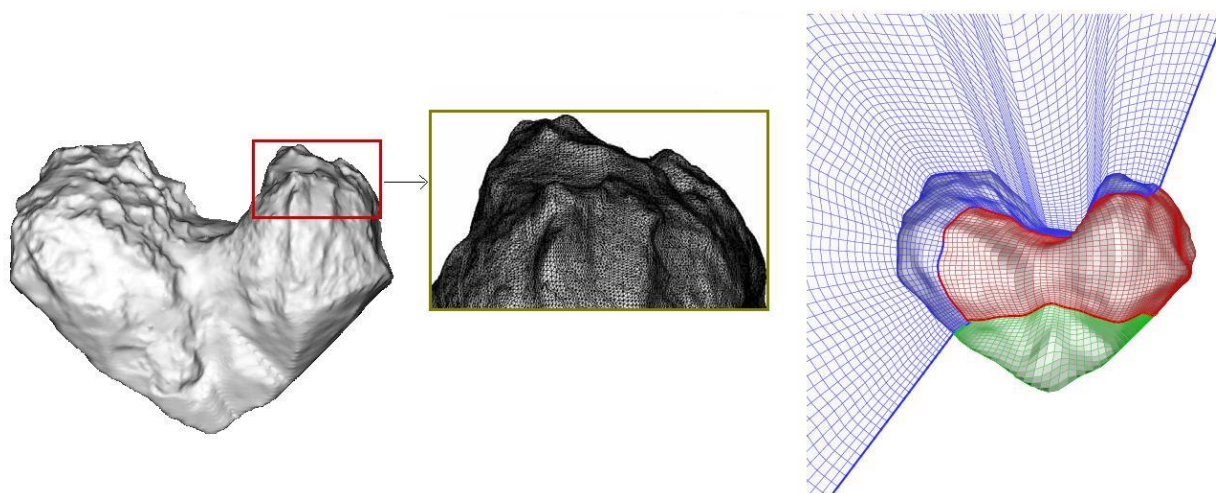


Рисунок 3.31. Форма поверхности кометы Чурюмова-Герасименко (слева и в центре; данные стереофотограмметрии с разрешением 20 м) и расчетная сетка при угловом разрешении $5^\circ \times 5^\circ$ (справа).

Посадка на комету модуля Филы. Первые расчеты реалистичной комы проводились в рамках работы по выбору места посадки спускаемого модуля Филы. В условиях жестких временных ограничений (вся работа продолжалась около двух месяцев) использовалась модель гомогенной поверхности, настроенная по глобальным параметрам, т.е. по свободным параметрам модели производства газопылевого потока с поверхности кометы, таким как полные потоки массы отдельных компонент, параметры анизотропии и параметр подогрева ночной стороны кометы. Глобальные параметры подбирались таким образом, чтобы рассчитанная атмосфера соответствовала выборочным данным измерений комы, полученным к тому моменту прибором ROSINA (Rosetta Orbiter Spectrometer for Ion and Neutral Analysis).

Проблема выбора места посадки представляла собой комплексную, сложную 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: на ночной стороне поверхности нет условий для перезарядки батарей, а на дневной стороне интенсивный приповерхностный поток может существенно осложнить посадку. 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.

Подробное описание работ по обеспечению посадки модуля Филы приведено в публикациях [115, 140]. Заметим, что в данной задаче проводилось моделирование только газовой составляющей комы, так как вклад пылевой составляющей в силовое воздействие на спускаемый аппарат незначителен: суммарный массовый расход пыли с поверхности кометы заметно меньше массового расхода газа, а скорость пылевых частиц в коме на 1-2 порядка меньше скорости частиц газа. Расчеты проводились как в приближении сплошной среды (CFD коды, уравнения Эйлера или Навье-Стокса), так и в приближении разреженного газа (DSMC коды). На рисунках 3.32 и 3.33 воспроизведены некоторые данные расчета реалистичной комы из [140]: параметры на поверхности кометы Чурюмова-Герасименко, рассчитанные на 12 часов UTC, 10 октября 2014 года и поля плотности газовой смеси, полученные в различных приближениях. Из рисунка 3.33 видно, что над дневной стороной поверхности все методики дают близкие результаты, а над ночной стороной поверхности удовлетворительное согласие наблюдается между данными, полученными по CFD кодам с использованием уравнений Навье-Стокса и DSMC кодам (соответственно, центральный и правый рисунок).

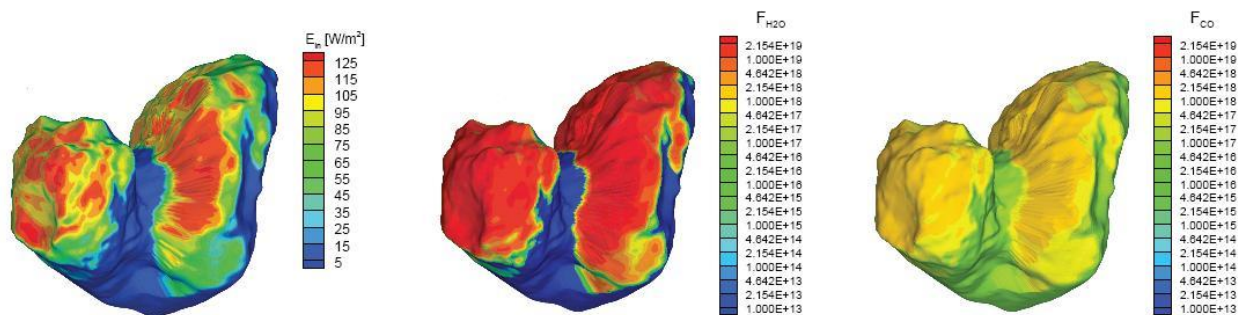


Рисунок 3.32. Параметры на поверхности кометы Чурюмова-Герасименко: падающий солнечный тепловой поток (слева), испускаемые потоки H_2O (в центре) и CO (справа). Данные работы [140].

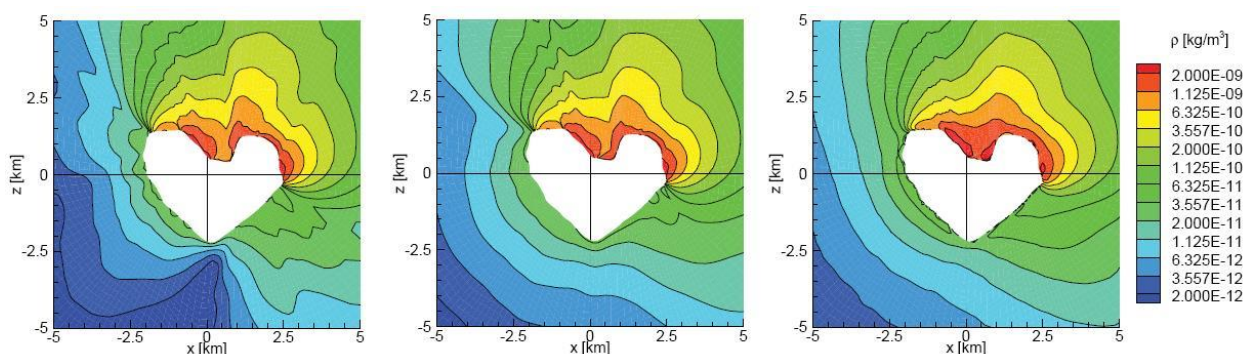


Рисунок 3.33. Поля плотности газовой смеси, полученные в приближении сплошной среды (уравнения Эйлера – слева, уравнения Навье-Стокса – в центре) и в приближении разреженного газа (метод Монте-Карло – справа). Данные работы [140].

Составление карты поверхностной активности по газу. 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 Чурюмова-Герасименко (карта свойств поверхности). В состав прибора ROSINA входили два масс спектрометра и один датчик давления, с помощью которых на протяжении всего периода сопровождения кометы был получен огромный объем информации о составе и плотности газовой комы.

При составлении карты активности предполагалось, что поверхность кометы неоднородна по своим свойствам (модель негомогенной поверхности), и на каждом расчетном элементе поверхности (сеточная ячейка) потоки трех газовых компонент, $Z_{H_2O}^*$, Z_{CO}^* , и $Z_{CO_2}^*$, определяются потоками Z_{H_2O} , Z_{CO} , и Z_{CO_2} , рассчитанными в гомогенном приближении, и коэффициентами негомогенности $f_{H_2O} \equiv Z_{H_2O}^* / Z_{H_2O}$, $f_{CO} \equiv Z_{CO}^* / Z_{CO}$ и

$f_{\text{CO}_2} \equiv Z_{\text{CO}_2}^* / Z_{\text{CO}_2}$. Также полагалось, что коэффициенты негомогенности каждого расчетного элемента есть локальные свойства поверхности, не зависящие от времени, а значит, влияние r_h и ориентации кометы относительно Солнца (меняющиеся со временем величины) на локальные потоки осуществляется только через параметры гомогенной модели, которые были определены ранее.

Таким образом, задача по созданию карты активности сводилась к подбору трех коэффициентов $f_{\text{H}_2\text{O}}$, f_{CO} и f_{CO_2} для каждого элемента поверхности. При этом использовались данные по плотности и составу газовой комы, полученные прибором ROSINA в период с 1 августа по 30 ноября 2014 года.

Алгоритм этой сложной и объемной работы подробно описан в [119]. Вкратце, он включает в себя расчеты квазистационарной комы для отобранных временных интервалов, каждый из которых охватывает полное вращение кометы (72 ориентации кометы на период полного вращения) и сравнение полученных данных с данными измерений в известных точках местоположения аппарата Розетта. По рассогласованию величин корректируется карта свойств поверхности, для чего строятся обратные линии тока от точек местоположения аппарата Розетта до поверхности кометы. Такая процедура повторяется многократно: на первых двух расчетных циклах используются CFD коды, на последующих двух циклах используются DSMC коды.

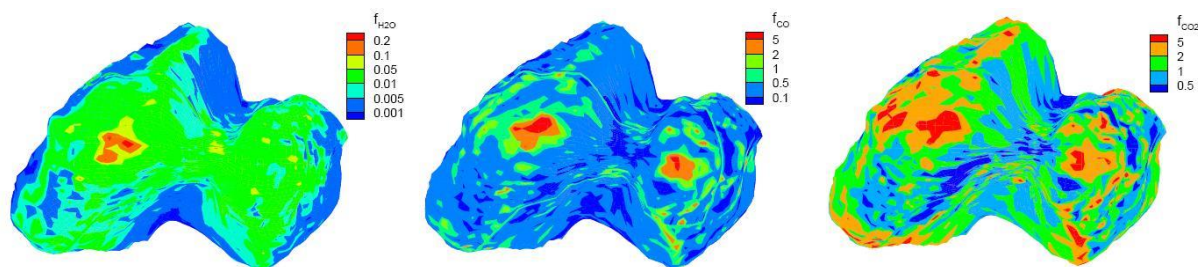


Рисунок 3.34. Распределения коэффициентов негомогенности ($f_{\text{H}_2\text{O}}$, f_{CO} и f_{CO_2}) по поверхности кометы. Данные работы [119].

Полученные после четырех расчетных циклов распределения коэффициентов негомогенности $f_{\text{H}_2\text{O}}$, f_{CO} и f_{CO_2} (карта активности по газу для поверхности кометы Чурюмова-Герасименко) показаны на рисунке 3.34. Они были использованы для финального моделирования по CFD и DSMC кодам эволюции атмосферы кометы в периоды с 15 сентября по 30 октября и с 8 по 12 октября и сравнения расчетных данных с данными измерений по числовой плотности газа и относительному содержанию

компонентов атмосферы в точках траектории аппарата Розетта. Результаты такого сравнения показаны на рисунке 3.35. Можно видеть, что расчетные данные, полученные в рамках каждого из приближений (газодинамического и кинетического), хорошо согласуются с данными измерений, как по частотным, так и по амплитудным характеристикам. Таким образом, полученные результаты подтвердили адекватность построенной модели атмосферы кометы Чурюмова-Герасименко.

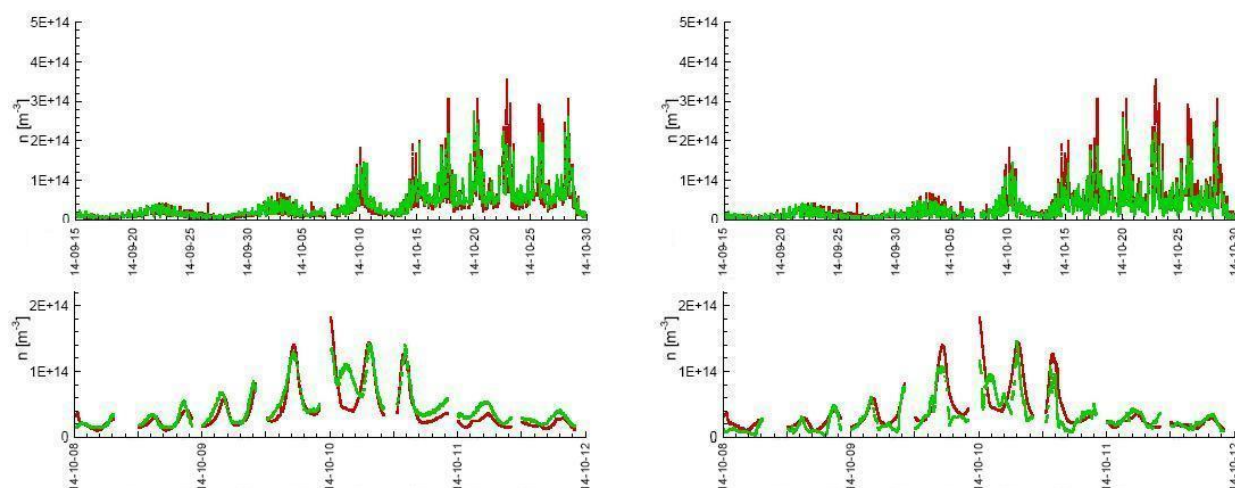


Рисунок 3.35. Сравнение расчетных данных (зеленые точки) с данными измерений (красные точки) по числовой плотности газа в точках траектории аппарата Розетта в периоды с 15 сентября по 30 октября (верхний ряд) и с 8 по 12 октября (нижний ряд): слева – для кодов DSMC, справа – для кодов CFD. Данные работы [119].

Составление карты поверхностной активности по пыли. Стоит упомянуть и о работе по составлению карты пылевой активности кометы на основе данных, полученных прибором GIADA (измеритель параметров частиц); эта работа к настоящему времени не завершена. Ее особенность заключается в том, что при моделировании параметров частиц пыли высокая степень иррегулярности формы кометы осложняет использование CFD кодов: однофракционная модель пылевого облака слишком груба, а при использовании многофракционной модели затруднительно провести разбиение поверхности на «независимые» активные участки. Поэтому движение частиц в этой задаче моделируется по DSMC кодам, но параметры газовой составляющей комы (определяют аэродинамическое воздействие на частицы) рассчитываются по CFD кодам. Последнее обусловлено с тем, что расчеты газа по DSMC кодам сопряжены с существенным повышением вычислительных затрат (как минимум на порядок) и сопровождаются

наличием шумовых помех в параметрах газа, которые осложняют моделирование движения отдельных частиц.

3.5 Выводы по главе

В качестве основных результатов третьей главы можно выделить следующее.

1. В рамках приближения механики сплошных сред (уравнения Эйлера или Навье-Стокса) выработана математическая модель течения в газопылевой атмосфере кометы с учетом многофазной неравновесности (многоскоростная и многотемпературная модель) и фотодиссоциации.

2. Описанная в первой главе схема ГКР адаптирована к расчету параметров многокомпонентного газа и облака частиц в атмосфере кометы. Предложено разбиение расчетной области на внутреннюю подобласть, где решение ищется методом установления по времени, и внешнюю подобласть, где используется метод маршировки по пространству.

2. Предложена многофракционная модель для расчета пылевого облака. Показано, что в случае истечения потока частиц с нескольких активных пятен на поверхности кометы, однофракционная расчетная модель (модель Китамуры) не адекватно описывает движение частиц, приводя к их нефизическому скоплению вблизи плоскостей взаимодействия. Многофракционная расчетная модель свободна от этого недостатка.

3. Модель течения в атмосфере кометы дополнена несколькими моделями производства газопылевого потока с поверхности кометы в зависимости от локальных свойств поверхности и падающей энергии солнечного теплового потока (модели поверхности кометы; предложены Ж.Ф. Крифо). Модели поверхности кометы описывают в локальном приближении сублимацию H_2O с поверхности кометы и диффузию молекул CO и CO_2 из глубины кометы через поры.

4. Прделан большой цикл систематических работ по моделированию газопылевой атмосферы кометы: исследовалось влияние формы кометы, свойств ее поверхности (гомогенное и негомогенное приближения, степень подогрева ночной стороны), расстояния до Солнца. Моделирование проводились как в квазистационарном приближении (до ~ 100 км), так и в нестационарном приближении (до ~ 100 тыс. км).

5. Расчеты в рамках уравнений Эйлера сравнивались с расчетами в рамках уравнений Навье-Стокса. В частности получено, что в рассматриваемых задачах невязкое приближение (уравнения Эйлера) применимо приблизительно до локальных чисел Кнудсена $\text{Kn} = 0.1$.

6. На ряде тестовых примеров проводилось сравнение с расчетами атмосферы кометы методом Монте-Карло и определена граница применимости приближения механики сплошных сред в задачах такого типа. В частности показано, что данные, полученные по двум различным методам (методам CFD и DSMC), хорошо согласуются между собой до локальных чисел Кнудсена $Kn \approx 1$.

7. Для проведения систематических работ в рамках проекта Розетта был сформирован комплекс программ RZC, включающий в себя газодинамические коды для расчета параметров газа (газовой смеси H_2O , CO и CO_2) в рамках уравнений Эйлера или Навье-Стокса и облака частиц в газодинамическом приближении. В комплексе программ RZC была реализована практика расчета атмосферы кометы на блочно-структурированной сетке.

8. Комплекс программ RZC нашел активное применение в ряде работ по сопровождению космической миссии Розетта и анализе данных, полученных в ходе ее выполнения. Так, данные моделирования атмосферы кометы Чурюмова-Герасименко использовались при выборе места посадки модуля Филы и при составлении карты поверхностной активности кометы.

4 Схема Годунова-Колгана-Родионова и современные методы сквозного счета

Как уже говорилось, представленные во второй и третьей главах пакеты программ базируются на использовании схемы, разработанной автором в 80-х годах. С тех пор схемы типа Годунова (в более широком смысле – противопотоковые методы) приобрели еще большую популярность и получили дальнейшее развитие. Такие методы чрезвычайно разнообразны, наиболее известными из них являются методы повышенной точности, такие как MUSCL, PPM, WENO и разрывный метод Галеркина. Поэтому данная глава посвящена оценке эффективности схемы Годунова-Колгана-Родионова в контексте современных методов сквозного счета. Но прежде чем перейти к рассмотрению этого вопроса, обратим внимание на важный исторический аспект.

За рубежом пионером методов повышенной точности, базирующихся на схеме Годунова, является Брам Ван Лир с его схемой MUSCL, опубликованной в 1979-м году [13]. Обладая многими научными заслугами и большим авторитетом, он с определенного времени значительное внимание уделяет изложению истории так называемых «high-resolution upwind methods», в том числе начальной стадии их развития. Отправным пунктом здесь полагается известная теорема Годунова о невозможности построения монотонной схемы с порядком аппроксимации выше первого.

В обзоре 1997-го года [196] Ван Лир отмечает две независимые работы, в которых преодолевается барьер, установленный теоремой Годунова. Это лекция Бориса [197], состоявшаяся в 1971-м году, и доклад самого Ван Лира [198] в 1972-м году. Заметим, что в том же 1997-м году в Мичиганском университете был организован международный симпозиум, посвященный методу Годунова. Сергей Константинович был приглашен на этот симпозиум, где сделал доклад «Воспоминания о разностных схемах» [199, 200]. По окончании симпозиума, председателем которого был Ван Лир, Сергею Константиновичу Годунову была торжественно присуждена степень почетного доктора.

В дальнейшем Ван Лир узнает о работе Колгана [8] 1972-го года и в своих последующих исторических обзорах [74, 201, 202] добавляет его имя к списку первых исследователей, преодолевших барьер теоремы Годунова. Благодаря усилиям Брам Ван Лира, пожелавшего исправить историческую оплошность, в 2011 году статья Колгана

была перепечатана в переводе в *Journal of Computational Physics* [203]. В своей сопровождающей статье [204] Ван Лир рассказал о жизни и работе Колгана и дал развернутый анализ его схемы. При этом он заметил, что схема Колгана совершенно неизвестна за рубежом (что справедливо) и имеет лишь ограниченную известность у себя на Родине (что не так).

Эта и другие неточности статьи [204] побудили автора данной работы написать заметку в *Journal of Computational Physics* [11] и поделиться дополнительной информацией и видением Колгана со стороны его соотечественников. В частности, в этой заметке удалось упомянуть о двух других отечественных работах [205, 206], в которых задолго до работ Бориса, Ван Лира и Колгана были описаны схемы, преодолевшие барьер теоремы Годунова.

Заканчивая этот краткий исторический экскурс уместно дать еще одно пояснение. За рубежом широко известна схема, являющаяся близким аналогом схемы ГКР. Ее называют MUSCL-Нансока или схемой Хэнкока. Хотя она была описана в статьях Ван Лира [207, 208] до публикаций автора по схеме ГКР, но среди отечественных специалистов в области численного моделирования долгие годы оставалась незамеченной. Объясняется это, по-видимому, тем, что аннотации к этим двум статьям не попали в Реферативный журнал Механика, который в то время был основным аккумулятором информации о научных работах в данной области.

4.1. Сравнение с коммерческими и промышленными кодами

Теперь вернемся к основной цели четвертой главы – оценке эффективности схемы ГКР в контексте современных методов сквозного счета. В данном разделе будут представлены несколько примеров сравнения с известными коммерческими и промышленными кодами². В качестве базовых реконструкций в составе схемы ГКР будут использоваться реконструкции-ограничители (1.6) и (1.7), описанные в первой главе. Обозначать варианты схемы будем, соответственно, ГКР-minmod и ГКР-МС (здесь сокращение МС соответствует принятому в книге [148]; МС = *monotonized central-difference reconstruction*).

4.1.1 Расчет обтекания профиля NASA0012 в рамках уравнений Эйлера

Данная задача использовалась в работе [209] для тестирования коммерческих CFD-кодов. Тестирование проводилось на предмет сходимости рассчитанных

² Результаты данного исследования в большем объеме приведены в [109].

аэродинамических характеристик профиля NASA0012 при измельчении расчетной сетки. Поскольку в данной задаче обтекание профиля рассчитывается в рамках уравнений Эйлера, то нет необходимости в сгущении сетки у поверхности. Для расчетов по схеме ГКР использовался тот же набор сеток O-типа, что и в [209]. На рисунке 4.1 показаны фрагменты расчетных сеток с различным сеточным разрешением: $N \times N = 128 \times 128$, 256×256 , 512×512 и 1024×1024 (расчетная область простирается от поверхности профиля до внешнего радиуса $R \approx 150$). Расчеты проводились для двух тестовых случаев, определяемых значениями параметров набегающего потока – числа Маха M и угла атаки α .

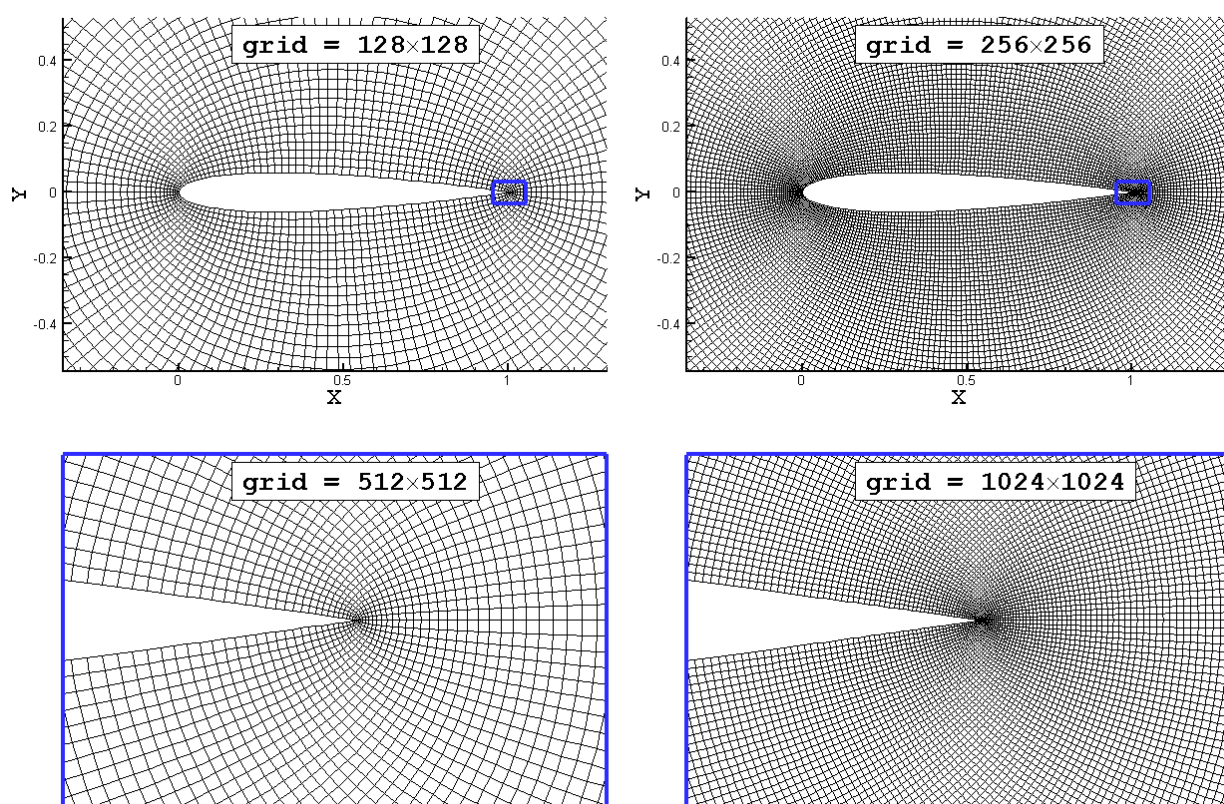


Рисунок 4.1. Расчетная сетка для задачи о невязком обтекании профиля NASA 0012.

Тестовый случай с $M = 0.5$ и $\alpha = 1.25^\circ$ (дозвуковой режим обтекания).

На рисунке 4.2 представлены результаты расчета задачи, полученные по схеме ГКР-МС на сетке $N \times N = 1024 \times 1024$. Видно, что в этом тестовом случае реализуется полностью дозвуковое обтекание профиля без образования ударных волн. На рисунке 4.3 показана сходимость различных методик при измельчении сетки (с увеличением N) по аэродинамическим коэффициентам C_d и C_l (соответственно, коэффициент лобового

сопротивления и коэффициент подъемной силы). Представлены результаты расчетов по схеме ГКР с реконструкциями двух видов и по CFD-кодам: OVERFLOW, CFL3D (данные по ним взяты из [209]) и FLUENT. Расчеты по коду FLUENT проводились только на одной сетке $N \times N = 512 \times 512$, но в двух вариантах – по явному и неявному алгоритмам.

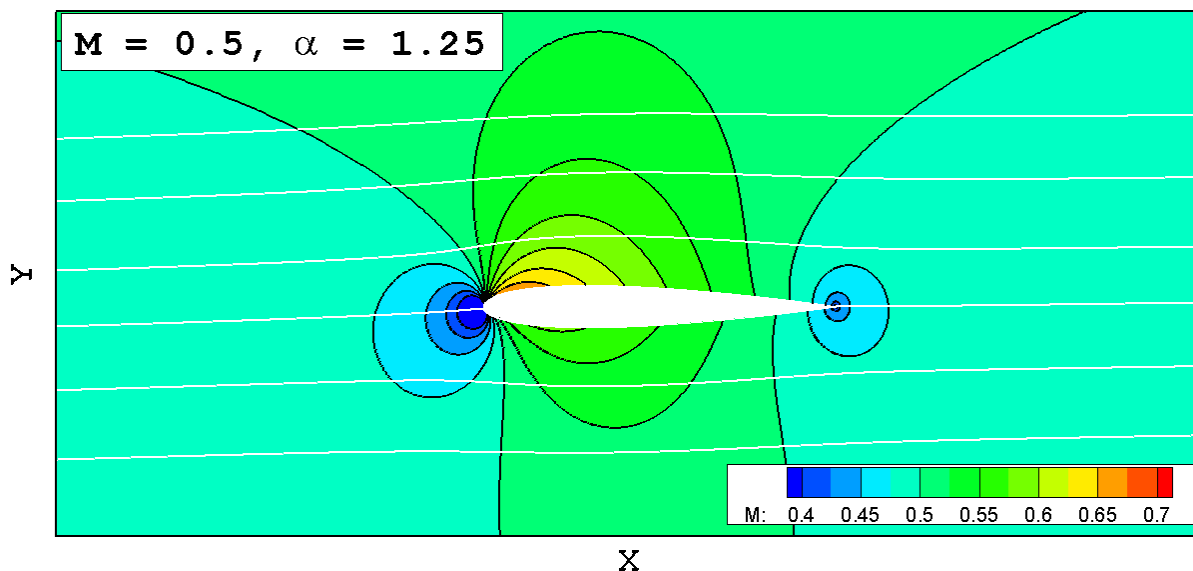


Рисунок 4.2. Изолинии числа Маха, полученные по схеме ГКР-МС при дозвуковом режиме обтекания профиля NASA0012.

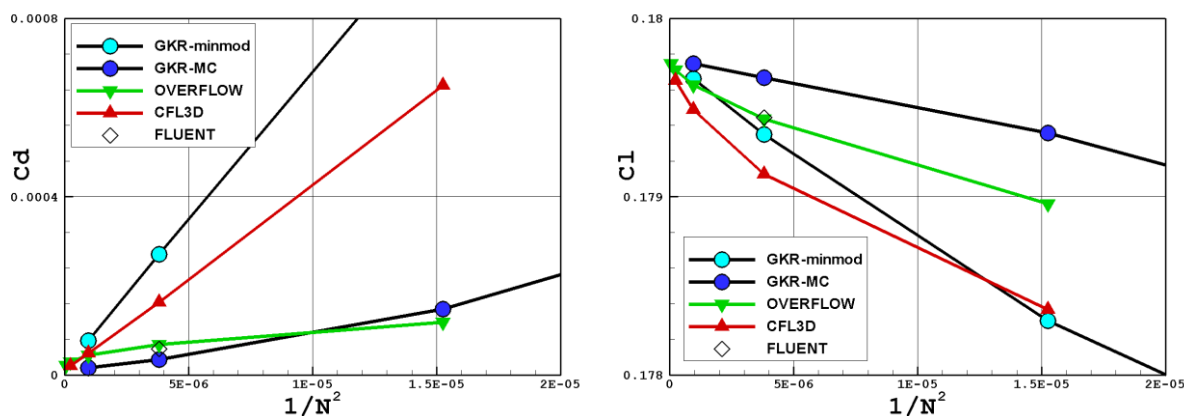


Рисунок 4.3. Сходимость методик по коэффициентам лобового сопротивления и подъемной силы с измельчением сетки (дозвуковой режим обтекания).

Анализируя данные, представленные на рисунке 4.3 можно отметить следующее.

1. Все методики показывают сходимость по сетке к одним и тем же значениям аэродинамических коэффициентов.

2. Схема ГКР обеспечивает сходимость с порядком близким ко второму (коэффициенты C_d и C_l почти линейно зависят от $1/N^2$), а коды OVERFLOW и CFL3D демонстрируют более медленную сходимость по коэффициенту C_l .

3. Использование реконструкции MC вместо *minmod* в схеме ГКР дает существенное уточнение по интегральным аэродинамическим коэффициентам (более чем в 2 раза).

4. Как явный, так и неявный варианты пакета FLUENT обеспечивают примерно такую же точность, как код OVERFLOW, уступая при этом схеме ГКР-MC.

Тестовый случай с $M = 0.8$ и $\alpha = 1.25^\circ$ (трансзвуковой режим обтекания).

Аналогично первому тестовому случаю, на рисунке 4.4 представлены результаты расчета задачи, полученные по схеме ГКР-MC на сетке $N \times N = 1024 \times 1024$. Видно, что в этом тестовом случае обтекание профиля сопровождается образованием двух ударных волн: большей интенсивности на подветренной стороне профиля и малой интенсивности на его наветренной стороне. В потоке за ударной волной большой интенсивности заметна небольшая «рябь», характерная для методов сквозного счета (вопросы подавления осцилляций за фронтом ударной волной будут рассмотрены в пятой главе диссертации).

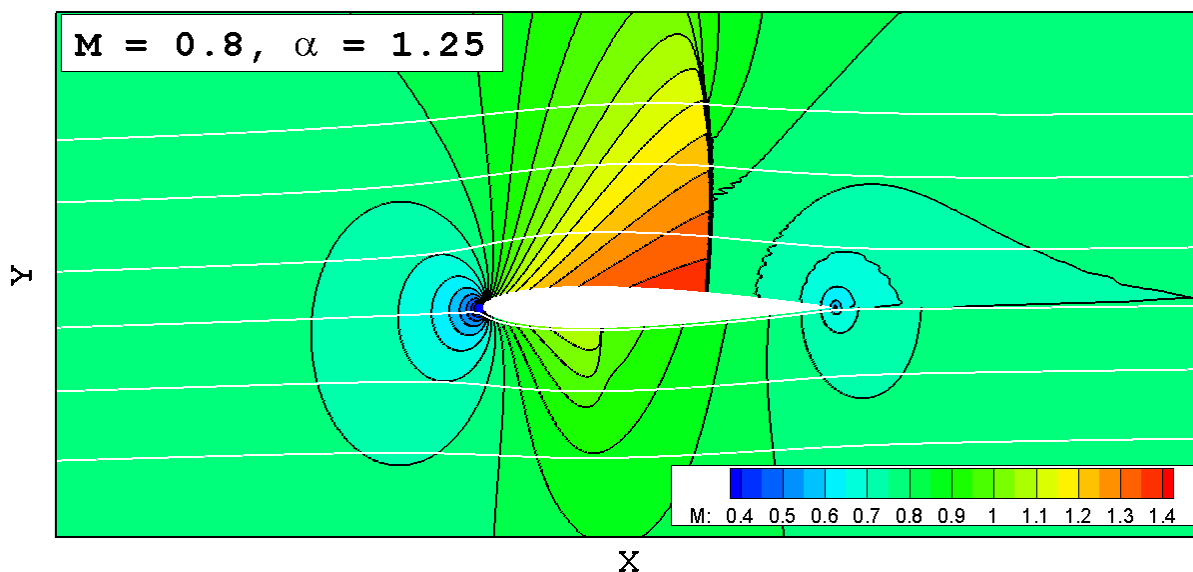


Рисунок 4.4. Изолинии числа Маха, полученные по схеме ГКР-MC при трансзвуковом режиме обтекания профиля NASA0012.

На рисунке 4.5 показана сходимость методик при измельчении сетки по аэродинамическим коэффициентам C_d и C_l (представлены те же методики, что и для первого тестового случая). Анализируя эти данные, можно отметить следующее.

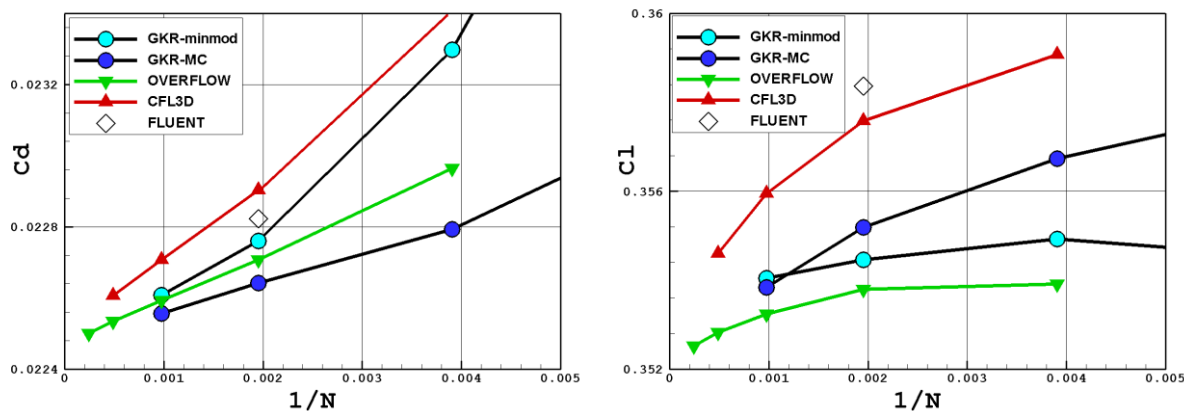


Рисунок 4.5. Сходимость методик по коэффициентам лобового сопротивления и подъемной силы с измельчением сетки (трансзвуковой режим обтекания).

1. Схема ГКР обеспечивает сходимость по сетке с порядком близким к первому (на этих рисунках коэффициенты представлены как функции от $1/N$). По коэффициенту C_l на крупной расчетной сетке реконструкция *minmod* дает более точные результаты, чем реконструкция MC, однако с измельчением сетки ситуация меняется на противоположную. По коэффициенту C_d реконструкция MC всегда предпочтительнее реконструкции *minmod*. Такую зависимость от реконструкции и степени измельчения сетки можно объяснить тем, что в данном тестовом случае присутствуют как ударные волны (где преимущество имеет реконструкция *minmod*), так и области с сильными градиентами параметров без скачков (где преимущество за реконструкцией MC). Вопросы объединения положительных свойств реконструкций MC и *minmod* при расчете ударных волн будут рассмотрены в пятой главе диссертации.

2. Результаты расчета по схеме ГКР (с любой реконструкцией) заметно превосходят по точности коммерческий код CFL3D. По сравнению с кодом OVERFLOW, схема ГКР-MC дает более точные значения коэффициента C_d , но немного менее точные значения коэффициента C_l . В целом можно сказать, что по точности схема ГКР-MC и код OVERFLOW близки.

3. Пакет FLUENT обеспечивают заметно меньшую точность, чем схема ГКР и код OVERFLOW. По этому критерию он близок к коду CFL3D.

4.1.2 Расчет обтекания профиля NACA0012 в рамках уравнений Навье-Стокса

Данная задача отличается от предыдущей тем, что в ней вместо уравнений Эйлера решаются осредненные уравнения Навье-Стокса с привлечением модели турбулентности Спаларта-Аллмараса. При этом используется расчетная сетка со сгущением у поверхности профиля, построенная с опорой на сетку O-типа из предыдущей задачи.

Алгоритм построения сетки заключался в следующем. Идущие от поверхности профиля сеточные линии сохранялись, но распределение точек на них менялось. Первый сеточный интервал у поверхности составлял 3×10^{-6} м (что при длине хорды в 1 м соответствует величине $y^+ \approx 1$). В направлении от поверхности профиля к внешней границе (до $R \approx 150$ м) размер сеточного интервала увеличивался с постоянным коэффициентом $q = 1.03$. В результате общее количество ячеек сетки составило $N \times M = 256 \times 480 = 122880$.

Расчет на построенной таким образом сетке проводился при следующих определяющих параметрах набегающего потока: число Маха $M = 0.7$, угол атаки $\alpha = 1.49^\circ$, давление $p_\infty = 46066$ Па, температура $T_\infty = 248$ К, кинематическая турбулентная вязкость $\nu_T = 2.455 \times 10^{-5}$ м²/с.

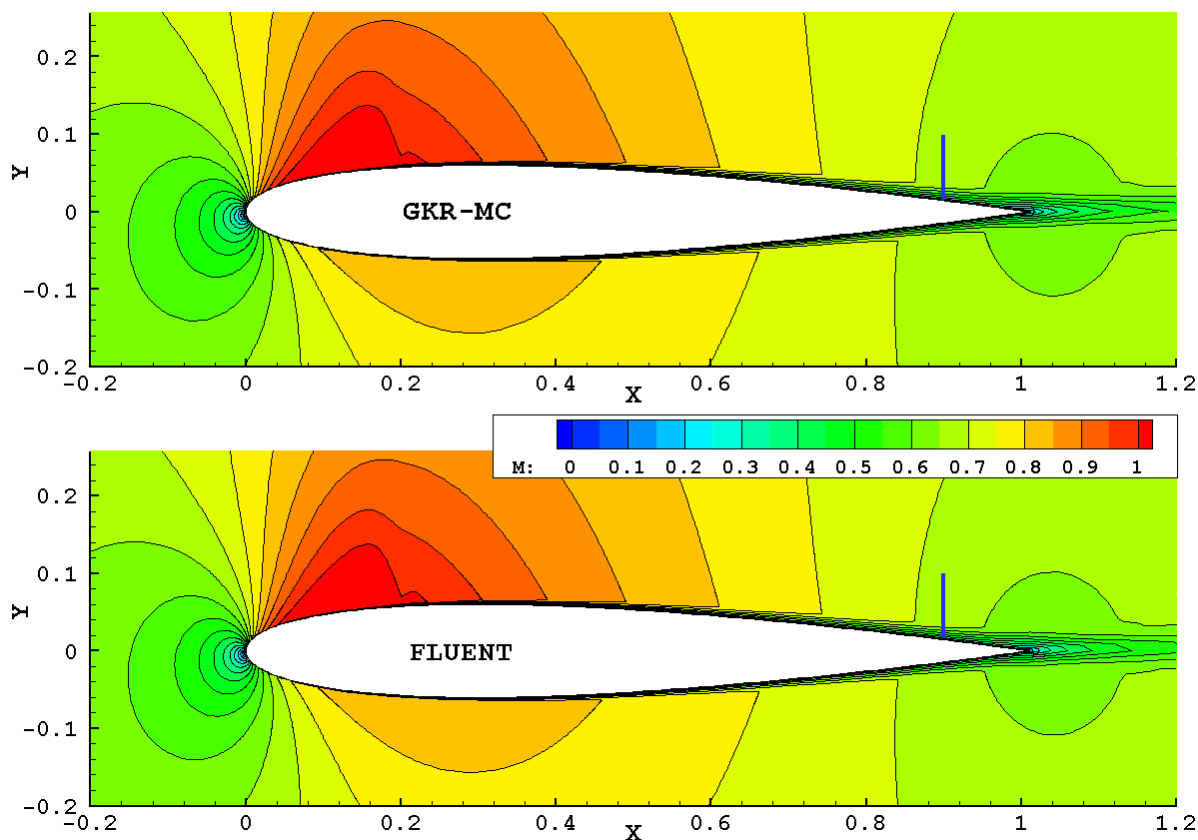


Рисунок 4.6. Изолинии числа Маха, полученные по схеме ГКР-МС и по пакету FLUENT.

Результаты расчета задачи, полученные по схеме ГКР-МС и по коммерческому пакету FLUENT, представлены на рисунке 4.6. Более детальное сопоставление этих двух расчетов по распределению скорости и кинематической турбулентной вязкости в сечении

$x = 0.9$ м пограничного слоя на верхней части профиля показано на рисунке 4.7. Как можно видеть, данные двух расчетов очень хорошо согласуются между собой – визуально они едва различимы. Правда, здесь следует заметить, что схема ГКР – явная схема, для которой локальное число Куранта не может превышать единицу. В стационарных задачах, решаемых методом установления по времени, она обычно требует существенно больше машинного времени, чем в случае использования неявных схем с большими числами Куранта. Поэтому основной областью применения схемы ГКР являются нестационарные задачи. К такому классу задач относится следующий тестовый пример.

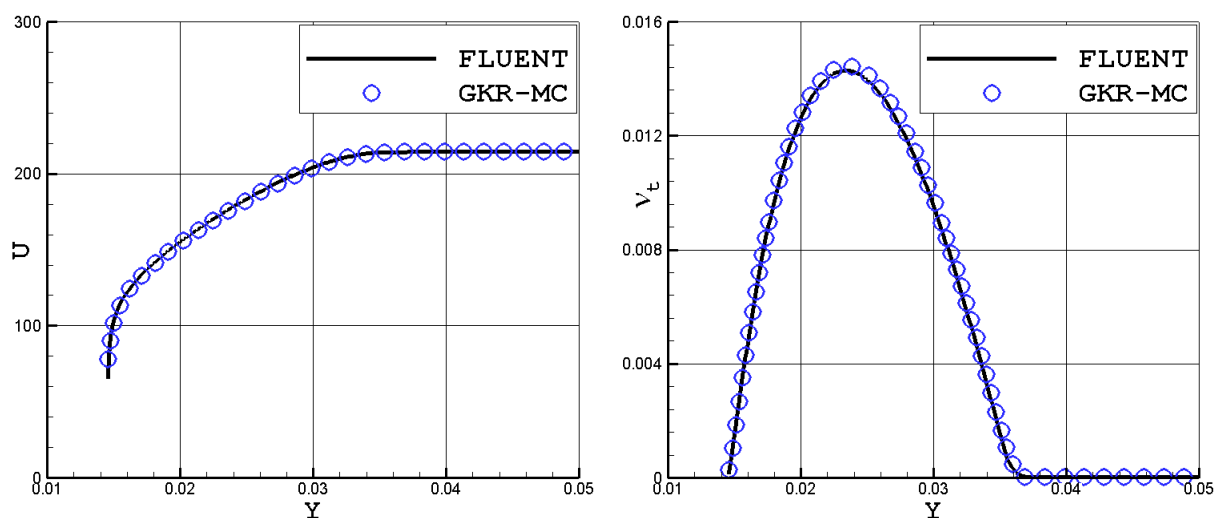


Рисунок 4.7. Распределение продольной составляющей скорости и кинематической турбулентной вязкости в пограничном слое на верхней части профиля (сечение $x = 0.9$ м).

4.1.3 Расчет обтекания цилиндра вязкой жидкостью (вихревая дорожка Кармана)

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

В данном разделе приводится сопоставление расчетов вихревой дорожки Кармана по схеме ГКР с опубликованными в работе [210] данными по тестированию CFD-кода PAV3D в процессе его долгосрочного развития в NASA Langley Research Center для нужд

промышленности и правительства США. Заметим, что код PAV3D использует неявный конечно-объемный метод расчета на многоблочных структурированных сетках.

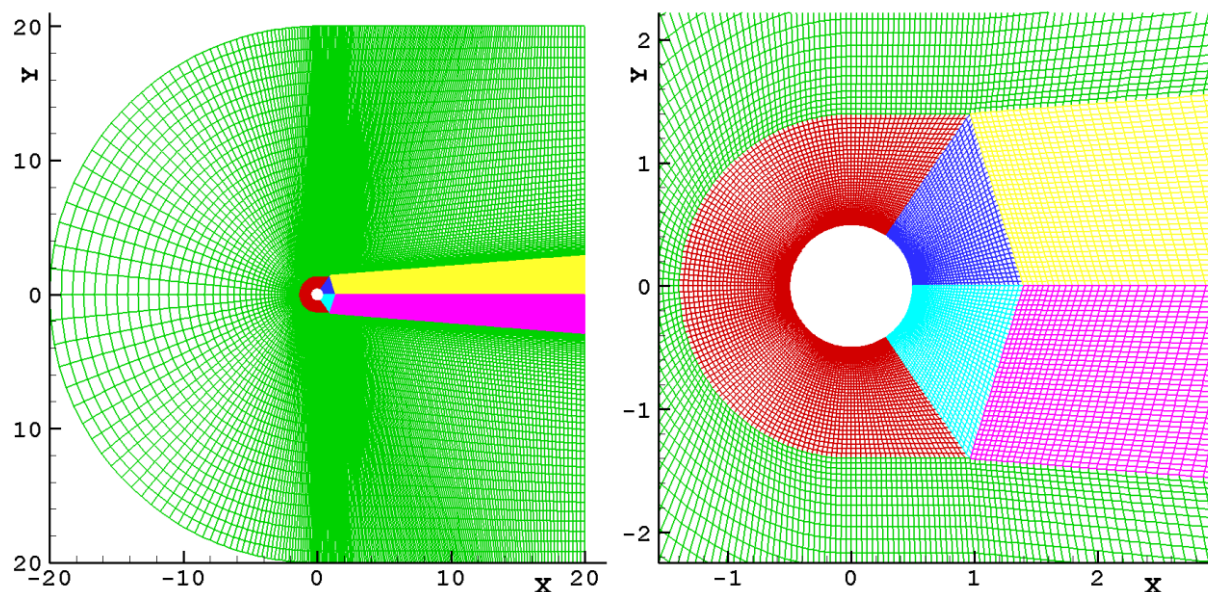


Рисунок 4.8. Расчетная сетка, используемая для расчета дорожки Кармана.

На рисунке 4.8 показана многоблочная расчетная сетка, используемая в работе [210] для расчета вихревой дорожки Кармана. Кроме общего и фрагментарного изображений сетки, в этой работе приводится и общее количество ячеек сетки – 34832. В результате подробного анализа этих данных удалось с хорошей точностью восстановить эту сетку – с соблюдением всех видимых размеров и с точно таким же количеством ячеек. Кроме сетки, показанной на рисунке 4.8 (нормальная сетка), в расчетах использовались две другие сетки – с вдвое меньшим (грубая сетка) и с вдвое большим (подробная сетка) количеством интервалов по каждому из направлений в каждом расчетном блоке.

На внешней границе расчетной области, как и в работе [210], ставилось условие невозмущенного потока с числом Маха $M = 0.3$. Поверхность цилиндра считалась теплоизолированной; на ней ставилось условие непротекания с прилипанием. В качестве набегающего потока моделировался воздух со следующими параметрами невозмущенного потока: скорость $U_\infty = 99$ м/с, давление $p_\infty = 11368$ Па, температура $T_\infty = 270$ К (скорость звука $a_\infty = 330$ м/с), молекулярная вязкость $\mu = 1.7 \times 10^{-5}$ Па·с. Для обеспечения требуемых значений числа Рейнольдса ($Re = 100, 200$ и 1000) диаметр цилиндра брался, соответственно, $D = 1.175 \times 10^{-4}, 2.35 \times 10^{-4}$ и 1.175×10^{-3} м.

Прежде, чем перейти к рассмотрению результатов, полученных по коду PAV3D и по схеме ГКР, отметим некоторые особенности этих методик применительно к рассматриваемой задаче.

Код PAV3D. Этот код 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». Как отмечается в работе [210], вариант с «duel time stepping» позволяет использовать большие шаги по времени; он ориентирован преимущественно на задачи на установление (рассматриваемая здесь задача таковой не является).

Схема ГКР. Расчет вихревой дорожки Кармана по схеме ГКР проводился с использованием реконструкции MC+, являющейся модификацией реконструкции MC. Выбор этой реконструкции обусловлен тем, что в данной задаче в расчетной области имеется большое количество локальных экстремумов различных параметров, а базовая реконструкция MC понижает порядок аппроксимации до первого в окрестности локальных экстремумов. Реконструкция MC+ свободна от этого недостатка. Она впервые была описана автором в работе [106] и имеет следующий вид (здесь используются те же обозначения, что и при описании базовых реконструкций (1.6) и (1.7) в первой главе)

$$(\Delta f_i)^{MC+} = \min\{\Delta f_i, 2\min\{\Delta f_i^+, \Delta f_i^-\}\},$$

где $\Delta f_i = (f_{i+1} - f_{i-1})/2$ и

$$\Delta f_i^+ = \begin{cases} f_{i+1} - f_i, & \text{если } (\Delta f_i \cdot \Delta f_{i+1}) > 0; \\ f_{i+1} - f_i - 0.5\Delta f_{i+1}, & \text{в противном случае;} \end{cases}$$

$$\Delta f_i^- = \begin{cases} f_i - f_{i-1}, & \text{если } (\Delta f_i \cdot \Delta f_{i-1}) > 0; \\ f_i - f_{i-1} - 0.5\Delta f_{i-1}, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Теперь рассмотрим результаты расчетов по обоим методикам.

На рисунке 4.9 представлены поля завихренности, полученные по схеме ГКР на подробной сетке для $Re = 100, 200$ и 1000 . Представленные поля наглядно демонстрируют вихревую структуру дорожки Кармана и ее качественное изменение с ростом числа Рейнольдса. На рисунке 4.10 показана сходимость с измельчением сетки (здесь N – количество интервалов по одному из направлений сетки) по числу Струхала и по амплитуде коэффициента C_y для числа Рейнольдса $Re = 200$. Как можно видеть, схема ГКР обеспечивает очень хорошую сходимость по сетке для обеих величин, которые определяются главным образом параметрами течения вблизи цилиндра. Это говорит о том, что сеточное разрешение у поверхности цилиндра достаточное. Код PAV3D показывает существенно худшую сходимость. Особенно плохими оказываются результаты для метода «duel time stepping», который использует большие шаги по времени и ориентирован на расчет задач на установление.

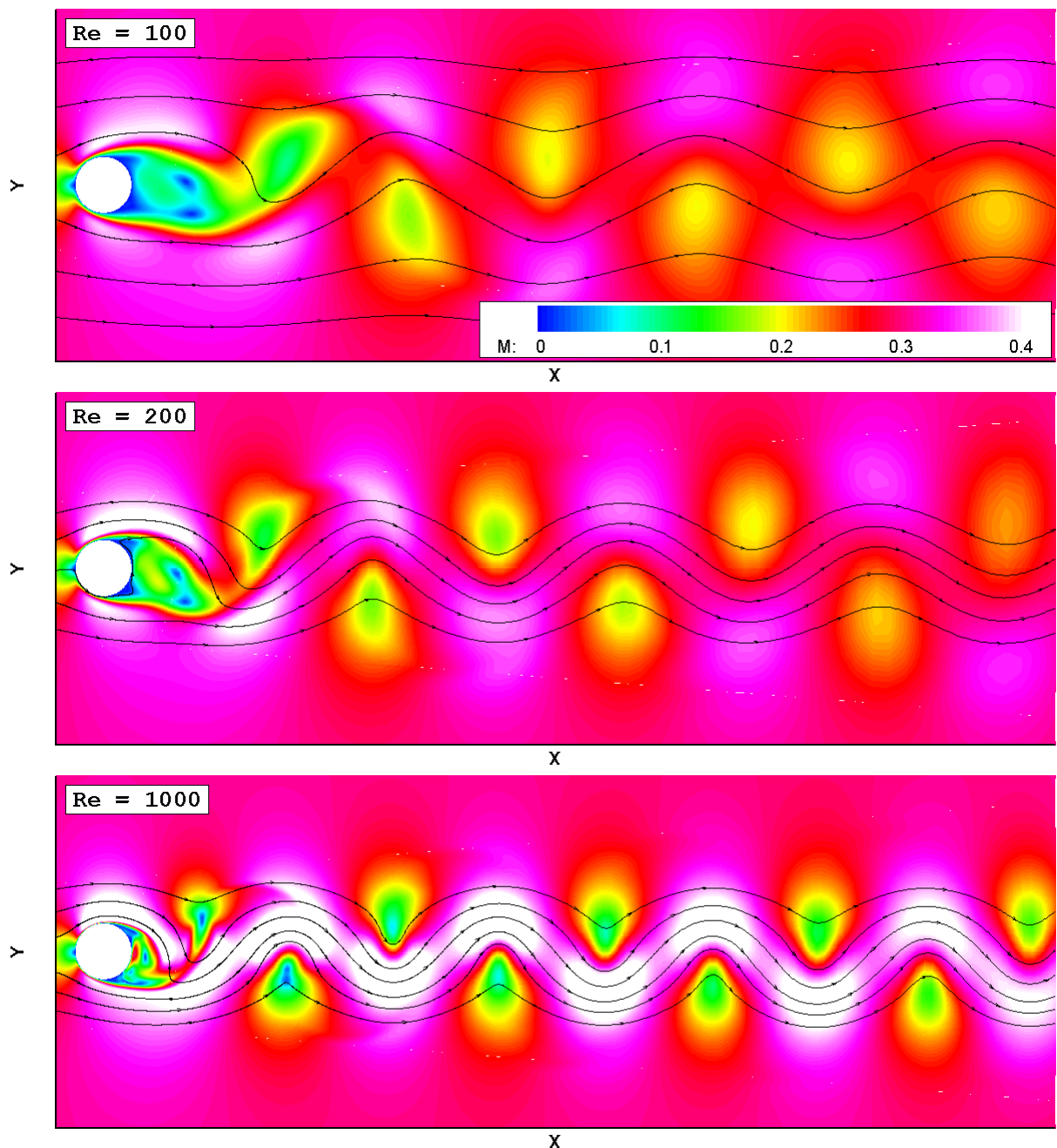


Рисунок 4.9. Поля числа Маха при $Re = 100, 200$ и 1000 , полученные по схеме ГКР-МС+ на подробной сетке.

Рассмотрим теперь рисунок 4.11, на котором расчетные данные по схеме ГКР и двум вариантам кода PAV3D сравниваются с двумя эталонными решениями, показанными на графике цветными кривыми. Эти эталонные решения заимствованы из работ [211, 212]; они были получены с использованием методов высокого порядка точности. Сравнение показывает, что (1) данные расчетов по схеме ГКР очень хорошо согласуются с эталонными решениями, а (2) данные расчетов по коду PAV3D с использованием любого

из неявных алгоритмов интегрирования по времени (dual time stepping или physical time stepping) существенно уступают в точности схеме ГКР.

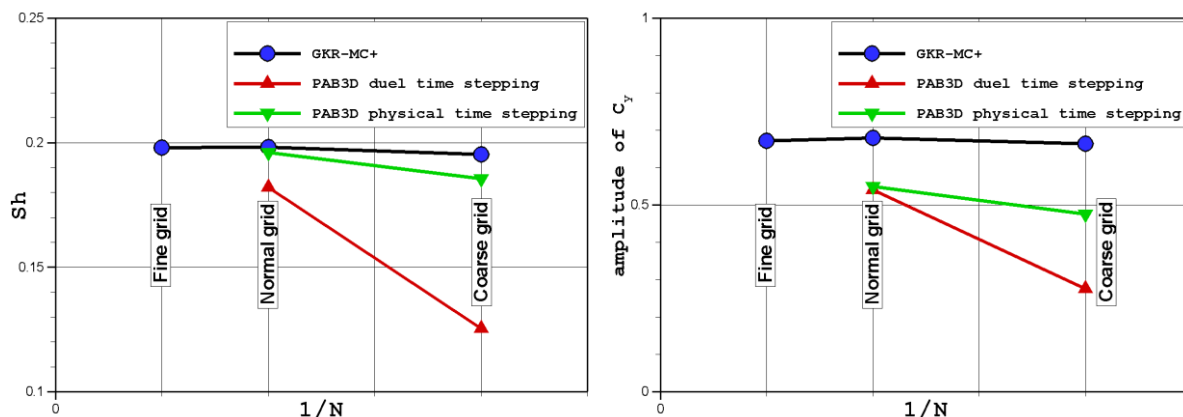


Рисунок 4.10. Сходимость с измельчением сетки по числу Струхалия (слева) и по амплитуде коэффициента C_y (справа) при $Re = 200$.

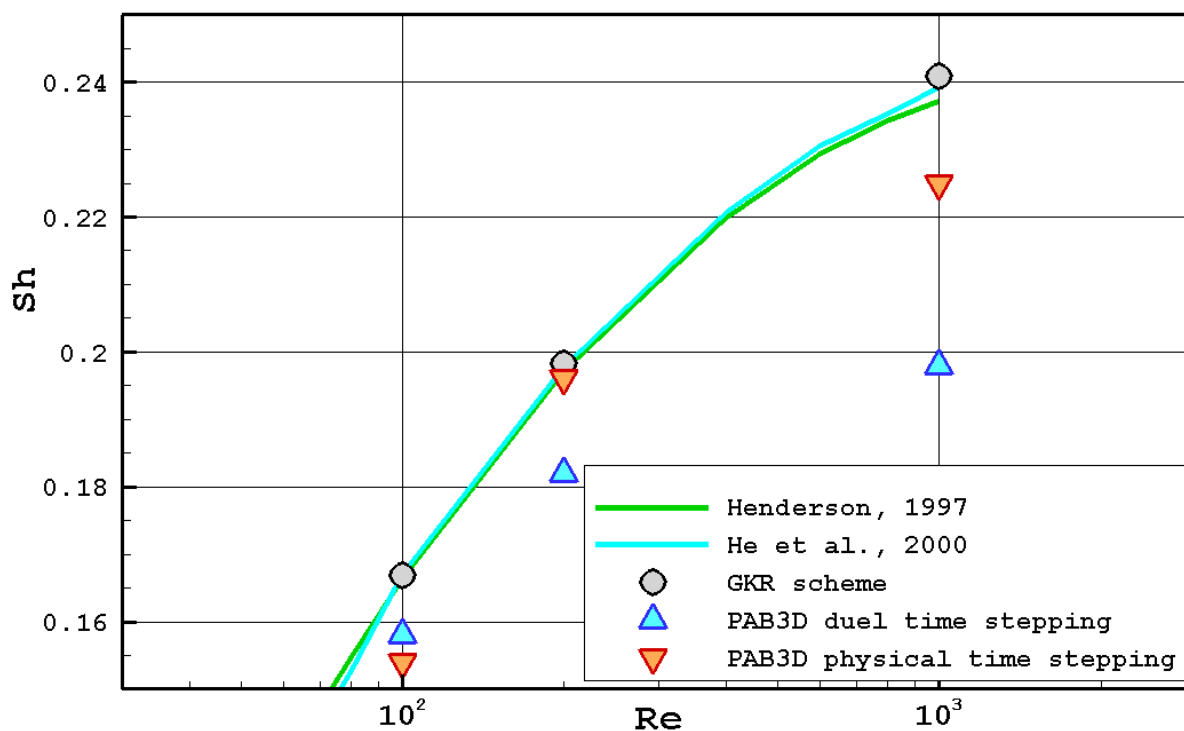


Рисунок 4.11. Зависимость числа Струхалия от числа Рейнольдса.

4.2 Сопоставление со схемой Кабаре

Схема КАБАРЕ была предложена в 1998 году Головизниным и Самарским на примере решения линейного уравнения переноса [52, 53]. Первоначально это была явная трехслойная разностная схема с шаблоном, зависящим от направления потока («противопотоковая» схема). Дальнейшее развитие схемы КАБАРЕ (см. работы [54 – 57] и приведённые в них ссылки) привело к её трансформации: были предложены её двухслойные представления (на разнесённых временных сетках и в виде предиктор-корректор), в схему были введены инварианты Римана и видоизменились способы подавления осцилляций параметров, появляющихся вблизи разрывных решений (нелинейная коррекция потоков вместо диссипатора Паниковского). Новые представления схемы КАБАРЕ позволили провести её обобщения на более сложные задачи, описываемые уравнениями гиперболического типа.

К настоящему времени схема КАБАРЕ протестирована на большом круге задач и используется в качестве инструмента для численного моделирования в различных областях науки. Можно отметить её высокую эффективность при решении задач аэроакустики [56].

В данном разделе проводится сопоставление схемы КАБАРЕ с различными вариантами схемы ГКР³. Описание и анализ схем проводится на примере решения линейного уравнения переноса. Выявляются общие свойства и различия схем. Для схемы КАБАРЕ предлагается новое представление, которое может рассматриваться как разновидность MUSCL-схемы (напомним, что схема ГКР принадлежит к семейству MUSCL-схем). Описываются несколько видов ограничителей, применяемых в сопоставляемых схемах. Для схемы ГКР предлагается новая реконструкция-ограничитель NOLD, обладающая пониженной диссипацией при расчете разрывных решений. 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».

4.2.1 Сравнительный анализ схем КАБАРЕ и ГКР

Описание схем и анализ их свойств будем проводить на примере решения линейного уравнения переноса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (4.1)$$

³ Более детально результаты данного исследования описаны в [110].

с постоянным коэффициентом $a > 0$. Будем решать задачу Коши, когда в области $t > 0$, $-\infty < x < \infty$ ищется функция $u(x, t)$, удовлетворяющая уравнению (1) и начальному условию $u(x, 0) = u_0(x)$, где $u_0(x)$ - заданная функция. При проведении тестовых расчётов ограничимся рассмотрением ступенчато-периодических функций $u_0(x)$, когда для любого x выполняется равенство $u_0(x + L) = u_0(x) + A$, где L и A – постоянные величины.

В качестве расчётной сетки будем использовать равномерную пространственно-временную дискретизацию расчётной области с шагами $h = L / N$, $\tau = T / M$, где N и M – целые числа (случай с неравномерной пространственной дискретизацией будет рассмотрен в разделе 4.2.4).

Число Куранта будем обозначать через $\nu \equiv a\tau / h$.

Схема КАБАРЕ. К настоящему времени предложено несколько представлений схемы КАБАРЕ, среди которых запись в форме предиктор-корректор является наиболее универсальной (она в частности позволяет проводить расчёты с переменным шагом по времени). При такой форме записи предполагается, что на нижнем временном слое имеются два набора величин – консервативные и потоковые. Полный цикл пересчёта этих величин на верхний временной слой состоит из следующих этапов [56, 57].

Этап 1 (шаг предиктор). На этом этапе вычисляются значения консервативных величин на промежуточном временном слое по формуле

$$\frac{u_i^{n+1/2} - u_i^n}{0.5\tau} + a \frac{u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n}{h} = 0. \quad (4.2)$$

Этап 2 (экстраполяция). На втором этапе находятся значения потоковых величин на верхнем временном слое путем экстраполяции, учитывающей «направление потока» (у нас $a > 0$)

$$u_{i+1/2}^{n+1} = 2u_i^{n+1/2} - u_{i-1/2}^n. \quad (4.3)$$

Этап 3 (шаг корректор). На заключительном этапе вычисляются значения консервативных величин на верхнем временном слое по формуле

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^{n+1/2}}{0.5\tau} + a \frac{u_{i+1/2}^{n+1} - u_{i-1/2}^{n+1}}{h} = 0. \quad (4.4)$$

Трёхслойное представление. Следует заметить, что первоначальный, трёхслойный вариант схемы КАБАРЕ оперировал только с потоковыми величинами и состоял из одной формулы. Применительно к рассматриваемой линейной задаче и в принятых нами обозначениях она записывается как

$$\frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1/2}^{n+1} - u_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{u_{i-1/2}^n - u_{i-1/2}^{n-1}}{\tau} \right) + a \frac{u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n}{h} = 0. \quad (4.5)$$

Эквивалентность двух представлений. В случае решения линейных уравнений форма предиктор-корректор схемы КАБАРЕ (4.2) – (4.4) даёт те же значения потоковых величин, что и её первоначальная форма (4.5). Эквивалентность двух представлений схемы КАБАРЕ позволяет переносить результаты анализа, проведённого для простого, трехслойного представления схемы, на её более сложное представление в форме предиктор-корректор. Такой анализ, в частности, позволяет легко показать, что схема КАБАРЕ устойчива при числах Куранта $\nu < 1$ и точна при двух его значениях: $\nu = 1/2$ и 1. Разложением уравнения (4.5) в ряд Тейлора можно получить аппроксимацию уравнения (4.1) с точностью до членов второго порядка малости

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{(1-\nu)(1-2\nu)}{12} ah^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(h^3). \quad (4.6)$$

Схема ГКР. В случае решения уравнения (4.1) с $a > 0$ схему ГКР можно свести к аппроксимации

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} + a \frac{u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}}{h} = 0, \quad (4.7)$$

в которой осреднённые по боковой грани значения параметра u выражаются через

$$u_{i+1/2}^{n+1/2} = u_i^n + \frac{(1-\nu)}{2} \Delta u_i^n. \quad (4.8)$$

Входящие в (4.8) значения приращений Δu_i^n определяются из реконструкции по известным значениям u_i^n .

Схема Фромма. В случае гладкой функции $u_0(x)$ для реконструкции можно использовать простые центральные разности без каких-либо ограничителей, а именно

$$\Delta u_i^n = (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) / 2 \quad (4.9)$$

Формула (4.9) даёт значение приращения u в ячейке с точностью до $O(h^3)$, а вычисленной на его основе производной $\partial u / \partial x$ с точностью до $O(h^2)$. Если схему (4.7) – (4.9) расписать относительно консервативных величин, то для рассматриваемого линейного уравнения получается схема Фромма [213], которая была описана ещё до появления схем MUSCL-типа. Эта схема устойчива при $\nu < 1$ и точна при $\nu = 1$. Здесь следует заметить, что все схемы типа MUSCL точны при $\nu = 1$; это следует непосредственно из (4.7) и (4.8), независимо от значений Δu_i^n .

Оказывается, что разложение схемы Фромма в ряд Тейлора с точностью до $O(h^2)$ совпадает с разложением схемы КАБАРЕ – выражением (4.6); отличие схем начинается с членов третьего порядка малости. Поэтому заметная разница в использовании этих двух

схем будет наблюдаться в трех случаях: (1) при расчётах на грубой сетке, (2) при числах Куранта близких к 0.5 (при $\nu = 1/2$ схема КАБАРЕ точна, а схема Фромма имеет третий порядок точности) и (3) на разрывных решениях (этот случай будет рассмотрен позднее).

Представление схемы КАБАРЕ в виде MUSCL-схемы. Путем несложных преобразований (см. [110]) можно показать, что схема КАБАРЕ может быть записана в виде MUSCL-схемы, если в последней приращение u внутри ячейки на новом слое рассчитывать по формуле

$$\Delta u_i^{n+1} = 2(u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}) - \Delta u_i^n \quad (4.10)$$

Эту формулу можно рассматривать как реконструкцию нового вида, а полученную на её основе схему (т.е. схему (4.7), (4.8), (4.10)) считать разновидностью MUSCL-схемы, обладающей индивидуальными особенностями. Два представления схемы КАБАРЕ – в форме предиктор-корректор и в форме MUSCL-схемы, будут давать одинаковые значения консервативных величин, если начальные, «стартовые» данные для расчётов по обоим представлениям согласованы (эквивалентность двух представлений).

4.2.2 Ограничители в схемах КАБАРЕ и ГКР

Схема КАБАРЕ. В первоначальном, трехслойном представлении схемы КАБАРЕ осцилляции параметров вблизи разрывов подавлялись при помощи так называемого диссипатора Паниковского [53], действующего по принципу искусственной вязкости. Позднее, уже применительно к двухслойным представлениям, было найдено более эффективным использовать процедуру нелинейной коррекции потоков (FC = Flux Correction), основанную на ограничении потоковых величин [54].

Применительно к представлению схемы в виде предиктор-корректор процедура FC вводится после второго этапа расчёта и заключается в ограничении величин $u_{i+1/2}^{n+1}$. Требуется, чтобы их значения не выходили за рамки, определяемые величинами на нижних слоях из «области влияния». В нашем случае ($a > 0$) процедура FC может быть записана в следующем виде

$$(u_{i+1/2}^{n+1})^{FC} = \text{median}(u_{i+1/2}^{n+1}, u_{i+1/2}^n, u_i^{n+1/2}) \quad (4.11)$$

Здесь используется функция median , которая впервые была введена Хьюном [214]. Она выбирает из трех чисел (аргументов функции) то, которое лежит между двумя оставшимися (если хотя бы два аргумента равны, то их величина и будет выбрана «медианой»). Функцию median можно выразить через функцию minmod :

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

В работе [215] показано, что схема КАБАРЕ с нелинейной коррекцией потоков (4.11) сохраняет монотонность решения при числах Куранта $\nu < 1/2$. Для распространения этого свойства на всю область устойчивости схемы, $\nu < 1$, необходима дополнительная коррекция – либо консервативных величин (этот способ упоминается в [55]), либо снова потоковых величин, но уже после шага корректор (этот способ описан в [216]). Поскольку двойная коррекция в схеме КАБАРЕ ещё не нашла практического применения в сложных нелинейных задачах, в последующих тестах будет использоваться только одинарная коррекция (4.11).

Следует также заметить, что в тех расчётных точках, где применение ограничителя (4.11) приводит к изменению потоковой величины, порядок точности схемы КАБАРЕ снижается. Чтобы ослабить этот эффект, используют модифицированную процедуру FC со свободным параметром [55]. Использование ненулевого значения этого настроечного параметра приводит к ослаблению действия ограничителя (4.11). В результате в областях гладкости решения точность улучшается, но на разрывных решениях свойство сохранения монотонности решения уже не гарантируется. Такая модификация ограничителя (4.11) в данной работе также тестироваться не будет.

Схема ГКР. Применительно к схеме ГКР будут рассмотрены ограничители двух видов – MC и NOLD. Первый ограничитель был описан раньше, но для удобства дальнейшего изложения мы его выпишем еще раз.

Ограничитель MC. Применительно к решению линейного уравнения (4.1) этот ограничитель имеет вид

$$(\Delta u_i)^{MC} = \min\text{mod}[\Delta u_i, 2\min\text{mod}(\Delta u_{i-1/2}, \Delta u_{i+1/2})] \quad (4.12)$$

где $\Delta u_i = (u_{i+1} - u_{i-1})/2$ и $\Delta u_{i+1/2} = u_{i+1} - u_i$.

Ограничитель NOLD. Ограничитель (4.12) (как и большинство других ограничителей) действуют на базовую величину (центральную разность) по принципу ограничения сверху. Теперь мы рассмотрим более «умный» ограничитель, который в некоторых особых случаях может сработать и как ограничитель снизу (т.е. увеличить базовую величину); он был впервые описан в работе [110], где назван NOLD-ограничителем (NOLD = Non-Oscillatory Low-Dissipative). Этот ограничитель имеет вид

$$(\Delta u_i)^{NOLD} = \begin{cases} \text{median}[\Delta u_i, \Delta u_i^{\min 2}, \Delta u_i^{\max 2}], & \text{если } \Delta u_i^{\min 2} < \Delta u_i^{\max 2}; \\ \min\text{mod}[\Delta u_i^{\min 2}, \Delta u_i^{\max 2}], & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (4.13)$$

где

$$\Delta u_i^{\min 2} = \max(2\Delta u_{i+1/2} - \Delta u_{i+1}^{\max}, 2\Delta u_{i-1/2} - \Delta u_{i-1}^{\max}), \quad \Delta u_i^{\max} = \max(0, \Delta u_{i-1/2}, \Delta u_{i+1/2}),$$

$$\Delta u_i^{\max 2} = \min(2\Delta u_{i+1/2} - \Delta u_{i+1}^{\min}, 2\Delta u_{i-1/2} - \Delta u_{i-1}^{\min}), \quad \Delta u_i^{\min} = \min(0, \Delta u_{i-1/2}, \Delta u_{i+1/2}).$$

4.2.3 Тестирование схем КАБАРЕ и ГКР

Рассмотрим решение линейной задачи с периодической начальной функцией $u_0(x) = \sin^2(\pi x/L)$ (синусоида в полуплоскости $u > 0$). На рисунке 4.12 приведены результаты расчёта задачи до момента времени $T = 10L/a$ с различным сеточным разрешением (N – количество ячеек, приходящихся на расчётную область $[0, L]$). Показаны расчетные профили для сеточного разрешения $N = 10$ (грубая сетка) и интегральные отклонения по норме L^1 расчётных данных от точного решения при числе Куранта $\nu = 0.25$.

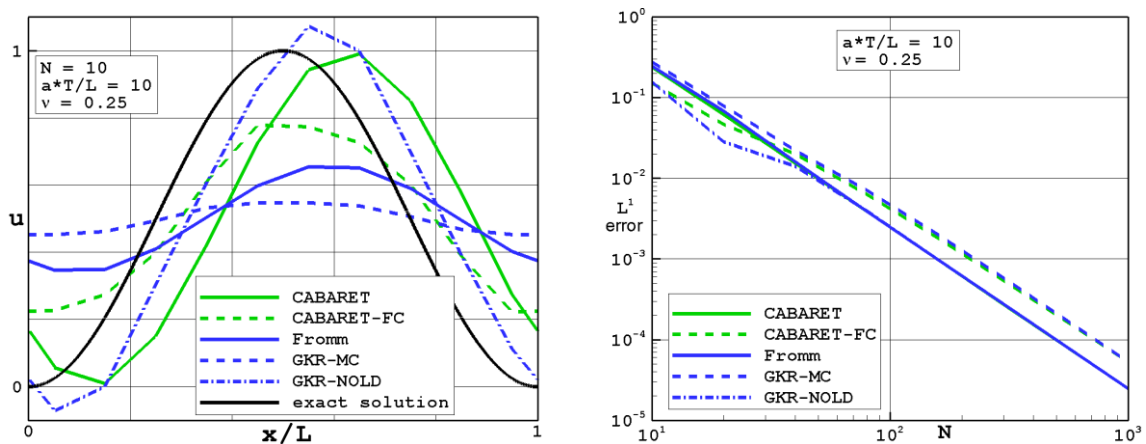


Рисунок 4.12. Сопоставление схем на равномерной сетке для случая синусоидальной функции $u_0(x)$: слева – профиль функции; справа – интегральная ошибка в зависимости от сеточного разрешения.

Как можно видеть, расчёты на грубой сетке по схеме КАБАРЕ (зеленая сплошная линия) и по схеме Фромма (синяя сплошная линия) приводят к заметному отклонению от точного решения (черная сплошная линия). Только схема КАБАРЕ, несмотря на ощутимый фазовый сдвиг, хорошо воспроизводит амплитуду колебаний, а схема Фромма её сильно уменьшает. Отметим, что при $N = 10$ и $\nu = 0.25$ обе схемы дают близкую интегральную погрешность – около 25%. С измельчением сетки точность расчётов заметно повышается – это уже проценты или доли процентов. В этом случае обе схемы дают очень близкие результаты.

Применение ограничителя в схеме КАБАРЕ (зеленая штриховая линия) приводит к заметному понижению амплитуды колебаний; тем не менее, она остается выше амплитуды, полученной по схеме Фромма. Применение ограничителя MC в схеме ГКР

(синяя штриховая линия) даёт тот же эффект – по сравнению со схемой Фромма амплитуда падает ещё больше. В то же время применение NOLD-ограничителя (синяя штрих-пунктирная линия) даже приводит к результатам, не уступающим по точности схеме КАБАРЕ без ограничителя. С измельчением расчётной сетки данные, полученные по схемам ГКР-NOLD, Фромма и КАБАРЕ становятся практически идентичными и соответствуют второму порядку сходимости к точному решению. Схемы ГКР-МС и КАБАРЕ-FC обеспечивают меньшую точность.

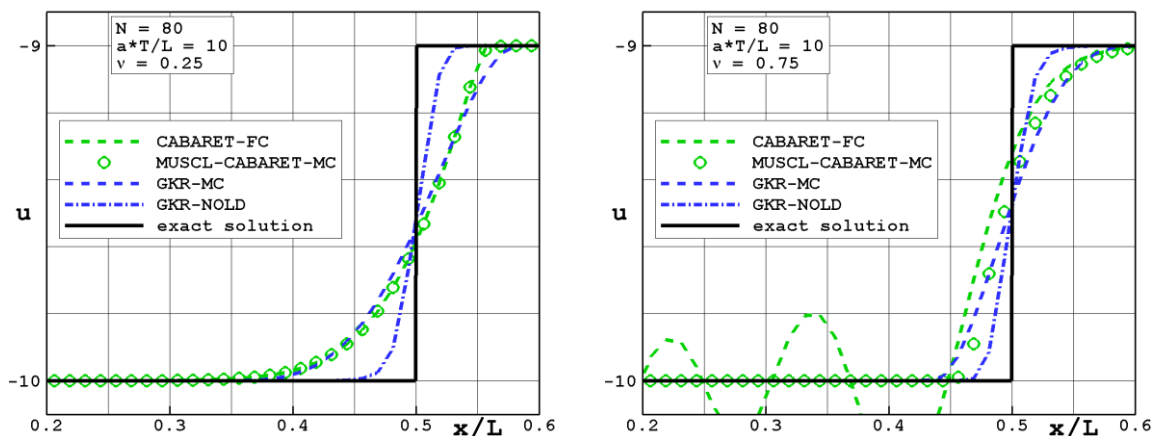


Рисунок 4.13. Сопоставление схем на равномерной сетке для случая с разрывной функцией $u_0(x)$ при двух чилах Куранта: $\nu = 0.25$ (слева) и $\nu = 0.75$ (справа).

Теперь рассмотрим задачу с разрывной начальной функцией $u_0(x) = 0.5 + 0.5 \operatorname{sgn}(x/L - 0.5)$. На рисунке 4.13 представлены некоторые результаты расчёта задачи с использованием тестируемых схем с ограничителями. Анализируя эти данные можно сделать следующие выводы.

В задаче с разрывом функции схема КАБАРЕ с FC-ограничителем (зеленая штриховая линия) даёт приемлемые результаты только при числах Куранта $\nu < 1/2$. Использование ограничителя MC в MUSCL-представлении схемы КАБАРЕ (зеленые кружки) обеспечивает монотонное поведение решения во всей области устойчивости схемы, $\nu < 1$; при этом в области $\nu < 1/2$ обе версии схемы КАБАРЕ дают почти идентичные результаты. Схема ГКР-МС по точности сопоставима со схемой КАБАРЕ-FC (в области $\nu < 1/2$). Но наилучшие результаты демонстрирует схема ГКР с NOLD-ограничителем. Отметим, что: (1) её погрешность слабо зависит от числа Куранта и (2) порядок сходимости по сетке (см. дополнительные материалы в [110]) у неё близок к первому, что является пределом в задачах с разрывом функции (первый порядок здесь означает, что по мере движения разрыва по сетке он размывается на ограниченное число ячеек).

4.2.4 Расчёты на неравномерной сетке

С практической точки зрения важным является вопрос эффективности схем при расчётах на неравномерной сетке. Поэтому проведем сопоставление точности обсуждаемых схем при решении линейного уравнения (4.1) на сильно неравномерной сетке.

Схема КАБАРЕ. В случае использования пространственно-неравномерной сетки в формулах (4.2), (4.4) и (4.5) схемы КАБАРЕ под величиной h следует понимать локальный шаг h_i . Тогда, непосредственно из трехслойного представления (4.5) видно, что схема КАБАРЕ аппроксимирует уравнение (4.1) со вторым порядком точности.

Схема ГКР. Здесь в формуле (4.7) вместо h используется h_i , а в формуле (4.8) под числом Куранта подразумевается его локальное значение $v_i = a\tau / h_i$. Кроме того, подлежащие ограничению центральные разности (они используются в (4.12) и (4.13)) вычисляются как

$$\Delta u_i = h_i \left[\frac{h_{i-1/2} (u'_x)_{i+1/2} + h_{i+1/2} (u'_x)_{i-1/2}}{h_{i-1/2} + h_{i+1/2}} \right], \quad (u'_x)_{i\pm 1/2} = \frac{\Delta u_{i\pm 1/2}}{h_{i\pm 1/2}}, \quad h_{i\pm 1/2} = \frac{h_i + h_{i\pm 1}}{2}, \quad (4.14)$$

а величины Δu_i^{\min} и Δu_i^{\max} , используемые в NOLD-ограничителе, переписываются в виде

$$\Delta u_i^{\min} = h_i \min(0, (u'_x)_{i-1/2}, (u'_x)_{i+1/2}), \quad \Delta u_i^{\max} = h_i \max(0, (u'_x)_{i-1/2}, (u'_x)_{i+1/2})$$

При расчётах на неравномерной сетке формула (4.14) позволяет вычислять производную $\partial u / \partial x = \Delta u_i / h_i$ в центре ячейки с точностью до $O(h^2)$. Проведенный автором теоретический анализ (см. работу [110]) показал, что при расчете интегральных величин схема ГКР на неравномерной сетке обеспечивает второй порядок точности.

Теперь перейдём к сопоставлению схем на примере тестовых расчётов.

Тестовые расчёты. Тестирование обсуждаемых схем будем проводить на сильно неравномерной сетке с размерами ячеек $h_i = h, 1.5h, 3h$ и $2.5h$, соответственно, для $i = 4k+1, 4k+2, 4k+3$ и $4k+4$, где $k = 0, 1, 2, \dots$. Измельчение сетки будет достигаться уменьшением величины h ; таким образом, характер и степень сеточной неравномерности будут сохраняться. Общее количество ячеек в расчётной области будет выбираться кратным четырём (тогда $N = L / 2h$), а расчётный шаг по времени будет согласован с ограничением по максимальному числу Куранта: $v_* \equiv a\tau / h < 1$.

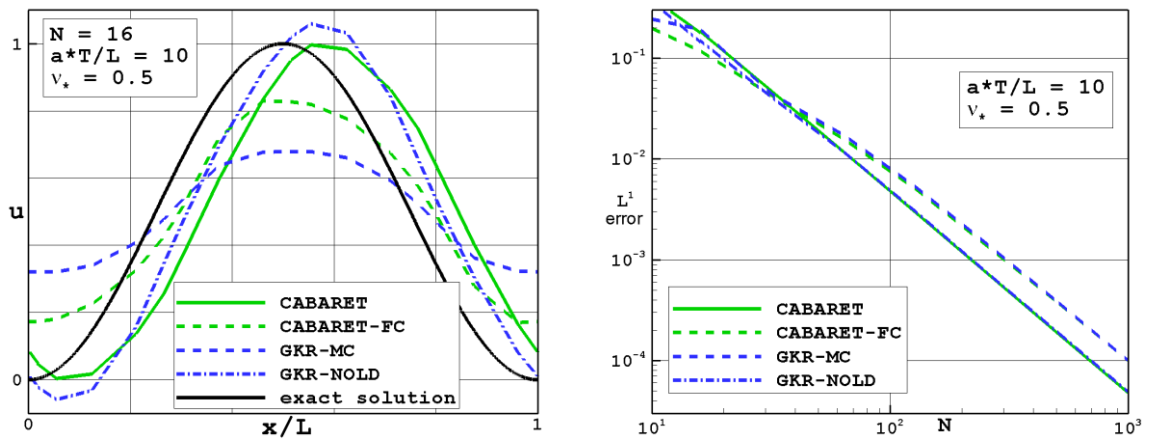


Рисунок 4.14. Сопоставление схем на неравномерной сетке для случая синусоидальной функции $u_0(x)$: слева – профиль функции; справа – интегральная ошибка в зависимости от сеточного разрешения.

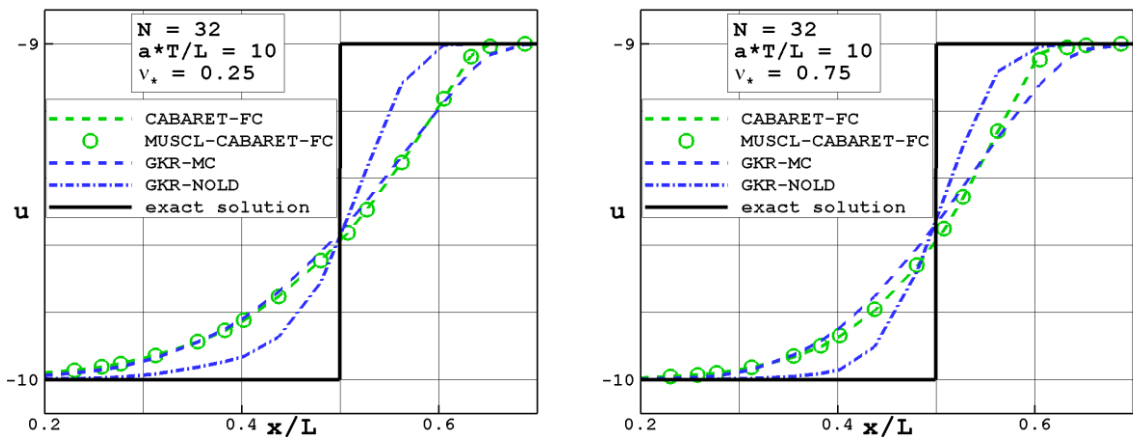


Рисунок 4.15. Сопоставление схем на неравномерной сетке для случая с разрывной функцией $u_0(x)$ при двух чилах Куранта: $\nu = 0.25$ (слева) и $\nu = 0.75$ (справа).

На рисунках 4.14 и 4.15 представлены результаты расчёта на неравномерной сетке двух рассмотренных ранее задач (синусоидальная функция и разрывная функция).

Результаты расчёта задачи с гладкой начальной функцией показаны на рисунке 4.14. Видно, что характер отклонения от точного решения для всех схем остается таким же, что мы наблюдали в расчётах на равномерной сетке. На грубой сетке ($N = 16$) лучшее согласие по амплитуде и форме профиля даёт схема КАБАРЕ без ограничителя; её основная погрешность заключается в фазовом сдвиге функции. Схема ГКР с реконструкцией NOLD немного завывает амплитуду, но демонстрирует чуть меньший фазовый сдвиг. С измельчением сетки эти схемы дают практически неразличимые результаты, соответствующие второму порядку сходимости по сетке. Схема КАБАРЕ с нелинейной коррекцией потока и схема ГКР-МС на грубой сетке заметно снижают амплитуду

колебаний. С измельчением сетки они также сближаются между собой и выходят на порядок точности, близкий ко второму, однако видно их отставание от двух предыдущих схем.

В задаче с разрывом функции (рисунок 4.15) все схемы также демонстрируют результаты, качественно близкие к тем, что были получены ранее для равномерной сетки. Исключение составляет лишь схема КАБАРЕ с FC-ограничителем, которая в данном случае демонстрирует монотонное решение и при $\nu_* = 0.75$. Это объясняется тем, что на неравномерной сетке величина ν_* вычисляется по размеру минимальной ячейки (h), поэтому в большинстве ячеек локальное число Куранта $\nu < 1/2$.

Таким образом, можно заключить, что при использовании сильно неравномерной сетки схема КАБАРЕ не приобретает преимуществ в точности расчёта перед схемой ГКР. Можно лишь отметить, что в одномерных задачах, рассматриваемых в данной работе, схема КАБАРЕ (во всех представлениях) алгоритмически проще обобщается на неравномерные сетки. Если говорить об обобщении схемы КАБАРЕ на неструктурированные сетки в многомерных задачах, то из всех её представлений MUSCL-представление выглядит наиболее перспективно. В этом представлении формулу (4.10) (экстраполяция приращений Δu_i^n) не представляет труда обобщить на произвольные сетки, чего нельзя сказать о представлении предиктор-корректор, в котором потоковые величины экстраполируются от одной боковой грани к другой через центр ячейки.

4.2.5 Расчёт задачи «blast wave»

Перейдем теперь к сопоставлению эффективности обсуждаемых схем при решении известной тестовой задачи «blast wave» [217]. В этом случае решается система нелинейных уравнений газовой динамики, записанных в консервативной форме. Рассматривается одномерное нестационарное течение невязкого совершенного газа с $\gamma = 1.4$ в области $0 < x < 1$. На границах расчётной области ($x = 0$ и 1) ставится условие непроницаемой стенки, а в качестве начальных данных ($t = 0$) выбираются следующие распределения скорости, плотности и давления:

$$u = 0, \quad \rho = 1, \quad p = \begin{cases} 1000, & \text{если } 0 < x < 0.1 \\ 0.01, & \text{если } 0.1 < x < 0.9 \\ 100, & \text{если } 0.9 < x < 1 \end{cases}$$

По каждой тестируемой схеме задача решается многократно – варьируется количество ячеек равномерной сетки, N . Все расчёты проводятся до момента времени $t = 0.038$, где полученные решения сравниваются с «точным» решением (в настоящей работе в качестве

точного решения используются данные эталонного расчёта задачи по схеме ГКР на лагранжевой сетке с $N = 40000$). Особенности применения тестируемых схем к решению данной сильно нелинейной задачи подробно описаны в [110]. Здесь лишь заметим, что реконструкция параметров в схеме ГКР осуществлялась с применением инвариантов Римана. При этом использовалась та же форма инвариантов, что и в работе [54] для схемы КАБАРЕ, а именно

$$\Delta I_1 = \Delta u + \frac{2}{\sqrt{\gamma\rho}} \Delta q, \quad \Delta I_2 = \Delta u - \frac{2}{\sqrt{\gamma\rho}} \Delta q, \quad \Delta I_3 = \Delta s$$

где $q = \sqrt{p}$ и $s = \ln(p / \rho^\gamma)$.

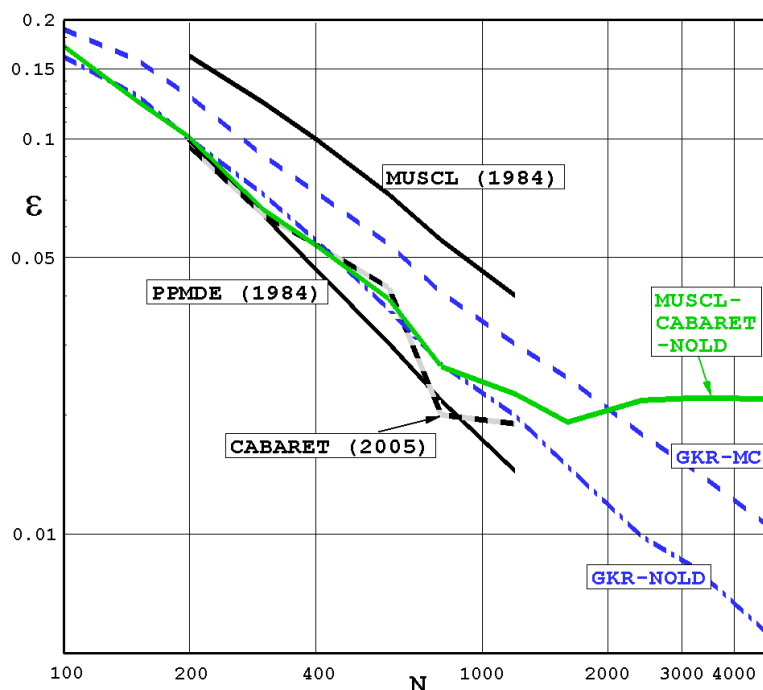


Рисунок 4.16. Зависимость средней относительной ошибки в плотности от количества ячеек сетки при расчете тестовой задачи «blast wave» по различным схемам.

На рисунке 4.16 приведены данные по относительной ошибке в плотности по норме L^1 (величина ε ; алгоритм расчёта ε можно найти в [217]) для различных схем в зависимости от сеточного разрешения. Наряду с данными настоящей работы (вариация N от 100 до 4800) приведены данные работы 1984 года [217] по схемам MUSCL и PPMDE и данные работы 2005 года [54] по схеме КАБАРЕ (вариация N от 200 до 1200).

Как можно видеть, переход в схеме ГКР от ограничителя MC к ограничителю NOLD приводит к существенному уточнению расчета. При этом данные, полученные по схеме ГКР-NOLD, пересекаются с данными, полученными по оригинальной схеме КАБАРЕ (последние имеют очень неравномерный характер и заканчиваются при $N = 1200$).

Вариант схемы MUSCL-CABARET с NOLD-ограничителем на грубой сетке даёт результаты, очень близкие к тем, что были получены по оригинальной схеме КАБАРЕ. После $N = 600$ данные этих двух схем начинают расходиться. По схеме MUSCL-CABARET+NOLD данные получены для большего сеточного разрешения. Из них видно, что с ростом N сходимость у этой схемы вдруг резко ухудшается и останавливается на уровне $\varepsilon \approx 0.02$. Чем это вызвано?

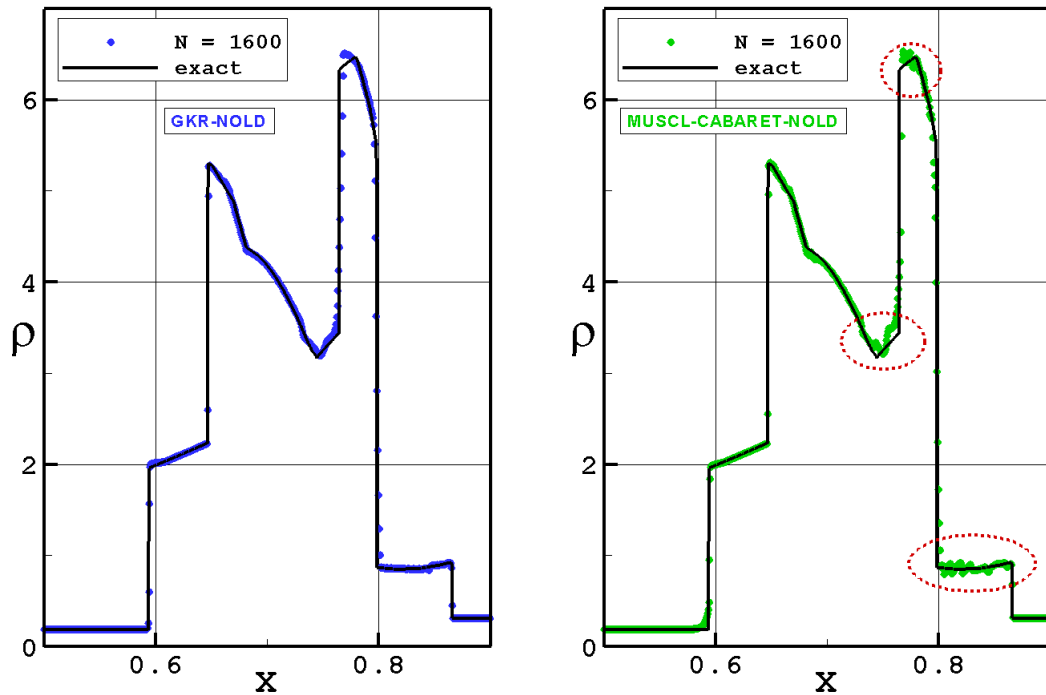


Рисунок 4.17. Профили плотности, полученные по схемам ГКР-NOLD (слева) и MUSCL-КАБАРЕ-NOLD (справа) при сеточном разрешении $N = 1600$.

На рисунке 4.17 показаны профили плотности, полученные по двум схемам при $N = 1600$. Сравнивая эти два профиля можно заметить, что на подробной сетке схема MUSCL-CABARET-NOLD порождает сильные осцилляции решения в области $0.7 < x < 0.9$. Осцилляции можно найти и в решении, полученном по схеме ГКР-NOLD, но их уровень существенно ниже. Именно высокой интенсивностью осцилляций объясняется ухудшение скорости сходимости к точному решению у схемы MUSCL-CABARET-NOLD.

С учетом сказанного есть все основания сомневаться в том, что схема КАБАРЕ, как она реализована в [54], даст хорошую сходимость к точному решению при $N > 1200$. В отсутствии данных, разрешающих это сомнение, можно лишь констатировать, что: (1) в задаче «blast wave» схема КАБАРЕ демонстрирует очень хорошую интегральную точность при $N < 1200$; (2) подобный уровень точности достигается и схемой ГКР-NOLD.

4.3 Схемы типа MUSCL и разрывный метод Галеркина

В последнее время для решения задач гиперболического типа широко применяется разрывный метод Галеркина (см. работы [46 – 51] и приведенные в них ссылки), который является комбинацией классического метода конечных элементов и конечно-объемных схем типа Годунова; его также можно интерпретировать как специфическую модификацию схемы Годунова.

Среди достоинств разрывного метода Галеркина (сокращенно – метода DG; DG = Discontinuous Galerkin), отмечают его способность сочетать высокие порядки аппроксимации с компактностью схемного шаблона. Более того, в работах [218, 219] показывается, что некоторые реализации этого метода обладают уникальным свойством, называемым суперсходимостью. Так, например, при использовании базисных полиномов только 1-го порядка (кусочно-линейная аппроксимация параметров) разрывный метод Галеркина может демонстрировать третий порядок сходимости к точному решению.

Напомним, что в других модификациях схемы Годунова, в схемах MUSCL-типа, использование кусочно-линейной аппроксимации обеспечивает лишь второй порядок точности, а для получения третьего порядка точности требуется переход на кусочно-параболическую аппроксимацию, что в разрывном методе Галеркина соответствует базисным полиномам уже 2-го порядка.

В этой связи интересно вспомнить серию публикаций Брам Ван Лира в 70-х годах прошлого века под общим подзаголовком «Towards the ultimate conservative difference scheme». Последняя, пятая статья [13] этой серии стала классической – в ней описана схема MUSCL, а в предпоследней статье [12] Ван Лир на примере решения линейного уравнения переноса исследовал различные варианты модификации схемы Годунова, один из которых и был им отобран в качестве базового для построения первой MUSCL-схемы. В линейном случае этот вариант обладает повышенной точностью и, оказывается, что с современных позиций его можно интерпретировать как разновидность разрывного метода Галеркина. Более того, на базе этого линейного варианта удастся построить новые версии разрывного метода Галеркина для решения нелинейных и многомерных задач.

В данном разделе проводится сопоставление разрывного метода Галеркина со схемой ГKP (в общем случае – со схемами MUSCL-типа)⁴. Выявляются их взаимосвязь и отличительные особенности. На базе линейного прототипа MUSCL-схемы строится новый, полностью дискретный вариант метода DG. Здесь также обсуждаются вопросы

⁴ Более детально результаты данного исследования описаны в [112, 143].

эффективности метода DG в сравнении со схемой ГKP при решении задач различного класса.

4.3.1 Линейный прототип MUSCL-схемы (схема III)

Обратимся к прототипу первой MUSCL-схемы, названному Ван Лиром схемой III, на примере решения линейного уравнения (4.1).

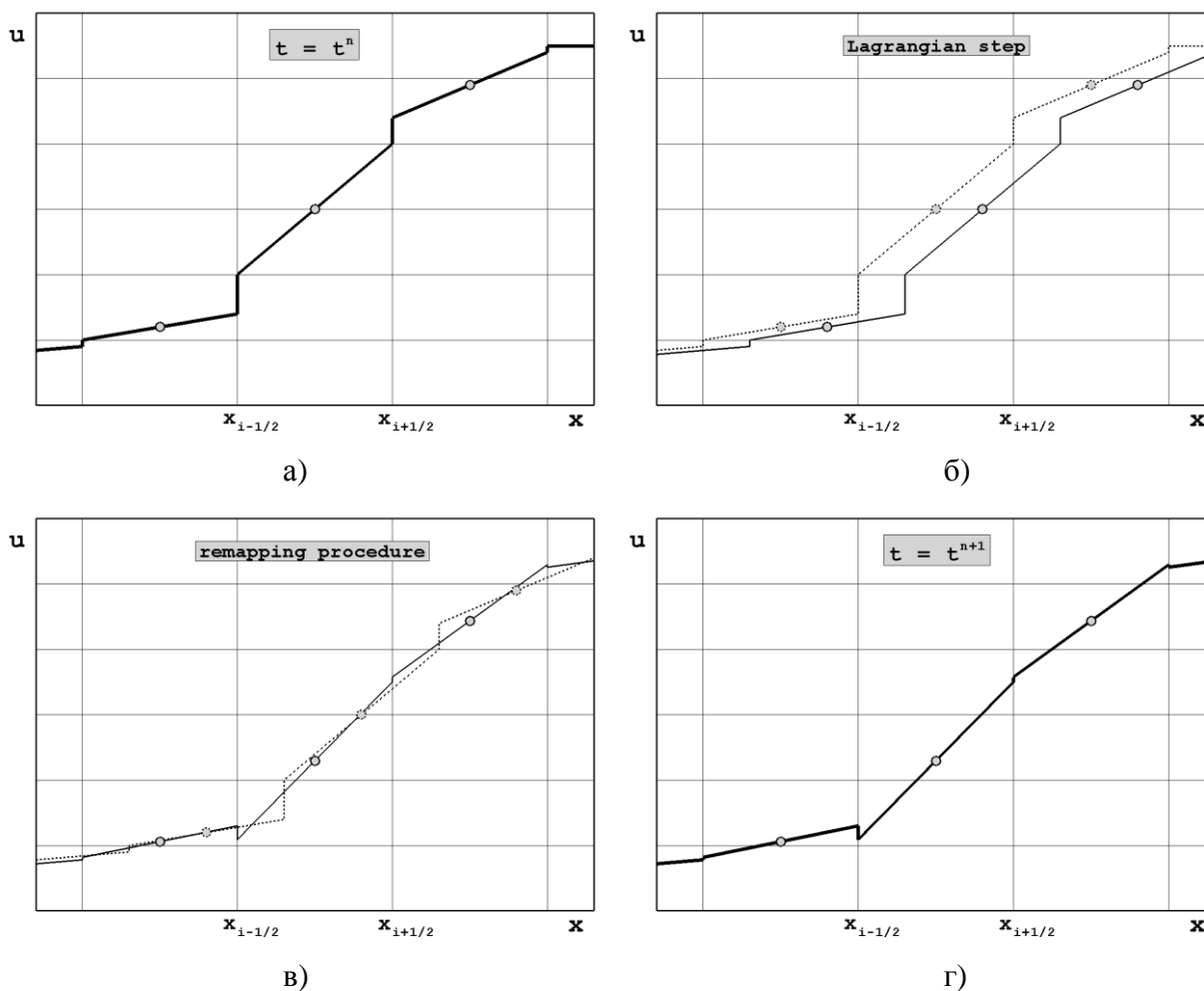


Рисунок 4.18. Расчётный цикл в схеме III: а) кусочно-линейное распределение $u(x)$ на нижнем временном слое $t = t^n$; б) шаг в лагранжевых координатах – сдвиг $u(x)$ на расстояние $a\tau$; в) процедура пересчёта на эйлерову сетку; г) кусочно-линейное распределение $u(x)$ на верхнем временном слое $t = t^{n+1}$.

Пусть на нижнем временном слое задано кусочно-линейное распределение $u(x)$ (рисунок 4.18а). На первом этапе делается шаг в лагранжевых координатах – это простой сдвиг функции на расстояние $a\tau$ (рисунок 4.18б). Заметим, что при этом не происходит никакой потери точности. На следующем этапе делается пересчет с лагранжевой сетки на

эйлерову с использованием метода наименьших квадратов (рисунок 4.18в). В результате мы получаем новое кусочно-линейное распределение функции (рисунок 4.18г), которое имеет минимальное отклонение от распределения на лагранжевой сетке.

Метод наименьших квадратов сводится к равенству средних величин и первых моментов на эйлеровой и лагранжевой сетках, что записывается как

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[u_i^{n+1} + (x - x_i) \frac{\Delta u_i^{n+1}}{h} \right] dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x - a\tau, t^n) dx, \quad (4.15)$$

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[u_i^{n+1} + (x - x_i) \frac{\Delta u_i^{n+1}}{h} \right] (x - x_i) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x - a\tau, t^n) (x - x_i) dx. \quad (4.16)$$

Поскольку $\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (x - x_i) dx = 0$, то уравнения (4.15) и (4.16) трансформируются, соответственно, в выражения для консервативных величин и приращений на верхнем временном слое. С учетом ограничения по числу Куранта, $\nu \leq 1$, они принимают вид

$$u_i^{n+1} = (1 - \nu)u_i^n + \nu u_{i-1}^n - \frac{\nu(1 - \nu)}{2} (\Delta u_i^n - \Delta u_{i-1}^n), \quad (4.17)$$

$$\Delta u_i^{n+1} = 6\nu(1 - \nu)(u_i^n - u_{i-1}^n) + (1 - 3\nu + 2\nu^3)\Delta u_i^n - \nu(3 - 6\nu + 2\nu^2)\Delta u_{i-1}^n. \quad (4.18)$$

Выражение (4.17) эквивалентно выписанным ранее соотношениям (4.7), (4.8) для MUSCL-схемы, а смысл выражения (4.18) будет прояснен чуть позже – в разделе 4.3.3. Сейчас только отметим, что Δu_i^{n+1} в схеме III определяется не из реконструкции по значениям u_i^{n+1} на верхнем временном слое, а из отдельного уравнения, которое обеспечивает наилучшую точность расчета в рамках кусочно-линейной аппроксимации. В результате схема III имеет третий порядок сходимости.

4.3.2 Разрывный метод Галеркина (метод DG)

Рассмотрим основные положения разрывного метода Галеркина на примере решения одномерного нелинейного уравнения, записанного в виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0. \quad (4.19)$$

В разрывном методе Галеркина исходное уравнение (4.19) умножается на пробные функции $\phi_x(x)$, и интегрируется по ячейке. Для базисных полиномов 1-го порядка (с пробными функциями $\phi_0(x) = 1$ и $\phi_1(x) = x - x_i$) получаются два уравнения – для средних величин и приращений:

$$\frac{d(u_i)}{dt} + \frac{1}{h} (f(u_{i+1/2}) - f(u_{i-1/2})) = 0, \quad (4.20)$$

$$\frac{d(\Delta u_i)}{dt} + \frac{6}{h}(f(u_{i+1/2}) + f(u_{i-1/2})) - \frac{12}{h} \left[\frac{1}{h} \int_{-h/2}^{h/2} f(u(x_i + \xi)) d\xi \right] = 0, \quad (4.21)$$

где $\xi = x - x_i$. Здесь потоковые величины на боковых гранях ячейки, $f(u_{i\pm 1/2})$, определяются из решения задачи Римана, а член в квадратных скобках в уравнении (4.21) есть осредненный по ячейке поток.

В линейном случае, когда $f = au$ и $a > 0$, осредненный поток выражается точно через среднюю консервативную величину, а $u_{i+1/2} = u_{i+1/2-}$. Тогда вместо (4.20), (4.21) можно записать

$$\frac{d(u_i)}{dt} + \frac{a}{h}(u_{i+1/2} - u_{i-1/2}) = 0, \quad (4.22)$$

$$\frac{d(\Delta u_i)}{dt} + \frac{6a}{h}(u_{i+1/2} + u_{i-1/2}) - \frac{12a}{h}u_i = 0, \quad (4.23)$$

где $u_{i+1/2} = u_{i+1/2-} = u_i + \Delta u_i / 2$, $u_{i-1/2} = u_{i-1/2-} = u_{i-1} + \Delta u_{i-1} / 2$.

Подчеркнем, что в разрывном методе Галеркина уравнения записываются в полудискретной форме. Для их дискретизации по времени обычно используют методы Рунге-Кутты.

4.3.3 Взаимосвязь схемы III с методом DG

Теперь раскроем связь схемы III с разрывным методом Галеркина. Как уже говорилось, в схеме III используется метод моментов, который приводит к соотношениям для средних величин (4.17) и приращений (4.18).

Соотношение для средних величин (4.17) эквивалентно уравнениям (4.7), (4.8) для MUSCL-схемы. Нетрудно заметить, что такая полностью дискретная форма схемы MUSCL-типа соответствует полудискретному уравнению (4.22). Это означает, что при $\tau \rightarrow 0$ (т.е. при $\nu \ll 1$) уравнение (4.17) переходят в уравнение (4.22).

Оказывается, что соотношения для приращений в схеме III и в разрывном методе Галеркина (соответственно, уравнения (4.18) и (4.23)) связаны между собой аналогичным образом. Действительно, выражение (4.18) можно переписать в виде

$$\frac{\Delta u_i^{n+1} - \Delta u_i^n}{\tau} + \frac{6a}{h}(u_{i+1/2}^{n+1/2} + u_{i-1/2}^{n+1/2}) - \frac{12a}{h}\hat{u}_i^{n+1/2} = 0,$$

где $u_{i+1/2}^{n+1/2}$ – потоковые величины (они определяются соотношением (4.8) и используются в уравнении (4.7)), а $\hat{u}_i^{n+1/2}$ – осредненное значение u по пространственно-временной ячейке (на рисунке 4.19 она выделена затенением; внутри ячейки значения u определяются

согласно точному решению: $u(x, t^n + \Delta t) = u(x - a\Delta t, t^n)$. Для величины $\hat{u}_i^{n+1/2}$ справедлива следующая формула

$$\hat{u}_i^{n+1/2} = u_i^n - \frac{\nu}{2}(\delta_{i+1/2} - \delta_{i-1/2}), \quad \delta_{i+1/2} = u_i^n + \left(\frac{1}{2} - \frac{\nu}{3}\right)\Delta u_i^n, \quad (4.24)$$

из которой, в частности, видно, что $\hat{u}_i^{n+1/2} \rightarrow u_i^n$ при $\tau \rightarrow 0$.

Таким образом, применительно к решению линейного уравнения (4.1) схема III может рассматриваться как полностью дискретная форма разрывного метода Галеркина. С учетом этого, интересно рассмотреть возможность обобщения схемы III на случай решения нелинейных и многомерных задач.

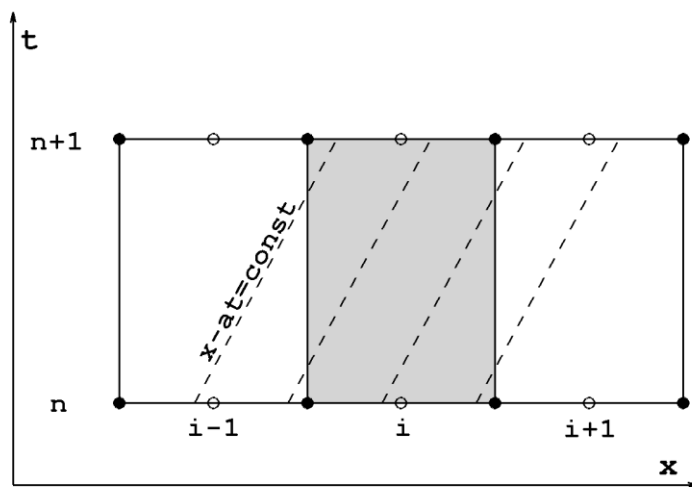


Рисунок 4.19. Схема расчетной сетки.

4.3.4 Обобщение схемы III на случай нелинейных уравнений

Обобщение схемы III на случай решения нелинейного уравнения (4.19) можно провести путем замены полудискретных уравнений (4.20), (4.21) на полностью дискретные уравнения вида

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} + \frac{f_{i+1/2}^{n+1/2} - f_{i-1/2}^{n+1/2}}{h} = 0, \quad (4.25)$$

$$\frac{\Delta u_i^{n+1} - \Delta u_i^n}{\tau} + \frac{6}{h}(f_{i+1/2}^{n+1/2} + f_{i-1/2}^{n+1/2}) - \frac{12}{h}\hat{f}_i^{n+1/2} = 0, \quad (4.26)$$

где $f_{i+1/2}^{n+1/2}$ – поток, осредненный по боковой грани, $\hat{f}_i^{n+1/2}$ – поток, осредненный по ячейке, т.е.

$$f_{i+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau f(u(x_{i+1/2}, t)) dt, \quad \hat{f}_i^{n+1/2} = \frac{1}{\tau h} \int_0^\tau \left[\int_{-h/2}^{h/2} f(u(x_i + \xi, t)) d\xi \right] dt.$$

Уравнение (4.25) можно рассматривать как схему MUSCL-типа. Простым и эффективным вариантом такой схемы (применительно к решению системы нелинейных уравнений) является схема ГКР, где второй порядок точности по времени (вычисление потока $f_{i+1/2}^{n+1/2}$ на промежуточном временном слое) достигается использованием специальной процедуры типа «предиктор».

Уравнение (4.26) решается после уравнения (4.25). Оно дополняет MUSCL-схему, позволяя получать приращения консервативных величин на новом временном слое без привлечения процедуры реконструкции. При решении этого уравнения потоковые величины на гранях уже известны и проблема заключается только в подходящей аппроксимации величины $\hat{f}_i^{n+1/2}$. Такую аппроксимацию, которая обеспечивает третий порядок точности схемы (4.25), (4.26) в нелинейных задачах, можно осуществить различными способами. Рассмотрим некоторых из них.

1. Схема Хьюна. Родство схемы III с разрывным методом Галеркина было впервые продемонстрировано Хьюном в работе [220], где на базе полностью дискретных уравнений метода DG была построена новая схема (названная противопотоковой моментной схемой) для решения нелинейных законов сохранения. В этой схеме для $\hat{f}_i^{n+1/2}$ предложена следующая аппроксимация

$$\hat{f}_i^{n+1/2} = \frac{1}{6} \left[f(\hat{u}_i^{n+1/2} - \Delta u_i^n / 2) + 4f(\hat{u}_i^{n+1/2}) + f(\hat{u}_i^{n+1/2} + \Delta u_i^n / 2) \right], \quad (4.27)$$

где

$$\hat{u}_i^{n+1/2} = \frac{1}{6} \left[u_i^n + 4u_i^{n+1/2} + u_i^{n+1} \right]. \quad (4.28a)$$

Входящая в выражение (4.28a) новая величина $u_i^{n+1/2}$ находится аналогично величине u_i^{n+1} , т.е. в результате решения уравнения (4.25), но с шагом по времени $\tau/2$ вместо τ . Такая вспомогательная расчетная процедура хотя и приводит к дополнительным вычислительным затратам (добавляется полный цикл расчета по MUSCL-схеме), но является необходимой. В линейном случае уравнение (4.27) трансформируется в простое соотношение $\hat{f}_i^{n+1/2} = a\hat{u}_i^{n+1/2}$, а уравнение (4.28a) сводится к выписанной ранее формуле (4.24).

2. В работе [221] вместо выражения (4.28a) предложена альтернативная аппроксимация по времени

$$\hat{u}_i^{n+1/2} = \frac{1}{4} \left[3u_i^{n+1/3} + u_i^{n+1} \right], \quad (4.28b)$$

в которой величина $u_i^{n+1/3}$ находится из решения уравнения (4.25) с шагом по времени $\tau/3$.

3. В работе [112] автор данной диссертации предложил свой, более экономичный вариант обобщения схемы III на случай решения нелинейного уравнения. В нем в качестве вспомогательной процедуры используется не схема MUSCL-типа, а схема Колгана [8], в которой процедура «предиктор» отсутствует. Аппроксимация по времени в новом варианте выглядит следующим образом

$$\hat{u}_i^{n+1/2} = \frac{1}{3} \left[u_i^n + \tilde{u}_i^{n+1/2} + u_i^{n+1} \right], \quad (4.28в)$$

где величина $\tilde{u}_i^{n+1/2}$ рассчитывается по схеме Колгана с шагом $\tau/2$.

В линейном случае аппроксимации (4.28а), (4.28б) и (4.28в) эквивалентны.

4.3.5 Обобщение схемы III на случай решения двумерных задач

Обобщение схемы III на двумерный случай также можно провести с опорой на полностью дискретную форму разрывного метода Галеркина. Покажем это на примере решения двумерного нелинейного уравнения вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} + \frac{\partial g(u)}{\partial y} = 0. \quad (4.29)$$

При использовании прямоугольной сетки с шагами h_x и h_y интегрирование (4.29) с базисными полиномами 1-го порядка ($\phi_0 = 1$, $\phi_1 = x - x_i$ и $\phi_2 = y - y_j$) приводит к следующим разностным соотношениям

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\tau} + \frac{f_{i+1/2,j}^{n+1/2} - f_{i-1/2,j}^{n+1/2}}{h_x} + \frac{g_{i,j+1/2}^{n+1/2} - g_{i,j-1/2}^{n+1/2}}{h_y} &= 0, \quad (4.30) \\ \frac{(\Delta_x u)_{i,j}^{n+1} - (\Delta_x u)_{i,j}^n}{\tau} + \frac{6(f_{i+1/2,j}^{n+1/2} + f_{i-1/2,j}^{n+1/2})}{h_x} - \frac{12 \hat{f}_{i,j}^{n+1/2}}{h_x} + \frac{12(G_{i,j+1/2}^{n+1/2} - G_{i,j-1/2}^{n+1/2})}{h_y} &= 0, \\ \frac{(\Delta_y u)_{i,j}^{n+1} - (\Delta_y u)_{i,j}^n}{\tau} + \frac{6(g_{i,j+1/2}^{n+1/2} + g_{i,j-1/2}^{n+1/2})}{h_y} - \frac{12 \hat{g}_{i,j}^{n+1/2}}{h_y} + \frac{12(F_{i+1/2,j}^{n+1/2} - F_{i-1/2,j}^{n+1/2})}{h_x} &= 0, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} f_{i+1/2,j}^{n+1/2} &= \frac{1}{\tau h_y} \int_0^\tau \left[\int_{-h_y/2}^{h_y/2} f(x_{i+1/2}, y_j + \eta, t) d\eta \right] dt, & g_{i,j+1/2}^{n+1/2} &= \frac{1}{\tau h_x} \int_0^\tau \left[\int_{-h_x/2}^{h_x/2} g(x_i + \xi, y_{j+1/2}, t) d\xi \right] dt, \\ \hat{f}_{i,j}^{n+1/2} &= \frac{1}{\tau h_x h_y} \iiint f(x_i + \xi, y_j + \eta, t) d\xi d\eta dt, & \hat{g}_{i,j}^{n+1/2} &= \frac{1}{\tau h_x h_y} \iiint g(x_i + \xi, y_j + \eta, t) d\xi d\eta dt, \\ F_{i+1/2,j}^{n+1/2} &= \frac{1}{\tau h_y^2} \int_0^\tau \left[\int_{-h_y/2}^{h_y/2} f(x_{i+1/2}, y_j + \eta, t) \eta d\eta \right] dt, & G_{i,j+1/2}^{n+1/2} &= \frac{1}{\tau h_x^2} \int_0^\tau \left[\int_{-h_x/2}^{h_x/2} g(x_i + \xi, y_{j+1/2}, t) \xi d\xi \right] dt. \end{aligned}$$

Как и в одномерном случае, здесь уравнение (4.30) является схемой MUSCL-типа. Однако теперь оно дополняется уравнениями для приращений уже по двум направлениям: пересчет величин $\Delta_x u$ и $\Delta_y u$ на верхний временной слой. Можно заметить, что в этих уравнениях появляются новые члены. В дополнение к потокам на гранях ячеек (величины $f_{i+1/2,j}^{n+1/2}$ и $g_{i,j+1/2}^{n+1/2}$, вычисляемые в MUSCL-схеме) и объемным интегралам потоковых величин ($\hat{f}_{i,j}^{n+1/2}$ и $\hat{g}_{i,j}^{n+1/2}$) требуется вычислять первые моменты потоков ($F_{i+1/2,j}^{n+1/2}$ и $G_{i,j+1/2}^{n+1/2}$) с опорой на решение задачи Римана.

В работе Хьюна [220] сообщается об обобщении противопотоковой моментной схемы на случай решения двумерных уравнений Эйлера и демонстрируются результаты расчета тестовой задачи (отражение косога скачка уплотнения от стенки). Хотя подробности обобщения схемы в статье не приводятся, но говорится о том, что на каждой грани ячейки потоки должны вычисляться в двух точках. Это, очевидно, обусловлено необходимостью вычислять первые моменты потоков – величины $F_{i+1/2,j}^{n+1/2}$ и $G_{i,j+1/2}^{n+1/2}$. Что касается объемных интегралов потоковых величин, то они, по всей видимости, аппроксимируются аналогично одномерному случаю с заменой выражений (4.27), (4.28а) на следующие

$$\begin{aligned}\hat{f}_{i,j}^{n+1/2} &= \frac{1}{6} \left[f \left(\hat{u}_{i,j}^{n+1/2} - (\Delta_x u)_{i,j}^n / 2 \right) + f \left(\hat{u}_{i,j}^{n+1/2} - (\Delta_y u)_{i,j}^n / 2 \right) + 2f \left(\hat{u}_{i,j}^{n+1/2} \right) \right. \\ &\quad \left. + f \left(\hat{u}_{i,j}^{n+1/2} + (\Delta_x u)_{i,j}^n / 2 \right) + f \left(\hat{u}_{i,j}^{n+1/2} + (\Delta_y u)_{i,j}^n / 2 \right) \right], \\ \hat{g}_{i,j}^{n+1/2} &= \frac{1}{6} \left[g \left(\hat{u}_{i,j}^{n+1/2} - (\Delta_x u)_{i,j}^n / 2 \right) + g \left(\hat{u}_{i,j}^{n+1/2} - (\Delta_y u)_{i,j}^n / 2 \right) + \dots \right], \\ \hat{u}_{i,j}^{n+1/2} &= \frac{1}{6} \left[u_{i,j}^n + 4u_{i,j}^{n+1/2} + u_{i,j}^{n+1} \right].\end{aligned}$$

В работе [221] на примере решения линейного уравнения переноса проводится анализ устойчивости двумерной версии схемы Хьюна. Оказывается, что область устойчивости такой схемы заметно меньше, чем у MUSCL-схемы (в одномерном случае они совпадали). Для гарантированно устойчивого счета по схеме Хьюна число Куранта (здесь $\nu = a_x \tau / h_x + a_y \tau / h_y$) не должно превышать 0.664 [221].

Итак, схема III обобщается на случай решения нелинейных и многомерных уравнений без потери присущего ей повышенного, третьего порядка точности. В результате получается полностью дискретный вариант разрывного метода Галеркина, который также можно называть противопотоковой моментной схемой, или схемой Хьюна. По сравнению с типичной MUSCL-схемой использование схемы Хьюна, как и других вариантов разрывного метода Галеркина, предполагает проведение вычислений в существенно

больших объемах. В связи с этим возникает важный вопрос: оправданы ли такие повышенные вычислительные затраты в случае решения сложных практических задач?

4.3.6 Сравнение метода DG со схемой ГКР по эффективности

В своей статье [220] Хьюн делает вывод о более высокой точности новой противопотоковой моментной схемы по сравнению со стандартной MUSCL-схемой. Однако при этом он отмечает, что при решении двумерных уравнений Эйлера расчет одного временного шага по новой схеме обходится примерно в пять раз дороже. Если учесть, что схема Хьюна в двумерном случае требует использования меньшего числа Куранта (чем стандартная MUSCL-схема), то коэффициент повышения затрат на расчет нестационарной задачи приблизится к восьми. А это означает следующее.

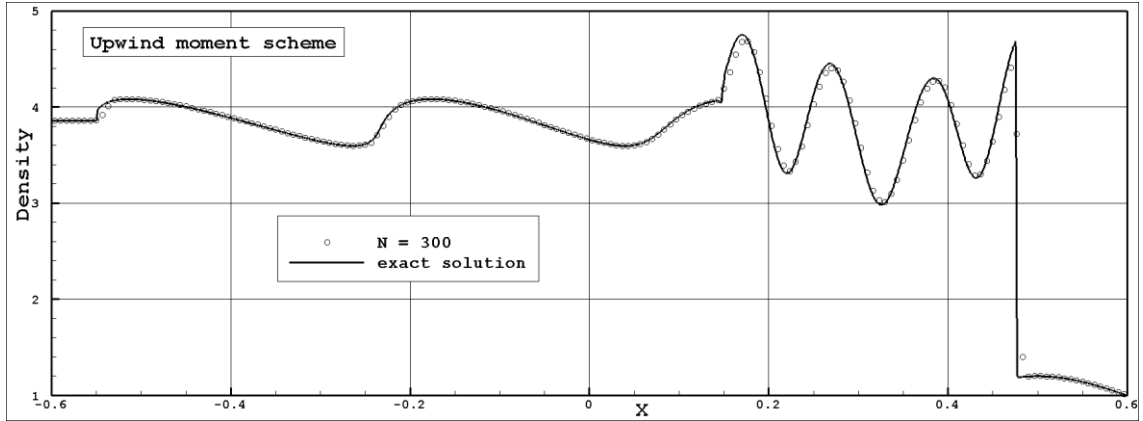
Если эффективность расчетного метода оценивать по вычислительным затратам, требующимся для решения тестовой задачи с заданной точностью, то чтобы считаться эффективной, схема Хьюна должна обеспечивать по крайней мере не худшую точность, чем точность MUSCL-схемы на сетке с удвоенным разрешением (по каждому из направлений сетки). Представляется, что такой же оценочный критерий эффективности может быть применен и к методу DG(1)-RK3 (разрывный метод Галеркина с базисными полиномами первого порядка в сочетании с методом Рунге-Кутты третьего порядка). Хотя в этом методе процедура интегрирования по времени более проста, но полный цикл расчета одного временного шага предполагает ее трехкратное использование. К тому же метод DG(1)-RK3 имеет более жесткое ограничение по числу Куранта.

По сравнению со схемой MUSCL-типа схема Хьюна и метод DG(1)-RK3 имеют более высокий порядок точности. Поэтому в задачах с гладкими профилями параметров их эффективность будет заметно выше (этот факт наглядно демонстрируется в [221]). Однако, в случае моделирования сложных течений с разрывами ситуация меняется: в областях влияния ударных волн темп сходимости к точному решению существенно снижается. В этих условиях высокоточные, но затратные методы могут не пройти сформулированный выше критерий эффективности. В поддержку этого утверждения приведем два примера.

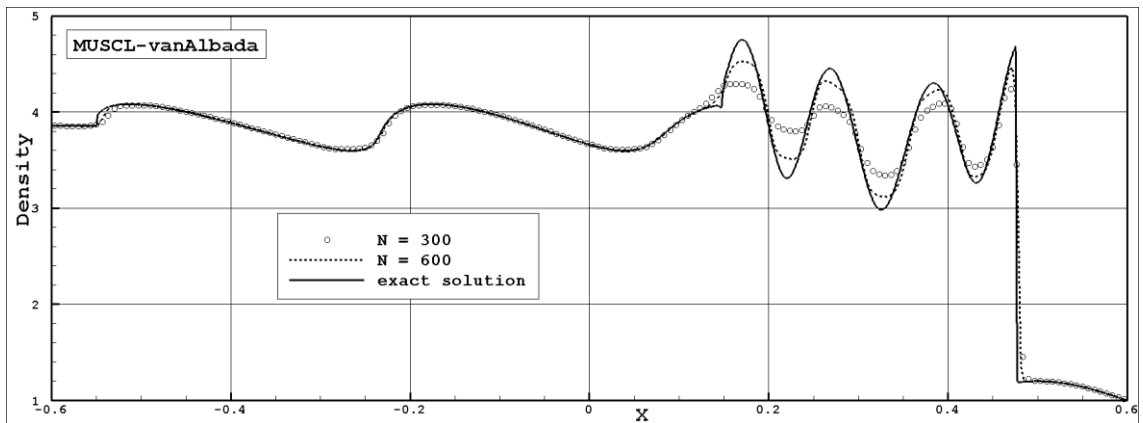
Тестовая задача Шу и Ошера (взаимодействие ударной волны с синусоидальным возмущением плотности) [222]. Эта задача использовалась Хьюном в [220] при тестировании противопотоковой моментной схемы. Задача решалась в следующей постановке.

Рассматривается одномерное нестационарное течение невязкого совершенного газа с $\gamma = 1.4$ в области $-1 \leq x \leq 1$. В качестве начальных данных ($t = 0$) задаются следующие распределения скорости, плотности и давления:

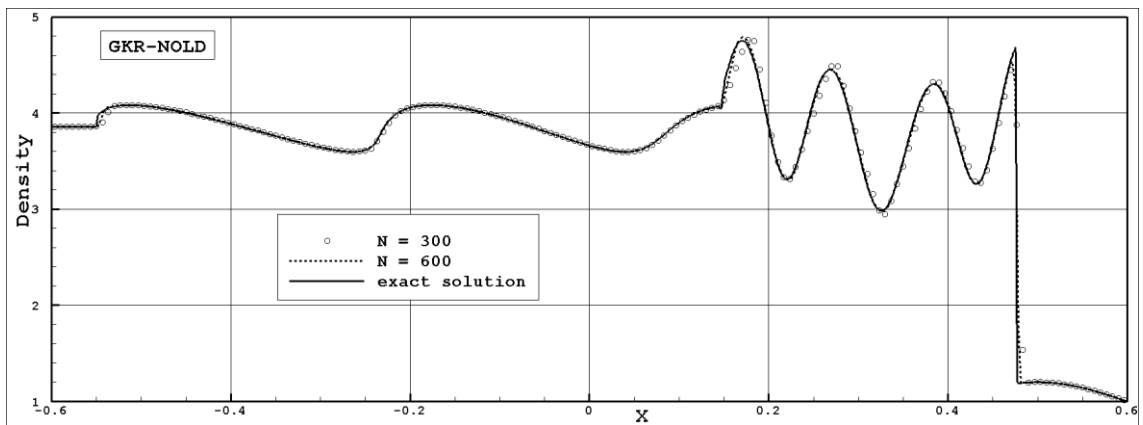
$$(u, \rho, P) = \begin{cases} (2.629, 3.857, 10.333), & \text{если } -1 \leq x < -0.8, \\ (0, 1 + 0.2 \sin(5\pi x), 1), & \text{если } -0.8 \leq x \leq 1. \end{cases}$$



а)



б)



в)

Рисунок 4.20. Профили плотности в тестовой задаче Шу и Ошера.

Расчеты проводятся на равномерной сетке (N – количество ячеек) до момента времени $t = 0.36$ при постоянных значениях параметров на границах области. Результаты расчетов сравниваются с «эталонным» решением, полученным по MUSCL-схеме на подробной сетке ($N = 3600$).

На рисунках 4.20а и 4.20б кружками воспроизведены данные работы [220]: расчет задачи по схеме Хьюна (противопотоковая моментная схема) и по MUSCL-схеме с ограничителем Ван Альбады при сеточном разрешении $N = 300$. Сравнение этих данных говорит о явном преимуществе схемы Хьюна. Даже на вдвое более подробной сетке (штриховая линия на 4.20б; данные настоящей работы) схема MUSCL-типа уступает по точности схеме Хьюна. На это можно заметить следующее.

Ограничитель Ван Альбады [207] обладает высокой диссипацией, наиболее сильно проявляющейся вблизи локальных экстремумов параметров (вследствие чего экстремумы «подрезаются»). В противоположной моментной схеме также используется ограничитель, но он в краткой статье [220] не описан. Судя по всему, Хьюн адаптировал к новой схеме один из низкодиссипативных ограничителей, разработанных им ранее в [43, 214].

На рисунке 4.20в приведены данные расчета задачи по схеме ГKP-NOLD (заметим, что ограничитель NOLD по своим свойствам близок к ограничителю, описанному Хьюном в [214]). Видно, что даже на одинаковой сетке ($N = 300$) такой вариант схемы MUSCL-типа почти не уступает по точности схеме Хьюна (сравните кружки на рисунках 4.20а и 4.20в); данные на более подробной сетке (штриховая линия на рисунке 4.20в) лежат заметно ближе к точному решению.

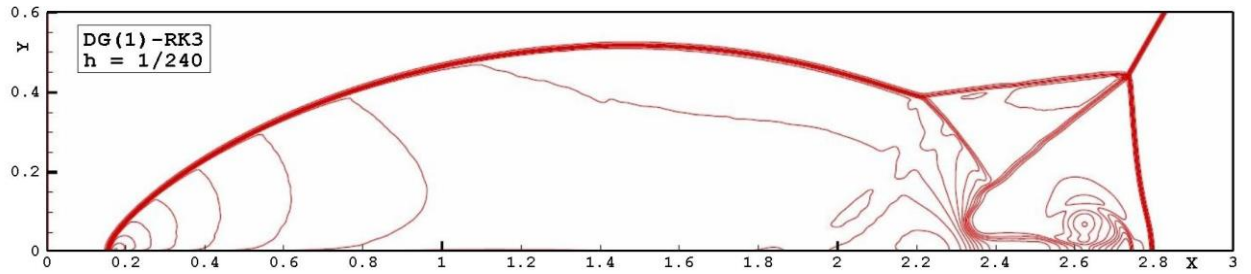
Тестовая задача о двойном маховском отражении («double Mach reflection») [217]. Эта задача, предложенная Вудвардом и Колеллой в 1984 году, активно используется для тестирования высокоточных методик. Постановка задачи следующая.

Рассчитывается двумерное нестационарное течение невязкого совершенного газа с $\gamma = 1.4$ в области $0 \leq x \leq 4$, $0 \leq y \leq 1$. На нижней границе расчетной области ($y = 0$) правее точки $x = 1/6$ расположена полубесконечная пластина. Сильная ударная волна (число Маха $M_s = 10$) набегаёт на пластину под углом 60° . Начало их взаимодействия соответствует началу расчета ($t = 0$) при следующих распределениях скорости, плотности и давления

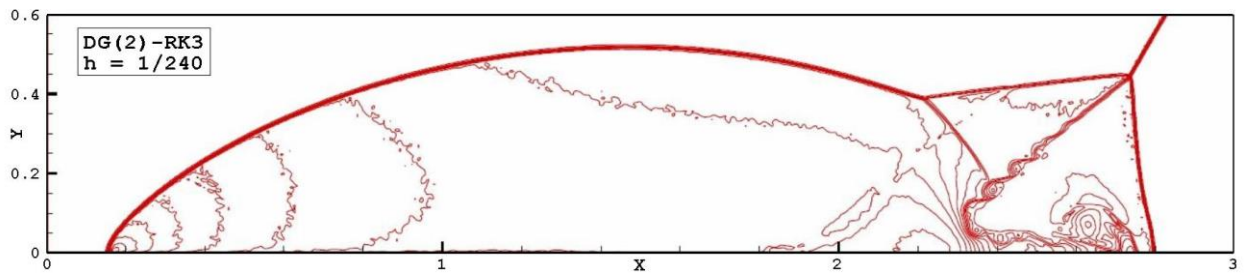
$$(u_x, u_y, \rho, P) = \begin{cases} (0, 0, 1.4, 1), & \text{если } x > 1/6 + y/\sqrt{3}, \\ (7.14471, -4.125, 8, 116.5), & \text{если } x \leq 1/6 + y/\sqrt{3}. \end{cases}$$

Расчет проводится на квадратной сетке (h – размер ячейки) до момента времени $t = 0.2$. В результате взаимодействия ударной волны с пластиной образуется сложная

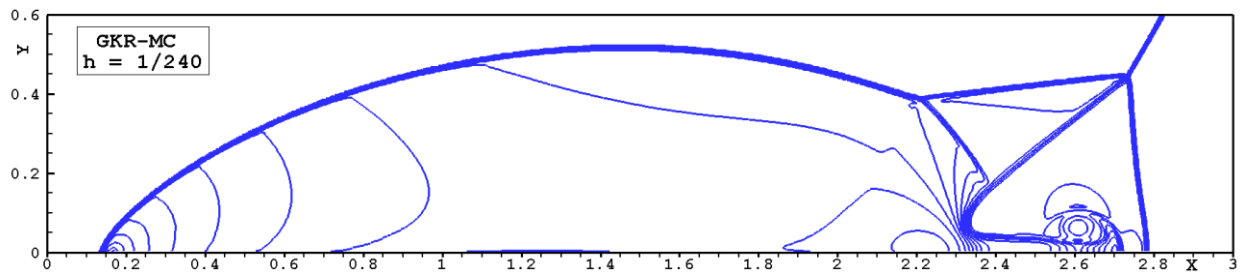
структура, состоящая из ударных волн и протяженного контактного разрыва, который с одной стороны исходит из тройной точки ($x \approx 2.74$, $y \approx 0.45$), а с другой стороны сворачивается в форме гриба (область $2.5 < x < 2.8$, $y < 0.15$). При тестировании методик основное внимание уделяется их способности разрешать контактный разрыв.



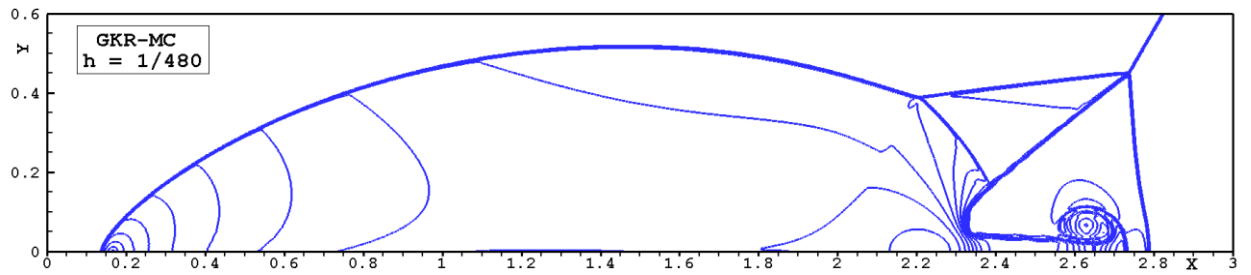
а)



б)



в)



г)

Рисунок 4.21. Изолинии плотности в тестовой задаче о двойном маховском отражении (29 изолиний, распределенных равномерно между значениями 1.3 и 23).

В 2013 году Чжун и Шу опубликовали данные расчета задачи о двойном маховском отражении с использованием разрывного метода Галеркина [50]. На рисунках 4.21а и 4.21б воспроизведены их данные для методов DG(1)-RK3 и DG(2)-RK3 (метод DG с базисными полиномами первого и второго порядков) при сеточном разрешении $h = 1/240$. В этой реализации разрывного метода Галеркина использовался ограничитель типа WENO, а задача Римана решалась приближенно методом, который называют «local Lax-Friderichs flux» или решателем схемы Русанова.

На рисунках 4.21в и 4.21г приведены аналогичные данные, полученные по схеме ГКР-МС для двух сеточных разрешений: $h = 1/240$ и $1/480$, соответственно. Здесь задача Римана решалась точно. Поскольку в данной задаче моделируется гиперзвуковой поток, то для подавления «карбункул»-неустойчивости в схему добавлялась искусственная вязкость (эта методика будет подробно изложена в следующей главе).

Как можно видеть, даже на одинаковой сетке схема ГКР с простым ограничителем МС не уступает по точности разрывному методу Галеркина с базисными полиномами первого порядка (сравните рисунки 4.21а и 4.21в). Использование же сетки с удвоенным разрешением (рисунок 4.21г) позволяет достигать существенно более высокой точности.

В данных, полученных по разрывному методу Галеркина с базисными полиномами второго порядка (рисунок 4.21б), можно видеть существенное «дрожание» параметров, причем оно наблюдается не только вблизи контактного разрыва (что можно было бы объяснить его неустойчивостью), но и вообще во всей области за фронтом отраженной волны. Такое решение рассматриваемой задачи вряд ли можно считать приемлемым.

4.4 Эффективность схем повышенного порядка аппроксимации

Продолжим обсуждение эффективности схем повышенного порядка аппроксимации, начатое в предыдущем разделе. Сначала представим дополнительные данные по сопоставлению схемы ГКР с методами повышенной точности.

4.4.1 Эффективность схемы ГКР в сравнении со схемами типа WENO

Обратимся к задаче о двойном маховском отражении, примеры расчета которой были приведены на рисунке 4.21. В настоящее время эта задача активно используется для тестирования высокоточных методик. Так, например, в авторитетном международном журнале *Journal of Computational Physics* только за 2016-й год можно найти более 20-ти публикаций с результатами моделирования задачи о двойном маховском отражении. Можно с уверенностью сказать, что большинство современных методов сквозного счета

проходят тестирование, в том числе и на этой задаче. Однако здесь следует отметить одну методическую проблему. В силу неустойчивости исходящего из тройной точки контактного разрыва (неустойчивость типа Кельвина-Гельмгольца) использование количественных критериев при сопоставлении методик в данной задаче весьма затруднительно – такое сопоставление ограничено рассмотрением расчетов с небольшим сеточным разрешением, когда значительная численная (схемная) вязкость препятствует развитию неустойчивости. Для того чтобы в этой задаче можно было использовать объективные (количественные) критерии сопоставления схем, необходимо перейти от решения уравнений Эйлера к решению уравнений Навье-Стокса. В этом случае размывание контактного разрыва будет зависеть не только от конкретной расчетной схемы и сеточного разрешения, но и от физической вязкости, величину которой можно регулировать.

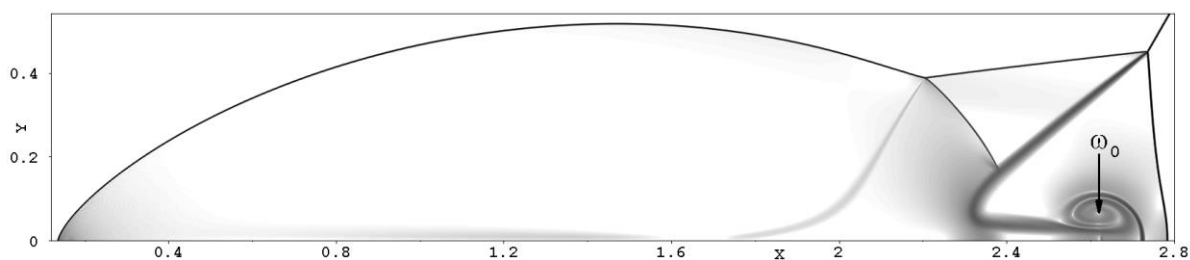


Рисунок 4.22. Структура течения (численная шпирен-визуализация) в задаче о двойном маховском отражении при $Re = 6000$.

Рассмотрим решение задачи о двойном маховском отражении в рамках уравнений Навье-Стокса. При этом на пластине будем ставить условие полного скольжения (условие прилипания здесь приведет к появлению пограничного слоя, который сильно исказит картину течения). Величину физической вязкости будем характеризовать числом Рейнольдса, рассчитываемым по плотности невозмущенного газа, скорости ударной волны и продольному размеру расчетной области ($L_y = 1$). На рисунке 4.22 показана структура течения для тестового случая с $Re = 6000$, рассчитанная по схеме ГKP-NOLD на сетке с $h = 1/1380$. Как можно видеть, при таком числе Рейнольдса контактный разрыв остается устойчивым, что позволяет проводить тестирование схем сквозного счета на предмет сходимости по сетке.

На рисунке 4.23 приведены данные по величине завихренности в центре главного вихря (величина ω_0 , см. рисунок 4.22) в зависимости от сеточного разрешения и времени счета. Красные кривые соответствуют двум схемам, имеющим 5-й порядок

аппроксимации по пространству (схемы WENO5 и MP5; WENO = weighted essentially non-oscillatory scheme, MP = monotonicity-preserving scheme) в комбинации с методом Рунге-Кутты третьего порядка (RK3). Эти схемы подробно описаны в [43]. Синие кривые соответствуют двум вариантам схемы ГКР. Как можно видеть, с измельчением сетки все кривые сходятся к одной величине ω_0 , однако темп сходимости у них разный. Если сравнивать точность схем при одинаковом сеточном разрешении (рисунок 4.23а), то схемы WENO5-RK3 и MP5-RK3 заметно превосходят схему ГКР-МС. Однако если эффективность расчетного метода оценивать по вычислительным затратам (по времени счета, которое требуется для решения задачи с заданной точностью), то преимущество схем повышенного порядка аппроксимации перед схемой ГКР-МС исчезает (см. рисунок 4.23б). Что касается схемы ГКР-NOLD, то она оказывается эффективнее схем WENO5-RK3 и MP5-RK3 по любому из двух рассмотренных критериев.

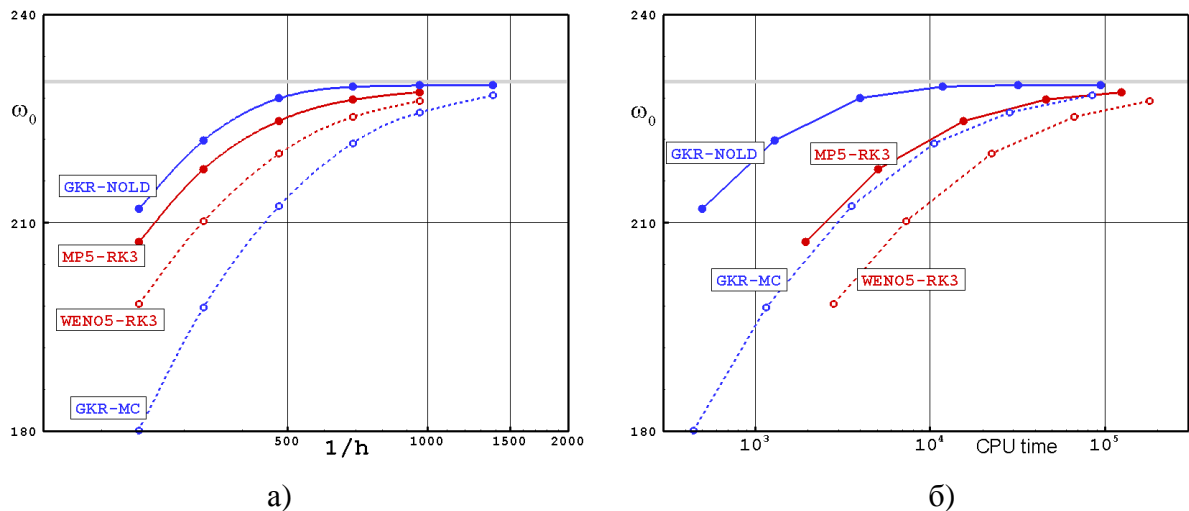


Рисунок 4.23. Величина ω_0 в задаче о двойном маховском отражении при $Re = 6000$:

а) зависимость от сеточного разрешения; б) зависимость от времени счета.

4.4.2 О точности схем сквозного счета в задачах с разрывами

Итак, проведенное исследование показало, что при моделировании течений с ударными волнами схема ГКР второго порядка аппроксимации по эффективности может не уступать, а иногда и превосходить методы, имеющие более высокий порядок аппроксимации. На самом деле такой вывод не является неожиданным – для этого достаточно вспомнить работы других авторов по данному вопросу.

Так, еще в 78-м году в работе Иванова и Крайко [60] было показано, что для любой разностной схемы порядок сходимости решения в областях влияния размазанных

разрывов в общем случае оказывается близким к первому. Известны также работы Остапенко с коллегами по этому вопросу [61, 62]. Например, в статье [61] на примере TVD-схемы Хартена было показано, что разностные схемы сквозного счета повышенного порядка аппроксимации приближенно имеют лишь первый порядок сходимости в гладкой части обобщенного решения за фронтом ударной волны.

За рубежом также имеются публикации на эту тему. Например в статье [63] на тестовых примерах показывается, что по критерию вычислительных затрат схема второго порядка аппроксимации может оказаться более эффективной, чем схема повышенного порядка типа WENO. Еще более значимы выводы публикации [64], которая представляет собой отчет большой группы ведущих специалистов в области CFD о работе международного семинара по методам повышенной точности. Заметим, что этот семинар был тщательно организован и проведен в начале 2012-го года. В нем приняли участие более 70-ти специалистов со всего мира из различных академических, правительственных и промышленных организаций. На семинаре были доложены результаты тестирования различных методов повышенной точности на заранее отобранных задачах. Главные выводы проделанной совместной работы следующие. В задачах с гладким решением (хотя и сложных) методы повышенного порядка способны продемонстрировать высокий порядок точности. Однако в задачах с разрывами решения эти методы не показывают высокой точности. В результате было признано, что в таких задачах нельзя определенно утверждать преимущество методов повышенного порядка над методами второго порядка.

4.5 Выводы по главе

В качестве основных выводов по четвертой главе можно выделить следующее.

1. По точности схема ГКР в целом не уступает, а иногда и превосходит методики, используемые в коммерческих и промышленных CFD-кодах, таких, как FLUENT, OVERFLOW, CFL3D и PAB3D. Поскольку схема ГКР является явной схемой, то в стационарных задачах, решаемых методом установления по времени, она обычно уступает неявным методам по времени счета. Поэтому основной областью применения схемы ГКР являются нестационарные задачи, где она демонстрирует высокую эффективность.

2. Сопоставление схемы ГКР со схемой КАБАРЕ на линейной задаче позволило выявить их общие свойства и найти еще одно представление схемы КАБАРЕ, которое можно рассматривать как разновидность MUSCL-схемы, обладающую индивидуальными особенностями. При расчёте разрывных решений MUSCL-представление схемы КАБАРЕ позволяет расширить диапазон применимости схемы по числу Куранта с $\nu < 1/2$ до $\nu < 1$.

3. Сравнение схем на примере расчета сильно нелинейной тестовой задачи «blast wave» показало, 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.

4. В ходе работ по сопоставлению со схемой КАБАРЕ была разработана новая реконструкция-ограничитель NOLD для схемы ГКР, которая при расчете разрывных решений обладает существенно меньшей диссипацией, чем другие реконструкции.

5. Сопоставление разрывного метода Галеркина со схемами MUSCL-типа позволило выявить их взаимосвязь и построить новую схему, которая обладает свойством суперсходимости и может рассматриваться как полностью дискретный вариант метода DG. В тоже время было установлено, что при решении многомерных задач новая схема, как и другие варианты метода DG, требует существенно больших вычислительных затрат, чем в случае использования схемы ГКР.

6. Сравнение схемы ГКР с разрывным методом Галеркина и схемами типа WENO показало, что в задачах с разрывами решения методы повышенного порядка могут уступать по эффективности схеме ГКР.

5 Применение искусственной вязкости для подавления «карбункул»-неустойчивости в схемах типа Годунова

В предыдущей главе обсуждались современные методы сквозного счета, базирующиеся на схеме Годунова (противопотоковые методы). Обладая многими достоинствами, такие методы приобрели большую популярность. Однако они имеют и изъяны, среди которых феномен «карбункула» является наиболее значительным. Данная глава посвящена решению этой проблемы.

5.1 Феномен «карбункула» и метод искусственной вязкости

Прежде всего заметим, что феномен «карбункула» тесно связан с так называемыми решателями задачи Римана (Riemann solvers), которые используются в схемах типа Годунова при вычислении потоков массы, импульса и энергии через грани ячеек. Рассмотрим кратко их основные особенности.

5.1.1 Решатели задачи Римана

Разработка и совершенствование методов приближенного решения задачи Римана является отдельным направлением развития схем сквозного счета. В отличие от алгоритмов точного решения задачи такие методы не требуют итераций и более экономичны. Решатели задачи Римана обычно классифицируют по их принадлежности к одному из двух приближений: расщепление разности вектора потока (FDS = flux difference splitting) или расщепление вектора потока (FVS = flux vector splitting) [146, 148].

Решатели FDS-типа весьма разнообразны и, в свою очередь, могут быть разделены на две группы: полные и неполные решатели задачи Римана [146] (см. рисунок 5.1). Полные решатели имеют такую же волновую структуру, как и у точного решателя задачи Римана. В случае решения уравнений Эйлера речь идет о трехволновой модели, состоящей из контактного разрыва и двух нелинейных волн, каждая из которых может быть либо волной сжатия, либо волной разрежения. К полным решателям относятся такие популярные решатели, как решатели Роу [65], Ошера [223] и их разновидности, решатель

HLLC [66], линейризованный решатель Toro [224]. Неполные решатели используют более грубые волновые модели, не содержащие явно контактный разрыв. Как следствие, их применение обычно приводит к чрезмерной диссипации контактных разрывов, даже в случае их (разрывов) сеточного выделения. К неполным решателям относятся решатели HLL [225], HLLC [226] и решатель схемы Русанова [227] (также известный как «local Lax–Friedrichs flux»).



Рисунок 5.1. Волновая структура в полном (слева) и неполном (справа) решателе задачи Римана.

Схемы, использующие приближение FVS, обычно более просты и лучше сочетаются с неявными методами [146]. Но они, аналогично неполным FDS решателям, склонны к более интенсивному размыванию контактных разрывов. Приближение FVS используется в схеме Стегера-Уорминга [228], FVS схеме Ван Лира [229], а также в кинетических схемах. Популярная схема AUSM [230] сочетает в себе особенности FVS и FDS приближений.

К перечисленным решателям задачи Римана добавим решатель А.В. Сафронова [231], который принадлежит к группе полных решателей FDS-типа. Следует отметить, что по эффективности он не уступает таким популярным решателям, как решатель HLLC или решатель Роу. Вместе с тем решатель Сафронова отличается экономичностью и легко обобщается на случаи расчета течений неидеального газа (например, неравновесного газа или газа с невыпуклым уравнением состояния).

С физической точки зрения использование точного решателя задачи Римана представляется наиболее правильным способом вычисления невязких потоков между ячейками. Поэтому решения тестовых задач классическим методом Годунова часто используют в качестве эталонных решений при оценке эффективности тех или иных приближенных решателей [146]. Обычно, более грубые приближенные решатели задачи Римана демонстрируют большую диссипацию и меньшую надежность. Отсюда складывалось мнение, что при моделировании сложных многомерных течений использование полных, трехволновых решателей предпочтительнее использования

неполных решателей или FVS схем. Однако такое представление неожиданно натолкнулось на проблему, получившую название «carbuncle phenomenon».

В 1988 году Пиэри и Имлей [67] сообщили о необычном численном дефекте, обнаруженном при расчете гиперзвукового обтекания затупленного тела. Оказалось, что замена FVS схемы Стегера-Уорминга на схему Роу вместо уточнения очевидного решения привела к получению нефизического решения. Такое решение, хотя и стационарное, отягощено рециркуляционной областью в виде опухолеподобного нароста перед телом; отсюда произошло название проблемы – «carbuncle phenomenon».

Принципиально важным вкладом в понимание «carbuncle phenomenon» стала работа Кёрка [68]. В ней был составлен перечень задач, в которых наблюдалось появление аномальных решений, и предложена новая тестовая задача, *задача Кёрка*, ставшая эффективным инструментом для диагностики схем (решателей задачи Римана) и выявления их склонности к «карбункул»-дефекту. В задаче Кёрка одномерная ударная волна рассчитывается в двумерном приближении на квадратной сетке, в которую вносится ничтожно малое возмущение. На этой задаче (как численно, так и с помощью линейного анализа) Кёрк исследовал свойства нескольких схем. Оказалось, что «карбункулом» страдает не только решатель Роу [65], но и точный решатель задачи Римана и линеаризованный решатель Торо [224] (все они – полные решатели), тогда как неполный решатель HLLE [226] не имеет такого изъяна.

Работы Пиэри, Имлей [67] и Кёрка [68] вызвали большой интерес специалистов в области численного моделирования, так что в последующие годы появилось большое количество публикаций по этой теме; среди них можно выделить работы [69 – 73, 232 – 255]. Прежде, чем изложить основные достижения в понимании и устранении «carbuncle phenomenon» заметим, что консолидированного мнения по некоторым аспектам этой сложной проблемы еще не сложилось. Показательно, что в 2009 году Ван Лир в своем обзоре по CFD [74], выделил «карбункул»-проблему в качестве одной из главных нерешенных проблем классических конечно-объемных схем, а Роу в своей обзорной лекции в 2013 году [75] сравнил ее со скелетом в шкафу, отметив, что причины и способы решения проблемы все еще являются предметом споров.

5.1.2 Основные особенности проблемы

Прежде всего, заметим, что «carbuncle phenomenon» 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. Поэтому термин «carbuncle phenomenon» часто используют наравне с терминами «карбункул»-*неустойчивость* или *ударно-волновая неустойчивость*.

Подверженность конкретных решателей ударно-волновой неустойчивости проверяется на тестовых задачах из перечня Кёрка [68]: сверхзвуковое обтекание затупленного тела, задача Кёрка и ее разновидности, дифракция ударной волны на 90-градусном угле, задача о двойном маховском отражении. Заметим, что такого рода тестирование желательно проводить максимально полно: конкретная схема может показать негативный результат только на одном из тестов, успешно пройдя остальные [237, 243].

Появление ударно-волновой неустойчивости в конкретной задаче существенно зависит от расчетной сетки. Следуя Кёрку [68], важнейшим условием для активации неустойчивости обычно называют ориентацию сетки (сеточных линий одного семейства) вдоль фронта ударной волны [69, 237, 240, 249]. Заметим, что это условие не выполняется в одной из упомянутых выше тестовых задач – задаче о двойном маховском отражении. Поэтому, для данной цели лучше подходит другое условие, которому удовлетворяют все тестовые задачи: ориентация сетки вдоль линий тока в окрестности ударной волны. Здесь также можно сослаться на Кёрка, который видел причину развития неустойчивости в недостатке диссипации через контактный разрыв в направлении, параллельном ударной волне; так случается, если полный решатель задачи Римана используется на гранях, расположенных вдоль линий тока.

Ударно-волновая неустойчивость чувствительна к размеру и форме ячеек сетки. Кёрк, например, в своем исследовании [68] подчеркивал, что феномен «карбункула» проявляется только при проведении расчетов с высоким сеточным разрешением. Для нестационарных задач такое положение дел вполне очевидно, поскольку при расчете на грубой сетке неустойчивость просто не успевает развиваться (см. примеры расчета задач о дифракции ударной волны и о двойном маховском отражении на разных сетках, соответственно, в [68] и [237]). Влияние соотношения размеров ячейки на развитие ударно-волновой неустойчивости исследовалось в работах [71, 240].

Хотя характерные особенности «карбункул»-повреждения наиболее отчетливо видны в случае использования схем первого порядка точности, переход на более точные схемы не решает проблему [237, 240]. Главную роль здесь играет вид конкретного решателя задачи Римана; именно через него происходит «заражение» схемы ударно-волновой неустойчивостью.

Первоначально «carbuncle phenomenon» наблюдался только в расчетах гиперзвуковых течений, однако позднее оказалось, что при моделировании сверхзвуковых течений также можно столкнуться с этой проблемой. Так, в работе [239] было показано, что пороговое значение числа Маха для ударно-волновой неустойчивости лежит в диапазоне $2 < M_S^C < 3$ (M_S^C – значение ударно-волнового числа Маха M_S , выше которого развивается неустойчивость; M_S^C зависит от показателя адиабаты, расчетной схемы и числа Куранта).

Принято считать, что «карбункул»-неустойчивостью страдают только методы сквозного счета (некоторые из них), а при использовании методик с выделением скачка эта проблема не обнаруживается [69, 240]. Установлено также, что при решении уравнений Навье-Стокса ударно-волновую неустойчивость можно подавлять увеличением физической вязкости [237, 240], однако в этом случае требуется переходить к непрактично низким числам Рейнольдса.

5.1.3 Возможные объяснения и способы решения проблемы

В первой публикации по «carbuncle phenomenon» [67] Пиэри и Имлей не только описали изъян схемы Роу, но и предложили специальное средство для его устранения: повышение численной диссипации схемы через сглаживание собственных значений якобиана потоков. В последующем Лин [233] модифицировал этот способ, устранив в нем зависимость от сеточного направления.

Первое объяснение «carbuncle phenomenon» было предложено Кёрком [68]. Он заметил, что схема Роу, как и другие низкодиссипативные схемы, не привносит никакой диссипации через контактный разрыв в направлении параллельном ударной волне. Это приводит к беспрепятственному нарастанию акустических волн, когда возмущение давления порождает возмущение плотности. Хотя Кёрк признавал, что неустойчивость такого рода можно подавлять увеличением диссипации схемы (например, применив энтропийную коррекцию Хартена к контактному разрыву), но критически относился к такому подходу: он (а) не имеет ни математического, ни физического обоснования и (б) приводит к понижению разрешающей способности схемы. Поэтому он предложил другой подход, когда решатели задачи Римана меняются в зависимости от локальных условий течения (например, базовый низкодиссипативный решатель Роу заменяется на более диссипативный решатель HLLE).

Сандерс и др. [236] связали «carbuncle phenomenon» с неустойчивостью строго противопотоковых схем. В своей работе они ввели понятие *строго противопотоковой*

функции потока (через свойство матрицы диссипации) и сформулировали для нее необходимое и достаточное условие. Они показали, что схемы, базирующиеся на строго противопотоковой функции потока, имеют одинаковое аппроксимационное уравнение, которое применительно к некоторым течениям является линейно неустойчивым. Для борьбы с «карбункул»-неустойчивостью в работе [236] была предложена простая многомерная модификация решателя Роу, когда для конкретной грани ячейки энтропийная коррекция делается с учетом параметров на соседних гранях (такая энтропийная коррекция получила название *H-correction*). Позднее Пандольфи и Амбросио [240] заметили, что *H-correction* работает не только на ударной волне, но и в высокоскоростном пограничном слое, и предложили способ устранения этого недостатка.

Следуя Кёрку, в работе [237] Гресье и Мочетта провели свой линейный анализ устойчивости ряда схем и показали, что те противопотоковые схемы, которые явно содержат контактный разрыв, являются минимально устойчивыми и склонны к «карбункулу». К минимально устойчивым схемам относятся не только схемы, использующие трехволновую модель приближения FDS (как схема Роу и схема Ошера), но и схема AUSM [245], и особая кинетическая схема EIM [256]. Только строго устойчивые схемы гарантируют отсутствие ударно-волновой неустойчивости. Однако они размывают сеточно-выделенные контактные разрывы, а в случае решения уравнений Навье-Стокса могут приводить к существенному искажению пограничного слоя.

Исследование другого рода было представлено в работе Лиу [238], где функции потока нескольких известных схем были разложены на составляющие, среди которых был выделен диссипативный член давления $D^{(p)}$, ответственный за ударно-волновую неустойчивость. Лиу выдвинул гипотезу, согласно которой условие $D^{(p)} = 0$ является достаточным условием для ударно-волновой устойчивости схемы. Эта гипотеза дала автору инструмент для выявления схем, которые хотя и явно содержат контактный разрыв, но свободны от «карбункул»-неустойчивости. Так, например, схема AUSM⁺ [257] оказалась такой схемой. Это достижение было принято неоднозначно. Так, если авторы работы [243] полностью согласны с гипотезой Лиу, то в работе [239] указывается на ее противоречие с теоремой Гресье [237]; в другой работе Дамбсер и др. [69] обращают внимание на то, что исключение члена $D^{(p)}$ из функции потока противоречит базовым физическим принципам (заметим, что сам автор гипотезы в конце статьи [238] сделал замечание о потенциальной полезности члена $D^{(p)}$). Данную ситуацию в некоторой степени проясняют результаты исследования [240].

В задаче, подобной тестовой задаче Кёрка, Пандольфи и Амбросио [240] провели исследование чувствительности различных противопотоковых схем к четно-нечетным

возмущениям в плотности, скорости и давлении. Детальный линейный анализ взаимодействия такого рода возмущений позволил авторам разделить противопотоковые схемы на несколько категорий по степени их подверженности «карбункул»-неустойчивости. В категорию схем не подверженных «карбункулу» (*carbuncle-free schemes*) попали только схема HLL (базирующаяся на неполном решателе задачи Римана) и FVS схемы Стегера-Уорминга и Ван Лира. В остальные категории попали схемы, которые в той или иной степени склонны к «карбункулу». Так, схема Roe, схема HLLC (обе используют полный решатель) и некоторые варианты схем из семейства AUSM были отнесены к категории схем, сильно подверженных «карбункулу» (*strong carbuncle prone schemes*), а упомянутая ранее схема AUSM⁺ была отнесена к категории схем, слабо подверженных «карбункулу» (*light carbuncle prone schemes*). Последнее согласуется с данными работы [243]: в задаче о двойном маховском отражении схема AUSM⁺ демонстрирует небольшое искривление ножки Маха. Таким образом, исследование Пандольфи и Амбросио [240] подтвердило, что все решатели задачи Римана, которые явно содержат контактный разрыв, в той или иной степени подвержены «карбункул»-неустойчивости. Однако здесь необходимо сделать уточнение.

В работе Ким и др. [243] утверждается возможность разработки функции потока, которая (а) точно разрешает контактный разрыв и (б) свободна от ударно-волновой неустойчивости; в доказательство приводится новая схема RoeM_2, обладающая таким качеством. В другой работе Парк и Квон [244] предложили схему HLLE+ (усовершенствованная схема HLLE) с похожими свойствами. Эффективность предложенных схем не вызывает сомнений, однако надо иметь в виду, что в них используются специальные встроенные параметры (функция управления g в схеме RoeM_2 и переключатель β в схеме HLLE+), чувствительные к присутствию ударной волны или контактного разрыва. Такие параметры регулируют схемную диссипацию в зависимости от локальных условий течения. Так что здесь речь идет о схемах, модифицированных с целью подавления «карбункул»-неустойчивости. Тогда как утверждения о невозможности сочетания требований (а) и (б), сделанные в работах [237] и [240], следует относить к базисным схемам, не содержащим специальных (*ad hoc*) поправок.

Итак, выделим два основных подхода к подавлению «carbuncle phenomenon».

К первому подходу отнесем разного рода модификации, повышающие диссипацию базисной схемы в окрестности ударной волны. Сюда же поместим методы, которые комбинируют два варианта решателей из одного семейства (в критических областях течения низкодиссипативный вариант схемы заменяется на более диссипативный

вариант). Относящиеся к такому подходу методы предлагались в работах: [67, 233, 236, 238, 240, 243, 248] для схемы Роу и ее разновидностей; [71, 73, 232, 244, 251, 255] для схем типа HLL; [72, 238, 241, 254] для схем семейства AUSM. Оригинальный метод предложен в работе [245], где подходящее повышение диссипации схемы Роу достигается за счет перехода от обычного сеточно-ориентированного решателя задачи Римана на так называемый «повернутый решатель» (*rotated Riemann solver*). Суть этого метода заключается в (1) декомпозиции нормали к боковой грани на два ортогональных направления, (2) применении решателя задачи Римана к каждому из направлений и (3) суммировании двух полученных потоков с весами, определенными при декомпозиции.

Ко второму подходу отнесем методы, в которых принадлежащие к различным семействам решатели задачи Римана (с различными диссипативными свойствами) комбинируются в зависимости от локальных условий течения. Так в работе [68] комбинируются схема Роу и схема HLL, а в работе [234] – схема AUSMDV и FVS схема Ханеля. К такому подходу относится и применение «повернуто-гибридных решателей» (*rotated-hybrid Riemann solvers*) [246, 252], когда для разных направлений (полученных после декомпозиции нормали к боковой грани) используются различные решатели задачи Римана (например, решатель Роу и решатель Русанова [246]).

Можно заметить, что все упомянутые методы подавления «карбункул»-неустойчивости применяются к приближенным решателям задачи Римана и предполагают повышение схемной диссипации, по крайней мере в окрестности ударной волны. В результате, такие решатели еще больше «отдаляются» от точного решателя, который (как уже отмечалось) является физически наиболее обоснованным способом вычисления *невязких* потоков между ячейками. Вместе с тем, точный решатель задачи Римана в полной мере подвержен «карбункул»-неустойчивости [68, 69, 236, 238, 242]. В этой связи интересно рассмотреть результаты матричного анализа на устойчивость, проведенного Дамбсером и др. [69]. В их работе анализировалась устойчивость ряда известных схем при расчете стационарной ударной волны в задаче типа тестовой задачи Кёрка. Оказалось, что из всех рассмотренных вариантов схема Годунова имеет наибольшее (положительное) значение величины $\max(\operatorname{Re}(\lambda))$, где λ – комплексное собственное значение «матрицы устойчивости» [69]. Эти данные дают основание отнести схему Годунова к категории схем, сильно подверженных «карбункулу».

5.1.4 Физические корни «карбункула»

Многие исследователи указывают на то, что феномен «карбункула», вероятно, не является только численной проблемой, а имеет физические корни. Такое мнение отчасти

основывается на экспериментальных работах, в которых наблюдались «карбункуло»-подобные отрывные течения (соответствующие ссылки можно найти в [69, 70, 247]). Правда, такого рода течения в экспериментах специальным образом стимулируются (например, с помощью иглы перед моделируемым спускаемым аппаратом), тогда как в расчетах «карбункул» образуется сам по себе.

Попытка теоретическим путем обнаружить физические корни «carbuncle phenomenon» была предпринята Робине и др. [239]. В своей работе они исследовали устойчивость плоской ударной волны в контексте двумерных уравнений Эйлера и соотношений Рэнкина-Гюгонио. Теоретический анализ выявил ранее неизвестный неустойчивый режим, который существует только при одном значении ударно-волнового числа Маха $M_S = M_{oc}(\gamma)$ ($M_{oc} = 2$ для совершенного газа с показателем адиабаты $\gamma = 1.4$). Было высказано предположение, что этот режим ответственен за «карбункул»-неустойчивость, которая проявляется в случае, если ударно-волновое число Маха превышает вышеупомянутое пороговое значение M_S^c . Согласно этому предположению неустойчивость зарождается внутри размытой ударной волны, где локальное расчетное число Маха пересекает теоретическую величину M_{oc} . В работе [239] было проведено сопоставление ряда теоретических зависимостей с расчетными данными, и получены хорошие корреляции, подтверждающие сделанное предположение о физической природе «карбункула». Основываясь на результатах проведенного анализа, авторы заключили, что «чем лучше схема описывает решение уравнений Эйлера, тем в большей степени она может быть подвержена ударно-волновой неустойчивости». Они также высказали мнение о том, что численную схему лучше конструировать на базе уравнений Навье-Стокса.

Предложенное Робине и др. [239] теоретическое объяснение природы «карбункул»-неустойчивости было воспринято неоднозначно. Так, в работе [69] отмечается, что обнаруженный неустойчивый режим связан с вихревой модой и это подтверждает двумерную природу «карбункула». В другой работе [258] связь ударно-волновой неустойчивости с вихревой модой (со ссылкой на [239]) служит обоснованием разработки вихре-сохраняющих схем. Однако, противоположную оценку работы Робине и др. можно найти в заметке [259], где теоретический анализ устойчивости плоской ударной волны [239] подвергнут серьезной критике.

Выводы работы [239] перекликаются с мнением других исследователей о невозможности построения точной и надежной схемы (свободной от «карбункул»-неустойчивости) в рамках уравнений Эйлера. Так, в работах [235, 253] говорится, что при построении расчетной схемы следует опираться на решение «вязких» уравнений,

например, используя приближение газокINETической модели. Заметим, что хотя газокINETические схемы свободны от «карбункул»-неустойчивости, но они в полной мере разделяют общий недостаток FVS схем – размывание сеточно-выделенного контактного разрыва. Поэтому, в работе [253] применяется кусочно-линейная реконструкция, повышающая порядок точности схемы и в значительной степени ослабляющая упомянутый недостаток FVS схем.

5.1.5 Метод искусственной вязкости как универсальное средство решения «карбункул»-проблемы

Особый метод подавления «карбункула» был предложен Ло и Йоргенсоном в краткой заметке [250]. Он базируется на повышении схемной диссипации за счет осреднения консервативных величин на каждом временном слое по типу схемы Лакса-Фридрихса, но с введением весового коэффициента для контроля диссипации. Несомненным достоинством такого метода является его универсальность: (1) он является внешним по отношению к решателю задачи Римана (например, его можно использовать в сочетании с точным решателем); (2) он имеет широкий спектр действия (кроме успешной борьбы с «карбункул»-неустойчивостью он устраняет скачок разрежения и подавляет осцилляции за фронтом медленно движущейся ударной волны [250]). Однако такой метод имеет и существенные недостатки: (1) он повышает схемную диссипацию не только вблизи газодинамических разрывов, но и во всей расчетной области; (2) используемый весовой коэффициент варьируется в широком диапазоне, подбираясь под конкретную задачу; (3) метод не имеет физического основания.

В 2014 году автор данной диссертации предложил альтернативный способ подавления «карбункул»-неустойчивости – метод искусственной вязкости. Суть метода 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 и Рихтмайера [2], но имеющее свои особенности (обобщение на многомерность и введение пороговой величины). Предложенный метод обладает универсальностью: он является внешним по отношению к конкретной схеме (алгоритм расчета «невязких» потоков не меняется) и имеет широкий спектр «целительного» действия. Вместе с тем он свободен от недостатков метода [250].

В последующих разделах будет подробно описана работа по адаптации метода искусственной вязкости к решению проблемы «карбункула» в схемах типа Годунова.

5.2 Адаптация метода к схемам первого порядка аппроксимации

Прежде чем перейти к описанию метода искусственной вязкости, обратимся к тестовой задаче Кёрка, различные модификации которой далее будут активно использоваться для апробации и настройки предлагаемого метода подавления «карбункул»-неустойчивости.

5.2.1 Тестовая задача Кёрка

В тестовой задаче Кёрка [68] рассчитывается плоская ударная волна, распространяющаяся вдоль прямоугольного канала. Расчетная область $[0, 800] \times [0, 20]$ в плоскости xu покрывается регулярной сеткой, состоящей из квадратных ячеек единичного размера ($h_x = h_y = 1$); начальное состояние газа (компоненты скорости, плотность и давление) в ячейках следующие: $(u_x, u_y, \rho, p) = (0, 0, 1, 1)$. На нижней, верхней и правой границах расчетной области задается непроницаемая стенка. Слева задается втекающий поток с параметрами $(u_1, 0, \rho_1, p_1)$, которые определяются ударно-волновым числом Маха (M_s) и показателем адиабаты (γ):

$$u_1 = u_s \frac{2(M_s^2 - 1)}{(\gamma + 1)M_s^2}, \quad \rho_1 = \frac{(\gamma + 1)M_s^2}{(\gamma - 1)M_s^2 + 2}, \quad p_1 = \frac{2\gamma M_s^2 - (\gamma - 1)}{(\gamma + 1)},$$

где $u_s = \sqrt{\gamma}M_s$ – скорость распространения ударной волны по неподвижному газу.

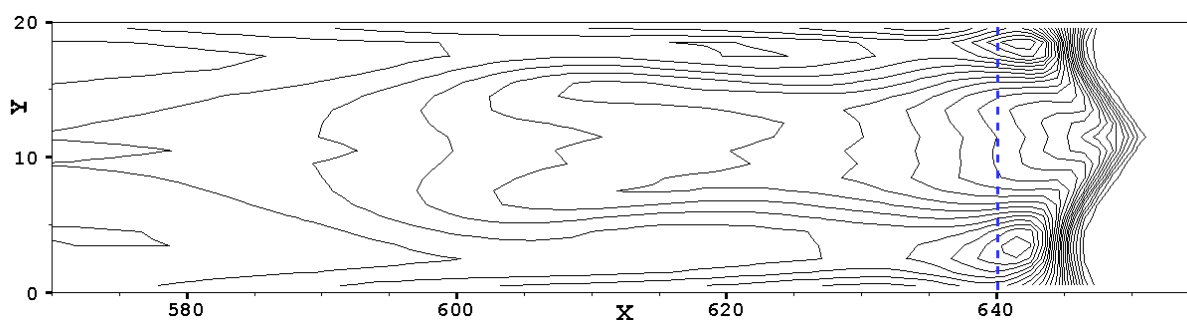


Рисунок 5.2. Изолинии плотности в тестовой задаче Кёрка при $\gamma = 1.4$ и $M_s = 6$ (фрагмент расчетной области). Расчет по схеме Годунова до $x_s = 640$.

В задаче Кёрка неустойчивость плоской ударной волны инициируется ничтожно малым возмущением центральной линии сетки: $\hat{y}_{i,jmid} = y_{i,jmid} + \delta(-1)^i$, где i и j – сеточные индексы, соответственно, в продольном и поперечном направлениях, $jmid = 10$, $\delta = 10^{-6}$. В качестве примера на рисунке 5.2 приведена картина течения, полученная с

использованием схемы Годунова. Неустойчивость в данной тестовой задаче обычно обнаруживается визуально, через возмущение ударной волны при ее прохождении по каналу. Для этой же цели могут использоваться и более чувствительные критерии, когда отклонение решения от одномерного потока каким-либо образом измеряется. Так, в [71, 239] ударно-волновая неустойчивость выявляется по росту максимальной величины поперечной компоненты скорости. В настоящей работе для измерения степени отклонения решения от одномерного потока будет использоваться величина

$$\varepsilon_0 = \max_{i,j} (|\rho_{i,j} - \bar{\rho}_i|), \quad \bar{\rho}_i = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J \rho_{i,j}. \quad (5.1)$$

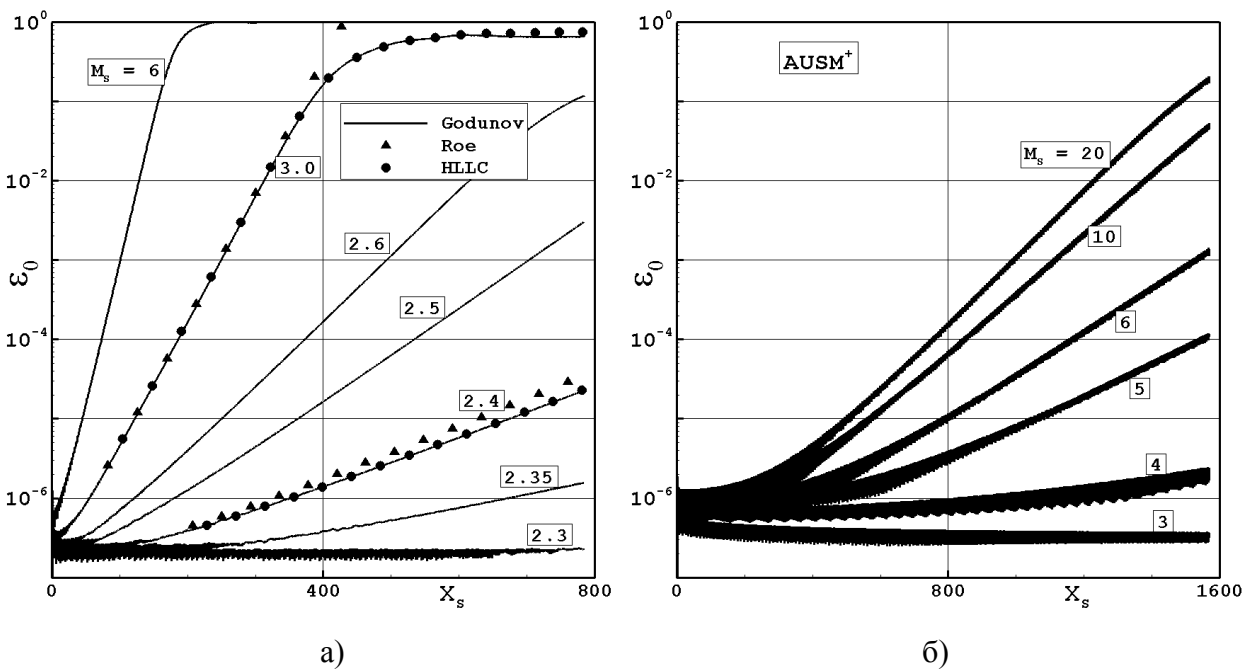


Рисунок 5.3. Развитие неустойчивости в задаче Кёрка для различных схем и ударно-волновых чисел Маха.

На рисунке 5.3 показаны зависимости ε_0 от расстояния, пройденного ударной волной ($x_s = u_s \cdot t$), для различных схем и ударно-волновых чисел Маха. Здесь и далее (если не оговорено особо) предполагается, что $\gamma = 1.4$, а число Куранта $C_{cfl} = 0.8$. Данные, полученные по схеме Годунова (сплошные линии для нескольких значений M_s) и по схемам Роу и HLLC (значки для $M_s = 2.4$ и 3.0), представлены на рисунке 5.3а. Видно, что уменьшение интенсивности ударной волны приводит к ослаблению ее неустойчивости: наклон кривых плавно уменьшается вплоть до горизонтального уровня, соответствующего

устойчивому расчету ударной волны. Схема Годунова, схема Роу и схема HLLC демонстрируют примерно одинаковую динамику роста возмущений при превышении порогового значения $M_s^c \approx 2.3$; этот результат согласуется с данными работы [239].

На рисунке 5.3б представлены данные, полученные по схеме AUSM⁺. Напомним, что в работе [240] AUSM⁺ была отнесена к схемам, слабо подверженным «карбункулу» (*light carbuncle prone schemes*). Представленные данные это наглядно подтверждают: при использовании схемы AUSM⁺ неустойчивость развивается очень медленно. Обратим внимание на то, что здесь расчеты задачи Кёрка проводились на вдвое более протяженной расчетной области. Видно, что при достижении $X_s = 800$ отклонение от одномерного течения во всех случаях настолько мало, что обнаружить его визуально по повреждению формы ударной волны не представляется возможным. Пороговое значение ударно-волнового числа Маха для схемы AUSM⁺ заметно выше: $M_s^c \approx 3$.

5.2.2 Введение искусственной вязкости

Предложенная фон Нейманом и Рихтмайером [2] концепция построения методов сквозного счета заключается в *явном* добавлении к невязким уравнениям газовой динамики специального диссипативного члена, обеспечивающего надлежащее размывание ударных волн. Поскольку добавочный диссипативный член по своему действию имитирует физическую вязкость, его называют членом искусственной вязкости, а методы, базирующиеся на такой концепции, иногда называют *методами с искусственной вязкостью* [146].

В схемах типа Годунова или (в более широком смысле) противопотоковых схемах надлежащее размывание газодинамических разрывов достигается за счет численной диссипации, присущей самой схеме. В этом случае говорят о *внутренней* искусственной (или численной) вязкости, которая выявляется при анализе ошибок аппроксимации [146, 148].

В данной работе мы используем термин *искусственная вязкость* по отношению к добавочной диссипации в виде правых частей уравнений Навье-Стокса с заменой коэффициента молекулярной вязкости на коэффициент искусственной вязкости. При таком подходе алгоритм расчета невязких потоков не меняется, поэтому новый метод борьбы с «карбункулом» может использоваться в сочетании со схемами различного типа.

Подбор формулы для коэффициента искусственной вязкости начнем с рассмотрения выражения, являющегося обобщением идей Неймана и Рихтмайера [2] на многомерный случай:

$$\mu_{AV} = \begin{cases} C_{AV} \rho h^2 |\nabla \cdot \vec{u}|, & \text{если } \nabla \cdot \vec{u} < 0, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (5.2)$$

где C_{AV} – безразмерный параметр, h – характерный размер расчетной ячейки.

Выражение вида (5.2) подразумевает добавление диссипации не только на фронте ударной волны, но и в областях безударного сжатия, отчего точность решения в этих областях может заметно понижаться. Поэтому вместо (5.2) предлагается использовать формулу

$$\mu_{AV} = \begin{cases} C_{AV} \rho h^2 \sqrt{(\nabla \cdot \vec{u})^2 - (C_{th} a / h)^2}, & \text{если } -\nabla \cdot \vec{u} > C_{th} a / h, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (5.3)$$

где $C_{th} > 0$ – пороговый коэффициент, a – скорость звука. Новый член в формуле (5.3) представляет собой порог на сжатие. Благодаря ему действие искусственной вязкости ограничивается только фронтом ударной волны. Это дает дополнительную выгоду: в областях, где $\mu_{AV} = 0$, вязкие члены можно не рассчитывать (экономия вычислительных ресурсов). Исходя из анализа большого количества тестовых расчетов, для порогового коэффициента было выбрано следующее значение: $C_{th} = 0.05$.

Другое отличие предлагаемой методики от метода работы [2] заключается в использовании искусственной теплопроводности наравне с искусственной вязкостью. Хотя искусственная теплопроводность не требуется для цели подавления «карбункул»-неустойчивости, но она полезна по другой причине. Так, в работе [260] было показано, что применение искусственной вязкости без теплопроводности может приводить к заметному усилению энтропийных следов. На основе предварительных тестовых расчетов мы также убедились в полезности добавления искусственной теплопроводности. (Отдельно заметим, что такое добавление является физически оправданным.) Таким образом, во всех представленных далее расчетах наравне с искусственной вязкостью добавлялась искусственная теплопроводность, которая рассчитывалась через коэффициент

$$\lambda_{AV} = \frac{\mu_{AV} C_p}{Pr}, \quad (5.4)$$

где C_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении, Pr – число Прандтля, полагаемое равным $\frac{3}{4}$.

В рамках данной работы расчеты будут проводиться на достаточно гладкой структурированной сетке с использованием явной центрально-разностной аппроксимации правых частей уравнений Навье-Стокса. Коэффициент искусственной вязкости будет

первоначально вычисляться в центрах ячеек, затем его значения на боковых гранях ячеек будут находиться из простой линейной интерполяции вида: $f_{i+1/2,j} = 0.5(f_{i,j} + f_{i+1,j})$. Входящая в формулу (5.3) дивергенция вектора скорости будет вычисляться по теореме Гаусса-Остроградского. При этом значения компонент вектора скорости на боковых гранях ячеек также будет находиться из линейной интерполяции по известным значениям в центрах ячеек. Выражение для характерного размера ячейки для общего случая будет выработано позднее.

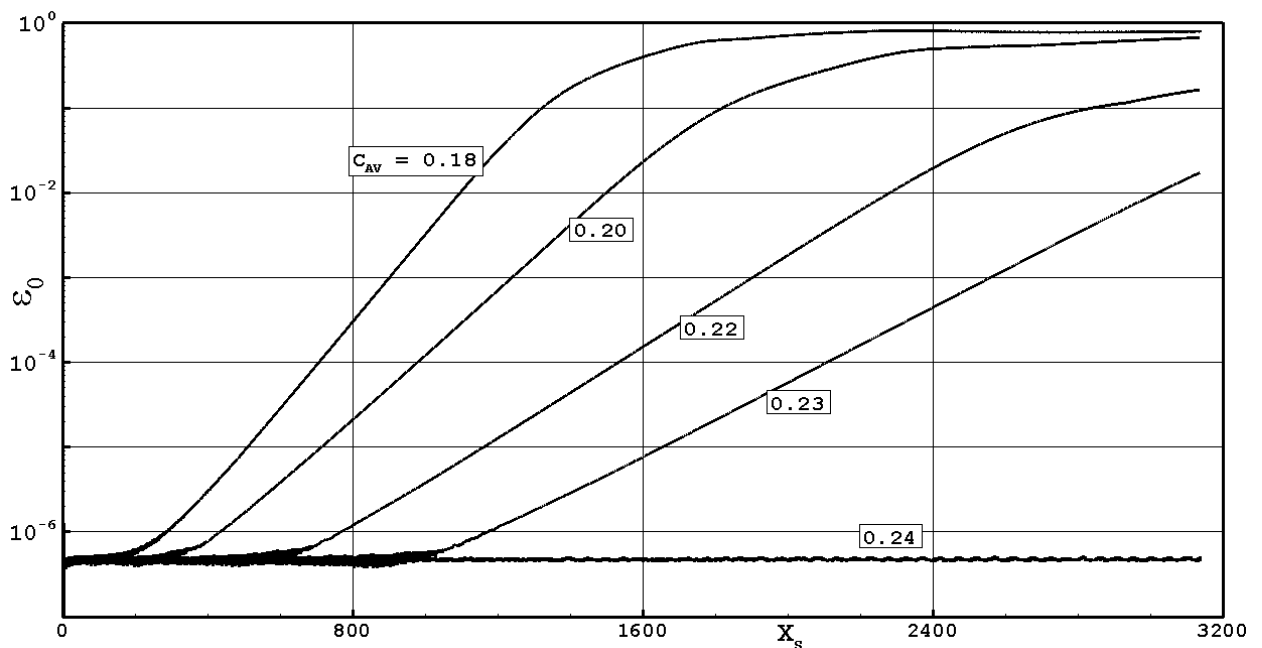


Рисунок 5.4. Развитие неустойчивости в задаче Кёрка. Расчеты по схеме Годунова с искусственной вязкостью ($M_S = 6$, варьируется C_{AV}).

Сначала продемонстрируем эффективность нового метода на задаче Кёрка; в этом случае для характерного размера ячейки имеем: $h = h_x = h_y$. На рисунке 5.4 показана динамика роста возмущений для ударной волны с $M_S = 6$ при различных значениях коэффициента C_{AV} . Видно, что с увеличением C_{AV} неустойчивость ударной волны сначала ослабляется, а затем полностью подавляется. Для данного варианта тестовой задачи минимальная величина C_{AV} , необходимая для подавления неустойчивости, составляет $C_{AV}^{\min} \approx 0.24$. Обратим также внимание на интересную особенность расчетов при значениях C_{AV} немного меньших C_{AV}^{\min} . В этом случае неустойчивость, хотя и характеризуется заметным темпом роста возмущений (наклон кривых на рисунке 5.4), но

обнаруживается с большой задержкой (по этой причине расчетная область была удлинена). Мы объясняем такую особенность действием следующих факторов.

В тестовой задаче Кёрка неустойчивость ударной волны инициируется систематическим, четно-нечетным возмущением центральной линии сетки. Поэтому на начальном этапе счета осцилляции газодинамических параметров (относительно одномерного течения) формируются в окрестности центральной линии тока, и они характеризуются бедным линейчатым спектром (*начальный спектр*). С течением времени такие осцилляции усиливаются и распространяются в пространстве; при этом они взаимодействуют между собой и с границами канала. В результате происходит наполнение спектра колебаний новыми частотами (*наполненный спектр*).

Естественно полагать, что эффективность искусственной вязкости в подавлении осцилляций имеет частотную зависимость. Поэтому использование некоторого конкретного значения C_{AV} может оказаться достаточным для подавления всех осцилляций из начального спектра, но не всех осцилляций из наполненного спектра. В этом случае интенсивность осцилляций из начального спектра будет поддерживаться на некотором равновесном уровне (они будут одновременно генерироваться и подавляться), и от величины этого уровня будет зависеть последующая наполняемость спектра. Если в процессе длительного счета появится колебательная мода, для подавления которой текущего значения C_{AV} будет недостаточно, то с этого момента начнется экспоненциальный рост возмущений. Такого рода спусковой механизм хорошо объясняет специфическое поведение кривых на рисунке 5.4.

Для того чтобы устранить обнаруженную нежелательную особенность задачи Кёрка была проведена ее модификация.

5.2.3 Модификации задачи Кёрка

Прежде всего, в модифицированной задаче Кёрка изменен способ инициирования неустойчивости ударной волны: возмущение вида $\hat{x}_{i_0,j} = x_{i_0,j} + \delta(2 \cdot RND_j - 1)$ вносится в поперечную сеточную линию $i = i_0$; здесь $i_0 = 10$, $\delta = 10^{-4}$, а RND_j – случайные числа, генерируемые в интервале $[0, 1]$. Таким образом, ударная волна получает однократное (в момент прохождения сеточной линии $i = i_0$) возмущение по всему фронту. Ввиду нерегулярности такого возмущения спектр колебаний будет быстро наполняться.

Кроме того, в модифицированной задаче на верхней и нижней границах расчетной области ставится условие периодичности течения. В этом случае границы канала приобретают прозрачность (неотражающее свойство), а алгоритмы расчета граничных и

внутренних ячеек становятся идентичными. Поперечный размер расчетной области увеличивается с $J = 20$ до $J = 50$ (при сохранении размера ячеек).

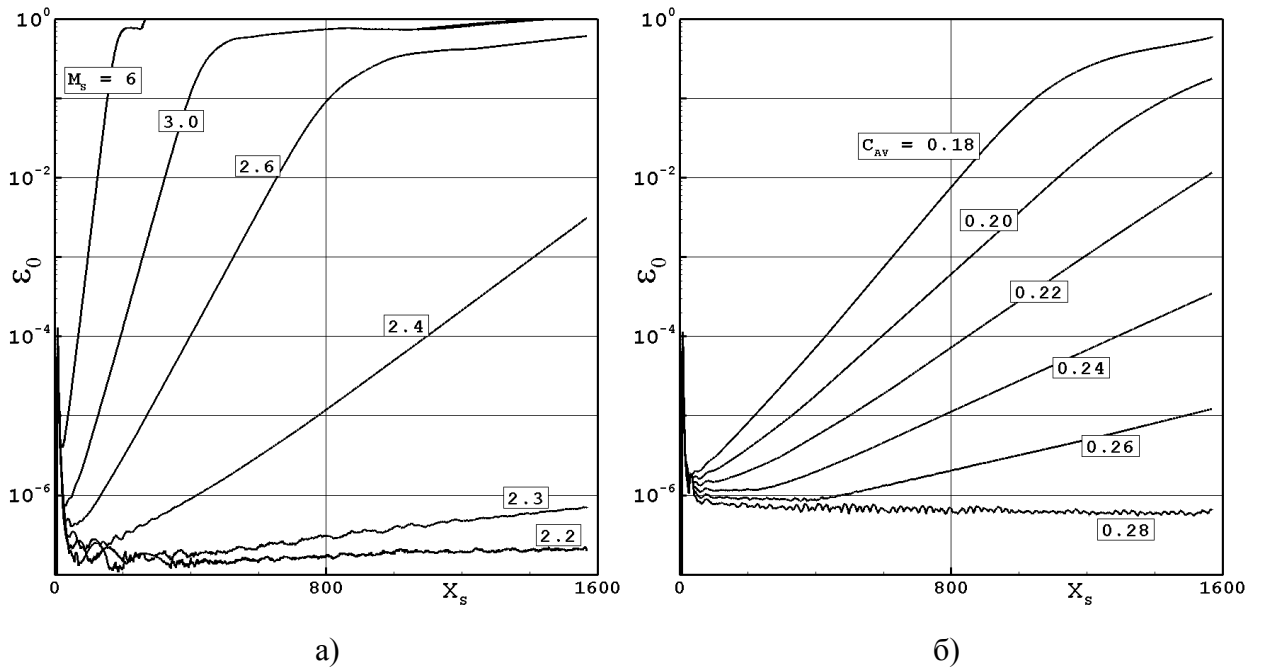


Рисунок 5.5. Развитие неустойчивости в модифицированной задаче Кёрка (поступательная ударная волна). Расчеты по схеме Годунова: а) без искусственной вязкости (варьируется M_S); б) с искусственной вязкостью ($M_S = 6$, варьируется C_{AV}).

На рисунке 5.5 приведены данные расчета модифицированной задачи Кёрка по схеме Годунова. Расчеты без добавления искусственной вязкости (рисунок 5.5а) показывают, что в модифицированной задаче Кёрка ударно-волновая неустойчивость выявляется не менее эффективно, чем в базовой задаче Кёрка (рисунок 5.3а); в новом (модифицированном) варианте пороговое значение ударно-волнового числа Маха оказывается даже немного ниже: $M_S^C \approx 2.2$. Расчеты с добавлением искусственной вязкости (рисунок 5.5б) демонстрируют отсутствие в модифицированной задаче Кёрка нежелательной особенности, которая была обнаружена в базовой задаче Кёрка (рисунок 5.4). В новом варианте: (а) неустойчивость обнаруживается заметно раньше (уже при $x_s = 800$), (б) с ростом C_{AV} наклоны кривых уменьшаются плавно вплоть до горизонтального уровня, и (в) минимальная величина C_{AV} , необходимая для подавления неустойчивости, оказывается заметно выше: $C_{AV}^{\min} \approx 0.28$.

Таким образом, можно сделать вывод, что модифицированная задача Кёрка хорошо подходит для целей дальнейшего тестирования нового метода. Однако в этой задаче

рассматривается только один практически важный случай, а именно моделирование ударной волны, движущейся по неподвижной среде. Для большей полноты предстоящего тестирования рассмотрим также два других распространенных случая: моделирование отраженной ударной волны и стационарной ударной волны.

Модифицированная задача Кёрка: отраженная ударная волна.

Вариант с отраженной ударной волной отличается от предыдущей модификации задачи Кёрка (поступательная ударная волна) следующими изменениями в постановке задачи: начальное состояние газа в расчетной области $(u_x, u_y, \rho, p) = (-u_1, 0, 1, 1)$, эти же параметры определяют втекающий поток на правой границе расчетной области; на левой границе задается непроницаемая стенка.

В данном варианте модифицированной задачи Кёрка поток после прохождения ударной волны практически останавливается (точное решение задачи соответствует неподвижному газу за ударной волной). Поэтому здесь осцилляции в плотности, которые возникают при прохождении ударной волны через «возмущенную» сеточную линию $i = i_0$, имеют тенденцию к «замораживанию». Чтобы оградиться от влияния таких долгоживущих возмущений, в данной задаче при вычислении ε_0 учитываются только точки, расположенные в заданной окрестности фронта ударной волны: $|x_{i,j} - x_s| < 20$, где $x_s = (u_s - u_1) \cdot t$ – координата фронта ударной волны.

На рисунке 5.6 приведены данные расчета модифицированной задачи Кёрка с отраженной ударной волной по схеме Годунова. Как видно из рисунка 5.6а, в данной тестовой задаче пороговое значение ударно-волнового числа Маха составляет величину $M_s^C \approx 2.1$, что незначительно меньше величины, полученной ранее для случая с поступательной ударной волной. Расчеты с добавлением искусственной вязкости (рисунок 5.6б) показывают, что в данной задаче для подавления неустойчивости ударной волны с $M_s = 6$ необходимо заметно меньше добавочной диссипации: $C_{AV}^{\min} \approx 0.18$.

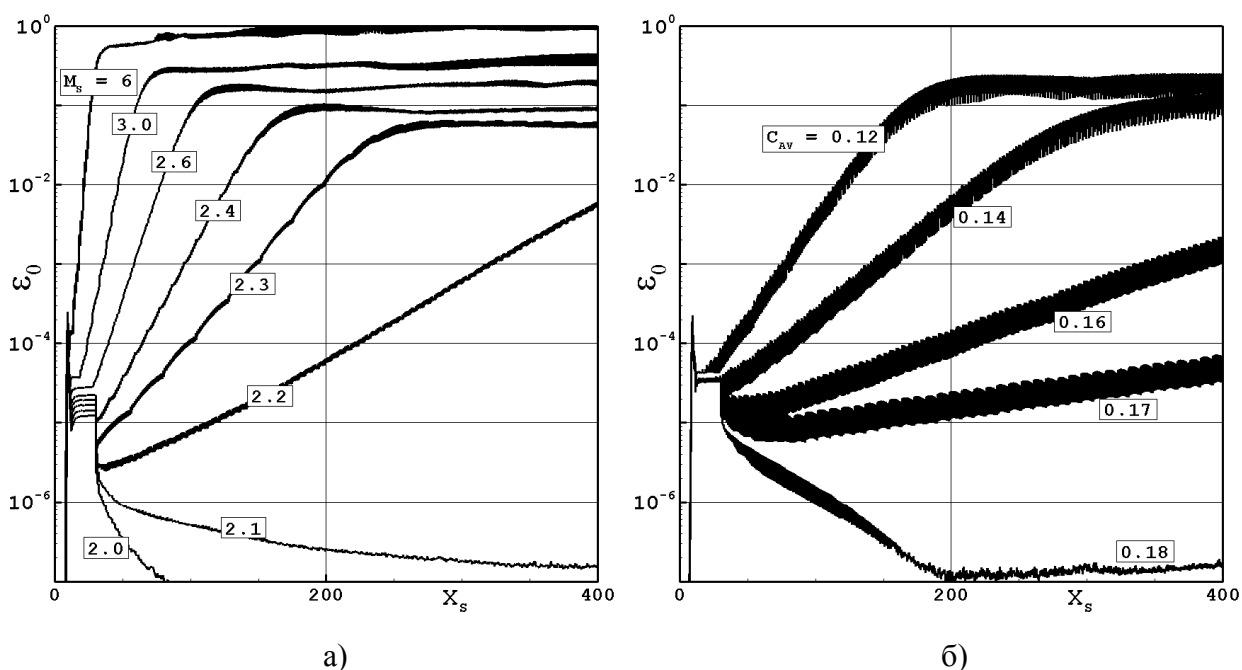


Рисунок 5.6. Развитие неустойчивости в модифицированной задаче Кёрка (отраженная ударная волна). Расчеты по схеме Годунова: а) без искусственной вязкости (варьируется M_s); б) с искусственной вязкостью ($M_s = 6$, варьируется C_{AV}).

Модифицированная задача Кёрка: стационарная ударная волна.

В этом варианте тестовой задачи Кёрка фронт стационарной ударной волны располагается на сеточной линии $i = i_0 = 790$, что соответствует поперечному сечению $x = x_0 = 790$ расчетной области $[0, 800] \times [0, 50]$ в плоскости xu . Соответственно, начальное распределение параметров имеет вид:

$$(u_x, u_y, \rho, P) = \begin{cases} ((u_1 - u_s), 0, \rho_1, P_1), & \text{если } x < x_0, \\ (-u_s, 0, 1, 1), & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

На правой границе расчетной области задается втекающий сверхзвуковой поток с параметрами $(-u_s, 0, 1, 1)$, а на левой границе задается вытекающий поток при заданном давлении p_1 . На верхней и нижней границах расчетной области ставится условие периодичности. Как и в предыдущих вариантах задачи неустойчивость ударной волны генерируется возмущением сетки, но здесь возмущенная сеточная линия $i = i_0$ расположена на фронте ударной волны, а параметр $\delta = 10^{-6}$. При расчете величины ε_0 учитываются все расчетные точки.

На рисунке 5.7 приведены данные расчета модифицированной задачи Кёрка со стационарной ударной волной по схеме Годунова. Заметим, что здесь величина ε_0 дается в зависимости от номера расчетного шага N_{STEP} . Как видно из рисунка 5.7а, в данной

тестовой задаче пороговое значение ударно-волнового числа Маха составляет величину $M_S^C \approx 1.55$, что заметно меньше полученных ранее величин для двух других тестовых задач. Расчеты с добавлением искусственной вязкости (рисунок 5.7б) показывают, что для стационарной ударной волны с $M_S = 6$ минимальная величина C_{AV} , необходимая для подавления неустойчивости, составляет $C_{AV}^{\min} \approx 0.26$.

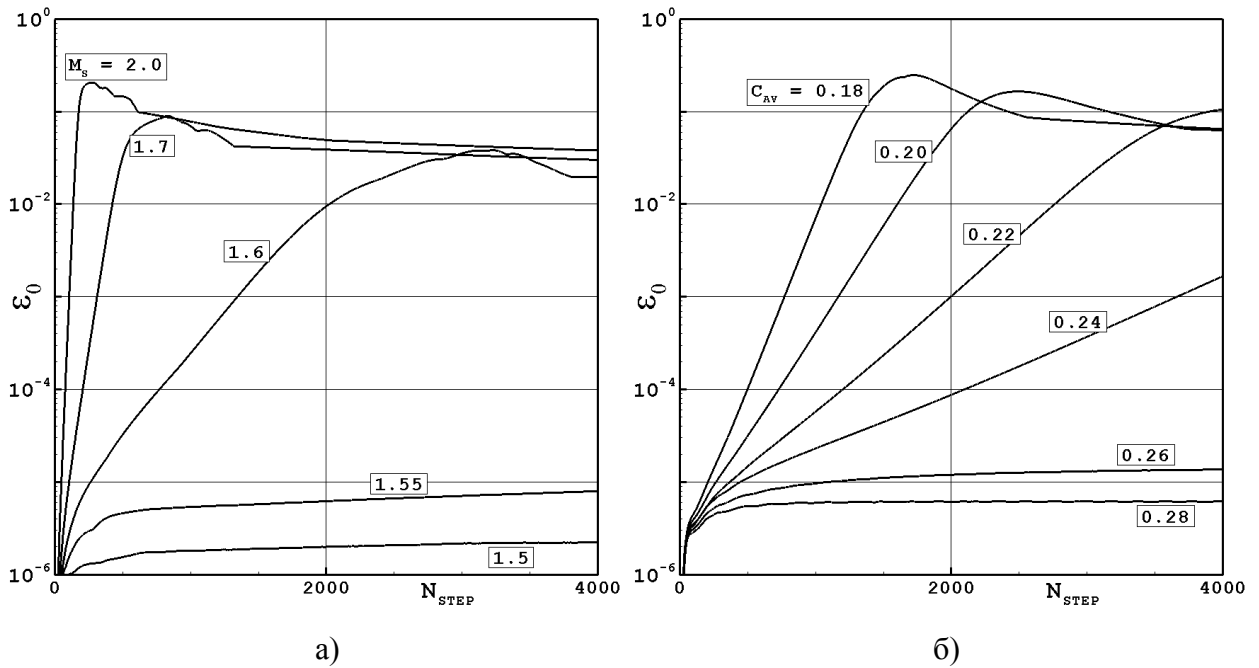


Рисунок 5.7. Развитие неустойчивости в модифицированной задаче Кёрка (стационарная ударная волна). Расчеты по схеме Годунова: а) без искусственной вязкости (варьируется M_S); б) с искусственной вязкостью ($M_S = 6$, варьируется C_{AV}).

Принцип действия искусственной вязкости.

Представляется интересным на примере модификаций задачи Кёрка рассмотреть подробнее механизм подавления неустойчивости при добавлении членов искусственной вязкости.

Численный анализ показал, что подавление неустойчивости происходит за счет компонент тензора вязких напряжений, реагирующих на сдвиговую деформацию – членов вида τ_{xy} . Они действуют на сторонах ячеек, расположенных вдоль линий тока. В тестовых задачах с поступательной и отраженной ударной волной включение (активация) этих членов является необходимым и достаточным условием для подавления неустойчивости.

В задаче со стационарной ударной волной реализуется более сложная схема. При отсутствии размывания ударной волны члены вида τ_{xy} хотя и действуют в некоторых

ячейках (ближайших к фронту ударной волны), но оказываются не в состоянии подавить неустойчивость. С добавлением членов вида τ_{xx} (действуют на сторонах ячейках, расположенных поперек линий тока) происходит размывание ударной волны, после чего подавление неустойчивости становится возможным. Отсюда можно заключить, что неустойчивость подавляется за счет действия членов вида τ_{xy} (диссипативная реакции на сдвиговую деформацию) внутри размытого фронта ударной волны.

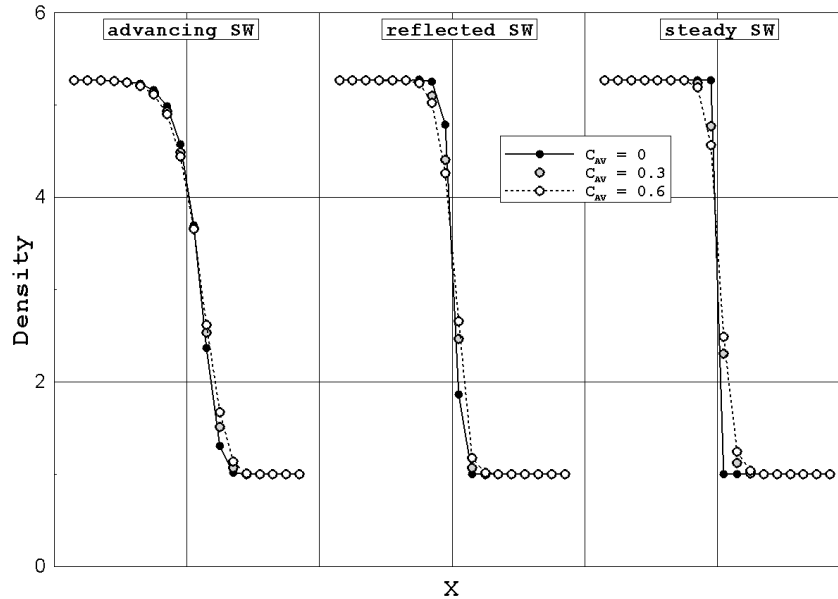


Рисунок 5.8. Уширение ударной волны за счет искусственной вязкости (схема Годунова; $M_s = 6$).

На рисунке 5.8 приведены данные по уширению ударной волны за счет искусственной вязкости в трех тестовых задачах. Показаны профили, полученные по схеме Годунова как в оригинальном варианте ($C_{AV} = 0$), так и с добавлением искусственной вязкости ($C_{AV} = 0.3$ и 0.6). Заметим, что в представленных расчетах ударно-волновая неустойчивость не инициировалась (сеточное возмущение отключалось), поэтому решения при $C_{AV} = 0$ оставались одномерными.

Итак, мы модифицировали задачу Кёрка и сформировали три задачи, которые далее будут использоваться при проведении параметрического тестирования нового метода борьбы с «карбункул»-неустойчивостью. Главная цель такого тестирования заключается в подборе значения коэффициента C_{AV} и выражения для характерного размера ячейки h ,

обеспечивающих подавление неустойчивости в широком диапазоне определяющих параметров.

5.2.4 Настройка метода на двумерных задачах

Влияние ударно-волнового числа Маха.

Рассмотрим влияние ударно-волнового числа Маха на C_{AV}^{\min} , минимальную величину C_{AV} , необходимую для подавления неустойчивости. На рисунке 5.9 показана зависимость C_{AV}^{\min} от M_s для схемы Годунова. Видно, что в каждой тестовой задаче – с поступательной, отраженной или стационарной ударной волной (соответственно, сплошная, штриховая или пунктирная линия), величина C_{AV}^{\min} монотонно растет с ростом числа Маха, асимптотически приближаясь к предельному значению. Характер обнаруженной зависимости позволяет в последующих тестовых расчетах ограничиться рассмотрением только вариантов с $M_s = 20$, когда значения C_{AV}^{\min} близки к максимальным (оценка сверху).

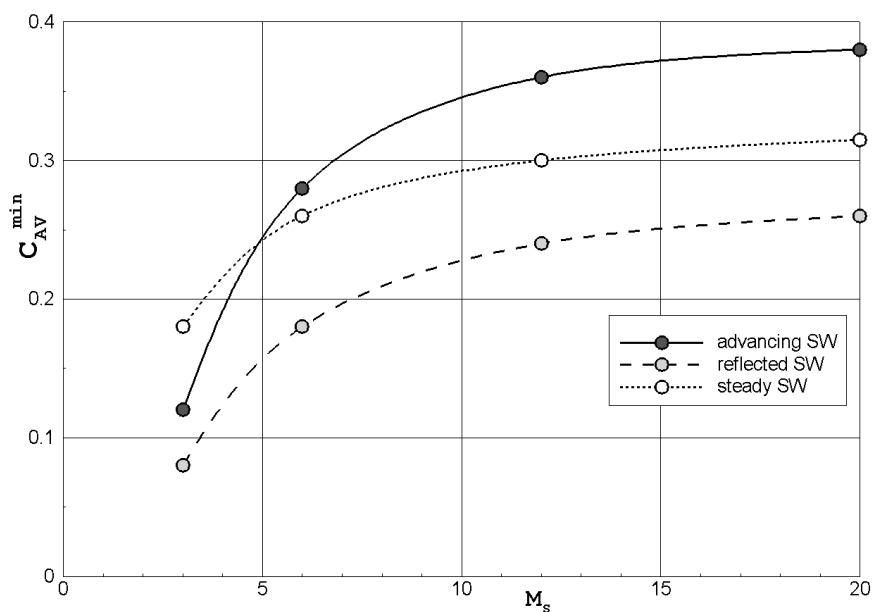


Рисунок 5.9. Зависимость C_{AV}^{\min} от ударно-волнового числа Маха (схема Годунова).

Влияние сетки (выбор выражения для характерного размера ячейки).

Обратимся теперь к проблеме вычисления характерного размера ячейки в случае, когда сеточные ячейки деформированы (относительно квадрата), но сама сетка остается гладкой и структурированной. Заметим, что, поскольку $\mu_{AV} \sim h^2$, то в случае сильной

сеточной деформации значения C_{AV}^{\min} оказываются очень чувствительными к способу вычисления характерного размера ячейки.

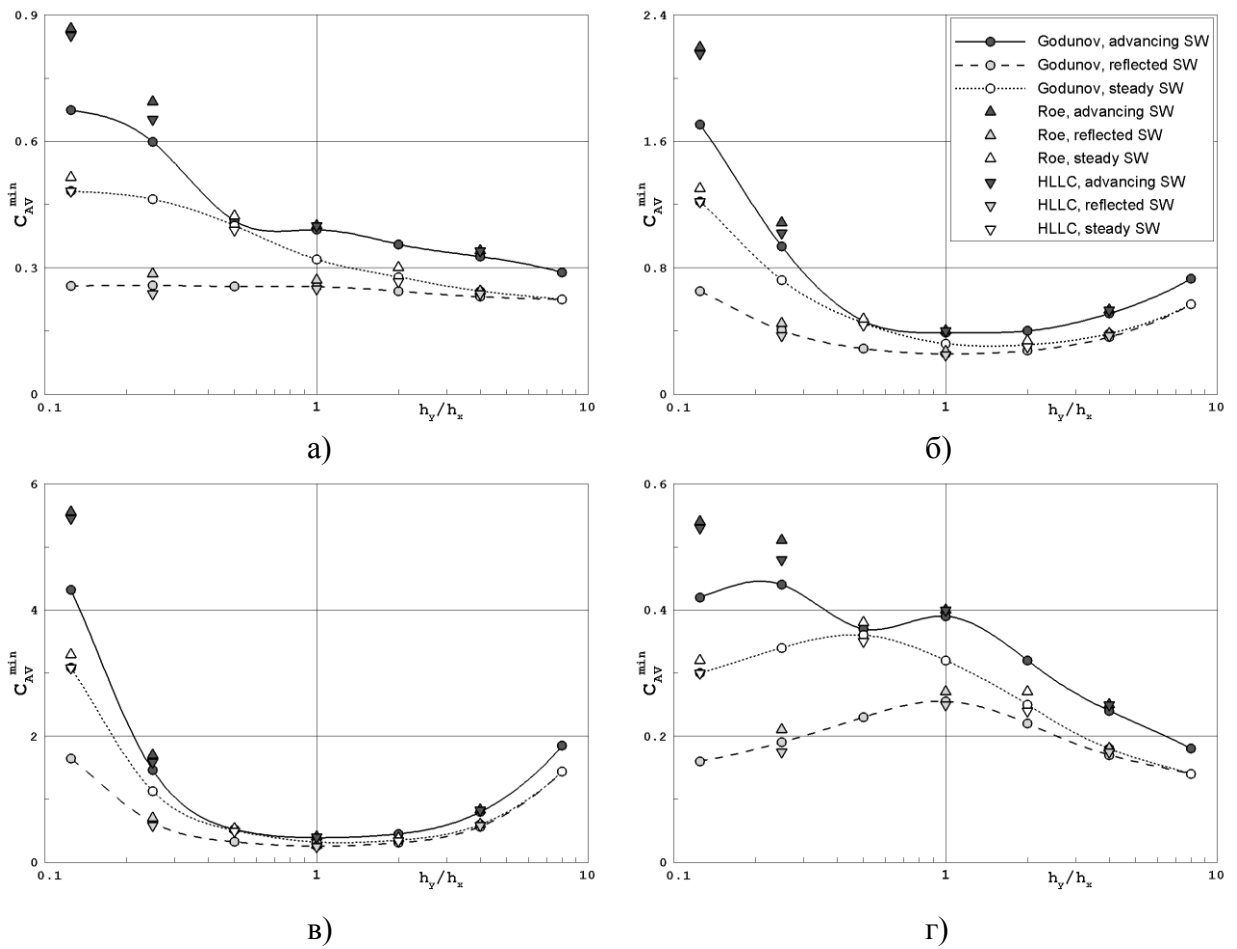


Рисунок 5.10. Зависимость C_{AV}^{\min} от коэффициента растяжения ячеек. Расчеты тестовых задач по схеме Годунова, схеме Роу и схеме HLLC ($M_S = 20$). Варианты формулы для характерного размера ячеек: а) $h = (h_x + h_y) / 2$; б) $h = \sqrt{h_x h_y}$; в) $h = 2h_x h_y / (h_x + h_y)$, г) $h = \sqrt{(h_x^2 + h_y^2) / 2}$.

Сначала рассмотрим случай растяжения ячеек, для чего в тестовых задачах типа задачи Кёрка квадратные ячейки заменим на прямоугольные ($h_y \neq h_x$). На рисунке 5.10 представлены результаты обработки многочисленных расчетов тестовых задач с поступательной, отраженной и стационарной ударной волной при $M_S = 20$; расчеты проводились по различным схемам (схема Годунова, схема Роу и схема HLLC) в диапазоне соотношения сторон ячейки $1/8 \leq h_y/h_x \leq 8$. Представлены четыре варианта обработки, отличающихся способом вычисления характерного размера ячейки. Из

сопоставления видно, что использование формулы $h = \sqrt{(h_x^2 + h_y^2)}/2$ дает наилучший результат. В этом случае использование величины $C_{AV} = 0.6$ гарантирует устойчивый счет во всех рассмотренных тестах. Также отметим, что среди рассмотренных вариантов наиболее «тяжелым» является случай расчета поступательной ударной волны на сетке, которая сильно вытянута в продольном направлении ($h_y/h_x \ll 1$).

Теперь рассмотрим случай сдвиговой деформации ячеек, для чего внесем изменения в тестовую задачу с поступательной ударной волной:

1) в изначально прямоугольной расчетной сетке с $J = 48$ (количество ячеек в поперечном направлении) и $h_y/h_x = 1, 1/2, 1/4$ или $1/8$ вертикальные сеточные линии $x = \text{const}$ заменим наклонными линиями $x + y = \text{const}$, как показано на рисунке 5.11;

2) в ячейках с центрами, расположенными в области $x < 0$, в начальный момент времени ($t = 0$) и в процессе счета ($t > 0$) будем поддерживать параметры втекающего потока $(u_1, 0, \rho_1, p_1)$;

3) на верхней и нижней границах расчетной области установим условие периодичности течения с учетом сдвига (ячейка нижней границы с номером i граничит с ячейкой верхней границы с номером $i + 48 \cdot h_y/h_x$).

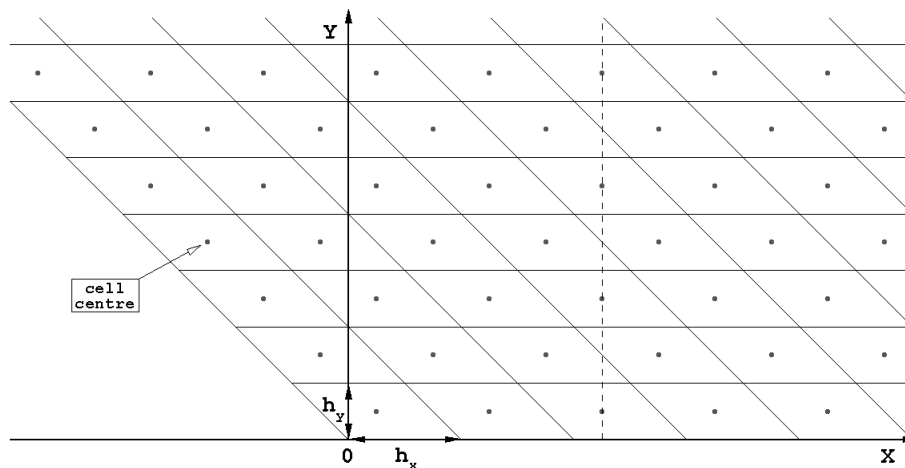


Рисунок 5.11. Фрагмент сетки со сдвиговой деформацией ячеек при $h_y/h_x = 1/2$.

Нетрудно увидеть, что после внесения указанных изменений численное решение тестовой задачи остается квазиодномерным в том смысле, что параметры течения в расчетных ячейках, расположенных на одной линии $x = \text{const}$, идентичны. Однако неустойчивость ударной волны проявляется и в этом варианте тестовой задачи: внесение

небольшого сеточного возмущения (аналогичного тому, как это делалось в случае с прямоугольной сеткой) со временем приводит к существенному искажению, как фронта ударной волны, так и всего течения в целом. Добавление искусственной вязкости здесь также приводит к подавлению неустойчивости, что можно наблюдать по степени отклонения решения от квазиодномерного потока.

Таблица 5.1. Значения C_{AV}^{\min} в тестовой задаче с поступательной ударной волной на сетке со сдвиговой деформацией ячеек (схема Годунова, $M_s = 20$).

$h_y / h_x =$	1	1/2	1/4	1/8
$h = \sqrt{(h_\xi^2 + h_\eta^2)} / 2$	0.25	1.60	1.24	1.07
$h = \sqrt{(d_1^2 + d_2^2)} / 4$	0.13	0.80	0.62	0.53
$h = \max(d_1, d_2) / \sqrt{2}$	0.08	0.48	0.43	0.43

В таблице 5.1 представлены данные обработки расчетов тестовой задачи с поступательной ударной волной на сетке со сдвиговой деформацией ячеек. Значения C_{AV}^{\min} приводятся для трех способов вычисления характерного размера ячейки, каждый из которых применительно к прямоугольной ячейке сводится к выбранной ранее формуле:

$$h = \sqrt{(h_x^2 + h_y^2)} / 2.$$

Первым, наиболее очевидным способом вычисления характерного размера ячейки является использование расстояний между сеточными линиями, определяемых как

$$h_\xi = \frac{V}{S_\xi}, \quad h_\eta = \frac{V}{S_\eta},$$

где V – объем ячейки, S_ξ и S_η – площади боковых граней ячейки в двух сеточных направлениях. В этом случае только вариант с $h_y / h_x = 1$ дает значение $C_{AV}^{\min} < 0.6$; в остальных вариантах для преодоления неустойчивости требуется добавление существенно большей диссипации. Это наблюдение согласуется с опытом расчета задачи о двойном маховском отражении, когда в окрестности ножки Маха ячейки сетки сильно вытянуты и скошены. Как ранее было замечено, среди тестовых задач на ударно-волновую неустойчивость эта задача является одной из наиболее труднопреодолимых.

Чтобы в рассмотренных тестовых расчетах подавление неустойчивости обеспечивалось при меньших значениях C_{AV}^{\min} , необходимо перейти к иному способу вычисления характерного размера ячейки. Подходящим для этой цели оказалось

использование длин диагоналей ячейки, d_1 и d_2 . Так, в таблице 5.1 приведены данные, относящиеся к использованию (а) осреднения вида $h = \sqrt{(d_1^2 + d_2^2)/4}$ и (б) максимальной длины. Видно, что последний способ, т.е. выражение

$$h = \max(d_1, d_2) / \sqrt{2} \quad (5.5)$$

дает наилучший результат. В этом случае использование выбранной ранее величины $C_{AV} = 0.6$ обеспечивает устойчивый счет при всех рассмотренных сдвиговых деформациях ячейки.

Влияние числа Куранта.

Напомним, что все предыдущие расчеты проводились при одном значении числа Куранта: $C_{cfl} = 0.8$. Теперь исследуем возможное влияние C_{cfl} на полученные результаты, но сначала выпишем относящиеся к делу соотношения.

В данной работе рассматриваются явные конечно-разностные схемы, для которых существует ограничение на величину расчетного шага Δt (условие Куранта-Фридрихса-Леви); в случае решения уравнений Эйлера для этой цели мы используем соотношение вида

$$\Delta t = C_{cfl} \cdot \min_{i,j} \left\{ (\Delta t^{conv})_{i,j} \right\}, \quad \Delta t^{conv} = \left[\frac{|\vec{u} \cdot \vec{n}_\xi| + a}{h_\xi} + \frac{|\vec{u} \cdot \vec{n}_\eta| + a}{h_\eta} \right]^{-1}, \quad (5.6a)$$

где C_{cfl} – число Куранта ($C_{cfl} < 1$), \vec{n}_ξ и \vec{n}_η – единичные нормали к боковым граням ячейки в двух сеточных направлениях.

С добавлением вязких членов мы фактически переходим к решению уравнений Навье-Стокса. В этом случае необходимо учитывать дополнительное ограничение, поэтому соотношение (5.6a) заменяется на

$$\Delta t = C_{cfl} \cdot \min_{i,j} \left\{ \left[\frac{1}{(\Delta t^{conv})_{i,j}} + \frac{1}{(\Delta t^{diff})_{i,j}} \right]^{-1} \right\}, \quad \Delta t^{diff} = \frac{3\rho}{8\mu_{AV}} \left[\frac{1}{h_\xi^2} + \frac{1}{h_\eta^2} \right]^{-1}. \quad (5.6b)$$

Заметим, что искусственная вязкость добавляется только на фронте ударной волны и ее действие на конкретную частицу газа является краткосрочным. Наш опыт показал, что при расчете на сетке умеренного удлинения ($1/2 \leq h_y / h_x \leq 2$) устойчивый счет возможен и при использовании соотношения (5.6a). Однако для большей строгости, в настоящей работе представлены только данные, полученные с использованием соотношения (5.6b).

На рисунке 5.12 показаны зависимости C_{AV}^{\min} от числа Куранта для некоторых вариантов тестовых задач. Кружками обозначены данные расчетов на сетке с

квадратными ячейками. Видно, что в случае расчета стационарной ударной волны зависимость от числа Куранта полностью отсутствует (что и следовало ожидать), а в случае расчета отраженной ударной волны она очень слабая. Наиболее сильная, практически линейная зависимость наблюдается в случае расчета поступательной ударной волны. Хотя уменьшение числа Куранта приводит к росту величины C_{AV}^{\min} , но ее значения остаются в пределах $C_{AV}^{\min} < 0.6$. На рисунке 5.12 треугольниками обозначены данные расчета наиболее критичного варианта из представленных на рисунке 5.10г (расчет поступательной ударной волны на сетке с $h_y/h_x = 1/8$ по схеме Рое). В этом случае диффузионная составляющая в соотношении (5.6b) доминирует над конвективной составляющей, что приводит к ослаблению зависимости C_{AV}^{\min} от числа Куранта. В целом, представленные на рисунке 5.12 данные убеждают в том, что выбранная величина $C_{AV} = 0.6$ является достаточной для подавления ударно-волновой неустойчивости при любых допустимых значениях C_{cf1} .

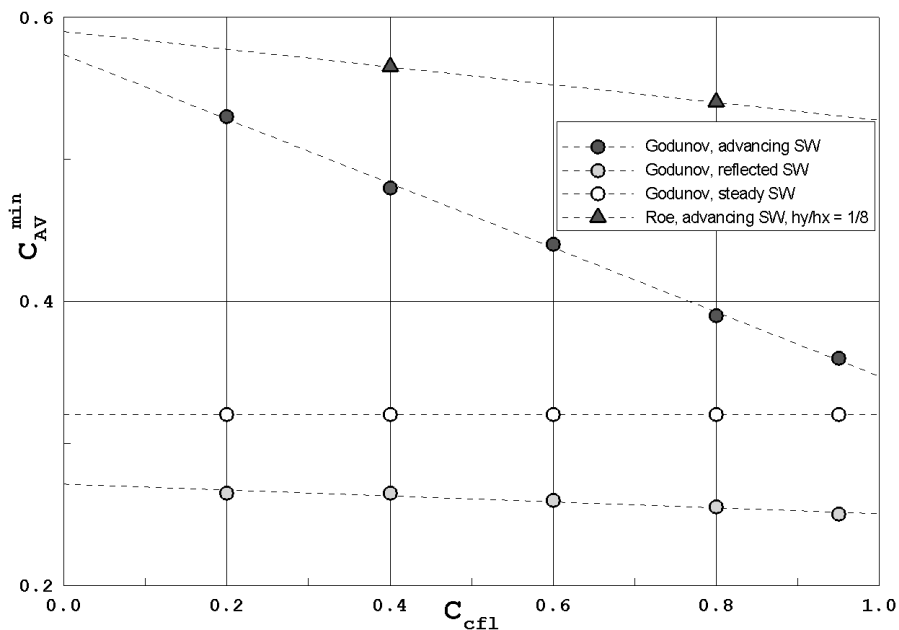


Рисунок. 5.12. Зависимость C_{AV}^{\min} от числа Куранта (схема Годунова при $h_y = h_x$ и схема Рое при $h_y/h_x = 1/8$; $M_S = 20$).

Влияние показателя адиабаты.

В завершение параметрического исследования рассмотрим влияние показателя адиабаты газа. На рисунке 5.13 представлены данные, полученные по схеме Годунова для различных значений γ (расчеты проводились на квадратной сетке). Можно видеть, что

зависимость $C_{AV}^{\min}(\gamma)$ является нелинейной для любого из рассмотренных тестовых вариантов, причем для наиболее критичного варианта (поступательная ударная волна, черные кружки) она практически пропорциональна функции $(\gamma + 1)/(\gamma - 1)$. Опираясь на эти данные можно предложить поправку для рекомендованного значения C_{AV} на случай проведения расчетов с показателем адиабаты, отличным от 1.4:

$$C_{AV} = 0.6 \cdot f(\gamma), \quad f(\gamma) = \frac{(\gamma + 1)}{6(\gamma - 1)}. \quad (5.7)$$

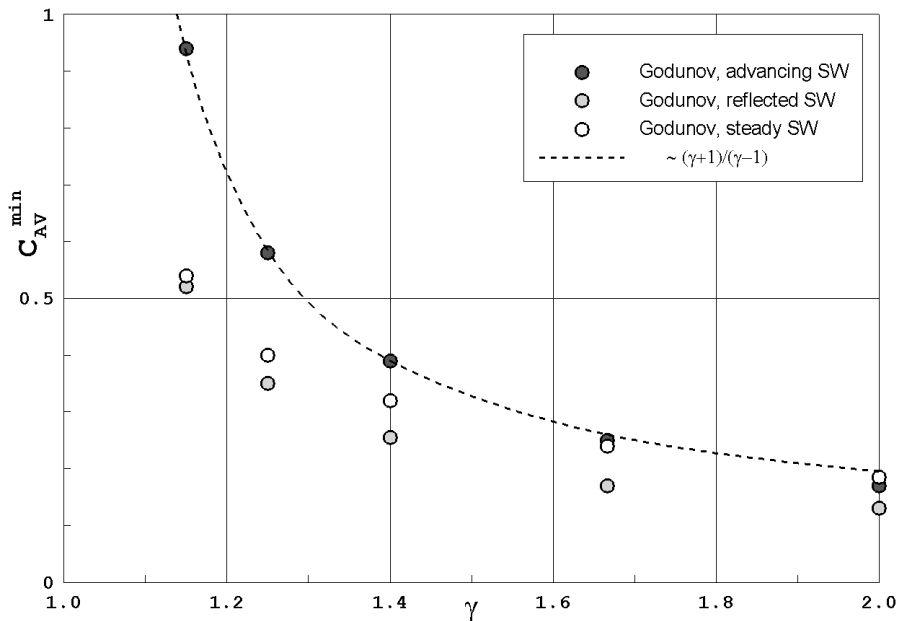


Рисунок 5.13. Зависимость C_{AV}^{\min} от показателя адиабаты (схема Годунова при $h_y = h_x$; $M_S = 20$).

5.2.5 Настройка метода на трехмерных задачах

Рассмотрим модификацию тестовой задачи Кёрка (поступательная ударная волна), описанную в предыдущем разделе и использованную для настройки метода искусственной вязкости на двумерных задачах. Ее обобщение на трехмерный случай осуществляется простым способом – добавляется координатное направление z с сеточным разбиением и граничными условиями аналогичными тем, что используются для координатного направления y . В результате получается трехмерная тестовая задача типа задачи Кёрка.

На рисунке 5.14 представлены данные расчета трехмерной задачи Кёрка на кубической сетке при $M_S = 6$. Можно видеть, что при использовании оригинальной

схемы Роу развивается сильная ударно-волновая неустойчивость, однако добавление искусственной вязкости приводит к подавлению неустойчивости.

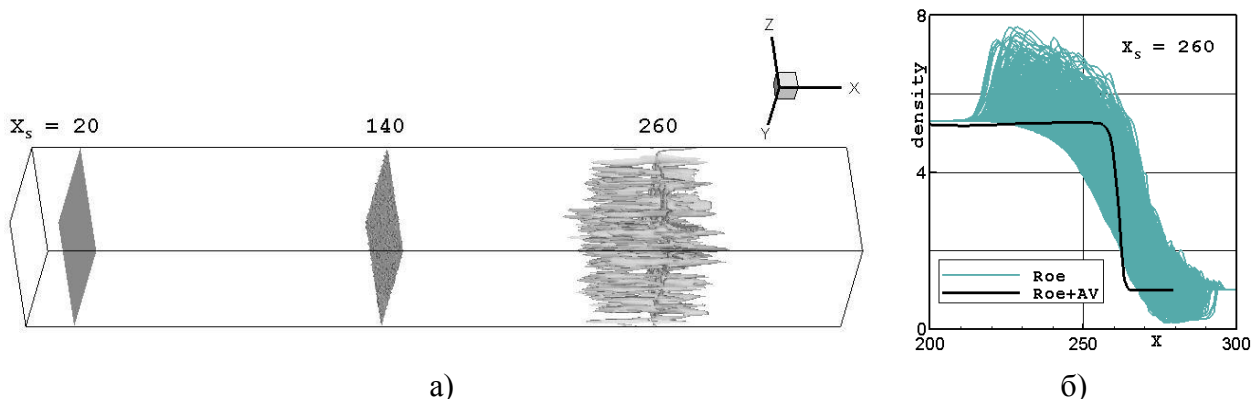


Рисунок 5.14. Данные расчета трехмерной задачи Кёрка с $M_S = 6$: а) изоповерхности плотности ($\rho = 4.5$ и 5.5) для трех моментов времени, соответствующих $x_s = 20, 140$ и 260 (схема Роу); б) осевые профили плотности для $x_s = 260$, полученные по схеме Роу в оригинальном варианте и с добавлением искусственной вязкости ($C_{AV} = 0.3$).

На рисунке 5.15а приведены зависимости ε_0 от расстояния, пройденного ударной волной ($x_s = u_s \cdot t$), для различных ударно-волновых чисел Маха, а на рисунке 5.15б показана динамика роста возмущений для ударной волны с $M_S = 6$ при различных значениях коэффициента C_{AV} . Если сравнить эти данные с аналогичными данными для двумерного варианта тестовой задачи Кёрка (см. рисунок 5.5), то обнаруживается их большое сходство. Действительно, в трехмерном случае пороговое значение ударно-волнового числа Маха $M_S^C \approx 2.3$ против $M_S^C \approx 2.2$ в двумерном случае; минимальная величина C_{AV} , необходимая для подавления неустойчивости ударной волны с $M_S = 6$, составляет $C_{AV}^{\min} \approx 0.28$ в обоих случаях. Отсюда можно заключить, что модель искусственной вязкости, выбранная в предыдущем разделе для подавления ударно-волновой неустойчивости в двумерных задачах, можно перенести на трехмерный случай с оговоркой: выражение для характерного размера ячейки должно быть распространено на трехмерный случай, а рекомендованное для использования в двумерных расчетах значение $C_{AV} = 0.6$ возможно следует немного скорректировать.

Чтобы выполнить эту задачу, было проведено исследование на различных модификациях тестовой задачи Кёрка, его результаты представлены в таблице 5.2. Во всех случаях поступательная ударная волна при $M_S = 20$ рассчитывалась по схеме Годунова.

Рассматривались случаи, когда ячейки сетки являются прямоугольными параллелепипедами (сетка типа А в таблице), со сдвиговой деформацией ячеек только в направлении y (сетка типа В) или одновременно в направлениях y и z (сетка типа С). Подробное описание способа построения сетки со сдвиговой деформацией ячеек было приведено ранее.

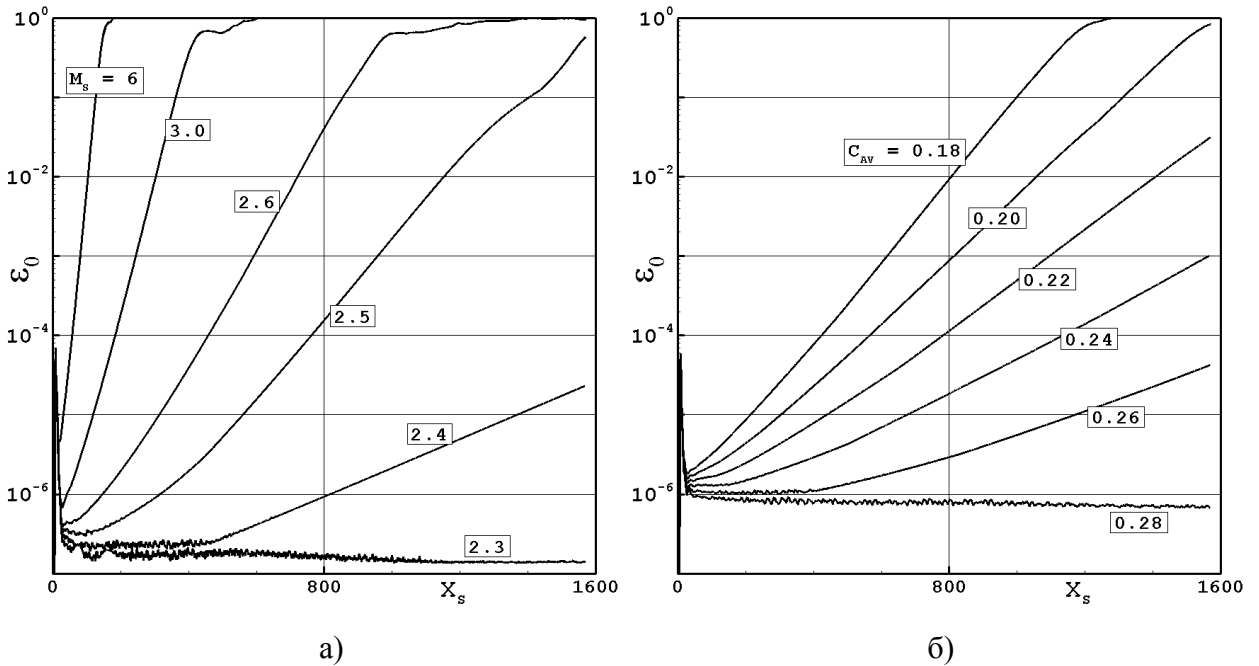


Рисунок 5.15. Развитие неустойчивости в трехмерной задаче Кёрка. Расчеты по схеме Годунова: а) без искусственной вязкости (варьируется M_S); б) с искусственной вязкостью ($M_S = 6$, варьируется C_{AV}).

Таблица 5.2. Значения C_{AV}^{\min} в тестовой задаче с поступательной ударной волной.

Тип сетки	А	А	А	А	А	В	В	С	С
$h_y / h_x =$	1	1/4	1/4	4	4	1/2	1/4	1/2	1/2
$h_z / h_x =$	1	1	1/4	1	4	1/4	1/2	1/2	1/4
C_{AV}^{\min} при $h = d_{\max}^{(S)}$	0.44	0.62	0.56	0.31	0.14	0.60	0.43	0.64	0.64
C_{AV}^{\min} при $h = d_{\max}^{(V)}$	0.44	0.90	0.80	0.43	0.20	0.88	0.56	0.53	0.71

Представленные в таблице 5.2 значения C_{AV}^{\min} (минимальная величина C_{AV} , необходимая для подавления неустойчивости в конкретном варианте тестовой задачи) даны для двух способов расчета характерного размера ячейки:

$$h = d_{\max}^{(S)} \equiv \max_i (d_i^{(S)}) / \sqrt{2}, \quad (5.8a)$$

$$h = d_{\max}^{(V)} \equiv \max_i (d_i^{(V)}) / \sqrt{3}, \quad (5.8b)$$

где $d_i^{(S)}$ – длины диагоналей боковых граней ячейки, $d_i^{(V)}$ – длины объемных диагоналей ячейки. Оба варианта согласуются с полученным ранее выражением (5.5) для использования в двумерных расчетах. Заметим, что в случае, когда ячейка является параллелепипедом с реберными векторами \vec{l}_1 , \vec{l}_2 и \vec{l}_3 , выражения (5.8) можно переписать:

$$h = d_{\max}^{(S)} = \sqrt{\frac{\max(d_{12}^2, d_{23}^2, d_{13}^2)}{2}},$$

$$h = d_{\max}^{(V)} = \sqrt{\frac{l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 + 2|(\vec{l}_1 \cdot \vec{l}_2)| + 2|(\vec{l}_2 \cdot \vec{l}_3)| + 2|(\vec{l}_1 \cdot \vec{l}_3)|}{3}}.$$

где $d_{jk}^2 = l_j^2 + l_k^2 + 2|(\vec{l}_j \cdot \vec{l}_k)|$.

Как можно видеть из таблицы 5.2, использование выражения $h = d_{\max}^{(S)}$ обеспечивает устойчивый счет любого из рассмотренных вариантов при $C_{AV} = 0.64$, тогда как для выражения $h = d_{\max}^{(V)}$ требуется значение $C_{AV} = 0.90$, что заметно выше. Исходя из полученных результатов, можно рекомендовать в трехмерных расчетах использовать выражение $h = d_{\max}^{(S)}$ и коэффициент $C_{AV} = 0.75$ (это значение взято с запасом).

5.2.6 Численные примеры

В данном разделе будут представлены примеры решения тестовых задач, демонстрирующие эффективность применения искусственной вязкости для подавления «карбункул»-неустойчивости. В качестве базовых численных методов решения уравнений Эйлера будут использоваться схема Годунова, схема Роу, схема HLLC, схема AUSM⁺ и схема Сафронова. Добавление диссипации в виде правых частей уравнений Навье-Стокса будет осуществляться в соответствии с методикой, описанной в предыдущем разделе. При этом будут использоваться: соотношения (5.3) и (5.4) для коэффициентов искусственной вязкости и теплопроводности; соотношение (5.5) для h и $C_{AV} = 0.6$ в двумерном случае; соотношение (5.8a) для h и $C_{AV} = 0.75$ в трехмерном случае. Поскольку во всех тестовых

задачах рассматривалось течение совершенного газа с $\gamma = 1.4$, поправка (5.7) для C_{AV} не использовалась.

Сверх- и гиперзвуковое обтекание цилиндра.

Задача об обтекании цилиндра сверхзвуковым потоком является первой тестовой задачей, где феномен «карбункула» был обнаружен и описан. К настоящему времени для целей тестирования используют различные варианты этой задачи, отличающиеся как числом Маха набегающего потока, M_∞ , так и расчетной сеткой. В данной работе задача рассчитывалась в следующей постановке.

Двумерная постановка. Расчетная область $[1, 3] \times [-75^\circ, 75^\circ]$ в полярных координатах $r\varphi$ покрывается регулярной сеткой с количеством ячеек $J \times I = 90 \times 160$. На нижней и верхней границах расчетной области ($i = 0$ и $i = I$) задается условие свободного вытекания. На границе $j = 0$ (поверхность цилиндра) задается непроницаемая стенка, а на границе $j = J$ задается втекающий поток с параметрами $(u_x, u_y, \rho, p) = (\sqrt{\gamma} M_\infty, 0, 1, 1)$.

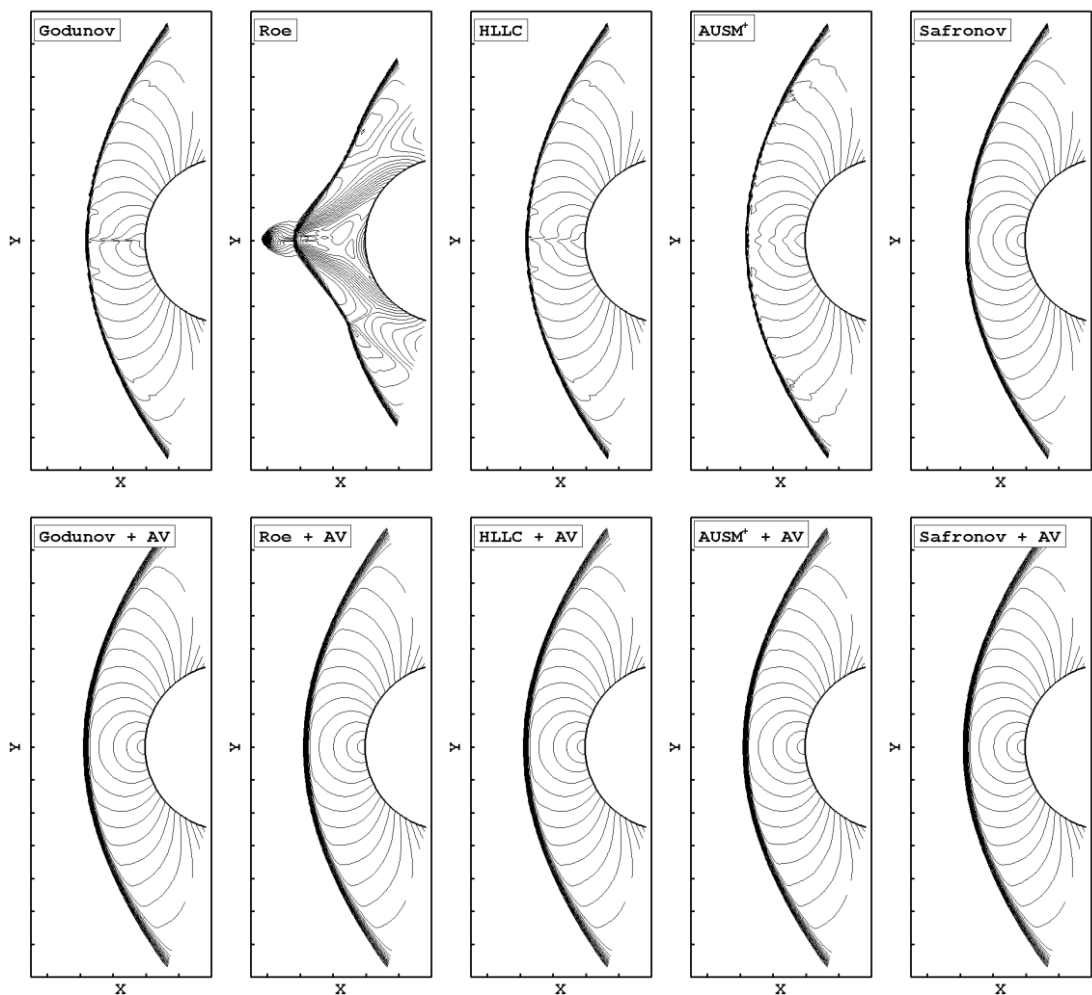


Рисунок 5.16. Сверхзвуковое обтекание цилиндра при $M_\infty = 3$. Изолинии числа Маха через 0.1 до 2.5. Верхний ряд: оригинальные схемы, нижний ряд: те же схемы с добавлением искусственной вязкости.

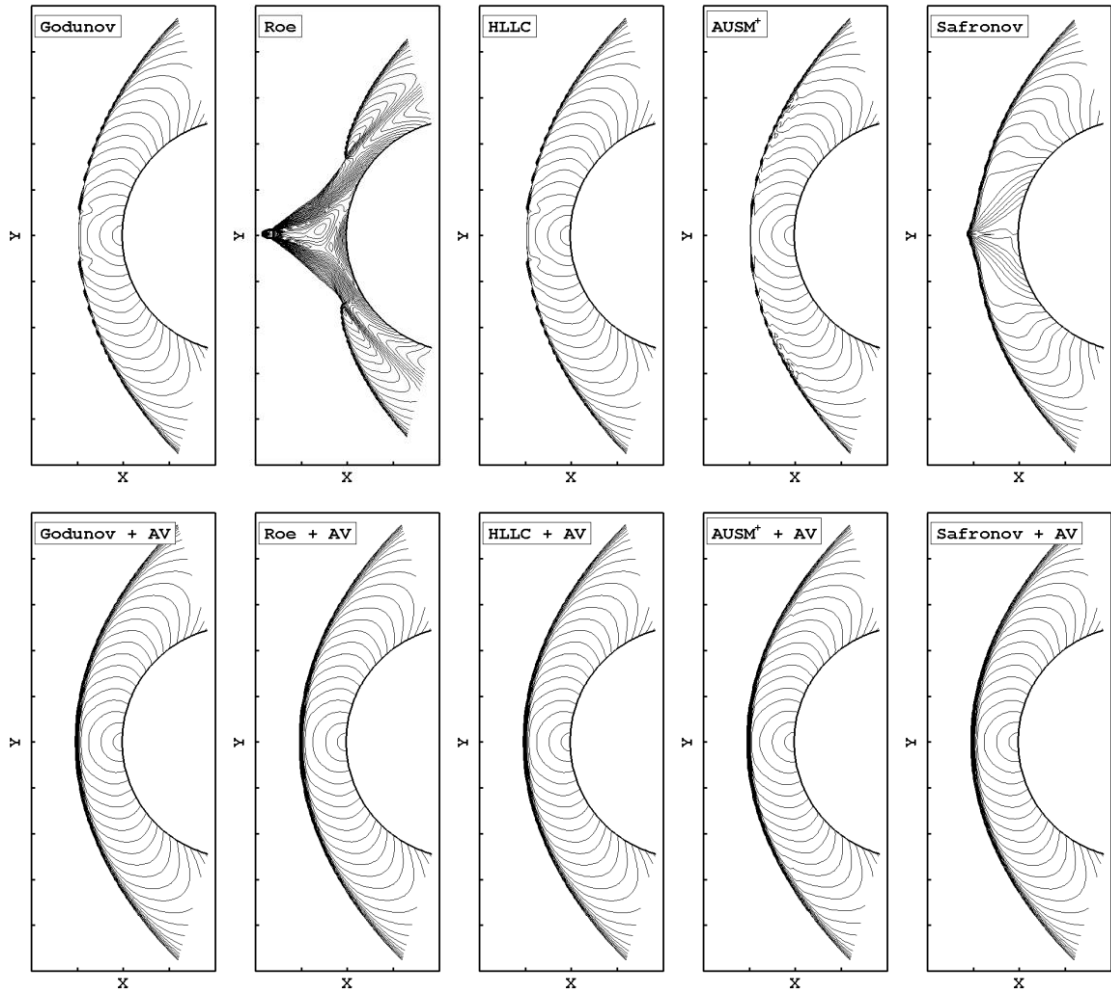


Рисунок 5.17. Гиперзвуковое обтекание цилиндра при $M_\infty = 20$. Изолинии числа Маха через 0.1 до 2.5. Верхний ряд: оригинальные схемы, нижний ряд: те же схемы с добавлением искусственной вязкости.

Результаты расчетов задачи при $\gamma = 1.4$ и двух значениях числа Маха набегающего потока, $M_\infty = 3$ и $M_\infty = 20$, представлены, соответственно, на рисунках 5.16 и 5.17. Можно видеть, что хотя феномен «карбункула» наиболее ярко проявляется при использовании схемы Роу, другие схемы также страдают от ударно-волновой неустойчивости. При добавлении искусственной вязкости (нижние группы рисунков) в каждом из тестовых вариантов ситуация исправляется, причем все схемы демонстрируют близкие результаты.

Трехмерная постановка. В отличие от двумерной постановки здесь добавлена координата z с равномерным разбиением интервала $0 \leq z \leq 1$ на 45 ячеек. На границах $z = 0$ и $z = 1$ ставится условие периодичности течения.

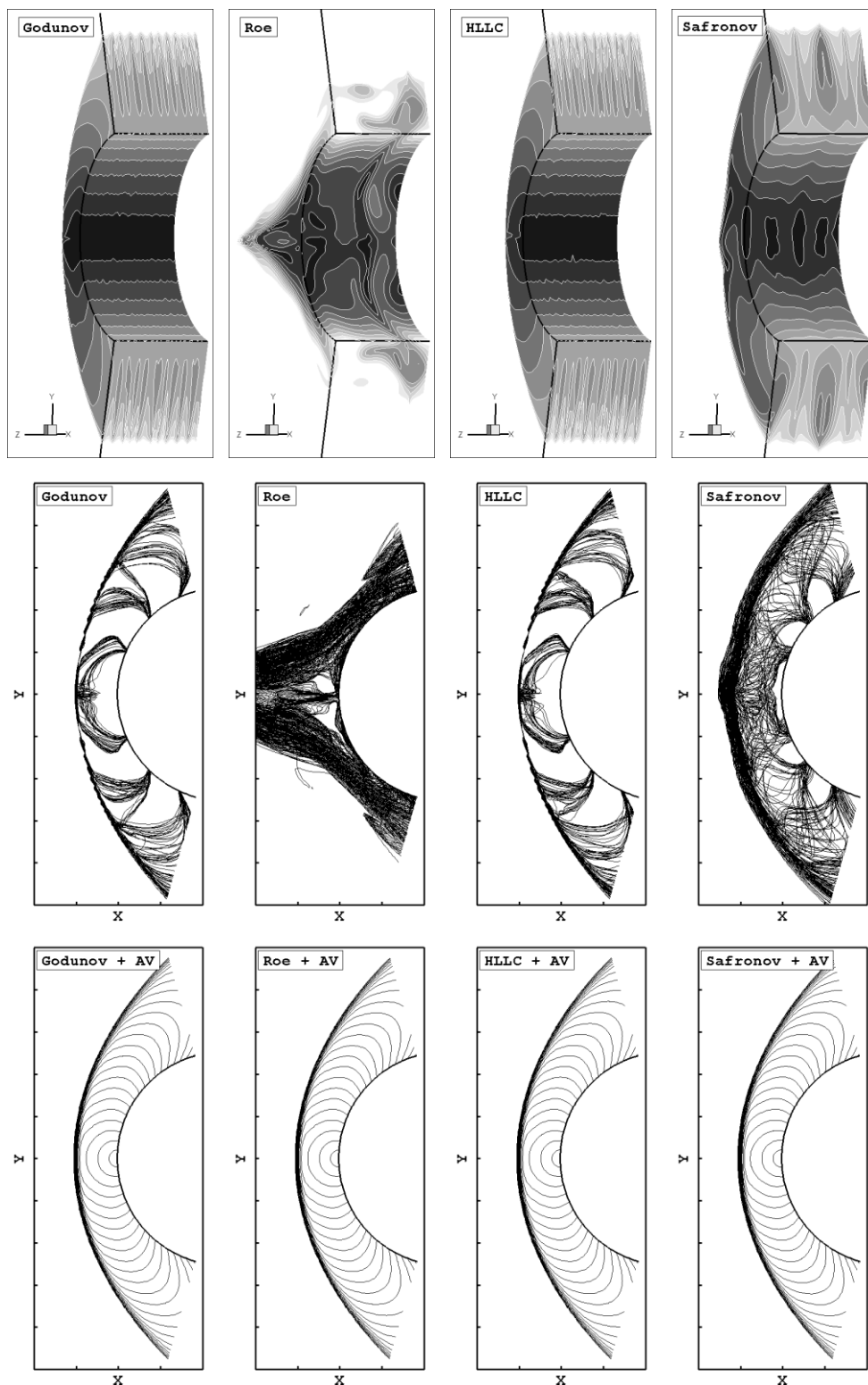


Рисунок 5.18. Гиперзвуковое обтекание цилиндра при $M_\infty = 20$. Верхний ряд: изолинии числа Маха через 0.25 на границах расчетной области (оригинальные схемы); центральный ряд: изолинии числа Маха через 0.5 во всех расчетных сечениях

$z = \text{const}$ (оригинальные схемы); нижний ряд: изолинии числа Маха через 0.1 во всех расчетных сечениях $z = \text{const}$ (схемы с добавлением искусственной вязкости).

Результаты расчетов задачи при $M_\infty = 20$ с использованием схемы Годунова, схемы Роу, схемы HLLC и схемы Сафронова представлены на рисунке 5.18. Приведены изолинии числа Маха на границах расчетной области и в расчетных сечениях $z = \text{const}$, полученные как с применением оригинальных схем, так и с добавлением искусственной вязкости.

Видно, что все четыре рассмотренные схемы подвержены ударно-волновой неустойчивости (верхний и средние ряды на рисунке), причем феномен «карбункула» наиболее сильно проявляется при использовании схемы Роу. В этом случае решение имеет ярко выраженный пространственный и нестационарный характер с образованием рециркуляционной области в виде опухолеподобного нароста перед телом. При использовании схемы Годунова и схемы HLLC рециркуляционная область отсутствует. Тем не менее, и в этих вариантах решение остается пространственным и нестационарным, причем наиболее сильно неустойчивость течения проявляется в направлении z . В случае использования схемы Сафронова неустойчивость течения оказывается выше, чем в случае использования схем Годунова и HLLC.

Нижние ряды на рисунке 5.18 демонстрируют данные, полученные по тем же схемам, но с добавлением искусственной вязкости. Видно, что в этом случае патологическое проявление неустойчивости полностью устраняется, и решения становятся двумерными; при этом все схемы демонстрируют близкие результаты.

Задача о двойном маховском отражении.

Еще одной тестовой задачей из перечня Кёрка [68] является задача о взаимодействии плоской ударной волны с наклонной поверхностью в режиме двойного маховского отражения. В этой задаче ударно-волновая неустойчивость обычно проявляется в виде патологического искривления ножки Маха. Задача о двойном маховском отражении из перечня Кёрка решается в следующей постановке.

Расчетная область в плоскости xu представляет собой прямоугольник $[0, 1.5] \times [0, 1]$, отсеченный прямой $y = (x - 0.075) \cdot \text{tg}(30^\circ)$; она покрывается регулярной сеткой с количеством ячеек $J \times I = 800 \times 800$, как схематично показано на рисунке 5.19а. Начальное состояние идеального газа с $\gamma = 1.4$ в расчетной области следующее: $(u_x, u_y, \rho, p) = (0, 0, 1, 1/\gamma)$. На нижней, верхней и правой границах расчетной области задается непроницаемая

стенка. На левой границе задается втекающий поток, соответствующий ударно-волновому числу Маха $M_s = 5.5$. Задача рассчитывается до момента времени $t = 1.2/M_s$.

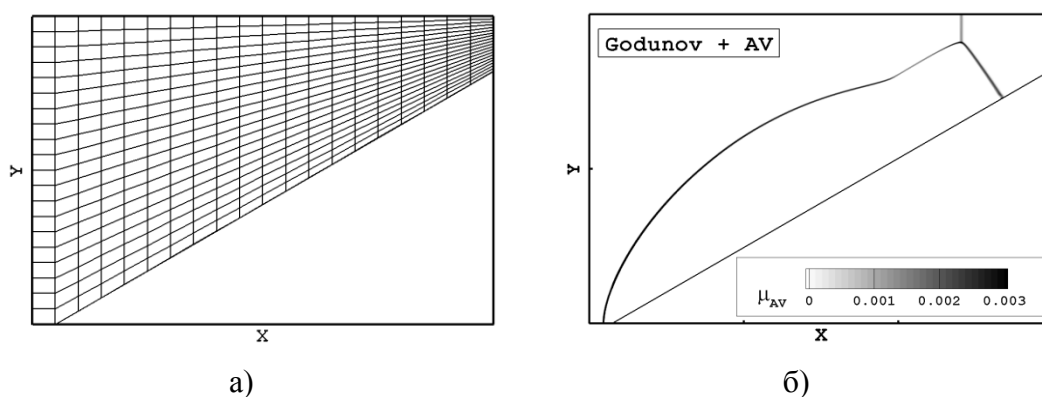


Рисунок 5.19. Схема расчетной сетки (слева) и поле коэффициента μ_{AV} при расчете по схеме Годунова с искусственной вязкостью (справа).

На рисунке 5.20 представлены результаты расчета задачи с использованием различных схем. Видно, что ударно-волновая неустойчивость обнаруживается во всех расчетах по оригинальным схемам (левый ряд на рисунке): наименьшее искривление ножки Маха демонстрирует схема $AUSM^+$, наихудший результат показывает схема $Roу$. С добавлением искусственной вязкости (правый ряд) все паталогические проявления неустойчивости устраняются, и данные, полученные по различным схемам, становятся схожими. Рисунок 5.19б показывает поле коэффициента μ_{AV} ; из него видно, что искусственная вязкость добавляется только на фронте сильной ударной волны.

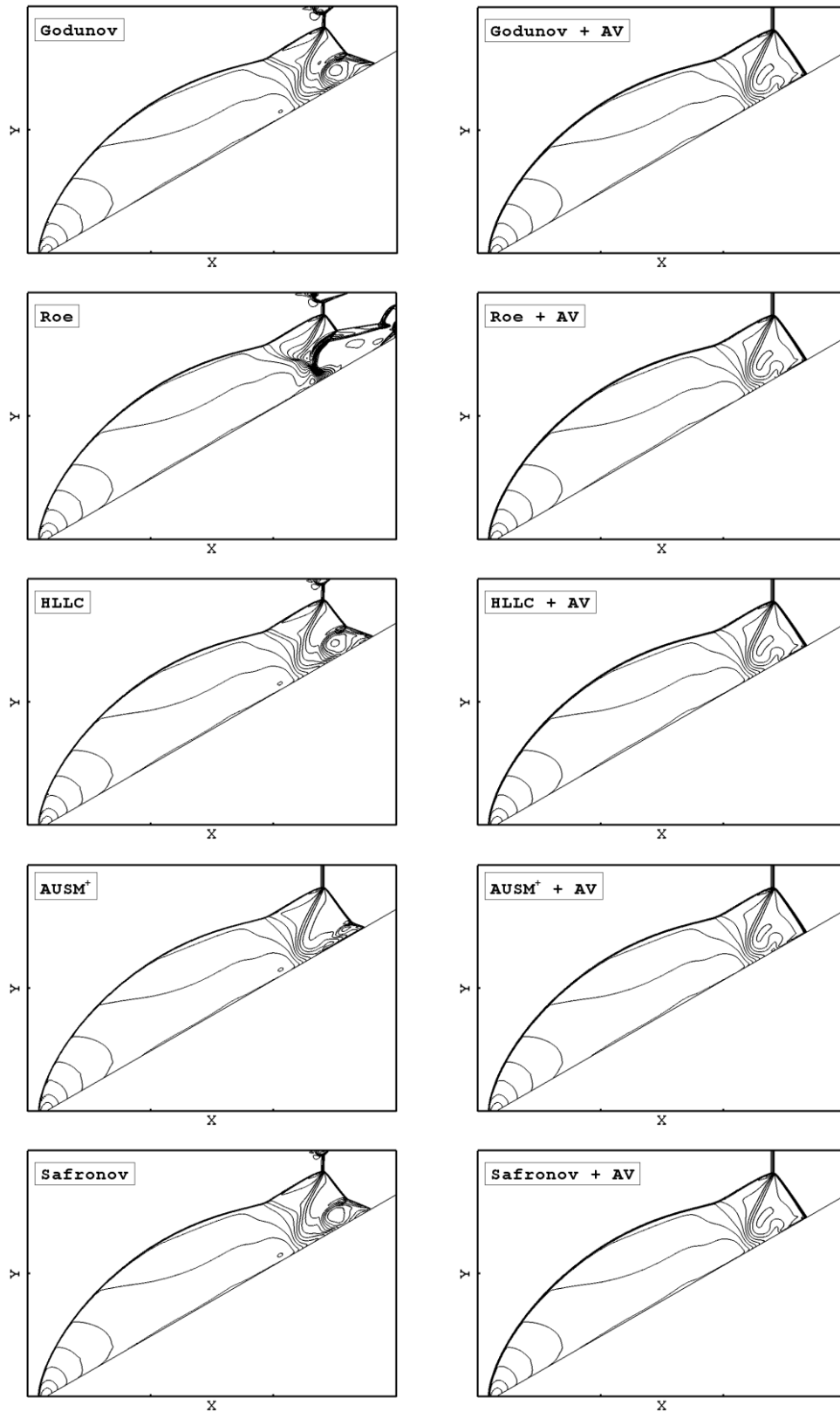


Рисунок 5.20. Задача о двойном маховском отражении. Изолинии плотности через 0.5 от 2 до 12. Левый ряд: оригинальные схемы; правый ряд: те же схемы с добавлением искусственной вязкости.

Дифракция ударной волны на 90-градусном угле.

Как было отмечено в работе Кёрка [68], при моделировании дифракции ударной волны на подробной сетке в некоторой части течения (где плоская ударная волна выровнена по сетке) может реализоваться условие, приводящее к неустойчивости. Продемонстрируем это на тестовой задаче в следующей постановке.

Расчетная область $[0, 1] \times [0, 1]$ в плоскости xu покрывается регулярной сеткой с $J \times I = 600 \times 600$; начальное состояние газа ($\gamma = 1.4$) в расчетной области следующее: $(u_x, u_y, \rho, p) = (0, 0, 1, 1/\gamma)$. На нижней, верхней и правой границах расчетной области задается непроницаемая стенка. В нижней части левой границы ($y < 0.5$) также задается непроницаемая стенка, а в ее верхней части ($y > 0.5$) задается втекающий поток, соответствующий ударно-волновому числу Маха $M_s = 5.09$. Задача рассчитывается до момента времени $t = 0.8 / M_s$.

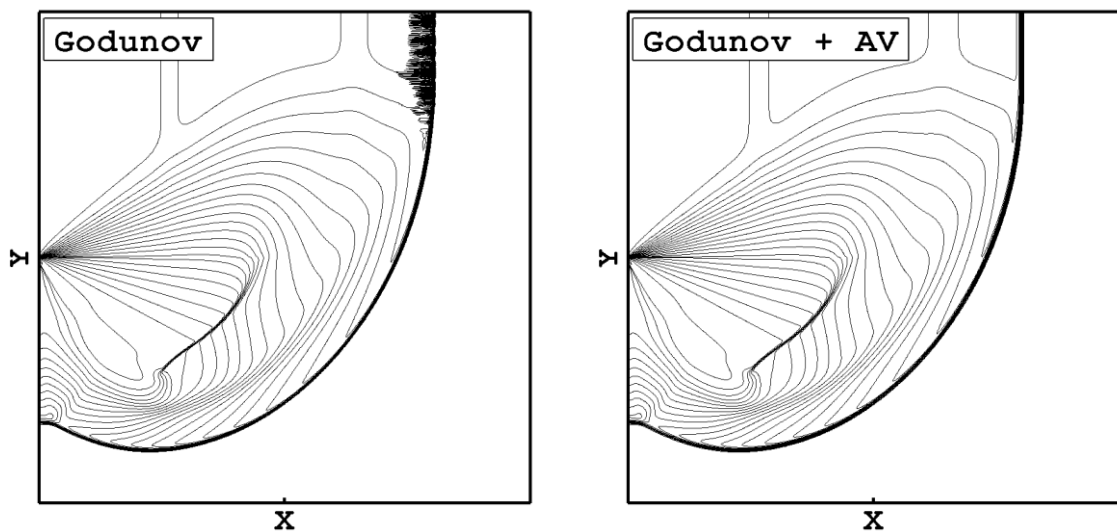


Рисунок 5.21. Задача о дифракции ударной волны на угле. Изолинии плотности через 0.2 до 5.2. Расчет по схеме Годунова в оригинальном варианте (слева) и с добавлением искусственной вязкости (справа).

На рисунке 5.21 представлены результаты расчета задачи с использованием схемы Годунова, как в оригинальном варианте, так и с добавлением искусственной вязкости. Видно, что предлагаемый метод эффективно устраняет ударно-волновую неустойчивость, наблюдающуюся в верхней части течения; в тоже время он практически не оказывает влияния на остальную часть течения.

Задача о седовском взрыве.

Кроме тестовых задач, входящих в перечень Кёрка, рассмотрим еще одну задачу, где ударно-волновая неустойчивость проявляется весьма наглядно. Это задача о сферически симметричном взрыве (седовский взрыв), решаемая в цилиндрической системе координат. Данная задача рассчитывалась в следующей постановке.

Расчетная область $[0, 1.1] \times [0, 1.1]$ в цилиндрических координатах xu покрывается регулярной сеткой с $J \times I = 220 \times 220$. Начальное состояние идеального газа с $\gamma = 1.4$ в расчетной области следующее: $(u_x, u_r, \rho, p) = (0, 0, 1, 10^{-6})$; исключение составляет лишь ячейка, примыкающая к началу координат, где давление равно 4.334474×10^5 . На нижней и левой границах расчетной области задается условие симметричности течения; на верхней и правой границах задается непроницаемая стенка. Такая постановка задачи соответствует полной энергии сферически симметричного взрыва $E_0 = 0.8510719$, при которой фронт ударной волны достигает радиуса $R_{\text{shock}} = 1$ на момент времени $t = 1$.

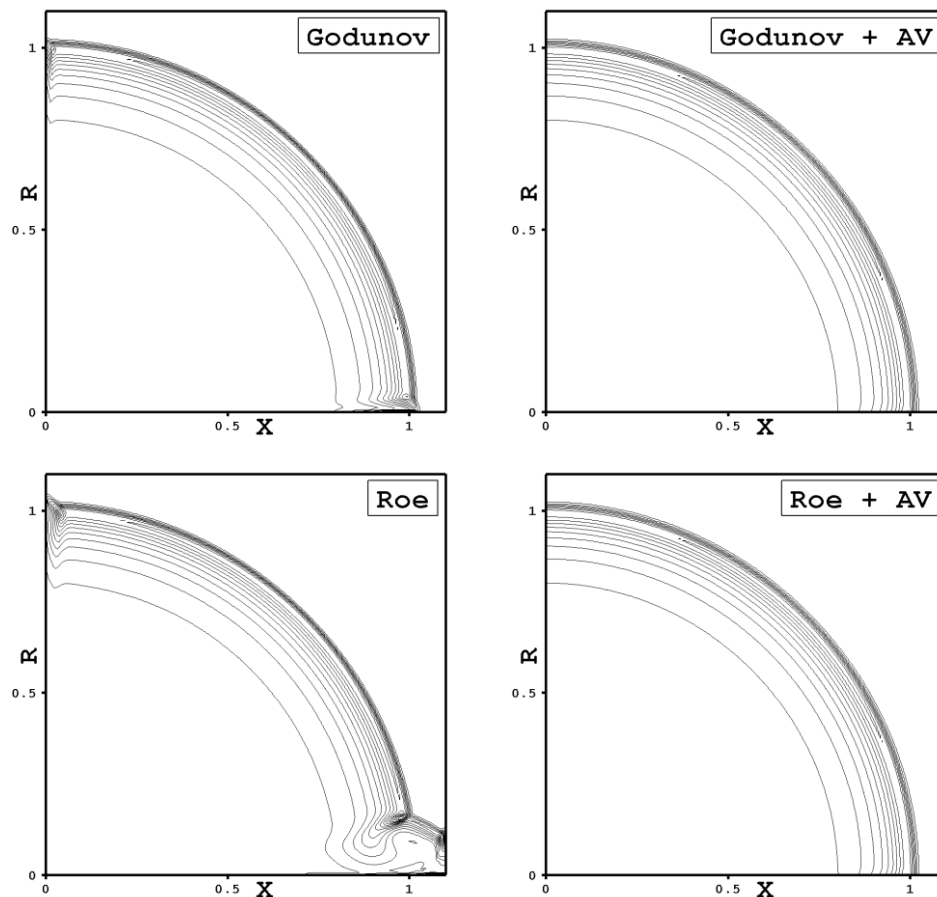


Рисунок 5.22. Задача о седовском взрыве на момент времени $t = 1$. Изолинии плотности через 0.4. Левый ряд: оригинальные схемы; правый ряд: те же схемы с добавлением искусственной вязкости.

На рисунке 5.22 представлены результаты расчета задачи с использованием схемы Годунова и схемы Роу. Как можно видеть, данные, полученные по оригинальным схемам (левый ряд), искажены «карбункуло»-подобными изъятиями вблизи обеих осей симметрии. Однако добавление искусственной вязкости в каждую из расчетных схем (правый ряд) полностью устраняет проблему.

Медленно движущаяся ударная волна.

Предлагаемый в данной работе метод добавления искусственной вязкости позволяет решить еще одну проблему, присущую схемам типа Годунова, а именно, появление низкочастотных возмущений при расчете медленно движущейся ударной волны. В отличие от феномена «карбункула» эта проблема обнаруживается в одномерных расчетах [261]. Для ее демонстрации была выбрана следующая задача.

Расчетная область $[0, 500]$ покрывается регулярной сеткой с шагом $h = 1$. Начальное состояние идеального газа с $\gamma = 1.4$ в расчетной области следующее

$$(u, \rho, p) = \begin{cases} (-0.820279, 3.857143, 10.333333), & \text{если } x < 400, \\ (-3.449648, 1, 1), & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Такие параметры соответствуют ударной волне с $M_s = 3$, когда она распространяется вдоль оси x со скоростью 0.1. В процессе счета на обеих границах расчетной области поддерживаются неизменные параметры. Расчет проводится до момента времени $t = 750$.

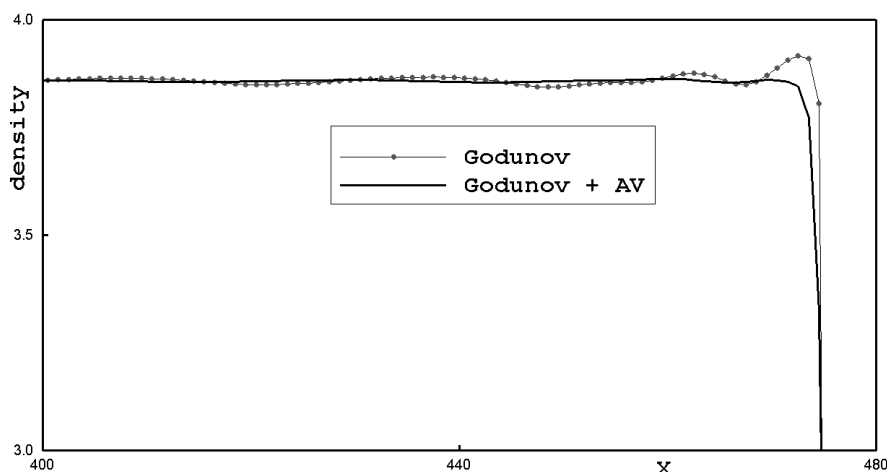


Рисунок 5.23. Профили плотности при моделировании медленно движущейся ударной волны по схеме Годунова (как в оригинальном варианте, так и с добавлением искусственной вязкости).

На рисунке 5.23 приведены профили плотности, полученные как по оригинальной схеме Годунова, так и с добавлением в нее искусственной вязкости. Представленные данные наглядно демонстрируют эффективность новой методики в подавлении низкочастотных возмущений: максимальный «заброс» плотности за скачком снижается с 1.5% до 0.14%. Аналогичный «исцеляющий» эффект наблюдается и при использовании других схем.

5.3 Адаптация метода к схемам повышенного порядка аппроксимации

Итак, в предыдущем разделе было дано описание метода искусственной вязкости и проведена его настройка на подавление «карбункул»-неустойчивости в схемах первого порядка аппроксимации. Однако с практической точки зрения наибольший интерес представляет применение метода искусственной вязкости в схемах повышенной точности. Здесь исследование проблемы осложняется двумя обстоятельствами.

1. К настоящему времени разработано огромное количество схем, которые можно отнести к классу схем типа Годунова повышенного порядка точности. В отличие от схем первого порядка они разнятся не только способом решения задачи Римана, но и чрезвычайно разнообразными способами повышения точности по пространству и времени. По этой причине не представляется возможным проведение всесторонней проверки эффективности метода искусственной вязкости для всего многообразия схем данного класса. Вместо этого, в данном исследовании мы ограничимся рассмотрением некоторых реализаций известных схем.

2. 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. Это обстоятельство будет учитываться при проведении адаптации метода искусственной вязкости к схемам повышенного порядка аппроксимации.

5.3.1 Разностные схемы и модель искусственной вязкости

Дискретизация по пространству.

В схемах второго порядка аппроксимации будут использоваться три алгоритма реконструкции: *minmod*, *vanLeer* и *MC* (названия реконструкций соответствуют принятым в книге [148]). Их можно записать как

$$(\Delta f_i)^{\text{minmod}} = \text{minmod}(\Delta f_{i-1/2}, \Delta f_{i+1/2}), \quad \text{minmod}(a, b) \equiv \begin{cases} a, & \text{если } |a| \leq |b| \text{ и } ab > 0, \\ b, & \text{если } |b| < |a| \text{ и } ab > 0, \\ 0, & \text{если } ab \leq 0, \end{cases}$$

$$(\Delta f_i)^{\text{vanLeer}} = \text{vanLeer}(\Delta f_{i-1/2}, \Delta f_{i+1/2}), \quad \text{vanLeer}(a, b) \equiv \begin{cases} \frac{2ab}{a+b}, & \text{если } ab > 0, \\ 0, & \text{если } ab \leq 0, \end{cases}$$

$$(\Delta f_i)^{\text{MC}} = \text{MC}(\Delta f_{i-1/2}, \Delta f_{i+1/2}), \quad \text{MC}(a, b) \equiv \text{minmod}\left(\frac{a+b}{2}, 2 \text{minmod}(a, b)\right),$$

Результат применения реконструкции зависит не только от выбранного алгоритма реконструкции, но и от того, по каким переменным реконструкция проводится. Наиболее простой способ – проводить реконструкцию по *примитивным переменным*, т.е. по компонентам вектора $\mathbf{Q} = (u_x, u_y, \rho, p)$. Однако этот способ часто приводит к плохим результатам. Более правильным является проведение реконструкции по *характеристическим переменным*. В данном исследовании такой подход реализован следующим образом.

Пусть требуется провести реконструкцию в ячейке по i -му сеточному направлению. Сначала вычисляются два набора приращений примитивных переменных, $\Delta \mathbf{Q}_{i-1/2} = \mathbf{Q}_i - \mathbf{Q}_{i-1}$ и $\Delta \mathbf{Q}_{i+1/2} = \mathbf{Q}_{i+1} - \mathbf{Q}_i$. Затем они переводятся в приращения характеристических переменных, $\Delta \mathbf{Z}_{i-1/2}$ и $\Delta \mathbf{Z}_{i+1/2}$, с использованием матрицы перехода $\mathbf{A} = (\partial \mathbf{Z} / \partial \mathbf{Q})_i$. Далее, к двум полученным наборам приращений характеристических переменных применяется одна из выписанных выше реконструкций и полученный в результате вектор $\Delta \mathbf{Z}_i$ переводится в $\Delta \mathbf{Q}_i$ с помощью обратной матрицы перехода \mathbf{A}^{-1} . На этом процедура реконструкции завершается. Прямая и обратная матрицы перехода имеют следующий вид

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} n_x & n_y & 0 & 1/\rho c \\ n_x & n_y & 0 & -1/\rho c \\ 0 & 0 & 1 & -1/c^2 \\ n_y & -n_x & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} n_x/2 & n_x/2 & 0 & n_y \\ n_y/2 & n_y/2 & 0 & -n_x \\ \rho/2c & -\rho/2c & 1 & 0 \\ \rho c/2 & -\rho c/2 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где $\rho = \rho_i$, $c = \sqrt{\gamma p_i / \rho_i}$, $\mathbf{n} \equiv (n_x, n_y)$ – направление нормали к боковой грани ячейки вдоль i -го сеточного направления.

Кроме кусочно-линейных реконструкций в данной работе будет использоваться реконструкция пятого порядка точности WENO5. Подробное описание этой реконструкции дается в [41], а в [43] приводится ее алгоритм на языке FORTRAN.

Использование характеристических переменных в реконструкции WENO5 будет осуществляться в соответствии с работой [41].

Дискретизация по времени.

В качестве метода интегрирования по времени в данной работе будут использоваться три алгоритма: процедура предиктор-корректор схемы ГКР и методы Рунге-Кутты второго и третьего порядка (RK2 и RK3) [222]. Метод RK2 будет использоваться в сочетании с реконструкцией MC, а метод RK3 – с реконструкцией WENO5.

Модель искусственной вязкости.

В схемах повышенного порядка аппроксимации будет использоваться та же модель искусственной вязкости, что была выбрана в разделе 5.2 для схем первого порядка, включая выражения для характерного размера ячейки: соотношение (5.5) в двумерном случае и соотношение (5.8a) в трехмерном случае. Адаптация модели искусственной вязкости к схемам повышенной точности будет заключаться в подборе подходящего коэффициента C_{AV} и выработке рекомендаций по усовершенствованию самих схем.

5.3.2 Тестирование и настройка метода

Представленные в данном разделе результаты тестирования метода искусственной вязкости проводились на следующих схемах: ГКР-minmod, ГКР-vanLeer, ГКР-MC, RK2-MC и RK3-WENO5. Для решения задачи Римана, как правило, использовался точный решатель Годунова; выборочные расчеты с применением решателей Роу и HLLC давали близкие результаты (аналогично тому, что наблюдалось в схемах первого порядка).

Подавляющее большинство тестовых расчетов было проведено на модификациях задачи Кёрка, которые были описаны в разделе 5.2.3. Полученные данные отличались большим разнообразием, что затрудняло их анализ. Для облегчения восприятия материала, представленного в данном разделе, сообщим заранее два важных вывода проделанной работы: (1) из отобранных схем схема ГКР-minmod демонстрирует наименьшую склонность к генерации паразитных колебаний за фронтом ударной волны; (2) при выполнении рекомендаций, которые будут сформулированы ниже, значение коэффициента $C_{AV} = 0.5$ в модели искусственной вязкости обеспечивает подавление «карбункул»-неустойчивости для всех рассмотренных схем.

Задача о двойном маховском отражении.

Прежде чем перейти к параметрическому тестированию нового метода борьбы с «карбункул»-неустойчивостью на базе тестовых задач типа задачи Кёрка, рассмотрим данные расчета одной хорошо известной тестовой задачи, а именно задачи о двойном маховском отражении [217]. Здесь мы используем первоначальную постановку задачи с одним уточнением: в процессе счета в расчетных точках, расположенных выше и левее всех ударных волн (отдаленных от них не менее чем на 5 сеточных интервалов), поддерживаются точные значения параметров потока за ударной волной с $M_s = 10$. Это делается для того, чтобы устранить небольшие паразитные возмущения, образующиеся из-за неподходящего (несогласованного с численной вязкостью) размывания главной ударной волны в начальных данных и на верхней границе расчетной области (подробнее о «start-up errors» можно прочесть в разделе 15.8.4 книги [148]).

На рисунке 5.24 приведены данные расчета задачи методом ГКР-МС на квадратной сетке с разрешением $h = 1/480$. Представлены четыре варианта расчета, отличающиеся типом переменных, используемых в реконструкции МС, и наличием или отсутствием искусственной вязкости. Рисунок 5.24а соответствует варианту расчета с использованием примитивных переменных и без добавления искусственной вязкости. Стрелки на рисунке указывают на возмущения различных видов, заметно ухудшающие качество полученных данных. Возмущения, показанные стрелками 1 и 2, расположены за отраженной ударной волной слева от тройной точки. Можно с уверенностью сказать, что они не вызваны «карбункул»-неустойчивостью, так как в этой части течения линии тока не ориентированы вдоль линий сетки. Другие возмущения расположены на ножке Маха (ударная волна между тройной точкой и пластиной $y = 0$). Здесь наблюдается пилообразное искажение ножки Маха (стрелка 3) и ее искривление (стрелка 4), приводящее к нефизической структуре течения за ударной волной. Эти возмущения являются проявлением «карбункул»-неустойчивости.

На рисунке 5.24б представлены данные, полученные с использованием примитивных переменных, но с добавлением искусственной вязкости. Видно, что в этом варианте расчета проявления «карбункул»-неустойчивости полностью исчезли. Что касается возмущений первого и второго вида (стрелки 1 и 2), то они остались. Хотя первые из них заметно ослабли, вторые сохранились на прежнем уровне.

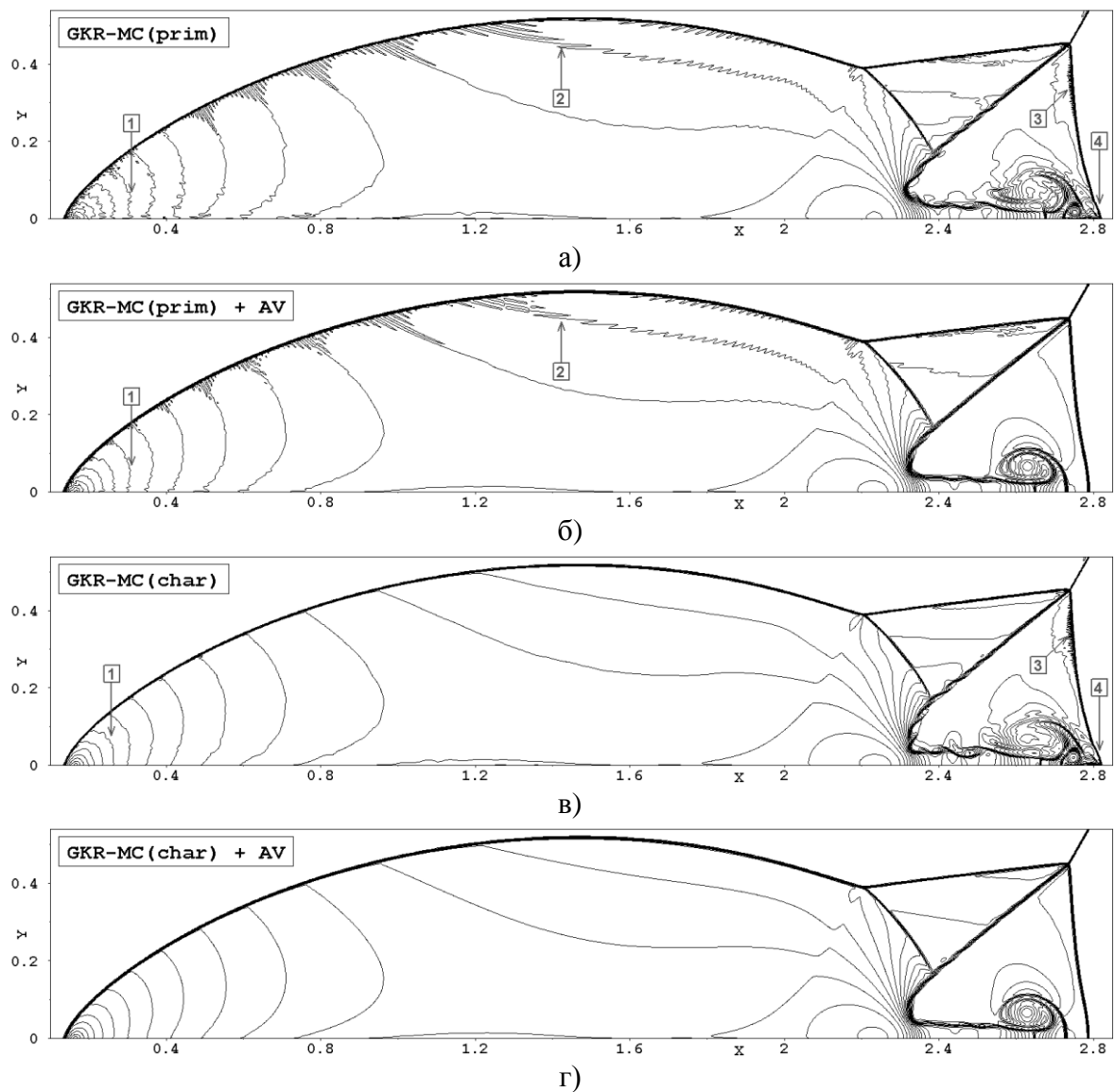


Рисунок 5.24. Изолинии плотности в тестовой задаче о двойном маховском отражении (41 изолиния, равномерно распределенная между значениями 2.1 и 22). Расчеты по схеме ГKR-МС на сетке с $h = 1/480$: а) и б) – реконструкция по примитивным переменным; в) и г) – реконструкция по характеристическим переменным; б) и г) – расчеты с добавлением искусственной вязкости.

Рисунок 5.24в соответствует варианту расчета с использованием характеристических переменных и без добавления искусственной вязкости. Сравнение с рисунком 5.24а показывает, что отказ от использования примитивных переменных в пользу характеристических переменных приводит к полному исчезновению возмущений второго вида и заметному ослаблению возмущений первого вида; при этом проявления «карбункул»-неустойчивости остаются без изменений. Наконец, данные расчета с использованием характеристических переменных и с добавлением искусственной вязкости (рисунок 5.24г) демонстрируют наилучшее качество: все паразитические

возмущения либо полностью устранены, либо ослаблены до пренебрежимо малого уровня.

Таким образом, мы приходим к выводу, что применительно к схемам повышенного порядка точности искусственная вязкость позволяет эффективно устранять паразитические возмущения, связанные с «карбункул»-неустойчивостью. Однако для подавления возмущений иного рода добавление искусственной вязкости может оказаться недостаточным или вообще неэффективным. В этом случае решение проблемы должно включать в себя усовершенствование самих расчетных методов. Одно предложение по усовершенствованию такого рода мы можем сформулировать на основании уже представленных данных; оно не является открытием данной работы, но представляет собой известную рекомендацию (например, его можно найти в обзорной статье Ван Лира [201]).

Предложение 1 (использование характеристических переменных). В схемах повышенной точности процедуру реконструкции данных предпочтительнее проводить с использованием характеристических переменных.

Итак, во всех представленных далее расчетах будет учитываться Предложение 1, то есть в каждой из рассматриваемых схем реконструкция данных будет проводиться с использованием характеристических переменных. Специально подчеркнем, что использование примитивных переменных в реконструкции `minmod` обычно не приводит к заметным возмущениям за ударной волной, как это наблюдается для других, менее диссипативных реконструкций; тем не менее, для этой реконструкции также будет учитываться Предложение 1 (если не указано иначе).

Модификации задачи Кёрка.

Перейдем теперь к рассмотрению тестовых задач типа задачи Кёрка, в которых проверяется устойчивость плоской ударной волны при ее расчете в двумерной постановке. В разделе 5.2 при рассмотрении схем первого порядка различались три вида ударных волн: поступательная, отраженная и стационарная. В данном разделе будут рассматриваться только тестовые случаи с поступательной и стационарной ударными волнами, поскольку они оказались наиболее критичными.

Расчеты на параллелограммной сетке. В ряде тестовых расчетов будет использоваться сетка с параллелограммными ячейками. В этих случаях вертикальные линии сетки $x = \text{const}$ будут заменяться наклонными линиями $x + \alpha y = \text{const}$, причем свободный параметр α будет подбираться таким, чтобы величина $N_{\text{shift}} \equiv \alpha J(h_y / h_x)$ была целым положительным числом. Тогда верхняя граница расчетной области будет сдвинута

относительно нижней границы на N_{shift} ячеек влево и на этих границах можно установить условие периодичности течения со сдвигом. (на рисунке 5.11 показан фрагмент такой сетки для случая $\alpha = 1$, $h_y / h_x = 1/2$.) В случае расчета поступательной ударной волны, в ячейках, центры которых расположены в области $x < 0$, будут поддерживаться в процессе всего счета параметры втекающего потока $(u_1, 0, \rho_1, P_1)$.

Во всех тестовых случаях (если не оговорено особо) будет предполагаться, что $\gamma = 1.4$, а $M_S = 20$ (в гиперзвуковых течениях ударно-волновая неустойчивость проявляется в максимальной степени). Расчеты по схеме RK3-WENO5 будут проводиться при числе Куранта $C_{cfl} = 0.6$, для остальных схем будет полагаться $C_{cfl} = 0.8$.

Поступательная ударная волна: прямоугольная сетка.

Эта тестовая задача рассчитывалась по различным схемам при следующих соотношениях сторон ячейки: $h_y / h_x = 1/8, 1/4, 1/2, 1, 2, 4, 8$. Количество ячеек в расчетной области составляло: $I \times J = 1600 \times 50$ при $h_y / h_x \geq 1/2$ и $I \times J = 1600 \times 100$ при $h_y / h_x < 1/2$. В каждом из тестовых вариантов проводилось несколько расчетов: варьировался коэффициент C_{AV} в модели искусственной вязкости и определялась минимальная величина C_{AV}^{\min} , необходимая для подавления «карбункул»-неустойчивости. Неустойчивость выявлялась по следующему критерию (далее его будем называть ε_0 -критерием): сохранение величины ε_0 (формула (5.1)) на «фоновом» уровне говорит об устойчивом счете, тогда как экспоненциальный рост ε_0 указывает на неустойчивость.

Расчеты показали, что в случае использования схем ГKP-minmod и ГKP-vanLeer значение коэффициента $C_{AV} = 0.20$ обеспечивает подавление «карбункул»-неустойчивости во всем диапазоне соотношений сторон ячейки. Для схем ГKP-МС и RK3-WENO5 это утверждение справедливо только при $h_y / h_x \geq 1$, а для схемы RK2-МС – при $h_y / h_x \geq 4$. В иных случаях использование ε_0 -критерия для выявления неустойчивости оказалось малоэффективным.

На рисунке 5.25 показаны зависимости ε_0 от расстояния, пройденного ударной волной ($x_S = u_S t$), для схемы ГKP-МС при двух значениях h_y / h_x . Видно, что с ростом C_{AV} наклон кривых на рисунке 5.25а (случай с $h_y / h_x = 1$) быстро уменьшается вплоть до горизонтального уровня, когда значения величины ε_0 остаются на «фоновом» уровне; здесь можно принять $C_{AV}^{\min} \approx 0.17$. В случае с $h_y / h_x = 1/4$ (рисунок 5.25б) наклон кривых с

ростом C_{AV} падает очень медленно, причем сами кривые сильно осциллируют. Здесь использование ε_0 -критерия оказывается малоэффективным, а значит возникает необходимость выработки альтернативного способа определения C_{AV}^{\min} . Данная задача была решена следующим образом.

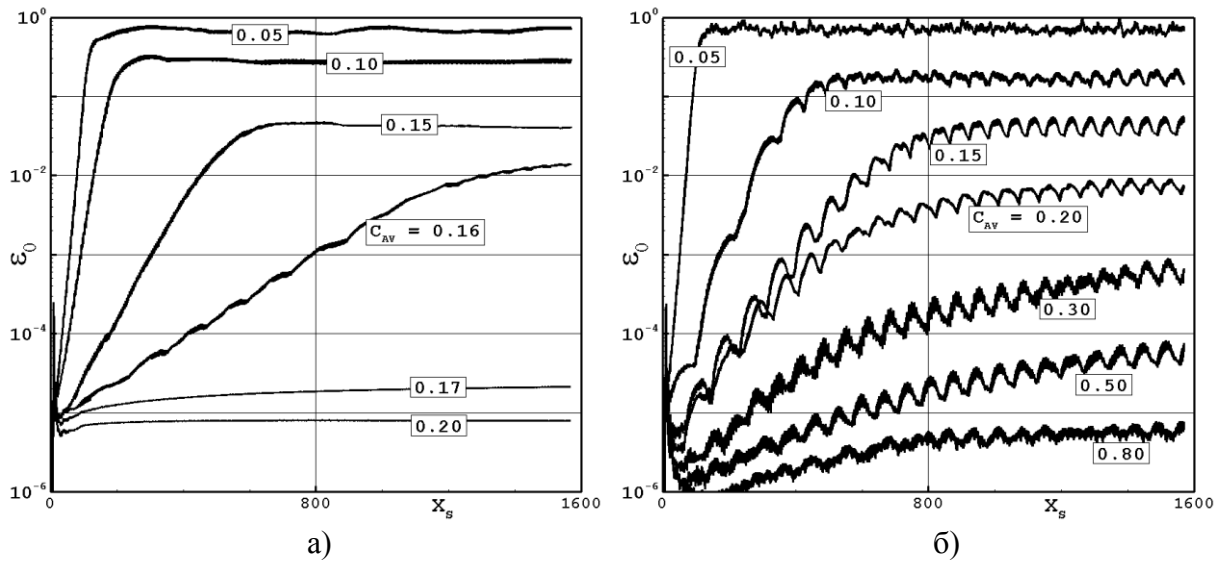


Рисунок 5.25. Развитие неустойчивости по ε_0 -критерию в модифицированной задаче Кёрка (поступательная ударная волна; $M_s = 20$). Расчеты по схеме ГКР-МС: а) $h_y / h_x = 1$; б) $h_y / h_x = 1/4$.

Одним из признаков неустойчивости являются «забросы» плотности за фронтом ударной волны. С ростом C_{AV} интенсивность таких забросов уменьшается, пока не становится достаточно малой, чтобы ей можно было пренебречь. В этом случае можно не обращать внимания на остаточную неустойчивость, даже если она присутствует в расчете.

Таким образом, для измерения степени неустойчивости решения за ударной волной можно использовать следующую величину

$$\varepsilon_1 = \max_{i,j} (\varepsilon_{i,j}), \quad \varepsilon_{i,j} = \frac{\rho_{i,j}}{\rho_1} - 1,$$

где ρ_1 – точное значение плотности за ударной волной, $\varepsilon_{i,j}$ – локальная погрешность плотности. Будем считать, что ударно-волновой неустойчивостью можно пренебречь, если в процессе счета значение величины ε_1 не превышает пороговый уровень 10^{-3} . Этот критерий будем называть ε_1 -критерием.

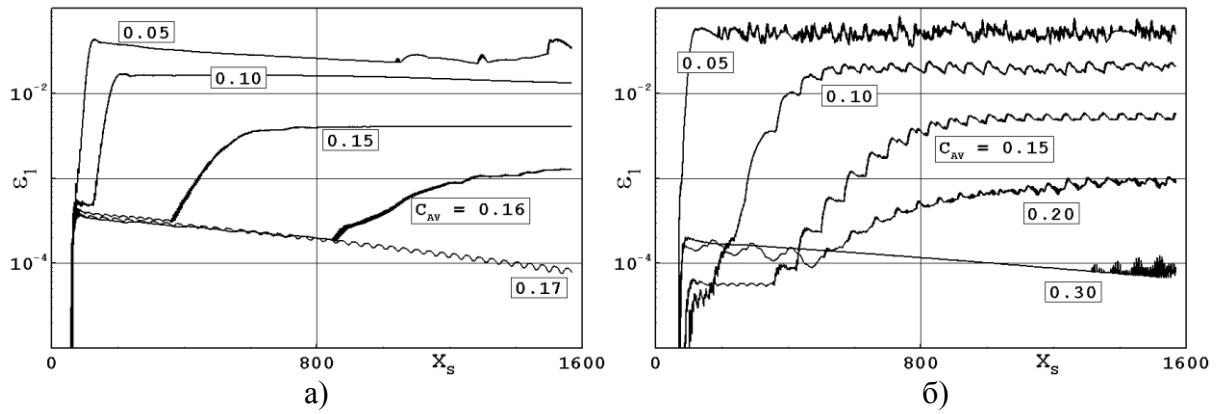


Рисунок 5.26. Развитие неустойчивости по ε_1 -критерию в модифицированной задаче Кёрка (поступательная ударная волна; $M_S = 20$). Расчеты по схеме ГКР-МС: а) $h_y/h_x = 1$; б) $h_y/h_x = 1/4$.

На рисунке 5.26 показаны зависимости $\varepsilon_1(x_s)$ для тех же тестовых случаев, что были отобраны для рисунка 5.25. Видно, что на расчетной сетке с $h_y/h_x = 1$ (рисунок 5.26а) ε_1 -критерий дает значение C_{AV}^{\min} , близкое к тому, что было получено с использованием ε_0 -критерия: $C_{AV}^{\min} \approx 0.17$. В случае с $h_y/h_x = 1/4$ (рисунок 5.26б) новый критерий дает значение $C_{AV}^{\min} \approx 0.20$, что лишь не намного выше.

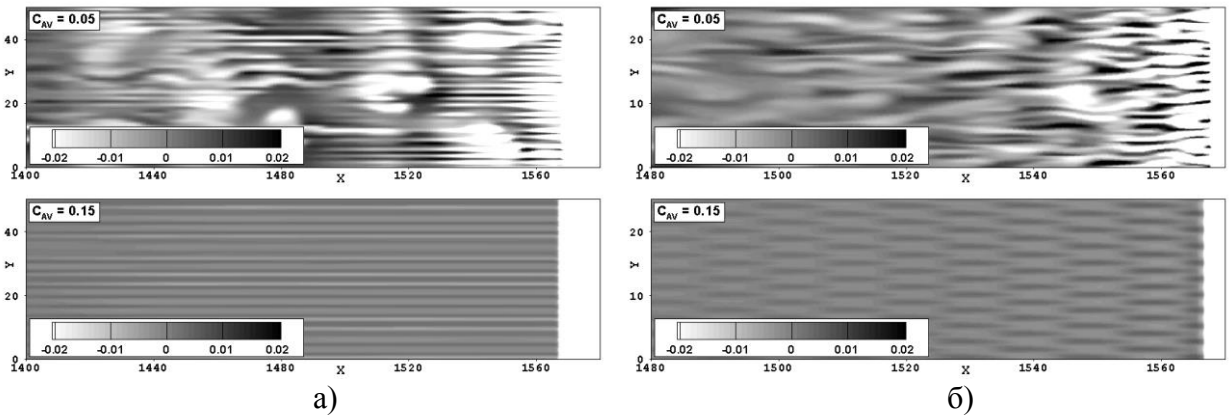


Рисунок 5.27. Распределение локальной погрешности плотности (ε) в модифицированной задаче Кёрка (поступательная ударная волна; $M_S = 20$). Расчеты по схеме ГКР-МС: а) $h_y/h_x = 1$; б) $h_y/h_x = 1/4$.

Интересно также рассмотреть пространственное распределение локальных ошибок $\varepsilon_{i,j}$: на рисунке 5.27 представлены данные, демонстрирующие характер неустойчивости течения в отобранных тестовых случаях при двух значениях C_{AV} . Видно, что при $C_{AV} =$

0.05 неустойчивость за ударной волной носит неупорядоченный характер, и погрешность в плотности превышает 2% в обоих тестовых случаях. При $C_{AV} = 0.15$ неустойчивость ослабляется до уровня $\sim 0.5\%$ и приобретает вид упорядоченных структур. В тестовом случае с $h_y/h_x = 1$ фронт ударной волны имеет зубчатообразную структуру (с периодичностью $\sim 3h_y$), которая в процессе счета не эволюционирует (локальные ошибки сохраняются вдоль горизонтальных линий). В случае с $h_y/h_x = 1/4$ фронт ударной волны имеет синусоидальную структуру (с периодичностью $\sim 10h_y$), причем ячеистый характер плотности вниз по течению указывает не на акустические волны (ошибки в давлении здесь на порядок меньше ошибок в плотности), а на циклическое развитие во времени самой ударно-волновой структуры.

Итак, использование ε_1 -критерия в данной тестовой задаче оказалось весьма эффективным. С его помощью удалось установить, что значение коэффициента $C_{AV} = 0.30$ обеспечивает подавление «карбункул»-неустойчивости для любой из рассматриваемых схем во всем диапазоне соотношений сторон ячейки: $1/8 \leq h_y/h_x \leq 8$.

О решателях задачи Римана, свободных от «карбункул»-неустойчивости. Считается, что схемы сквозного счета, которые используют неполные решатели задачи Римана (базирующиеся на грубых волновых моделях, не содержащих явно контактный разрыв), не страдают от «карбункул»-проблемы. Однако это не всегда верно. Так, например, расчеты тестовой задачи с поступательной ударной волной по схеме ГКР-МС с неполным решателем схемы HLL [225] обнаруживают «карбункул»-неустойчивость при $h_y/h_x \leq 1/4$. На рисунке 5.28 представлены данные для случая с $h_y/h_x = 1/4$. Видно, что при $C_{AV} = 0$ неустойчивость развивается весьма интенсивно, однако с добавлением искусственной вязкости она быстро угасает. Объяснить появление неустойчивости в данном примере можно следующим образом.

Известно, что причина развития «карбункул»-неустойчивости кроется в недостатке диссипации через контактный разрыв в направлении, параллельном ударной волне. Так случается, если полный решатель задачи Римана используется на гранях, расположенных вдоль линий тока. При использовании схемы повышенного порядка точности на сетке с $h_y/h_x \ll 1$ диссипация в поперечном направлении существенно уменьшается, что создает условия для развития неустойчивости даже в случае применения неполного решателя. К сказанному можно добавить, что расчет по схеме HLL первого порядка точности на сетке с $h_y/h_x = 1/32$ (довольно экзотический тестовый случай) также показал неустойчивость ударной волны.

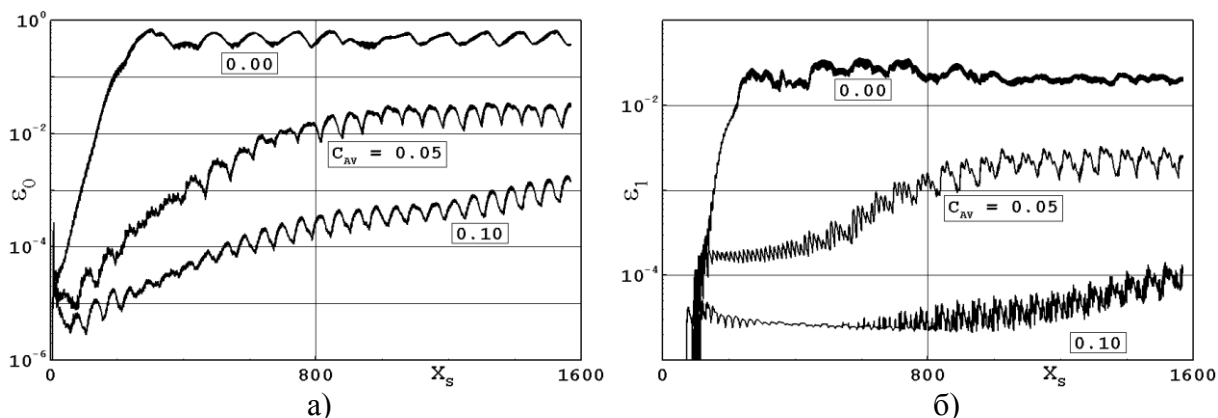


Рисунок 5.28. Развитие неустойчивости в модифицированной задаче Кёрка (поступательная ударная волна; $M_s = 20$). Расчеты по схеме ГКР-МС с решателем HLL на сетке с $h_y / h_x = 1/4$: а) ε_0 -критерий; б) ε_1 -критерий.

Поступательная ударная волна: параллелограммная сетка.

В этой тестовой задаче поступательная ударная волна рассчитывается на параллелограммной сетке с $\alpha = 1$ (вертикальные линии сетки заменены наклонными линиями $x + y = \text{const}$) и $h_y / h_x = 1, 1/2, 1/4, 1/8$; расчетная сетка состоит из $I \times J = 1200 \times 48$ ячеек. Как отмечалось в разделе 5.2.4, численное решение этой задачи остается квазиодномерным в том смысле, что параметры течения на одной вертикальной линии $x = \text{const}$ идентичны.

В таблице 5.3 представлены данные обработки расчетов тестовой задачи. Для различных схем приведены значения минимальной величины C_{AV} , необходимой для подавления неустойчивости по ε_1 -критерию. Можно видеть, что в случае использования схемы ГКР-minmod значение $C_{AV} = 0.15$ обеспечивает подавление неустойчивости во всем диапазоне соотношения сторон ячейки. (Заметим также, что для данной схемы использование ε_0 -критерия дает близкие значения C_{AV}^{\min} .) Схемы ГКР-vanLeer и RK3-WENO5 в целом демонстрируют приемлемые результаты, тогда как схемы ГКР-МС и RK2-МС сталкиваются с проблемой расчета на сетке с $h_y / h_x = 1$.

Таблица 5.3. Значения величины C_{AV}^{\min} в тестовой задаче с поступательной ударной волной, рассчитываемой на параллелограммной сетке (ε_1 -критерий, $M_S = 20$). Величины в скобках соответствуют случаю использования Предложения 2 (переключение на реконструкцию minmod).

$h_y/h_x =$	1	1/2	1/4	1/8
ГКР-minmod	0.05	0.10	0.15	0.15
ГКР-vanLeer	0.20 (0.05)	0.15 (0.11)	0.22 (0.19)	0.27 (0.17)
ГКР-МC	> 1 (0.05)	0.13 (0.12)	0.28 (0.25)	0.45 (0.38)
RK2-МC	> 1 (0.07)	0.30 (0.22)	0.37 (0.30)	0.47 (0.43)
RK3-WENO5	0.35 (0.07)	0.20 (0.15)	0.25 (0.25)	0.30 (0.25)

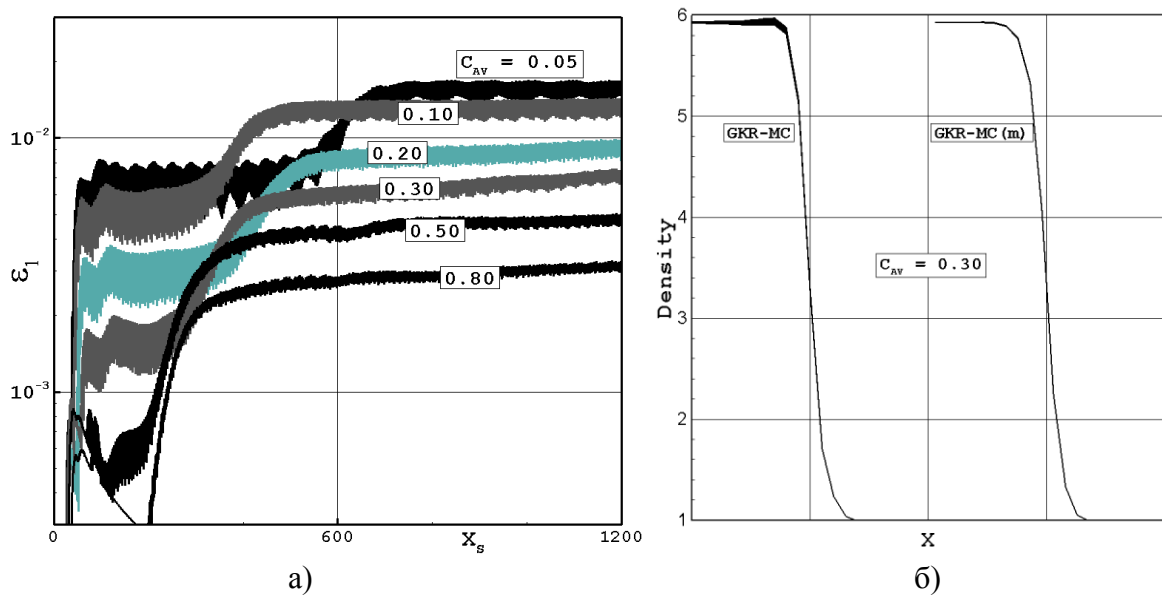


Рисунок 5.29. Расчеты поступательной ударной волны на параллелограммной сетке по схеме ГКР-МC ($h_y/h_x = 1$; $M_S = 20$): а) развитие неустойчивости по ε_1 -критерию (варьируется C_{AV}); б) профили ударной волны, полученные по стандартной и модифицированной схемам ($C_{AV} = 0.3$).

На рисунке 5.29а показаны зависимости $\varepsilon_1(x_s)$ в расчетах по схеме ГКР-МC на сетке с $h_y/h_x = 1$. Видно, что с ростом C_{AV} уровень максимальной погрешности плотности падает очень медленно, так что критерий устойчивости $\varepsilon_1 < 10^{-3}$ оказывается недостижимым при умеренных значениях C_{AV} . Следовательно, в данном тестовом случае добавление искусственной вязкости оказывается недостаточным для подавления ударно-

волновой неустойчивости и здесь необходимо усовершенствование самой расчетной схемы. Для этой цели весьма эффективным оказался метод, базирующийся на следующих соображениях.

Обратим внимание на реконструкцию *minmod*. Хотя среди рассматриваемых реконструкций она обладает наибольшей диссипацией, но в сочетании с искусственной вязкостью эта реконструкция наиболее эффективно подавляет ударно-волновую неустойчивость. С практической точки зрения применение более точных реконструкций предпочтительно в гладких областях решения и вблизи контактных поверхностей. Однако в расчетных точках, расположенных внутри размытого фронта сильной ударной волны, точность реконструкции отступает на второй план; здесь более важным становится способность расчетных алгоритмов предотвращать появление осцилляций в решении. Это соображение приводит нас к формулировке следующего предложения по усовершенствованию процедуры реконструкции данных.

Предложение 2 (переключение на реконструкцию minmod). При проведении реконструкции в ячейке (i, j) по одному из сеточных направлений (например, вдоль i -го направления) будем проверять условие нахождения ячейки и ее соседей (ячеек $(i-1, j)$ и $(i+1, j)$) внутри фронта ударной волны; признаком нахождения ячейки внутри фронта будем считать условие $\mu_{AV} \neq 0$. В случае выполнения этого условия всегда будем переходить на представление о линейном распределении данных внутри ячейки и использовать реконструкцию *minmod*. Обозначать такой метод будем добавлением символа (m) к базовой реконструкции, например MC(m).

На рисунке 5.29б сравниваются профили ударной волны, полученные по схеме ГКР-МС (базовый вариант) и по схеме ГКР-МС(m) (вариант с переключением на реконструкцию *minmod*) при $C_{AV} = 0.3$. Видно, что на гребне ударной волны базовый вариант демонстрирует нарушение одномерности течения и ощутимый заброс в плотности (~0.7%). Использование Предложения 2 (модифицированный вариант схемы) приводит к существенному улучшению решения: восстанавливается одномерность течения, а забросы плотности снижаются на порядок. При этом важно, что переход на модифицированный вариант не сопровождается заметным уширением фронта ударной волны.

В таблице 5.3 в скобках приведены данные, полученные по модифицированным схемам. Можно заметить, что использование Предложения 2 позволяет существенно улучшить результаты: теперь значение коэффициента $C_{AV} = 0.43$ обеспечивает подавление неустойчивости во всех случаях, причем если не рассматривать варианты с сильно вытянутыми ячейками ($h_y / h_x = 1/8$), то достаточным оказывается значение $C_{AV} = 0.30$.

Стационарная ударная волна: прямоугольная сетка.

Эта тестовая задача рассчитывалась при следующих соотношениях сторон ячейки: $h_y / h_x = 1/4, 1/2, 1, 2$. Первоначально количество ячеек в расчетной области составляло $I \times J = 400 \times 100$.

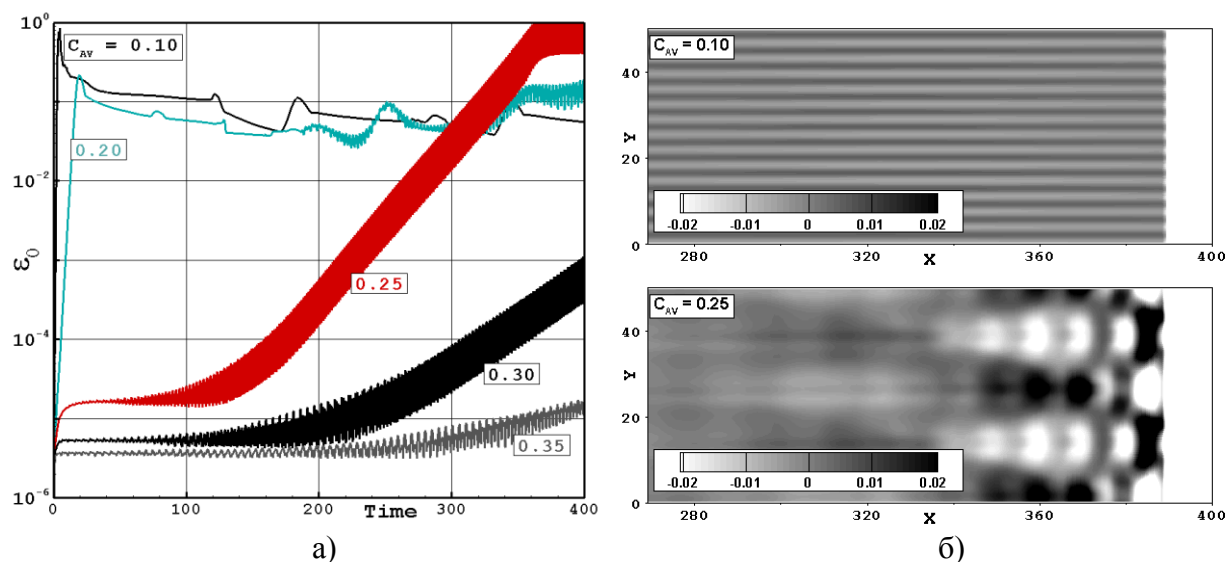


Рисунок 5.30. Расчеты стационарной ударной волны по схеме ГКР-МС ($h_y / h_x = 1/2$; $M_S = 20$): а) развитие неустойчивости по ϵ_0 -критерию (варьируется C_{AV}); б) распределение локальной погрешности плотности (ϵ) при двух значениях C_{AV} .

На рисунке 5.30 представлены данные расчета задачи по схеме ГКР-minmod на сетке с $h_y / h_x = 1/2$. Показано развитие неустойчивости по ϵ_0 -критерию и пространственное распределение локальных ошибок при двух значениях C_{AV} . Видно, что на начальной стадии счета ($t < 60$ на рисунке 5.30а) значение коэффициента $C_{AV} = 0.25$ обеспечивает подавление ударно-волновой неустойчивости, однако продолжение расчета при этом значении C_{AV} обнаруживает неустойчивость с образованием за фронтом ударной волны крупномасштабных структур (рисунок 5.30б). Такое отсроченное проявление неустойчивости можно объяснить следующим образом.

В работе [249] было показано, что при моделировании стационарной ударной волны появление «карбункул»-неустойчивости может зависеть от расположения фронта ударной волны относительно расчетной сетки. В нашем случае начальное распределение параметров соответствует расположению фронта ударной волны строго на сеточной линии $i = i_0$. Сразу в начале счета под действием искусственной вязкости происходит

уширение ударной волны, что порождает возмущение потока, которое распространяется вниз по течению. Это возмущение достигает правой границы расчетной области, частично отражается от нее и возвращается к ударной волне за время $t = -x_0/(u_x - a) + x_0/(u_x + a) \approx 87$ (здесь $x_0 = 390$, $u_x \approx -4$, $a \approx 10.5$). В результате фронт ударной волны немного смещается, что оказывается критичным для появления неустойчивости при данном значении C_{AV} .

Чтобы учесть возможную зависимость неустойчивости от сеточного расположения ударной волны данная тестовая задача была скорректирована следующим образом.

Квазистационарная ударная волна. По сравнению с первоначальной постановкой задачи добавляется малая величина 0.002 к продольной компоненте скорости во всей расчетной области и на ее границах. В этом случае фронт ударной волны медленно дрейфует по сетке, проходя расстояние в одну ячейку за $\Delta t = 500$, что требует 30000–80000 шагов по времени в зависимости от расчетного варианта. Возмущение сетки увеличивается до уровня $\delta = 10^{-3}$, что облегчает обнаружение неустойчивости в случае ее появления на каком-либо этапе счета (при некотором расположении ударной волны относительно сетки). Размер расчетной области сокращается до $I \times J = 100 \times 100$.

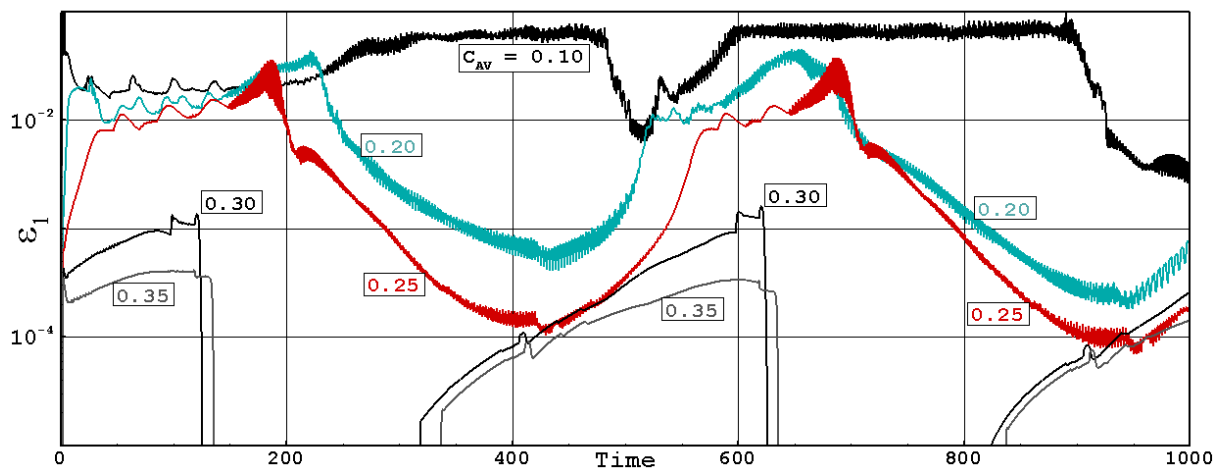


Рисунок 5.31. Развитие неустойчивости по ε_1 -критерию в модифицированной задаче Кёрка (квазистационарная ударная волна; $M_s = 20$). Расчеты по схеме ГКР-minmod на сетке с $h_y/h_x = 1/2$.

На рисунке 5.31 показано развитие неустойчивости по ε_1 -критерию в скорректированной тестовой задаче (квазистационарная ударная волна) для тех же расчетных вариантов, что представлены на рисунке 5.30. Нетрудно заметить, что (1) при $C_{AV} > 0.2$ зависимость $\varepsilon_1(t)$ имеет строгую цикличность с периодом $\Delta t = 500$ и (2)

значение коэффициента $C_{AV} = 0.35$ обеспечивает выполнение критерия $\varepsilon_1 < 10^{-3}$ в любой момент времени, т.е. при любом расположении ударной волны относительно расчетной сетки. Таким образом, для данного тестового случая (расчет квазистационарной ударной волны по схеме ГКР-minmod на сетке с $h_y/h_x = 1/2$) можно принять, что $C_{AV}^{\min} \approx 0.35$.

Аналогично тестовая задача о квазистационарной ударной волне рассчитывалась с использованием других схем и соотношений сторон ячейки. При этом рассматривались как базовые варианты схем, так и их модификации с использованием Предложения 2 (переключение на реконструкцию minmod). В таблице 5.4 представлены данные обработки проведенных расчетов. Можно видеть, что в данной тестовой задаче для подавления неустойчивости (по ε_1 -критерию) крайне необходимо использовать Предложение 2. В базовом варианте только схема ГКР-vanLeer демонстрирует относительную эффективность, тогда как использование переключения на реконструкцию minmod в любой из рассматриваемых схем позволяет подавлять неустойчивость при умеренном значении свободного коэффициента: $C_{AV} = 0.35$.

Таблица 5.4. Значения величины C_{AV}^{\min} в тестовой задаче с квазистационарной ударной волной, рассчитываемой на прямоугольной сетке (ε_1 -критерий, $M_s = 20$). Величины в скобках соответствуют случаю использования Предложения 2 (переключение на реконструкцию minmod).

$h_y/h_x =$	1/4	1/2	1	2
ГКР-minmod	0.35	0.35	0.30	0.25
ГКР-vanLeer	0.50 (0.35)	0.50 (0.35)	0.30 (0.30)	0.25 (0.25)
ГКР-MC	> 1 (0.35)	> 1 (0.35)	> 1 (0.30)	~ 1 (0.25)
RK2-MC	> 1 (0.35)	> 1 (0.35)	> 1 (0.35)	~ 1 (0.25)
RK3-WENO5	~ 1 (0.35)	0.70 (0.35)	0.40 (0.35)	0.25 (0.25)

Стационарная ударная волна: параллелограммная сетка.

В этом варианте тестовой задачи стационарная ударная волна рассчитывается на параллелограммной сетке с $N_{shift} = 2$ (верхняя граница расчетной области сдвинута относительно нижней границы на 2 ячейки) и $h_y/h_x = 1/4, 1/2, 1, 2$; расчетная сетка состоит из $I \times J = 200 \times 200$ ячеек. Здесь сеточные линии $i = \text{const}$ слегка отклонены от фронта ударной волны, поэтому в расчете одновременно присутствует весь спектр положений фронта относительно сетки. Заметим, что в задачах такого типа часто

наблюдаются значительные искажения потока за ударной волной, что представляет собой серьезную вычислительную проблему.

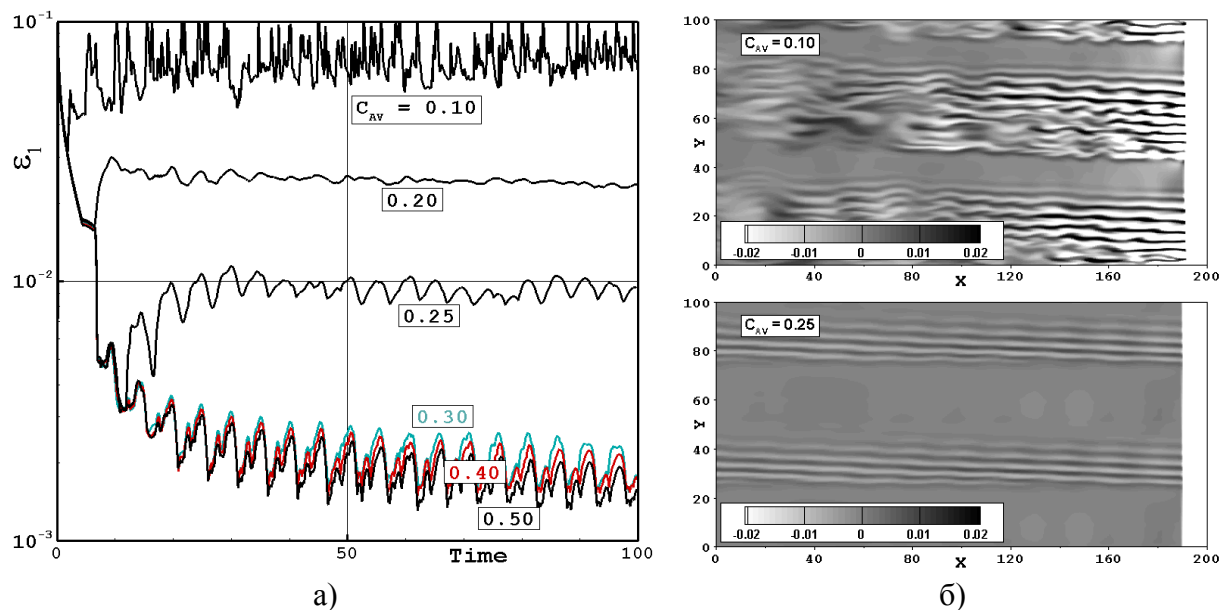


Рисунок 5.32. Расчеты стационарной ударной волны по схеме ГКР- minmod на параллелограммной сетке ($h_y / h_x = 1/2$; $M_S = 20$): а) эволюция максимальной погрешности плотности ε_1 ; б) пространственное распределение погрешности ε при двух значениях C_{AV} на момент времени $t = 100$.

На рисунке 5.32 представлены данные расчета задачи по схеме ГКР-minmod на сетке с $h_y / h_x = 1/2$. Видно, что по мере роста C_{AV} до значения $C_{AV} \approx 0.3$ ошибки в плотности существенно уменьшаются (рисунок 5.32а), однако последующее увеличение C_{AV} дает незначительный эффект. Было также замечено следующее. При малых значениях C_{AV} картина течения в верхней части расчетной области ($50 < y < 100$ на рисунке 5.32б) заметно отличается от картины течения в ее нижней части ($0 < y < 50$), что указывает на неустойчивость течения (восприимчивость к малым возмущениям сетки). При $C_{AV} \geq 0.25$ верхняя и нижняя картины течения практически дублируют друг друга (максимальное отличие между ними в плотности не превышает 0.1%), что говорит об устойчивости течения. Таким образом, в данном тестовом случае для подавления «карбункул»-неустойчивости достаточно использовать величину $C_{AV} = 0.25$, однако «забросы» плотности за ударной волной остаются выше уровня $\varepsilon_1 = 10^{-3}$ при любых умеренных значениях C_{AV} .

Аналогично расчеты стационарной ударной волны на параллелограммной сетке были проведены с использованием других схем и соотношений сторон ячейки. Оказалось, что величина $C_{AV} = 0.3$ обеспечивает подавление «карбункул»-неустойчивости при использовании любой из рассматриваемых схем, за исключением схемы RK2-MC, однако применение в этой схеме Предложения 2 (переключение на реконструкцию minmod) делает устойчивой и ее.

В таблице 5.5 приводятся данные по максимальной погрешности плотности при $C_{AV} = 0.5$ (рекомендуемая величина) для различных схем и соотношений сторон ячейки; значения в скобках соответствуют модификациям с использованием Предложения 2. Видно, что (1) во всех случаях ошибка в плотности за ударной волной не превышает 1% и (2) использование Предложения 2 приводит к заметному улучшению решения (в некоторых случаях наблюдается двукратное снижение ошибки). Данные таблицы также показывают, что уровень искажения потока существенно выше при $h_y / h_x \ll 1$, когда ячейки сильно вытянуты по направлению нормали к фронту ударной волны. Однако при $h_y / h_x \gg 1$ (ячейки сильно вытянуты вдоль фронта ударной волны) существует другая неприятность: искусственная вязкость, необходимая для подавления «карбункул»-неустойчивости, может приводить к излишнему размыванию ударной волны, поскольку в этом случае $\mu_{AV} \sim h_y^2$. Отсюда можно сделать вывод, что в окрестности ударной волны желательно, по возможности, не использовать сетку с сильно вытянутыми ячейками.

Таблица 5.5. Максимальные значения величины $\varepsilon_1 \times 10^2$ в тестовой задаче со стационарной ударной волной, рассчитываемой на параллелограммной сетке ($M_s = 20$, $C_{AV} = 0.5$). Величины в скобках соответствуют случаю использования Предложения 2 (переключение на реконструкцию minmod).

$h_y / h_x =$	1/4	1/2	1	2
ГКР-minmod	0.30	0.20	0.14	0.08
ГКР-vanLeer	0.48 (0.36)	0.28 (0.24)	0.22 (0.18)	0.12 (0.10)
ГКР-MC	0.70 (0.38)	0.44 (0.26)	0.28 (0.18)	0.20 (0.10)
RK2-MC	0.85 (0.40)	0.58 (0.26)	0.40 (0.20)	0.22 (0.10)
RK3-WENO5	0.78 (0.40)	0.48 (0.32)	0.30 (0.22)	0.12 (0.10)

Влияние показателя адиабаты.

Рассмотрим влияние показателя адиабаты газа. В таблице 5.6 представлены данные, полученные по схеме ГКР-minmod для двух характерных тестовых случаев при различных значениях γ . В разделе 5.2.4 было показано, что в случае расчета поступательной ударной волны по схеме Годунова (схеме первого порядка точности) наблюдается сильная зависимость C_{AV}^{\min} от γ . Как видно из таблицы 5.6 (Случай 1), с переходом на схему второго порядка точности зависимость $C_{AV}^{\min}(\gamma)$ ослабляется, причем значения C_{AV}^{\min} не превышают 0.25 в рассмотренном диапазоне $1.15 \leq \gamma \leq 2$. Для квазистационарной ударной волны (Случай 2) зависимость $C_{AV}^{\min}(\gamma)$ крайне слабая: в этом случае $C_{AV}^{\min} \approx 0.35$ (в пределах погрешности 0.05). Отсюда мы делаем вывод, что рекомендованная величина $C_{AV} = 0.5$ может быть использована в широком диапазоне значений показателя адиабаты газа.

Таблица 5.6. Значения величины C_{AV}^{\min} , полученные по схеме ГКР-minmod при различных значениях γ . Случай 1: тестовая задача с поступательной ударной волной при $h_y/h_x = 1$.

Случай 2: тестовая задача с квазистационарной ударной волной при $h_y/h_x = 1/2$.

$\gamma =$	1.15	1.25	1.4	1.6667	2.0
Случай 1	0.25	0.22	0.19	0.15	0.12
Случай 2	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35

Трехмерный случай.

Для настройки рассматриваемого метода на случай моделирования трехмерных задач были проведены дополнительные тестовые расчеты. Рассчитывались поступательная и квазистационарные ударные волны на кубической сетке ($h_x = h_y = h_z$) по схеме ГКР-minmod с добавлением искусственной вязкости при различных значениях C_{AV} . Сравнение новых данных с теми, что были получены в двумерном случае, показало их близкое сходство. Так, при расчете поступательной ударной волны минимальное значение C_{AV} для подавления неустойчивости составляет $C_{AV}^{\min} \approx 0.19$ в обоих (двумерном и трехмерном) случаях. При расчете квазистационарной ударной волны новое значение C_{AV}^{\min} также оказалось близким к значению, полученному ранее для двумерного случая: $C_{AV}^{\min} \approx 0.30$. Таким образом, мы приходим к выводу, что применительно к схемам повышенного

порядка точности рекомендованная величина $C_{AV} = 0.5$ может быть использована при расчете задач любой размерности.

5.3.3 Численные примеры

В данном разделе на примере решения нескольких тестовых задач по отобранным схемам (ГКР-minmod, ГКР-vanLeer, ГКР-МС, RK2-МС и RK3-WENO5) демонстрируется эффективность предложенного метода подавления возмущений, появляющихся за фронтом ударной волны, в том числе и тех, что вызваны «карбункул»-неустойчивостью. В сочетании с отобранными схемами применяются различные решатели задачи Римана (Riemann solvers = RS), такие как точный решатель (решатель Годунова), решатели Роу и HLLC. В представленных примерах предполагается, что (1) все процедуры реконструкции данных базируются на использовании характеристических переменных (Предложение 1), если не указано иначе, и (2) модель искусственной вязкости применяется в том виде, как было описано выше, а именно с базовым коэффициентом $C_{AV} = 0.5$ и с переключением на реконструкцию minmod в окрестности ударной волны (Предложение 2). Число Куранта обычно принималось равным 0.6 для схемы RK3-WENO5 и 0.8 для остальных схем. Однако при моделировании стационарных задач без добавления искусственной вязкости стандартная величина C_{cf} уменьшалась вдвое или (при использовании решателя Роу) вчетверо; это делалось для того, чтобы понизить интенсивность нестационарных процессов на финальной стадии счета.

Задача о двойном маховском отражении (дополнительные материалы).

Вернемся к задаче о двойном маховском отражении. В начале раздела 5.3.2 были представлены данные, полученные по различным версиям схемы ГКР-МС. К этому можно добавить, что разработанная позже версия этой схемы, названная ГКР-МС(m)+AV, дает результаты, которые практически неотличимы от тех, что показаны на рисунке 5.24г.

На рисунке 5.33 представлены результаты расчетов задачи с использованием схемы RK3-WENO5 в сочетании с решателями типа HLL на сетке с разрешением $h = 1/330$. (Заметим, что схема RK3-WENO5 на сетке с $h = 1/330$ расходует примерно вдвое больше процессорного времени (CPU time), чем схема ГКР-МС на сетке с $h = 1/480$.) Как можно видеть, при использовании решателя HLLC без искусственной вязкости (рисунок 5.33а) численное решение сильно искажено «карбункул»-неустойчивостью и осцилляциями за ударной волной. Добавление искусственной вязкости (рисунок 5.33б) позволяет полностью устранить все дефекты решения. С другой стороны, применение грубого, двухволнового решателя HLL позволяет получить решение, свободное от «карбункул»-

неустойчивости, без привлечения искусственной вязкости (рисунок 5.33в). Однако в этом случае (1) осцилляции за ударной волной остаются на высоком уровне и (2) контактный разрыв, исходящий из тройной точки и сворачивающийся в крупный вихрь, оказывается сильнее размытым (сравните с рисунком 5.33б).

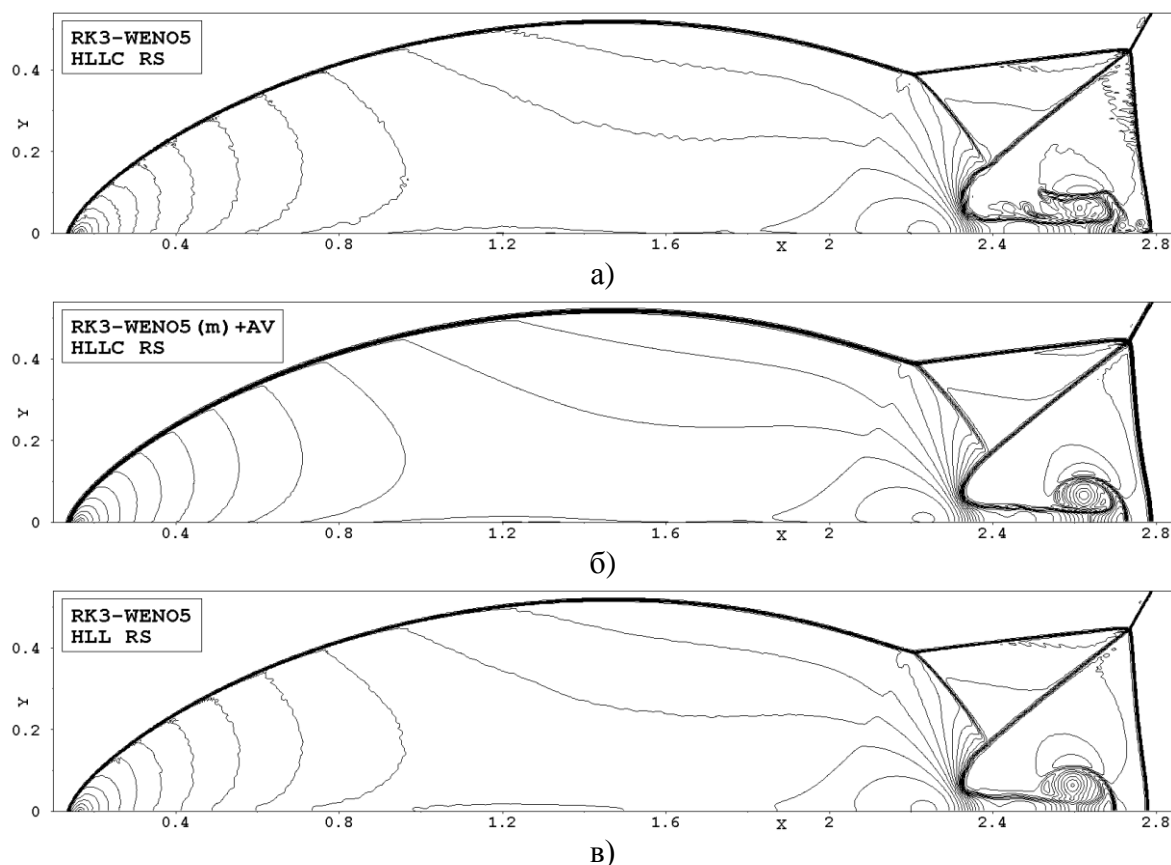


Рисунок 5.33. Изолинии плотности в тестовой задаче о двойном маховском отражении (те же изолинии, что и на рисунке 5.24). Расчеты по схеме RK3-WENO5 на сетке с $h = 1/330$: а) и б) – с использованием решателя HLLC; в) – с использованием решателя HLL; б) – с использованием искусственной вязкости и Предложения 2 (переключение на реконструкцию minmod) .

Сверх- и гиперзвуковое обтекание цилиндра.

Постановка этой тестовой задачи была дана в разделе 5.2.6, где тестировались схемы первого порядка точности.

На рисунках 5.34 и 5.35 представлены результаты расчетов задачи для $M_\infty = 3$ и $M_\infty = 20$, полученные по отобранным схемам в сочетании с различными решателями задачи Римана. Как можно видеть, все оригинальные схемы (т.е. без привлечения искусственной вязкости) в обоих тестовых случаях страдают от ударно-волновой неустойчивости

(верхние ряды рисунков). Добавление искусственной вязкости (нижние ряды рисунков) приводит к исправлению решений, причем все схемы демонстрируют близкие результаты.

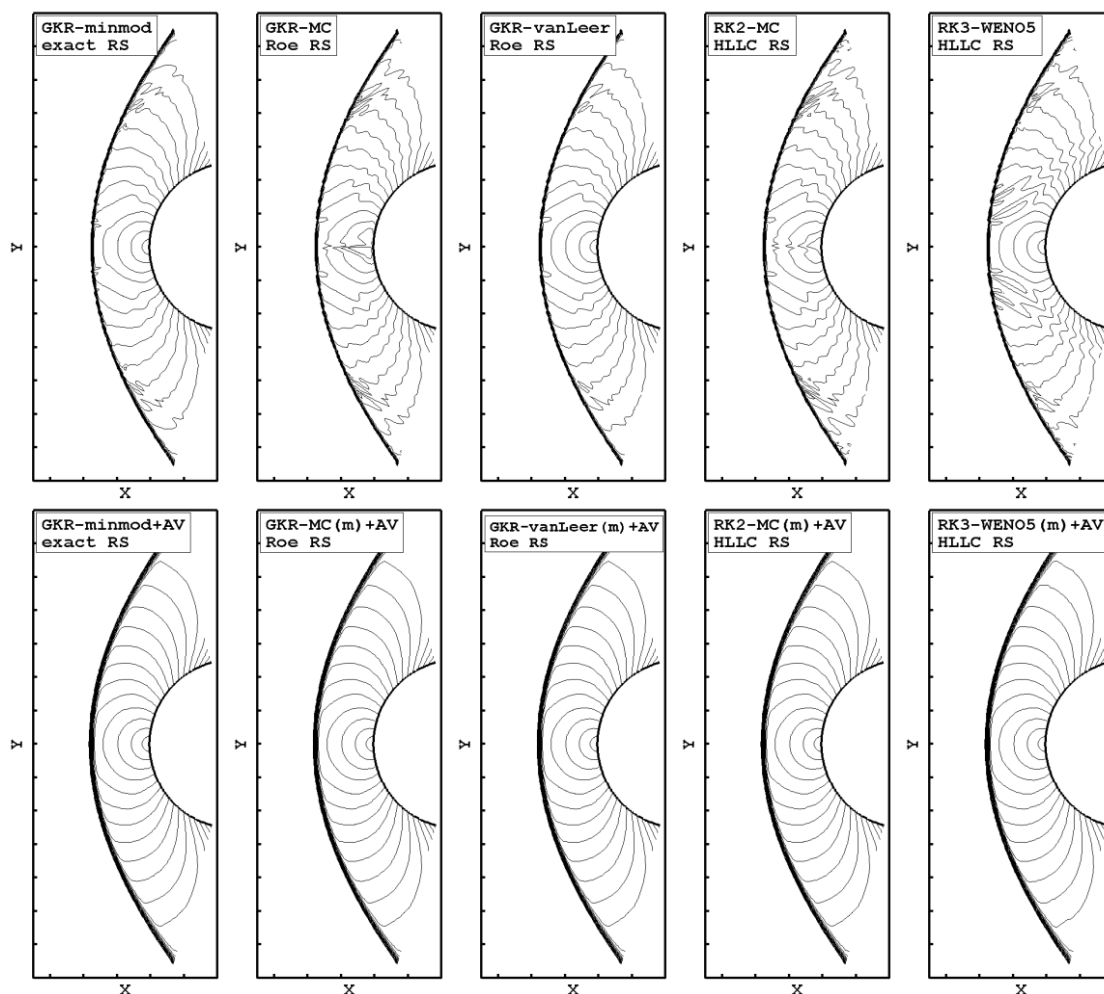


Рисунок 5.34. Сверхзвуковое обтекание цилиндра при $M_\infty = 3$. Двадцать пять изолиний числа Маха, равномерно распределенные между 0.1 и 2.5. Верхний ряд: оригинальные схемы, нижний ряд: те же схемы с добавлением искусственной вязкости.

Проблема нагрева (двумерный и трехмерный случаи).

Перейдем теперь к проблеме нагрева, которая возникает при моделировании *вязкого* гиперзвукового обтекания цилиндра. С этой целью будем решать уравнения Навье-Стокса, как в двумерной, так и в трехмерной постановках. В качестве начальных данных задачи возьмем те, что использовались в работе [72]: $M_\infty = 8.1$, 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. Рабочим газом

является воздух в приближении идеального газа с $\gamma = 1.4$, коэффициент молекулярной вязкости вычисляется по формуле Сазерленда, число Прандтля $Pr = 0.72$.

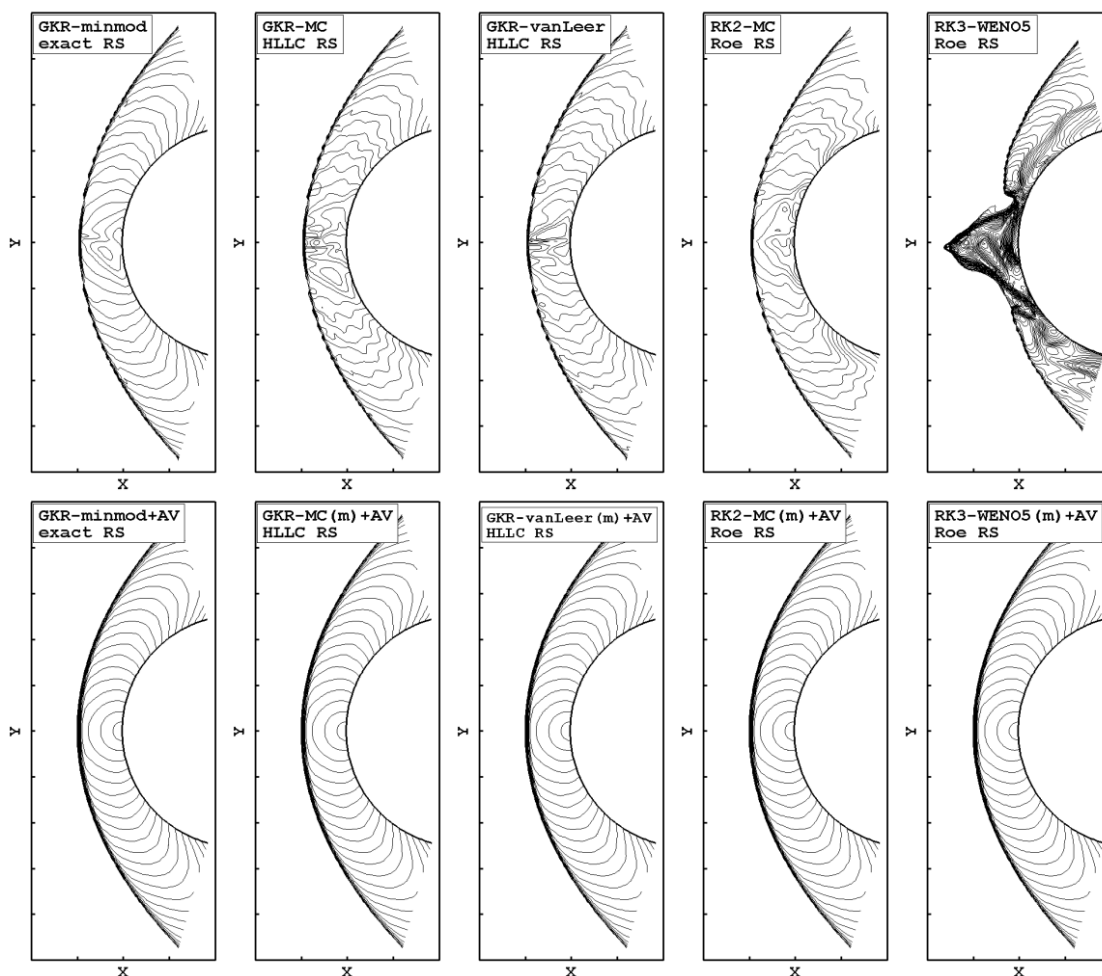


Рисунок 5.35. Гиперзвуковое обтекание цилиндра при $M_\infty = 20$. Двадцать пять изолиний числа Маха, равномерно распределенные между 0.1 и 2.5. Верхний ряд: оригинальные схемы, нижний ряд: те же схемы с добавлением искусственной вязкости.

В двумерном случае используется расчетная сетка с количеством ячеек $J \times I = 150 \times 160$, равномерная в окружном направлении и неравномерная с использованием геометрической прогрессии в радиальном направлении: $h_{j+1} / h_j = 1.05$, $h_1 = 5 \times 10^{-5} r$ (как показано слева на рисунке 5.36). В трехмерном случае сетка приобретает $K = 45$ равномерных интервалов в координатном направлении z ; в этом направлении расчетная область представляет собой сегмент $0 \leq z \leq r$ с условием периодичности на концах.

В данной тестовой задаче присутствуют физическая (молекулярная) и искусственная вязкости, которые суммируются в каждой расчетной ячейке. Однако для предотвращения появления искусственной вязкости внутри тонкого пограничного слоя здесь используется

следующее условие: если ячейка сильно вытянута, более конкретно, если $\max(h_i, h_j, h_k) > 10 \cdot \min(h_i, h_j, h_k)$, то $\mu_{AV} = 0$. Также в данной задаче стационарные уравнения интегрируются с использованием локального расчетного шага по времени.

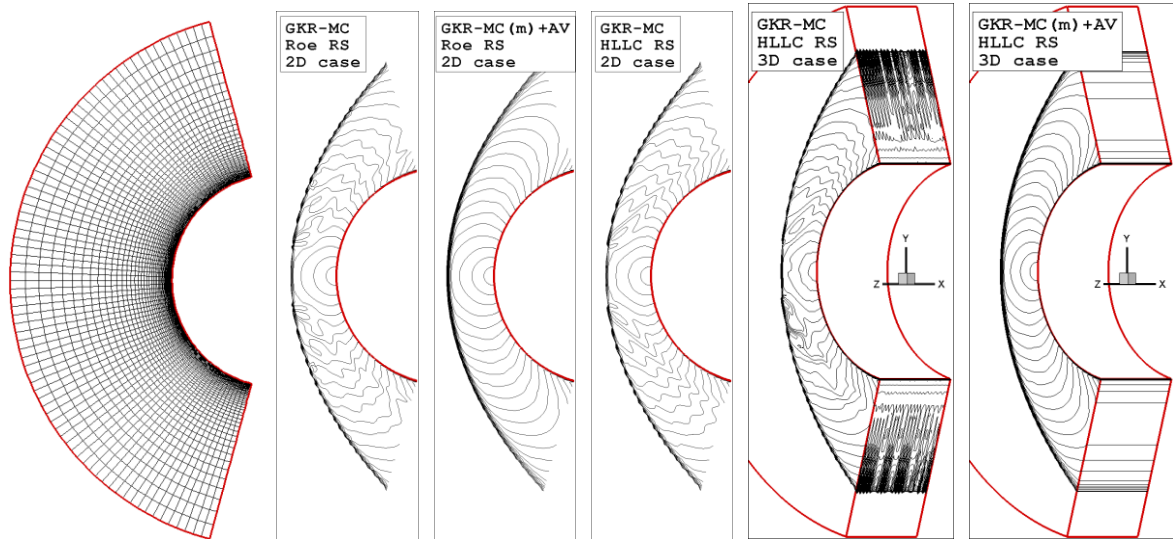


Рисунок 5.36. Вязкое гиперзвуковое обтекание цилиндра при $M_\infty = 8.1$, $Re_r = 1.31 \times 10^5$ (двумерный и трехмерный случаи). Расчетная сетка (каждая вторая линия сетки) и изолинии числа Маха (от 0.1 до 2.5 через 0.1).

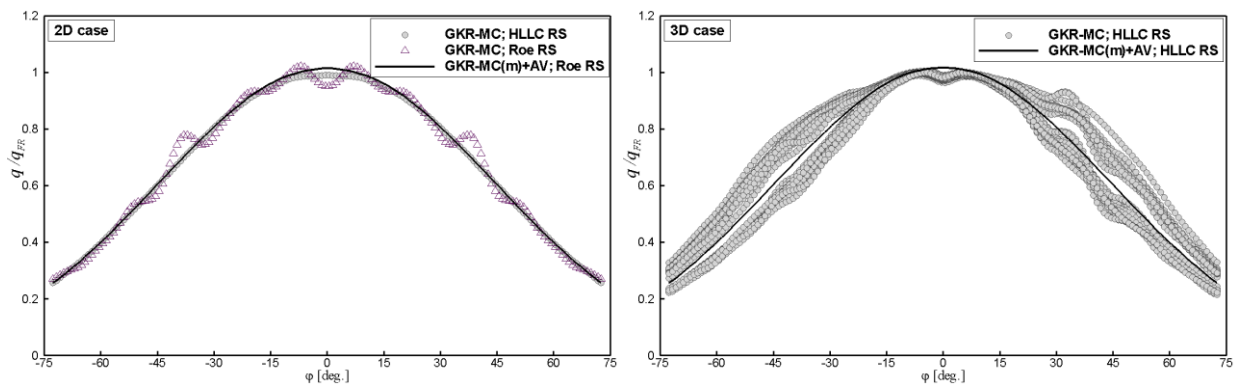


Рисунок 5.37. Распределение теплового потока по поверхности цилиндра при $M_\infty = 8.1$, $Re_r = 1.31 \times 10^5$ (двумерный и трехмерный случаи).

На рисунке 5.36 приведены изолинии числа Маха, полученные по схеме ГКР-МС с двумя решателями задачи Римана (решателями Roe 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 5.37 демонстрирует соответствующие

профили тепловых потоков на поверхности цилиндра, нормированные к величине в точке торможения: $q_{FR} = 17.5 \text{ W/cm}^2$ (Fay–Riddell’s stagnation value; см. [72]). 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.

Задача о седовском взрыве.

Постановка этой тестовой задачи была дана в разделе 5.2.6 при тестировании схем первого порядка точности.

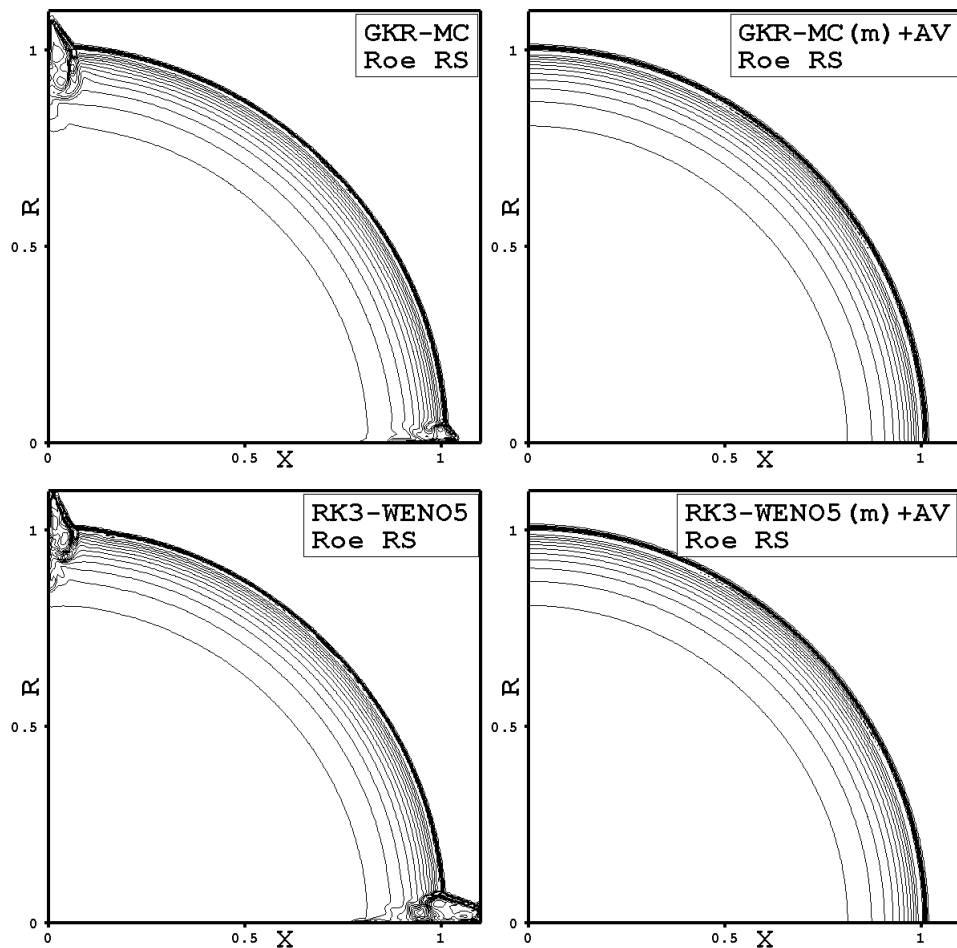


Рисунок 5.38. Задача о седовском взрыве на момент времени $t = 1$. Пятнадцать изолиний плотности, равномерно распределенные между значениями 0.4 и 6.

На рисунке 5.38 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 изъятиями вблизи обеих осей симметрии. Однако добавление искусственной вязкости в каждую из расчетных схем (правые графики) полностью устраняет проблему.

Задача Ноха.

В заключение обратимся к решению тестовой задачи Ноха [260] в двумерной постановке. Здесь в плоскости xu начальное состояние газа с $\gamma = 5/3$ следующее: $\rho = 1$, $p = 0$ (в расчетах заменяется на 10^{-6}), в каждой точке вектор скорости газа имеет единичную длину и направлен к началу координат. Точное решение задачи представляет собой ударную волну, отраженную от начала координат и имеющую круговую форму: скорость ударной волны равна $1/3$; за ударной волной $\rho = 16$, $p = 16/3$ и $\mathbf{u} = 0$; перед ударной волной $\rho = \left(1 + t / \sqrt{x^2 + y^2}\right)$, тогда как скорость и давление остаются неизменными.

Расчетная область в плоскости xu представляет собой квадрат $[0, 1] \times [0, 1]$. На его нижней и левой границах задается условие симметричности течения. На верхней и правой границах задаются параметры точного решения (зависят от времени и радиуса).

Результаты расчета задачи Ноха на сетке, состоящей из $J \times I = 200 \times 200$ ячеек, показаны на рисунке 5.38. Можно видеть, что схема ГKP-minmod с решателем HLLC (верхний ряд) дает сильную ударно-волновую неустойчивость. С добавлением искусственной вязкости (второй ряд) возмущения за ударной волной практически исчезают, но можно заметить небольшое занижение плотности непосредственно перед ударной волной (см. стрелки на графиках). Это происходит из-за особенности данной тестовой задачи: течение перед ударной волной является сходящимся и гиперзвуковым. В этом случае использование примитивных переменных в процедуре реконструкции данных оказывается более предпочтительным, чем использование характеристических переменных. Третий ряд на рисунке 5.38 подтверждает это заявление (здесь символ (p) означает использование примитивных переменных). Основываясь на этих данных можно сформулировать альтернативный вариант Предложения 2: на фронте ударной волны одновременно с переключением на реконструкцию minmod переходить на использование примитивных переменных. В других тестовых задачах эта версия работает примерно так же хорошо, как и основная, но в данной задаче она имеет преимущество. Последний пример на рисунке 5.38 (нижний ряд) относится к схеме RK3-WENO5 с решателем Roe; здесь используется искусственная вязкость и альтернативный вариант Предложения 2.

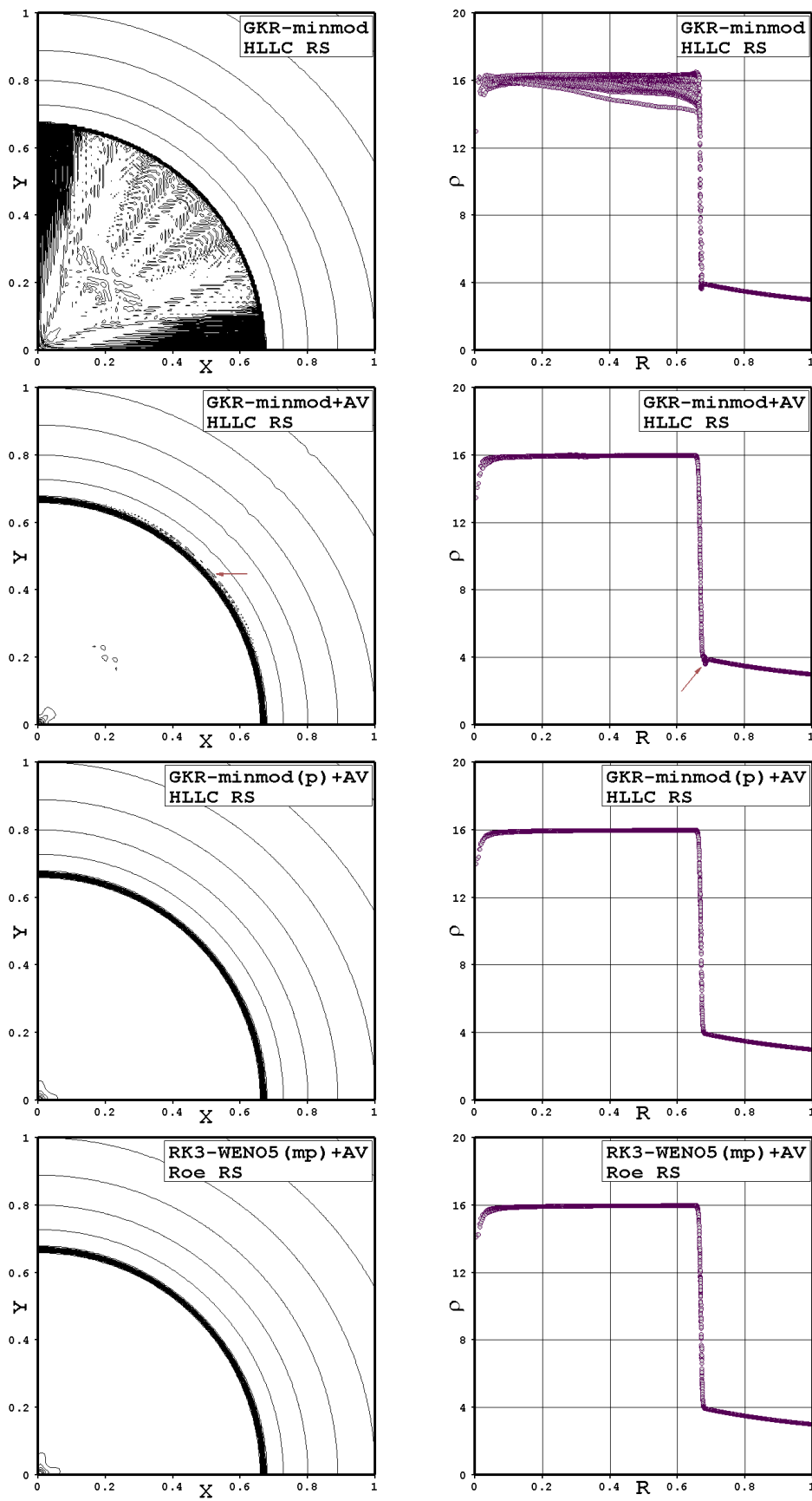


Рисунок 5.39. Результаты расчета задачи Ноха для $t = 2$ по различным схемам. Слева: изолинии плотности (от 2.5 до 17 через 0.25) в расчетной области. Справа: графики плотности в зависимости от радиуса $r = \sqrt{x^2 + y^2}$.

5.4 Выводы по главе

В качестве основных результатов пятой главы можно выделить следующее.

1. Проведен подробный анализ публикаций по численной неустойчивости типа «карбункул» в противопотоковых схемах и предложен новый подход к решению этой проблемы – метод искусственной вязкости, базирующийся на решении уравнений Навье-Стокса с заменой коэффициента молекулярной вязкости на коэффициент искусственной вязкости. Такой подход является внешним по отношению к конкретной схеме расчета «невязких» потоков (универсальность).

2. Предложена модель искусственной вязкости, согласующаяся с искусственной вязкостью фон Неймана и Рихтмайера, но имеющая свои особенности: обобщение на многомерность; использование искусственной теплопроводности наравне с искусственной вязкостью; введение пороговой величины для ограничения области действия добавочной диссипации (только внутри фронта ударной волны).

3. Для целей тестирования нового метода борьбы с «карбункул»-неустойчивостью предложено несколько модификаций задачи Кёрка: случаи расчета поступательной, отраженной или стационарной ударной волны на прямоугольной или параллелограммной сетке; инициация неустойчивости течения реализована через возмущение сетки с использованием генератора случайных чисел.

4. На примере использования схем первого порядка аппроксимации в двумерных и трехмерных задачах подобраны параметры модели искусственной вязкости: выражение для характерного размера ячейки h и базовый безразмерный коэффициент C_{AV} . Выявлена зависимость C_{AV} от показателя адиабаты газа для схем первого порядка.

5. Проведена адаптация метода искусственной вязкости к схемам повышенного порядка точности на примере использования нескольких отобранных схем (в том числе трех вариантов схемы ГКР). В качестве безразмерного базового коэффициента в модели искусственной вязкости было выбрано значение $C_{AV} = 0.5$, обеспечивающее подавление «карбункул»-неустойчивости в схемах повышенного порядка (при выполнении двух рекомендаций, перечисленных ниже). Это значение подходит для моделирования течений любой размерности в широком диапазоне значений показателя адиабаты газа (универсальность).

6. Первая рекомендация (Предложение 1) относится к процедуре реконструкции данных внутри ячейки; здесь следует переходить на использование характеристических переменных. Использование примитивных переменных обычно приводит к заметным

осцилляциям за ударной волной. Исключение составляет лишь реконструкция `minmod`, для которой можно использовать как характеристические, так и примитивные переменные.

7. Вторая рекомендация (Предложение 2) касается реконструкции данных внутри ячеек, расположенных внутри фронта ударной волны. В таких ячейках следует переходить на представление о линейном распределении данных и использовать реконструкцию `minmod`. При этом реконструкцию можно проводить как с использованием характеристических переменных (основной вариант), так и с использованием примитивных переменных (альтернативный вариант). В большинстве тестовых задач оба варианта показали близкие результаты, однако в задаче Ноха альтернативный вариант показал некоторое преимущество.

8. Использование рассматриваемой методики в сочетании с выполнением указанных рекомендаций позволяет не только подавлять численную неустойчивость типа «карбункул», но и существенно снижает уровень осцилляций параметров потока за фронтом ударной волны. Одним из практически важных результатов применения предлагаемой методики является решение проблемы нагрева, которая иногда возникает при моделировании вязкого гиперзвукового обтекания затупленного тела.

9. Проведенное исследование также показало, что применение неполных приближенных решателей задачи Римана (считающихся свободными от «карбункул»-неустойчивости) в схемах повышенной точности само по себе не гарантирует полное подавление неустойчивости. Применение метода искусственной вязкости и в этом случае решает проблему.

Заключение

В диссертации получены следующие основные результаты.

1. Предложен оригинальный метод повышения точности схемы Годунова на базе принципа Колгана и вычислительной процедуры типа предиктор-корректор. Новая схема сквозного счета (схема ГКР) обобщена на случай моделирования течений неравновесного газа. Показана высокая эффективность схемы ГКР при моделировании сложных ударно-волновых течений в широком диапазоне времен релаксации неравновесных процессов.

2. 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).

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 неравновесных струй продуктов сгорания, истекающих в атмосферу на различных высотах полета.

5. Показано, что в рамках приближения гипотезы Буссинеска (определяет форму тензора турбулентных напряжений в популярных моделях турбулентности) не удается 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.

6. Развита единая математическая модель ближней атмосферы кометы, включающая в себя несколько моделей производства газопылевого потока с поверхности и учитывающая многофазную неравновесность и фотодиссоциацию.

7. 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.

8. 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.

9. Предложено новое представление схемы КАБАРЕ, относящееся к классу MUSCL-схем.

10. Предложена новая низкодиссипативная реконструкция-ограничитель NOLD для схемы ГКР. Показана ее высокая эффективность в задачах с разрывами решения.

11. Предложен оригинальный вариант разрывного метода Галеркина, обладающий свойством суперсходимости.

12. Предложен универсальный подход к решению проблемы «карбункул»-неустойчивости в схемах типа Годунова – метод искусственной вязкости. Показана эффективность нового подхода на всесторонних тестовых примерах.

Список литературы

1. Годунов С.К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Математический сборник. – 1959. – Т. 47, № 3. – С. 271–306.
2. Von Neumann J., Richtmyer R.D. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks // J. Appl. Phys. – 1950. – V. 21. – P. 232–237.
3. Годунов С.К., Забродин А.В., Прокопов Г.П. Разностная схема для двумерных нестационарных задач газовой динамики и расчет обтекания с отошедшей ударной волной // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1961. – Т. 1, № 6. – С. 1020–1050.
4. Иванов М.Я., Крайко А.Н. Решение прямой задачи о смешанном течении в соплах // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. – 1969. – № 5. – С. 77–83.
5. Иванов М.Я., Крайко А.Н., Михайлов Н.В. Метод сквозного счета для двумерных и пространственных сверхзвуковых течений. I // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1972. – Т. 12, № 2. – С. 441–463.
6. Иванов М.Я., Крайко А.Н. Метод сквозного счета для двумерных и пространственных сверхзвуковых течений. II // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1972. – Т. 12, № 3. – С. 805–813.
7. Годунов С.К. (ред.), Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Наука, 1976.
8. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. – 1972. – Т. 3, № 6. – С. 68–78.
9. Копченков В.И., Крайко А.Н. Монотонная разностная схема второго порядка для гиперболических систем с двумя независимыми переменными // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1983. – Т. 23, № 4. – С. 848–858.
10. Меньшов И. С. Повышение порядка аппроксимации схемы Годунова на основе решения обобщенной задачи Римана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1990. – Т. 30, № 9. – С. 1357–1371.
11. Rodionov A.V. Complement to the “Kolgan project” // J. Comput. Phys. – 2012. – V. 231. – P. 4465–4468.
12. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection // J. Comput. Phys. – 1977. – V. 23. – P. 276–299.

13. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method // J. Comput. Phys. – 1979. – V. 32. – P. 101–136.
14. 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.
15. Родионов А.В. Повышение порядка аппроксимации схемы С.К.Годунова // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1987. – Т. 27, № 12. – С. 1853–1860.
16. Глебов Г.А., Молчанов А.М. Модель турбулентности для расчета высокоскоростных реагирующих струй // Исследование теплообмена в летательных аппаратах. Сборник статей. – М.: МАИ. – 1982. – С. 6–11.
17. Глебов Г.А., Молчанов А.М., Трунов А.П. Коэффициенты скоростей химических реакций для расчета догорающих струй двигателей // Тепло- и массообмен в элементах конструкции двигателей ЛА. Сборник статей. – М.: МАИ. – 1990. – С. 13–17.
18. Молчанов А.М. Численный метод расчета сверхзвуковых турбулентных струй // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2010. – Т. 10.
<http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2009-12-14-001.pdf>
19. Быков Л.В., Молчанов А.М. Математическое моделирование струй реактивных двигателей // Тепловые процессы в технике. – 2011. – Т. 3, № 3. – С. 98–107.
20. Molchanov A.M. Numerical simulation of supersonic chemically reacting turbulent jets // AIAA Paper No. 2011-3211. – 2005. – 37 pp.
21. Завелевич Ф.С., Марков М.Н., Натензон Я.М., Петров В.С., Саликовский В.И., Юделович М.Я. Экспериментальное и теоретическое исследование неравновесного излучения струи двигателя коррекции орбитальной пилотируемой станции (ОПС) «Салют» // Проблемы механики и теплообмена в космической технике. Сборник статей под ред. О.М. Белоцерковского. – М.: Машиностроение, 1974. – С. 114–123.
22. Завелевич Ф.С., Ушаков Н.Н. Взаимодействие выхлопных струй ракетных двигателей на различных топливах с атмосферой применительно к оценке экологической безопасности запусков ракет и ракет-носителей // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета. – 2012. – № 3 (34). – С. 226–234.
23. Виткин Э.И., Перельман Л.Т., Ходыко Ю.В. Численное моделирование сверхзвуковых струйных двухфазных течений с явным выделением ударных волн // Инженерно-физический журнал. – 1987. – Т. 53, № 1. – P. 32–37.

24. Бриль А.И., Кабашников В.Л., Ходыко Ю.В. Подобие излучательных характеристик нагретых струй // Теплофизика высоких температур. – 1991. – Т. 29, № 5. – P. 995–1001.
25. Аэродинамика ракет. В 2-х книгах. Под ред. М. Хемша и Дж. Нильсена. – М.: Мир, 1989.
26. Шульман Л.М. Динамика кометных атмосфер. Нейтральный газ. – Киев: Наукова Думка, 1972.
27. Шульман Л.М. Ядра комет. – М: Наука, 1987.
28. Gombosi T.I., Cravens T.E., Nagy A.F. Time-dependent dusty gasdynamic flow near cometary nuclei // *Astrophys. J.* – 1985. – V. 293. – P. 328–341.
29. Combi M.R. Time-dependent gas kinetics in tenuous planetary atmospheres: The cometary coma // *ICARUS.* – 1996. – V. 123. – P. 207–226.
30. Crifo J.F. Improved gasdynamic treatment of cometary water sublimation and recondensation: Application to comet P/Halley // *Astron. Astrophysics.* – 1987. – V. 187. – P. 438–450.
31. Crifo J.F. Inferences concerning water vapour viscosity and mean free path at low temperatures // *Astron. Astrophysics.* – 1989. – V. 223. – P. 365–368.
32. Crifo J.F. Water clusters in the coma of comet Halley and their effect on the gas density, temperature and velocity // *ICARUS.* – 1990. – V. 84. – P. 414–446.
33. Crifo J.F. Hydrodynamic models of the collisional coma // Newburn, R.L., Rahe, J. (Eds.), *Comets in the Post-Halley Era* – Kluwer Academic Press, Dordrecht, 1991. – V. 2. – P. 937–989.
34. Crifo J.F. Lower and upper limits to Comet P/Halley solid material loss rate // *Adv. Space Res.* – 1991. – V. 11, No.12. – P. 155–160.
35. Crifo J.F. Cometary gas-phase chemistry, taking into account homogeneous and ioninduced water recondensation // *Astrophys. J.* – 1992. – V. 391. – P. 336–352.
36. Kitamura Y. A numerical study of the interaction between two cometary jets: A possibility of shock formation in cometary atmospheres // *ICARUS.* – 1990. – V. 86. – P. 455–475.
37. Colella P., Woodward P.R. The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations // *J. Comput. Phys.* – 1984. – V. 54. – P. 174–201.
38. Harten A., Osher S. Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes. I // *SIAM J. Numer. Anal.* – 1987. – V. 24, No.2. – P. 279–309.
39. Harten A., Enquist B., Osher S., Chakravarthy S.R. Uniformly high-order essentially non-oscillatory schemes. III // *J. Comput. Phys.* – 1987. – V. 71. – P. 231–303.
40. Liu X.-D., Osher S., Chan T. Weighted essentially non-oscillatory schemes // *J. Comput.*

- Phys. – 1994. – V. 115. – P. 200–212.
41. Jiang G.-S., Shu C.-W. Efficient implementation of weighted ENO schemes // J. Comput. Phys. . – 1996. – V. 126. – P. 202–228.
 42. Titarev V.A., Toro E.F. Finite-volume WENO schemes for three-dimensional conservation laws // J. Comput. Phys. – 2004. – V. 201. – P. 238–260.
 43. Suresh A., Huynh H.T. Accurate monotonicity-preserving schemes with Runge–Kutta time stepping // J. Comput. Phys. – 1997. – V. 136. – P. 83–99.
 44. Toro E.F., Millington R.C., Nejad L.A.M. Towards very high order Godunov schemes // Toro E.F. (Ed.), Godunov Methods: Theory and Applications – Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2001. – P. 905–937.
 45. Titarev V.A., Toro E.F. ADER schemes for three-dimensional nonlinear hyperbolic systems // J. Comput. Phys. – 2005. – V. 204. – P. 715–736.
 46. Cockburn B., Karniadakis G.E., Shu C.-W. The development of discontinuous Galerkin methods // Discontinuous Galerkin Methods. Theory, Computation and Applications. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. – Springer-Verlag, 2000. – V. 11. – P. 3–50.
 47. Cockburn B., Shu C.-W. Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods for convection-dominated problems // J. Sci. Comput. – 2001. – V. 16. – P. 173–261.
 48. Dumbser M. Building blocks for arbitrary high order discontinuous Galerkin schemes // J. Sci. Comput. – 2006. – V. 27. – P. 215–230.
 49. Krivodonova L. Limiters for high-order discontinuous Galerkin methods // J. Comput. Phys. – 2007. – V. 226. – P. 879–896.
 50. Zhong X., Shu C.-W. A simple weighted nonoscillatory limiter for Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods // J. Comput. Phys. – 2013. – V. 232. – P. 397–415.
 51. Ладонкина М.Е., Неклюдова О.А., Тишкин В.Ф. Использование разрывного метода Галеркина при решении задач газовой динамики // Матем. Моделирование. – 2014. – Т. 26, № 1. – С. 17–32.
 52. Головизнин В.М., Самарский А.А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // Матем. Моделирование. – 1998. – Т. 10, № 1. – С. 86–100.
 53. Головизнин В.М., Самарский А.А. Некоторые свойства разностной схемы «кабаре» // Матем. Моделирование. – 1998. – Т. 10, № 1. – С. 101–116.
 54. Головизнин В.М. Балансно-характеристический метод численного решения уравнений газовой динамики // ДАН. – 2005. – Т. 403, № 4. – С. 459–464.
 55. Karabasov S.A., Goloviznin V.M. Compact accurately boundary-adjusting high-resolution

- technique for fluid dynamics // *J. Comput. Phys.* – 2009. – V. 228. – P. 7426–7451.
56. Карабасов С.А. О возможностях методов второго порядка аппроксимации на примере модельных задач газо- и гидродинамики // *Матем. Моделирование.* – 2010. – Т. 22, № 7. – С. 93–120.
 57. Головизнин В.М., Канаев А.А. Принцип максимума парциальных локальных вариаций для определения конвективных потоков при численном решении одномерных нелинейных скалярных гиперболических уравнений // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* – 2011. – Т. 51, № 5. – С. 881–897.
 58. Abalakin I.V., Bakhvalov P.A., Kozubskaya T.K. Edge-based reconstruction schemes for unstructured tetrahedral meshes // *Int. J. Numer. Meth. Fluids.* – 2016. – V. 81. – P. 331–356.
 59. Любимов Д.А. Разработка и применение метода высокого разрешения для расчета струйных течений методом моделирования крупных вихрей // *ТВТ* – 2012. – Т. 50, № 3. – С. 450–466.
 60. Иванов М.Я., Крайко А.Н. Об аппроксимации разрывных решений при использовании разностных схем сквозного счета // *Журнал вычисл. матем. и матем. физики*, 1978, Т. 18, № 3, С. 780-783.
 61. Остапенко В.В. О сходимости разностных схем за фронтом нестационарной ударной волны // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* – 1997. – Т. 37, № 10. – С. 1201–1212.
 62. Ковыркина О.А., Остапенко В.В. О реальной точности разностных схем сквозного счета // *Матем. Моделирование.* – 2013. – Т. 25, № 9. – С. 63–74.
 63. Greenough J. A., Rider W. J. A quantitative comparison of numerical methods for the compressible Euler equations: fifth-order WENO and piecewise-linear Godunov // *J. Comput. Phys.* – 2004. – V. 196. – P. 259–281.
 64. Wang Z.J., Fidkowski K., Abgrall R., Bassi F., Caraeni D., Cary A., Deconinck H., Hartmann R., Hillewaert K., Huynh H.T., Kroll N., May G., Persson P.-O., van Leer B., Visball M. High-order CFD methods: current status and perspective // *Int. J. Numer. Meth. Fluids.* – 2013. – V. 72. – P. 811–845.
 65. Roe P.L. Approximate Riemann Solvers // *J. Comput. Phys.* – 1981. – V. 43. – P. 357–372.
 66. Toro E.F., Spruce M., Speares W. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver // *Shock Waves.* – 1994. – V. 4. – P. 25–34.
 67. Peery K.M., Imlay S.T. Blunt body flow simulations // *AIAA Paper No. 88-2924.* – 1988.
 68. Quirk J. J. A contribution to the great Riemann solver debate // *ICASE Report No. 92-64.* – 1992; *Int. J. Numer. Meth. Fluids.* – 1994. – V. 18. – P. 555–574.

69. Dumbser M., Moschetta J.-M., Gressier J. A matrix stability analysis of the carbuncle phenomenon // *J. Comput. Phys.* – 2004. – V. 197. – P. 647–670.
70. Roe P., Nishikawa H., Ismail F., Scalabrin L. On carbuncles and other excrescences // *AIAA Paper No. 2005-4872.* – 2005.
71. Menart J.A., Henderson S.J. Study of the issues of computational aerothermodynamics using a Riemann solver // *AFRL Report No. 2008-3133.* – 2008.
72. Kitamura K., Shima E. Towards shock-stable and accurate hypersonic heating computations: A new pressure flux for AUSM-family schemes // *J. Comput. Phys.* 2013. V. 245. P. 62–83.
73. Xie W., Li W., Li H., Tian Z., Pan S. On numerical instabilities of Godunov-type schemes for strong shocks // *J. Comput. Phys.* – 2017. – V. 350. – P. 607–637.
74. Van Leer B. The development of numerical fluid mechanics and aerodynamics since the 1960s: US and Canada // 100 Vol. of ‘Notes on Num. Fluid Mech.’ – Springer-Verlag, 2009. – P. 159–185.
75. Roe P. Colorful fluid dynamics: behind the scenes // *Lecture in Michigan Engineering.* – 2013.
<https://cfdninja.com/education/colorful-fluid-dynamics/>
76. 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.
77. 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.
78. Тишин А.П., Родионов А.В. К вопросу об «экологически чистых» ракетных топливах // *Известия ВУЗ. Авиационная техника.* – 1993. – № 3. – С. 77–83.
79. 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.
80. Rodionov A.V. A Godunov’s method modification for prediction of supersonic reacting turbulent jets // *La Recherche Aérospatiale.* – 1995. – № 4. – P. 263–276.
81. 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.
82. 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.

83. 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.
84. Родионов А.В. Моделирование истечения пространственных многофазных струй с поверхности ядра кометы // *Астрономический вестник*. – 1996. – Т. 30, № 3. – С. 265–275.
85. 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.
86. Crifo J.F., Rodionov A.V. The dependence of the circumnuclear coma structure on the properties of the nucleus. Part II. First investigation of the coma surrounding a homogeneous, aspherical nucleus // *ICARUS*. – 1997. – V. 129. – P. 72–93.
87. 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.
88. 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.
89. 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.
90. 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.
91. 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.
92. 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.
93. Родионов А.В. Новый маршевый метод расчета струй продуктов сгорания // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2002. – Т. 42, № 7. – С. 1093–1104.
94. 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.
95. 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.
 96. 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.
 97. 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.
 98. 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.
 99. 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.
 100. 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.
 101. 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.
 102. 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.
 103. 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.
 104. 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.
 105. Zakharov V.V., Rodionov A.V., Lukianov G.A., Crifo J.F. Monte-Carlo and multifluid modelling of the circumnuclear dust coma. Part II. Aspherical-homogeneous, and spherical-inhomogeneous nuclei // *ICARUS*. – 2009. – V. 201. – P. 358–380.
 106. 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.

107. 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.
108. 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.
109. Родионов А.В., Мышкина И.Ю., Спиридонов В.Ф., Стародубов С.В., Циберев 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.
110. Родионов А.В. Сопоставление схемы КАБАРЕ со схемами типа MUSCL // *Матем. Моделирование*. – 2013. – Т. 25, № 9. – С. 109–136.
111. 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.
112. Родионов А.В. О взаимосвязи разрывного метода Галеркина со схемами MUSCL-типа // *Матем. Моделирование*. – 2015. – Т. 27, № 10. – С. 96–116.
113. 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.
114. 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.
115. Jurado E., Martin T., Canalias E., Blazquez A., Garmier R., Ceolin T., Gaudon F., Delmas C., Biele J., Ulapec 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.
116. Rodionov A.V. Artificial viscosity in Godunov-type schemes to cure the carbuncle phenomenon // *J. Comput. Phys.* – 2017. – V. 345. – P. 308–329.
117. Rodionov A.V. Artificial viscosity to cure the carbuncle phenomenon: The three-

- dimensional case // *J. Comput. Phys.* – 2018. – V. 361. – P. 50–55.
118. 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.
 119. 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.
 120. 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.
 121. Rodionov A.V. Application of the modified Godunov's scheme to numerical simulation of real gas flows // *Contributed papers of international school seminar «Nonequilibrium processes in gases and low temperature plasma».* Minsk. – 1992. – P. 39–41.
 122. Tishin A.P., Rodionov A.V. On the subject of «ecologically clean» rocket propellants // *AIAA Paper No. 93-2416.* – 1993. – 5 pp.
 123. Anfimov N.A., Karabadjak G.F., Khmelinin B.A., Plastinin Y.A., Rodionov A.V. Analysis of mechanisms and nature of radiation from aluminum oxide in different phase states in solid rocket exhaust plumes // *AIAA Paper No. 93-2818.* – 1993. – 11 pp.
 124. Карабаджак Г.Ф., Пластинин Ю.А., Родионов А.В. Мониторинг (NO)_x и влияние выхлопа сверхзвукового пассажирского самолета на концентрацию озона в атмосфере // *Методы исследования гиперзвуковых летательных аппаратов. Сборник докладов школы-семинара ЦАГИ «Механика жидкости и газа», 25 февр. – 1 марта 1992, ЦАГИ.* – 1994. – Часть 5. – С. 10.1–10.10.
 125. Eremin V.V., Mikhailin V.A., Rodionov A.V. Numerical simulation of super-sonic flow over flying vehicles of complicated configuration in the scope of Euler's equations // *Proc. Sino-Russian Hypersonic Flow Conf. Beijing, China.* – 1994. – P. 103–108.
 126. Plastinin Yu.A., Anfimov N.A., Baula G.G., Karabadzak G.F., Khmelinin B.A., Rodionov A.V. Modeling of aluminum oxide particle radiation in a solid propellant motor exhaust // *AIAA Paper No. 96-1879.* – 1996. – 8 pp.
 127. Rodionov A.V., Plastinin Yu.A., Drakes J.A., Simmons M.A., Hiers R.S. Modeling of multiphase alumina-loaded jet flow fields // *AIAA Paper No. 98-3462.* – 1998. – 16 pp.
 128. Rodionov A.V. New space-marching technique for exhaust plume simulation // *AIAA Paper No. 2000-3390.* – 2000. – 11 pp.

129. Plastinin Yu.A., Karabadzhak G.F., Khmelinin B.A., Baula G.G., Rodionov A.V. Ultraviolet, visible and infrared spectra modeling for solid and liquid-fuel rocket exhausts // AIAA Paper No. 2001-0660. – 2001. – 15 pp.
130. Rodionov A.V., Plastinin Yu.A., Karabadzhak G.F. Soot oxidation modeling in plumes // AIAA Paper No. 2001-3858. – 2001. – 9 pp.
131. Plastinin Yu.A., Karabadzhak G.F., Khmelinin B.A., Baula G.G., Rodionov A.V. Advanced model for soot radiation in the plume // AIAA Paper No. 2002-0798. – 2002. – 4 pp.
132. Plastinin Yu.A., Karabadzhak G.F., Khmelinin B.A., Baula G.G., Rodionov A.V. Modeling of OH ultraviolet radiation in Atlas motor plume and comparison with recent experimental data // AIAA Paper No. 2003-0507. – 2003. – 10 pp.
133. Karabadzhak G.F., Khmelinin B.A., Plastinin Yu.A., Rodionov A.V. Analysis of new spacecraft plume glow data taken onboard of the Mir space station // AIAA Paper No. 2003-0509. – 2003. – 11 pp.
134. Plastinin Yu.A., Karabadzhak G.F., Khmelinin B.A., Baula G.G., Rodionov A.V. Determination of soot particle density and dimension in the LOX/kerosene engine booster exhaust from remote measurements of radiation density // Proc. 2nd Int. Conf. on Green Propellants for Space Propulsion. Cagliari, Sardinia, Italy (ESA SP-557). – 2004. – 4 pp.
135. Lukyanov G.A., Zakharov V.V., Rodionov A.V., Crifo J.F. Comparison between Navier-Stokes and DSMC simulations of the rarefied gas flow from model cometary nuclei // Rarefied Gas Dynamics. Proc. 24th Int. Symp., AIP Conf. Proc. 762. – 2004. – P. 331–336.
136. Plastinin Yu.A., Karabadzhak G.F., Khmelinin B.A., Baula G.G., Rodionov A.V. Investigation of soot density in the LOX/kerosene engine booster exhaust of Atlas II and Atlas III from remote measurements of radiation density // AIAA Paper No. 2005-0769. – 2005. – 6 pp.
137. Karabadzhak G.F., Plastinin Yu.A., Rodionov A.V., Erofeev A.I., Freedlander O.G. Modeling of the radiation caused by interaction of a liquid propellant motor exhaust with rarefied atmosphere at orbital altitudes and comparison with experiment // AIAA Paper No. 2005-0770. – 2005. – 10 pp.
138. Rodionov A.V., Spiridonov V.F., Tsiberev K.V., Tagirova I.Yu. The Code for Solving Aerodynamic Problems Based on Explicit Godunov-Kolgan-Rodionov Scheme // Proc. Int. Conf. on Computational Science & Computational Intelligence. Las Vegas, Nevada. – 2014. – P. 285–287.
139. Родионов А.В. О схемах типа MUSCL и разрывном методе Галеркина // Труды XV Международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование»

- Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ.– 2015. – С. 406–415.
140. Crifo J.F., Zakharov V.V., Rodionov A.V., Lukyanov G.A. The Prediction of the Gas Environment of the PHILAE Probe During its 2014 Descent to the Nucleus of the Comet 67P // *Rarefied Gas Dynamics. Proc. 30th Int. Symp., AIP Conf. Proc.* 1786. – 2016. – P. 160007-1–160007-8.
141. Родионов А.В., Тагирова И.Ю. Искусственная вязкость в методах сквозного счета для борьбы с численной неустойчивостью типа «карбункул» // Труды XVI Международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование» – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ.– 2017. – С. 261–268.
142. Родионов А.В. О применимости гипотезы Буссинеска при моделировании сверхзвуковых струй в рамках уравнений Рейнольдса // *Препринты РФЯЦ-ВНИИЭФ.* – 2013. – № 112. – 71 с.
143. Родионов А.В. О схемах типа MUSCL и разрывном методе Галеркина // *Препринты РФЯЦ-ВНИИЭФ.* – 2015. – № 114. – 43 с.
144. Родионов А.В. Применение искусственной вязкости для борьбы с численной неустойчивостью типа «карбункул» // *Препринты РФЯЦ-ВНИИЭФ.* – 2017. – № 115. – 53 с.
145. Родионов А.В. Искусственная вязкость для подавления ударно-волновой неустойчивости в схемах типа Годунова повышенной точности // *Препринты РФЯЦ-ВНИИЭФ.* – 2018. – № 116. – 51 с.
146. Toro E.F. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. Third Edition.* – Springer-Verlag, 2009.
147. Vlasenko V., Bosniakov S., Mikhailov S., Morozov A. Troshin A. Computational approach for investigation of thrust and acoustic performances of present-day nozzles // *Progress in Aerospace Sciences* – 2010. – V. 46. – P. 141–197.
148. LeVeque R.J. *Finite volume methods for hyperbolic problems.* – Cambridge University Press, 2002.
149. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Справочник в 10 томах. Под ред. В.П. Глушко. – М.: ВИНТИ АН СССР, 1971 – 1979.
150. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочник в 4 томах. Под ред. В.П. Глушко. – М.: Наука, 1978 – 1982.
151. База данных по константам скорости процессов энергообмена ENRATE. Центр АВОГАДРО. – М.: Институт механики МГУ, 1992.

152. Сальников В.А., Старик А.М. Численный анализ энергетических характеристик газодинамических лазеров на продуктах сгорания углеводородных топлив // Теплофизика высоких температур. – 1995. – Т. 33, № 1. – С. 121–133.
153. Стернин Л.Е. Основы газодинамики двухфазных течений в соплах. – М.: Машиностроение, 1974.
154. Jones W. P., Launder B. E. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence // Int. J. of Heat and Mass Transfer. – 1972. – V. 15. – P. 301–314.
155. Launder B. E., Sharma B. I. Application of the energy dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc // Letters in Heat and Mass Transfer. – 1974. – V. 1, No. 2. – P. 131–138.
156. Molchanov A.M. Application of the implicit McCormack method to the computation of supersonic turbulent jets, using an algebraic stress model // The second Japan-Soviet Union Symposium on Computational Fluid Dynamic, August 27-31. – 1990. – P. 231–238.
157. Sarkar S., Erlebacher G., Hussaini M.Y., Kreiss H.O. The analysis and modeling of dilatational terms in compressible turbulence // J. Fluid Mech. – 1991. – V. 227. – P. 473–493.
158. Sarkar S., Lakshmanan B. Application of a Reynolds stress turbulence model to the compressible shear layer // AIAA Journal. – 1991. – V. 29, No. 5. – P. 743–749.
159. Henderson C.B. Drag coefficient of spheres in continuum and rarefied flows // AIAA Journal. – 1976. – V. 14, No. 6. – P. 707–708.
160. Hilling W.B., Turnbull D. Theory of crystal growth in undercooled pure liquids // J. Chem. Physics. – 1956. – V. 24. – P. 914.
161. Rosner D.E., Epstein M. Simultaneous kinetic and heat transfer limitations in the crystallization of highly undercooled melts // Chemical Engineering Science. – 1975. – V. 30. – P. 511–520.
162. Levi C.G., Jayaram V., Valencia J.J., Mehrabian R. Phase selection in electro-hydrodynamic atomization of alumina // J. Mater. Res. – 1988. – V. 3, No. 5. – P. 969–983.
163. Reardon J.E. Prediction of radiation from rocket exhaust gases // AIAA Paper No. 70-841. – 1970.
164. Dash S.M., Wolf D.E., Seiner J.M. Analysis of turbulent under-expanded jets. Part I: Parabolized Navier-Stokes model, SCIPVIS // AIAA Journal. – 1985. – V. 23, No. 4. – P. 505–514.
165. Молчанов А.М. Расчет турбулентных сверхзвуковых струй реального газа, истекающих в затопленное пространство. Ч.1. Постановка задачи и численный метод // Вестник МАИ. – 1997. – Т. 4, № 1. – С. 58–64.

166. Wu B.J.C. Possible water vapor condensation in rocket exhaust plumes // *AIAA Journal*. – 1975. – V. 13, No. 6. – P. 797–802; Ву. Исследование возможности конденсации водяных паров в выхлопной струе ракетных двигателей // *Ракетная техника и космонавтика*. – 1975. – Т. 13, № 6. – С. 107–114.
167. Пластинин Ю.А. Моделирование неравновесных процессов излучения сверхзвуковых недорасширенных струй полидисперсных продуктов сгорания // *Космонавтика и ракетостроение*. – 2005. – Вып. 1 (38). – С. 34–43.
168. Пластинин Ю.А. Методика и результаты определения концентрации и размеров сажистых частиц путем дистанционного измерения яркости излучения сверхзвуковой струи бустерного двигателя, работающего на топливе кислород-керосин // *Космонавтика и ракетостроение*. – 2006. – Вып. 3 (44). – С. 125–130.
169. Карабаджак Г.Ф., Пластинин Ю.А., Родионов А.В., Сженев Е.Ю., Сипачев Г.Ф., Хмелинин Б.А. Спектрональные исследования сверхслабых эмиссий естественного и техногенного происхождения в верхних слоях атмосферы и ионосферы Земли // *Космонавтика и ракетостроение*. – 2007. – Вып. 4 (49). – С. 26–32.
170. Seiner J.M., Norum T.D. Experiments of shock associated noise on supersonic jets // *AIAA Paper No. 79-1526*. – 1979.
171. Cumber P.S., Fairweather M., Falle S.A.E.G., Giddings J.R. Predictions of the structure of turbulent, moderately underexpanded jets // *ASME J. Fluids Eng.* – 1994. – V. 116. – P. 707–713.
172. Lakshmanan B., Abdol-Hamid K.S. Investigation of supersonic jet plumes using an improved two-equation turbulence model // *J. Propuls. Power.* – 1994. – V. 10, No. 5. – P. 736–741.
173. Suzen Y.B., Hoffmann K.A. Investigation of supersonic jet exhaust flow by one- and two-equation turbulence models // *AIAA Paper No. 98-0322*. – 1998.
174. Abdol-Hamid K.S., Pao S.P., Hunter C.A., Deere K.A., Massey S.J., Elmiligui A. PAB3D: Its history in the use of turbulence models in the simulation of jet and nozzle flows // *AIAA Paper No. 2006-489*. – 2006.
175. Fairweather M., Ranson K.R., Prediction of underexpanded jets using compressibility-corrected, two-equation turbulence models // *Prog. Comput. Fluid Dyn.* – 2006. – V. 6, No. 1/2/3. – P. 122–128.
176. Глушко Г.С., Иванов И.Э., Крюков И.А. Расчет сверхзвуковых турбулентных течений // *Препринты ИПМ им. А.Ю. Ишлинского*. – 2006. – № 793.
177. Сафронов А.В. Хотулев В.А. Результаты экспериментальных исследований сверхзвуковых холодных и горячих струйных течений, истекающих в затопленное

пространство // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2008. – Т. 6.

<http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-10-20-001.pdf>

178. Boussinesq J. Essai sur la théorie des eaux courantes // Mémoires présentés par divers savants à l'Académie des Sciences. – 1877. – V. XXIII, No. 1. – P. 1–680.
179. Wilcox D.C. Turbulence Modeling for CFD. Second Edition. – DCW Industries, 1998.
180. Kato M., Launder B.E. The modeling of turbulent flow around stationary and vibrating square cylinders // Proceedings of Ninth Symposium on Turbulent Shear Flows, Kyoto, Japan. – 1993. – V. 9. – P. 10.4.1–10.4.6.
181. Larsson J., Eriksson L.-E., Håll U. External Heat Transfer Predictions in Supersonic Turbines Using the Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations // Proceedings from the 12th ISABE Conference, Melbourne. – 1995.
<http://www.cfd-online.com/Users/jola/Papers/melbourne.pdf>
182. Murakami S. Overview of turbulence models applied in CWE-1997 // J. Wind Eng. Ind. Aerodyn. – 1998. – V. 74–76. – P. 1–24.
183. Koubogiannis D.G., Athanasiadis A.N., Giannakoglou K.C. One- and two-equation turbulence models for the prediction of complex cascade flows using unstructured grids // Computers and Fluids. – 2003. – V. 32. – P. 403–430.
184. Menter F.R. Zonal two-equation k- turbulence model for aerodynamic flows // AIAA Paper No. 93-2906. – 1993.
185. Menter F.R. Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications // AIAA Journal. – 1994. – V. 32, No. 8. – P. 1598–1605.
186. Spalart P.R., Allmaras S.R. A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic flows // AIAA Paper No. 92-0439. – 1992.
187. Baldwin B.S., Barth T.J. A One-Equation Turbulence Transport Model for High Reynolds Number Wall-Bounded Flows // NASA TM-102847. – 1990.
188. Dacles-Mariani J., Zilliac G.G., Chow J.S., Bradshaw P. Numerical/ Experimental Study of Wingtip Vortex in the Near Field // AIAA Journal. – 1995. – V. 33, No. 9. – P. 1561–1568.
189. Pope S.B. Turbulent Flows. – Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
190. Probstein R.F. The dusty gasdynamics of comet heads // Problems of hydrodynamics and continuum mechanics. – SIAM, Philadelphia, 1969. – P. 568–583.
191. Kitamura Y. Axisymmetric dusty gas jet in the inner coma of a comet // ICARUS. – 1986. – V. 66. – P. 241–257.
192. Cercignani C. Strong evaporation of a polyatomic gas // Prog. Astron. Aeron. – 1981. – V. 74, No.1. – P. 305–320.

193. Bird G.A. Breakdown of continuum flow in freejets and rocket plumes // *Rarefied Gas Dynamics*. Vol. II. Progress in Astronautics and Aeronautics. – AIAA, Washington DC, 1981. – V.74. – P. 681–694.
194. Lamy P.L., Toth I., Weaver H., Jorda L., Kaasalainen M. The nucleus of Comet 67P/Churyumov–Gerasimenko, the new target of the Rosetta mission // *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts*, No. 35. – 2003. – P. 970.
195. Lamy P.L., Toth I., Davidsson B.J.R., Groussin O., Gutiérrez P., Jorda L., Kaasalainen M., Lowry S.C. A portrait of the nucleus of Comet 67P/Churyumov–Gerasimenko // *Space Sci. Rev.* – 2007. – V. 128. – P. 23–66.
<http://dx.doi.org/10.1007/s11214-007-9146-x>
196. Hussaini M. Y., van Leer B., van Rosendale J. H. (Eds.) *Upwind and high-resolution schemes*. – Springer, 1997.
197. Boris J. P. A fluid transport algorithm that works // *Computing as a Language of Physics*. International Atomic Energy Commission. – 1971. – P. 171–189.
198. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. I. The quest of monotonicity // *Lecture Notes in Physics*. – 1973. – V. 18. – P. 163–168.
199. Годунов С.К. Воспоминания о разностных схемах. Доклад на Международном симпозиуме «Метод Годунова в газовой динамике». – Новосибирск: Научная книга, 1997.
200. Godunov S.K. Reminiscences about difference schemes // *J. Comput. Phys.* – 1999. – V. 153. – P. 6–25.
201. Van Leer B. Upwind and high-resolution methods for compressible flow: from donor cell to residual-distribution schemes // *Communications in Computational Physics*. – 2006. – V. 1, No. 2. – P. 192–206.
202. Van Leer B. History of CFD: Part II. – Awards lecture (AIAA Fluid Dynamics award). – 2010.
203. Kolgan V.P. Application of the principle of minimizing the derivative to the construction of finite-difference schemes for computing discontinuous solutions of gas dynamics // *J. Comput. Phys.* – 2011. – V. 230. – P. 2384–2390.
204. Van Leer B. A historical oversight: Vladimir P. Kolgan and his high-resolution scheme // *J. Comput. Phys.* – 2011. – V. 230. – P. 2378–2383.
205. Федоренко Р.П. Применение разностных схем высокой точности для численного решения гиперболических уравнений // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* – 1962. – Т. 2, № 6. – С. 1122–1128.
206. Гольдин В.Я., Калиткин Н.Н., Шишова Т.В. Нелинейные разностные схемы для

- гиперболических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1965. – Т. 5, № 5. – С. 938–944.
207. van Albada G.D., van Leer B., Roberts W.W. A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics // *Astron. Astrophysics*. – 1982. – V. 108. – P. 76–84.
208. van Leer B. On the relation between the upwind-differencing schemes of Godunov, Engquist–Osher and Roe // *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* – 1984. – V. 5, No. 1. – P. 1–20.
209. Vassberg J.C., Jameson A. In pursuit of grid convergence, Part I: Two-dimensional Euler solutions // *AIAA Paper No. 2009-4114*. – 2009.
210. Massey S.J., Abdol-Hamid K.S. Enhancement and validation of PAB3D for unsteady aerodynamics // *AIAA Paper No. 2003-1235*. – 2003.
211. Henderson R. D. Nonlinear dynamics and patterns in turbulent wake transition // *J. Fluid Mech.* – 1997. V. 352. – P. 65 – 112.
212. He J.-W., Glowinski R., Metcalfe R., Nordlander A., Periaux J. Active control and drag optimization for flow past a circular cylinder. I. Oscillatory Cylinder Rotation // *J. Comput. Phys.* – 2000. – V. 163. – P. 83–117.
213. Fromm J.E. A method for reducing dispersion in convective difference schemes // *J. Comput. Phys.* – 1968. – V. 3. – P. 176–189.
214. Huynh H.T. Accurate upwind methods for the Euler equations // *SIAM J. Numer. Anal.* – 1995. – V. 32, No.5. – P. 1565–1619.
215. Остапенко В.В. О монотонности балансно-характеристической схемы // *Матем. Моделирование*. – 2009. – Т. 21, № 7. – С. 29–42.
216. Остапенко В.В. О сильной монотонности схемы «КАБАРЕ» // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* – 2012. – Т. 52, № 3. – С. 447–460.
217. Woodward P., Colella P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks // *J. Comput. Phys.* – 1984. – V. 54. – P. 115–173.
218. Cheng Y., Shu C.-W. Superconvergence and time evolution of discontinuous Galerkin finite element solutions // *J. Comput. Phys.* – 2008. – V. 227. – P. 9612–9627.
219. Meng X., Shu C.-W., Zhang Q., Wu B. Superconvergence of discontinuous Galerkin method for scalar nonlinear conservation laws in one space dimension // *SIAM J. Numer. Anal.* – 2012. – V. 50. – P. 2336–2356.
220. Huynh H.T. An upwind moment scheme for conservation laws // *Computational Fluid Dynamics 2004*. – Springer, Berlin, 2006. – P. 761–766.
221. Suzuki Y., van Leer B. An analysis of the upwind moment scheme and its extension to systems of nonlinear hyperbolic-relaxation equations // *AIAA Paper No. 2007-4468*. – 2007.

222. Shu C.-W., Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II // *J. Comput. Phys.* – 1989. – V. 83. – P. 32–78.
223. Osher S., Solomon F. Upwind difference schemes for hyperbolic systems of conservation laws // *Math. Comp.* – 1982. – V. 38. – P. 339–374.
224. Toro E.F. A linearised Riemann solver for the time-dependent Euler equations of gas dynamics // *Proc. Roy. Soc. London.* – 1991. – V. A434. – P. 683–693.
225. Harten A., Lax P.D., van Leer B. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws // *SIAM Rev.* – 1983. – V. 25, No. 1. – P. 35–61.
226. Einfeldt B. On Godunov-type methods for gas dynamics // *SIAM J. Numer. Anal.* – 1988. – V. 25, No. 2. – P. 294–318.
227. Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* – 1961. – Т. 1, № 2. – С. 267–279.
228. Steger J. L., Warming R. F. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with applications to finite difference methods // *J. Comput. Phys.* – 1981. – V. 40. – P. 263–293.
229. Van Leer B. Flux-vector splitting for the Euler equations // *Lecture Notes in Physics.* – Springer-Verlag, 1982. – V. 170. – P. 507–512.
230. Liou M.-S., Steffen C. J. A new flux splitting scheme // *J. Comput. Phys.* – 1993. – V. 107. – P. 23–39.
231. Сафронов А.В. Разностный метод для уравнений газодинамики из соотношений на разрывах // *Матем. Моделирование.* – 2008. – Т. 20, № 2. – С. 76–84.
232. Charrier P., Dubrocca B., Flandrin L. An approximate Riemann solver of hypersonic bidimensional flows // *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I.* – 1993. – V. 317. – P. 1083–1086.
233. Lin H.-C. Dissipation additions to flux-difference splitting // *J. Comput. Phys.* – 1995. – V. 117. – P. 20–27.
234. Wada Y., Liou M.-S. An accurate and robust flux splitting scheme for shock and contact discontinuities // *SIAM J. Sci. Comput.* – 1997. – V. 18, No. 3 – P. 633–657.
235. Xu K., Hu J. Projection dynamics in Godunov-type schemes // *J. Comput. Phys.* – 1998. – V. 142. – P. 412–427.
236. Sanders R., Morano E., Druguet M.-C. Multidimensional dissipation for upwind schemes: stability and applications to gas dynamics // *J. Comput. Phys.* – 1998. – V. 145. – P. 511–537.
237. Gressier J., Moschetta J.-M. Robustness versus accuracy in shock-wave computations // *Int. J. Numer. Meth. Fluids.* – 2000. – V. 33. – P. 313–332.
238. Liou M.-S. Mass flux schemes and connection to shock instability // *J. Comput. Phys.* – 2000. – V. 160. – P. 623–648.

239. Robinet J.-Ch., Gressier J., Casalis G., Moschetta J.-M. Shock wave instability and the carbuncle phenomenon: same intrinsic origin? // *J. Fluid Mech.* – 2000. – V. 417. – P. 237–263.
240. Pandolfi M., D'Ambrosio D. Numerical instabilities in upwind methods: analysis and cures for the «carbuncle» phenomenon // *J. Comput. Phys.* – 2001. – V. 166. – P. 271–301.
241. Kim K.H., Kim C., Rho O.-H. Methods for the accurate computations of hypersonic flows. I. AUSMPW+ scheme // *J. Comput. Phys.* – 2001. – V. 174. – P. 38–80.
242. Xu K., Li Z. Dissipative mechanism in Godunov-type schemes // *Int. J. Numer. Meth. Fluids.* – 2001. – V. 37. – P. 1–22.
243. Kim S.-S., Kim C., Rho O.-H., Hong S.K. Cures for shock instability: Development of a shock-stable Roe scheme // *J. Comput. Phys.* – 2003. – V. 185. – P. 342–374.
244. Park S. H., Kwon J.H. On the dissipation mechanism of Godunov-type schemes // *J. Comput. Phys.* – 2003. – V. 188. – P. 524–542.
245. Ren Y.-X. A robust shock-capturing scheme based on rotated Riemann solvers // *Computers and Fluids.* – 2003. – V. 32. – P. 1379–1403.
246. Nishikawa H., Kitamura K. Very simple, carbuncle-free, boundary-layer-resolving, rotated-hybrid Riemann solvers // *J. Comput. Phys.* – 2008. – V. 227. – P. 2560–2581.
247. Elling V. The carbuncle phenomenon is incurable // *Acta Mathematica Scientia, Ser. B.* – 2009. – V. 29, No. 6. – P. 1647–1656.
248. Ismail F., Roe P., Nishikawa H. Proposed cure to the carbuncle phenomenon // *Computational Fluid Dynamics.* – Springer-Verlag, 2009. – P. 149–154.
249. Kitamura K., Roe P., Ismail F. An evaluation of Euler fluxes for hypersonic flow computations // *AIAA Journal.* – 2009. – V. 47, No. 1. – P. 44–53.
250. Loh C.Y., Jorgenson P.C.E. Multi-dimensional dissipation for cure of pathological behaviors of upwind scheme // *J. Comput. Phys.* – 2009. – V. 228. – P. 1343–1346.
251. Kim S.D., Lee B.J., Lee H.J., Jeung I.-S. Robust HLLC Riemann solver with weighted average flux scheme for strong shock // *J. Comput. Phys.* – 2009. – V. 228. – P. 7634–7642.
252. Shen Y., Zha G., Huerta M.A. Rotated hybrid low diffusion ECUSP-HLL scheme and its applications to hypersonic flows // *AIAA Paper No. 2011-3345.* – 2011.
253. Li J., Li Q., Xu K. Comparison of the generalized Riemann solver and the gas-kinetic scheme for inviscid compressible flow simulations // *J. Comput. Phys.* – 2011. – V. 230. – P. 5080–5099.

254. Phongthanapanich S. Multidimensional dissipation technique for an AUSM scheme on triangular grids // Transactions of the Canadian Society for Mechanical Engineering. – 2015. – V. 39, No. 2. – P. 307–321.
255. Shen Z., Yan W., Yuan G. A robust HLLC-type Riemann solver for strong shock // J. Comput. Phys. – 2016. – V. 309. – P. 185–206.
256. Macrossan M.N., Oliver R.I. A kinetic theory solution method for the Navier-Stokes equations // Int. J. Numer. Meth. Fluids. – 1993. – V. 17. – P. 177–193.
257. Liou M.-S. A sequel to AUSM: AUSM⁺ // J. Comput. Phys. – 1996. – V. 129. – P. 364–382.
258. Morton K.W., Roe P.L. Vorticity-preserving Lax–Wendroff-type schemes for the system wave equation // SIAM J. Sci. Comput. – 2001. – V. 23, No. 1. – P. 170–192.
259. Coulombel J.-F., Benzoni-Gavage S., Serre D. Note on a paper by Robinet, Gressier, Casalis & Moschetta // J. Fluid Mech. – 2002. – V. 469. – P. 401–405.
260. Noh W. F. Errors for calculations of strong shocks using an artificial viscosity and an artificial heat flux // J. Comput. Phys. – 1987. – V. 72. – P. 78–120.
261. Roberts T. W. The behavior of flux difference splitting schemes near slowly moving shock waves // J. Comput. Phys. – 1990. – V. 90. – P. 141–160.