УДК 532.529 doi 10.26089/NumMet.v18r433

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ОБТЕКАНИИ ТЕЛ ГИПЕРЗВУКОВЫМ ПОТОКОМ

К. Н. Волков[1], В. Н. Емельянов[2], А. Г. Карпенко[3]

Рассматриваются вопросы, связанные с численным моделированием газодинамических и физико-химических процессов, сопровождающих гиперзвуковое обтекание тел различной формы. Математическая модель включает в себя уравнения газовой динамики, записанные для реального газа, и уравнения химической кинетики, описывающие равновесные процессы в высокотемпературном воздухе. Для дискретизации основных расчетных соотношений применяется метод конечных объемов и различные разностные схемы для дискретизации конвективных потоков. Возможности разработанной вычислительной процедуры показываются на примере решения ряда задач физико-химической газовой динамики. Расчеты проводятся с использованием графических процессоров общего назначения. Обсуждается время счета, достигнутое при использовании различных разностных схем и подходов к описанию свойств высокотемпературного воздуха.

Ключевые слова: аэродинамика, гиперзвуковое обтекание, вычислительная газовая динамика, реальный газ, метод конечных объемов, ударная полна, диссоциация.

1. Введение. Повышенный интерес к проблемам гиперзвукового обтекания тел различной формы вызван развитием авиационной и ракетно-космической техники в связи с проектированием гиперзвуковых летательных аппаратов для длительного полета в атмосфере, использующих гиперзвуковой прямоточный воздушно-реактивный двигатель [1, 2]. В обычном прямоточном воздушно-реактивном двигателе входящий в воздухозаборник поток сжимается за счет специальной формы летательного аппарата и тормозится до дозвуковой скорости. При высоких числах Маха торможение входящего потока воздуха до дозвуковых скоростей приводит к предельным по прочностным характеристикам материалов двигателя значениям температуры и давления на входе в камеру сгорания. В канале гиперзвукового двигателя поток тормозится лишь частично и сохраняет сверхзвуковую скорость, что снижает температурные нагрузки. Для развития современной авиации требуется поиск и разработка средств, позволяющих управлять характеристиками газового потока вблизи поверхности летательного аппарата, контролировать передачу тепла и массоперенос в пограничном слое, снижать поверхностное трение, задерживать ламинарно-турбулентный переход, управлять отрывом потока, уменьшать время воспламенения и управлять процессами горения в сверхзвуковых потоках.

Гиперзвуковые течения характеризуются широким диапазоном изменения определяющих параметров. В случае сильных ударных волн, которые реализуются при высокоскоростном входе тела в атмосферу, состояние газа за фронтом ударной волны отличается от статистически равновесного [2]. Высокие температуры инициируют протекание в ударном слое около обтекаемого тела сложных физико-химических процессов, сопровождающихся возбуждением внутренних степеней свободы молекул (молекулы кислорода и азота начинают диссоциировать на атомы). Дальнейший рост температуры приводит к ионизации газа с образованием свободных электронов. Образовавшиеся атомы, электроны и ионы диффундируют к поверхности тела (в более холодную область), где происходит их рекомбинация (реакция, идущая с выделением тепла), что дает дополнительный вклад в нагрев поверхности тела. При этом изменяются физические свойства и состав воздуха, оказывающие влияние на вязкость, теплопроводность и характеристики сжимаемости. В частности, диссоциация и ионизация приводят к поглощению до 75% энергии потока, что делает неприемлемыми многие результаты газовой динамики совершенного газа [3].

[1] Балтийский государственный технический университет “Военмех” им. Д.Ф. Устинова, факультет ракетно-космической техники, 1-я Красноармейская ул., д. 1, 190005, Санкт-Петербург; вед. науч. сотр., e-mail: dsci@mail.ru

[2] Балтийский государственный технический университет “Военмех” им. Д.Ф. Устинова, факультет ракетно-космической техники, 1-я Красноармейская ул., д. 1, 190005, Санкт-Петербург; профессор, e-mail: vlademelyanov@gmail.com;

[3] Санкт-Петербургский государственный университет, математико-механический факультет, Университетский просп., д. 28, 198504, Санкт-Петербург; доцент, e-mail: aspera.2003.ru@mail.ru

Возможность воспроизведения параметров, недостижимых в лабораторных условиях, стимулирует создание и развитие методов численного моделирования. Результаты численного моделирования зависят от выбора газодинамической и физико-химической модели высокотемпературного воздуха. В расчетах используются приближенные многотемпературные модели, в которых разделяются температура поступательного движения частиц и температуры колебательного движения разных молекул. В моделях диссоционно-колебательного взаимодействия процессы колебательного возбуждения молекул учитываются при определении скоростей их диссоциации. Константы скоростей диссоциации определяются с использованием поступательной и колебательной температуры.

Применение численных методов с выделением разрывов применительно к моделированию гиперзвукового проникновения тела в среду с температурными и концентрационными неоднородностями обсуждается в работе [4]. Воздух рассматривается как смесь идеальных совершенных газов, реагирующих между собой. Применяется модель, учитывающая наличие 6 компонентов, между которыми происходит 21 химическая реакция.

В работе [5] рассматривается обтекание сферы гиперзвуковым потоком совершенного газа при числах Маха до 20. Предположение о совершенном газе приводит к завышенной температуре сжатого слоя. Влияние численной диссипации на точность численных расчетов при гиперзвуковых скоростях обсуждается в работе [6]. В работе [7] проводится исследование стационарного и нестационарного обтекания тел различной конфигурации потоком как идеального газа (модель уравнений Эйлера), так и вязкого теплопроводного газа (модель уравнений Навье–Стокса) в широком диапазоне параметров. Исследуется одна из особенностей гиперзвукового обтекания затупленной головной части объекта, обнаруженная при компьютерном моделировании аэродинамики высокоскоростного полета — эффект карбункула (carbuncle phenomena) [8].

Во многих работах рассматриваются режимы обтекания при умеренных числах Маха. Картина обтекания затупленной головной части объекта, летящего в атмосфере Земли (или в газовой среде, ее имитирующей), полученная при численном интегрировании уравнений Эйлера или Навье–Стокса в широком диапазоне изменения параметров, имеет достаточно типовой вид [7]. При высокоскоростном полете перед телом возникает сильная ударная волна, интенсивность (отношение давлений за и перед фронтом) которой существенно зависит от скорости полета. Максимальные давление и температура достигаются в точке торможения потока. При сверхзвуковой скорости полета фронт головной ударной волны имеет малую толщину, а для ее математического описания принимается модель бесконечно тонкого разрыва (газодинамические параметры изменяются скачкообразным образом). Влияние вязкости при сверхзвуковом полете сказывается лишь в тонком пограничном слое, примыкающем к поверхности обтекаемого тела.

Изменение свойств газа при гиперзвуковом обтекании определяет изменение картины обтекания объекта, в том числе его головной части. При гиперзвуковом обтекании головная ударная волна имеет размытый фронт, что связывается не только с физическими эффектами (возбуждение колебательных степеней свободы в двух- и многоатомных газах), но и с газодинамическими процессами (уменьшение плотности газовой среды при полете на бóльших высотах). С увеличением высоты полета число Рейнольдса уменьшается, а толщина пограничного слоя увеличивается. Образуется сомкнутый вязкий ударный слой, представляющий собой единую структуру, интегрированную из области ударного слоя торможения набегающего потока (тонкий головной скачок на сверхзвуке) и из широкой области взаимодействия течения с поверхностью (достаточно тонкий пограничный слой на сверхзвуке) [7].

Сильная ударная волна в достаточно разреженном газе воспринимается как некоторый переходной слой. В переходном слое развиваются процессы релаксации колебательных степеней свободы, а затем — процессы установления химического и ионизационного равновесия. Их времена релаксации определяются разреженностью среды и ее общим энергетическим уровнем. В том случае, когда все релаксационные процессы завершаются на достаточно малом пространственном промежутке за фронтом сильной ударной волны, динамика их развития не рассматривается, а переходной слой представляется в виде разрыва, разделяющего два равновесных состояния газа. В отличие от слабых ударных волн, равновесное состояние за разрывом подразумевает новое химическое и ионизационное равновесие, отвечающее новым значениям температуры и давления.

Другим предельным случаем является течение, в котором после прохождения ударной волны не успевают развиться релаксационные процессы (замороженное течение).

Когда кинетика релаксационных процессов такова, что зоны их протекания соизмеримы с характерными размерами задачи, требуется совместное решение уравнений газовой динамики и уравнений, описывающих протекание релаксационных процессов (неравновесное течение). Область неравновесности распространяется на всю область около обтекаемого тела или является локализованной непосредственно около фронта сильной ударной волны.

Сила лобового сопротивления на сверх- и гиперзвуковых скоростях полета составляет 50–70%, из которой 50–60% приходится на волновое сопротивление [9]. Для управления волновым сопротивлением летательных аппаратов интенсивно изучаются эффекты локального и распределенного энергетического воздействия на сверхзвуковые течения с применением электрических разрядов и электромагнитного излучения [9, 10]. Возможность дистанционного подвода энергии к сверхзвуковому потоку подтверждается многими экспериментами [11]. За энергоисточником формируется высокотемпературный след с пониженными значениями числа Маха, полного давления и скоростного напора, что позволяет изменять режим обтекания. В работе [12] проводится численное исследование влияния источников энергии в потоке на обтекание гиперзвукового летательного аппарата X-43 при числе Маха M = 6, характерном для гиперзвуковых летательных аппаратов длительного атмосферного полета.

В настоящей статье обсуждается построение и реализация математической модели, предназначенной для численного моделирования гиперзвукового обтекания тел произвольной формы с учетом равновесных физико-химических процессов, протекающих в высокотемпературном воздухе. Для реализации математической модели применяется метод конечных объемов на произвольных неструктурированных сетках, а для ускорения вычислений — графические процессоры общего назначения [13]. Возможности разработанного вычислительного алгоритма демонстрируются на примере решения ряда задач гиперзвуковой аэродинамики.

2. Математическая модель. Расчетная область включает в себя поле течения в невозмущенном потоке, течение за фронтом ударной волны и течение в следе за обтекаемым телом. Течение считается ламинарным во всей расчетной области.

2.1. Газодинамические процессы. В общем случае для моделирования обтекания тела гиперзвуковым потоком используется решение уравнения Больцмана. Решение уравнения Больцмана требует достаточно высоких вычислительных затрат, что затрудняет проведение серийных расчетов. Помимо построения интеграла столкновений с необходимостью выбора эмпирической модели потенциала взаимодействия, возникают проблемы, связанные с обработкой и визуализацией расчетных данных. В связи с этим, математическая модель основывается на законах сохранения массы, количества движения и энергии.

Нестационарное трехмерное течение вязкого сжимаемого газа описывается системой уравнений, которая в интегральной форме записывается в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t}\oint\limits_V \boldsymbol{U}\,dV + \oint\limits_{\partial V} \boldsymbol{F}\cdot d\boldsymbol{S} = \boldsymbol{H}, \tag{1}$$

где $\boldsymbol{U}$ — вектор-столбец консервативных переменных в точке $\boldsymbol{x}$ в момент времени t, $\boldsymbol{F}$ — тензорное поле потока, $\boldsymbol{H}$ — источниковый член, V — некоторый замкнутый объем газа с границей ∂V, $d\boldsymbol{S} = \boldsymbol{n}\,dS$ — вектор элементарной площадки dS к границе объема ∂V с внешней нормалью $\boldsymbol{n}$. Вектор-столбец консервативных переменных и тензорное поле потока имеют вид

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho\boldsymbol{v} \\ \rho e \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{F} = \begin{pmatrix} \rho\boldsymbol{v} \\ \rho\boldsymbol{v}\boldsymbol{v} + p\boldsymbol{I} - \boldsymbol{\tau} \\ (\rho e + p)\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{q} \end{pmatrix}.$$

Полная энергия единицы массы равняется сумме внутренней энергии ε, обусловленной термодинамическими процессами (включает в себя энергии поступательного движения, вращательного, колебательного и электронного возбуждения атомных и молекулярных компонент газовой смеси), и кинетической энергии

$$e = \varepsilon + \frac{1}{2}\,|\boldsymbol{v}|^2.$$

Здесь t — время; ρ — плотность; p — давление; $\boldsymbol{v}$ — вектор скорости с компонентами v_x, v_y и v_z в координатных направлениях x, y и z; $\boldsymbol{\tau}$ — тензор вязких напряжений, $\boldsymbol{I}$ — единичный тензор. Компоненты тензора вязких напряжений имеют вид

$$\tau_{ij} = \mu\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\,\frac{\partial v_k}{\partial x_k}\,\delta_{ij}\right).$$

Вектор потока тепла выражается через закон Фурье: $\boldsymbol{q} = -\lambda\nabla T$.

В расчетах динамическая вязкость и теплопроводность находятся при помощи формул Сазерленда

$$\mu = \mu_0\,\frac{C+T_0}{C+T}\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}, \quad \lambda = \lambda_0\,\frac{C+T_0}{C+T}\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}.$$

Для воздуха принимается, что $\mu_0 = 1.7894 \times 10^{-5}$ кг/(м·с) и $\lambda_0 = 0.0242$ Вт/(м·К) при $T_0 = 273$ К, $C = 110.4$ К.

Уравнение (1) дополняется уравнением состояния идеального газа

$$p = \rho \, \frac{R_0}{M_\Sigma(p, T)} \, T,$$

где R_0 — универсальная газовая постоянная, M_Σ — молекулярный вес газа, который в общем случае зависит от давления и температуры. Вводя энтальпию $h = \varepsilon + p/\rho$, запишем выражение для полной энергии единицы массы:

$$e = h + \frac{1}{2} \, |\boldsymbol{v}|^2 - \frac{p}{\rho} \, .$$

Допуская, что имеется равновесие по всем внутренним степеням свободы частиц с энергией поступательного движения, введем теплоемкость газа, рассчитанную в приближении равновесной заселенности внутренних энергетических состояний:

$$h = h_0 + \int\limits_{T_0}^{T} c_p \, dT,$$

где h_0 — энтальпия образования вещества при $T = T_0$.

В случае совершенного газа молекулярный вес M_Σ, газовая постоянная $R = R_0/M_\Sigma$, теплоемкость при постоянном давлении c_p и теплоемкость при постоянном объеме c_v являются постоянными. При этом справедливо соотношение Майера $c_p - c_v = R$. Показатель адиабаты рассчитывается из соотношения $\gamma = c_p/c_v$, а для нахождения энтальпии и внутренней энергии применяются соотношения $h = c_p T$ и $\varepsilon = c_v T$.

При решении плоской задачи в уравнении (1) скорость в направлении оси z и все производные в этом направлении равняются нулю ($v_z = 0$, $\partial/\partial z = 0$). В случае осевой симметрии уравнение (1) записывается в цилиндрических координатах, а скорость и производные в окружном направлении полагаются равными нулю: $v_\varphi = 0$, $\partial/\partial\varphi = 0$. В осесимметричном случае источниковый член в уравнении (1) имеет вид

$$\boldsymbol{H} = -\frac{1}{r} \begin{pmatrix} \rho v_r \\ \rho v_x v_r \\ \rho v_r v_r \\ (\rho e + p) v_r \end{pmatrix},$$

где v_x и v_r — осевая и радиальная скорости. Тензорное поле потока имеет прежний вид (при отсутствии скорости в направлении оси z).

2.2. Физико-химические процессы. Рассмотрим случай реагирующей смеси газов, состоящей из нейтральных и заряженных частиц. Химические процессы в воздухе считаются равновесными, а воздух при этом представляется в виде смеси N_s различных идеальных газов (N_2, O_2, NO, N, O, N^+, O^+, Ar, Ar^+ и др.).

Исходя из закона сохранения вещества, в замкнутой системе начальное распределение химических элементов в смеси газов не меняется со временем. При изменении термодинамического состояния замкнутой системы вследствие химических реакций изменяется химический состав, но не изменяется количество частиц химического элемента i. Число уравнений сохранения вещества равняется числу химических элементов N_e, входящих в смесь (электроны тоже считаются химическим элементом). Распределение химических элементов задается молярными долями $\chi_i^0 = \nu_i^0/\nu_\Sigma^0$, где $\nu_\Sigma^0 = \sum\limits_i^{N_e} \nu_i^0$, а под ν_i^0 понимается количество молей химического элемента i. Верхний индекс 0 указывает на то, что число молей считается для химического элемента, а не для молекулы или компонента смеси.

В химической термодинамике закон действующих масс связывает между собой равновесные активности или парциальные давления p_k исходных веществ и продуктов реакции. Парциальное давление идеального газа в смеси равняется давлению, которое оказывается газом, если бы он занимал тот же объем, что и вся смесь газов, при той же температуре. Парциальное давление компонента газовой смеси k связано с мольными долями при помощи соотношения $\chi_k = \nu_k/\nu_\Sigma = p_k/p_\Sigma$, где p_Σ — известное давление смеси. Для упрощения при составлении уравнений равновесия принимается, что при диссоциации любой молекулы ее распад происходит до атомов элементов. При этом количество реакций равняется разности учитываемых компонент смеси N_s и количества рассматриваемых химических элементов N_e ($N_l = N_s - N_e$, где $l = 1, \dots, N_l$).

Система уравнений, описывающая равновесный состав смеси, состоит из закона сохранения вещества (закона сохранения атомов химических элементов), уравнения равновесия химических реакций и закона Дальтона:

$$\begin{aligned}
&\sum_k^{N_s} \phi_i^k \chi_k = \chi_i^0 \frac{\nu_\Sigma^0}{\nu_\Sigma} \quad (i = 1, \dots, N_e);\\
&p_\Sigma^{\beta^l} \prod_k^{N_s} \chi_k^{\eta_k^l} = K_p^l, \quad \beta^l = \sum_k^{N_s} \eta_k^l \quad (l = 1, \dots, N_l);\\
&\sum_k^{N_s} \chi_k = 1.
\end{aligned} \tag{2}$$

Здесь k — номер компонента смеси, ϕ_i^k — количество частиц химического элемента i в компоненте смеси k, $\chi_k = \nu_k/\nu_\Sigma$ — молярные доли компонентов газовой смеси, ν_k — число молей компонента смеси, $\nu_\Sigma = \sum\limits_k^{N_s} \nu_k$ — общее количество молей смеси газов в текущем состоянии, K_p^l — константа химического равновесия по давлению (индекс p) реакции l, η_k^l — стехиометрические коэффициенты для реакции l, которые для исходных веществ принимаются отрицательными, а для продуктов реакции — положительными. В системе (2) имеется $N_s + 1$ уравнений и столько же неизвестных ν_Σ^0/ν_Σ и $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{N_s}$ (мольные доли компонентов смеси).

Константа равновесия K_p^l связана с энергией Гиббса для веществ, принимающих участие в этой реакции, соотношением

$$RT \ln K_p^l = -\Delta_l G(T) = -\sum_k^{N_s} \eta_k^l \Delta G_k,$$

где $\Delta_l G(T)$ — разность энергии Гиббса исходных компонентов и продуктов реакции l, ΔG_k — изменение энергии Гиббса компонента смеси k от стандартного состояния до состояния при заданной температуре, при этом

$$\Delta G_k(T) = \Delta H_k(T) - T\Delta S_k(T),$$

где $\Delta H_k(T)$ — изменение молярной энтальпии от стандартного состояния, $\Delta S_k(T)$ — изменение энтропии. Значения функций $\Delta H_k(T)$ и $\Delta S_k(T)$ для каждого компонента смеси k берутся из таблиц или для их нахождения используется аппроксимация полиномами [14]. Для константы равновесия имеет место соотношение

$$R \ln K_p^l = \sum_k^{N_s} \eta_k^l \Delta\Phi_k(T) - \frac{1}{T} \sum_k^{N_s} \eta_k^l \Delta H_k(0).$$

Изменение энергии Гиббса $\Delta G_k(T)$ выражается через приведенную функцию Гиббса $\Delta\Phi_k(T)$ и энтальпию образования $\Delta H_k(0)$ [15].

2.3. Учет реальных свойств газа. Для описания равновесной диссоциации некоторых двухатомных газов используется, в частности, модель идеального диссоциирующего газа Лайтхилла. Его свойства описываются тремя константами, что позволяет в обобщенной форме проанализировать влияние диссоциации. Табличные данные по составу воздуха при различных давлениях и температурах приводятся в работах [16–18].

В модели [19] воздух рассматривается как идеальная смесь кислорода и азота (предполагается, что соединения азота с кислородом отсутствуют) с постоянными молярными концентрациями, учитывая возбуждение колебательных и вращательных степеней свободы молекул. Средняя молярная масса смеси остается постоянной, а уравнение состояния сохраняет вид, соответствующий уравнению состояния идеального газа.

Достоинством моделей, предложенных в работах [20, 21] (модели Крайко), является учет диссоциации и ионизации воздуха при высоких температурах. При учете реальных термодинамических свойств воздуха используются явные выражения для плотности и удельной внутренней энергии через давление и температуру $\rho = \rho(p, T)$ и $\varepsilon = \varepsilon(p, T)$. В диапазоне температур от 200 до 20 000 K и давлений от 0.001 до 1000 атм погрешность модели не превосходит 1.5% по плотности и 3% по энтальпии.

Уравнения, описывающие течение реального газа, имеют тот же вид, что и уравнения для идеального газа. При использовании приближенной модели (модели Крайко или модели идеального диссоциирующего газа) возникают трудности при переходе от консервативных переменных к физическим. В приближенных моделях состояние газа определяется в функции переменных $\rho = \rho(p, T)$ и $\varepsilon = \varepsilon(p, T)$, а для расчетов используется зависимость $p = p(\rho, \varepsilon)$. Для перехода между физическими и консервативными переменными при известных плотности и внутренней энергии решается система нелинейных уравнений.

Модель Крайко успешно используется в работе [22] для моделирования течения реального газа в каналах переменного сечения с нестационарным локализованным подводом энергии.

3. Численный метод. Для численного решения уравнений газовой динамики используется метод конечных объемов, реализованный на неструктурированных сетках, ячейки которых состоят из многогранников произвольной формы.

3.1. Газовая динамика. Система уравнений (1) решается с помощью метода конечных объемов. Расчетная область разделяется на множество контрольных объемов. Предполагается, что сеточная величина, определенная в центре контрольного объема V_i, представляет собой среднеинтегральное значение соответствующей непрерывно распределенной величины

$$\boldsymbol{U}_i = \frac{1}{V_i} \int\limits_{V_i} \boldsymbol{U}\, dV.$$

Вычисляя интеграл по границе контрольного объема i как сумму произведений значений вектора потока $\boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{n}$ в центрах граней j контрольного объема на площади его граней S_{ij}, уравнение (1) можно переписать в следующем полудискретном виде:

$$\frac{d\boldsymbol{U}_i}{dt} + \frac{1}{V_i} \sum_{j}^{N_i} \boldsymbol{F}_{ij} S_{ij} = 0, \tag{3}$$

где V_i — объем контрольного объема i, $\boldsymbol{F}_{ij}$ — вектор потока из ячейки i в ячейку j в центре грани контрольного объема, S_{ij} — площадь грани j контрольного объема i.

Для дискретизации производной по времени в уравнении (3) используется явная схема Рунге–Кутты третьего порядка. Для вычисления конвективных потоков на грани контрольного объема имеются различные подходы [23]. При этом стандартные схемы расчета потоков, например широко используемая схема Рое, приводят к потере точности и расходимости вычислительной процедуры. Для дискретизации конвективных потоков применяются схема Годунова и схема Русанова [24]. Второй порядок аппроксимации по пространству достигается с помощью интерполяции из центра ячеек на грань конечного объема с функцией ограничения градиента решения для обеспечения монотонности схемы [25]. Вязкая часть потока аппроксимируется по явной схеме. Учет вязких потоков вызывается тем, что в расчетах невязких течений образуются нефизические численные аномалии при обтекании гиперзвуковым потоком затупленных тел [6]. Источниковый член в уравнениях, записанных в осесимметричном виде, аппроксимируется по явной схеме.

Для приближенного учета сложных физико-химических процессов в реальных газах разработана методология эффективного показателя адиабаты, позволяющая проводить декомпозицию полной задачи моделирования высокоскоростных течений газа на отдельные подзадачи. Это обеспечивает создание универсального вычислительного комплекса, структурированного на ряд автономных сегментов, с возможностью независимой модификации их функционального наполнения, усовершенствование алгоритмов и компьютерной реализации.

Существующие численные методы расчета уравнений движения газа (1) разрабатывались для совершенного газа. Для обобщения этих подходов на течения химически реагирующего равновесного газа вводится эффективный показатель адиабаты, позволяющий вычислить скорость звука по формуле совершенного газа

$$a^2 = \gamma^* \, \frac{p}{\rho}\,.$$

Между эффективным показателем адиабаты γ^* и отношением удельных теплоемкостей $\gamma = c_p/c_v$ имеется связь

$$\gamma^* = \gamma \, \frac{\rho}{p\rho_p} \, .$$

При расчете скорости звука предполагается, что процессы распространения слабых возмущений являются изоэнтропийными ($ds = 0$):

$$a^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s = \left(\rho_p + \rho_T \, \frac{dT}{dp}\right)^{-1} .$$

При термодинамическом равновесии справедливо равенство $T ds = dh - dp/\rho$.

Поскольку $dh = h_p \, dp + h_T \, dT$, то при $ds = 0$ можно получить

$$\frac{dT}{dp} = \frac{1 - \rho h_p}{\rho h_T} \, .$$

Теплоемкость при постоянном давлении вычисляется при помощи численного дифференцирования (центрально-разностная дискретизация второго порядка) при $\Delta T = 0.01T$:

$$c_p(p, T) = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p = \frac{h(p, T + \Delta T) - h(p, T - \Delta T)}{2\Delta T} \, .$$

3.2. Детали реализации. Для построения неструктурированных сеток существует множество открытых и коммерческих пакетов прикладных программ: Gmsh, Ansys ICEM CFD и др. Для хранения данных о неструктурированной сетке используется формат OpenFOAM. Это позволяет использовать имеющиеся программные модули для обработки входных и выходных данных, а также для управления расчетами на основе открытых кодов. Для ускорения расчетов основные вычисления выполняются на графических ускорителях [26, 27]. Для реализации алгоритма расчета на GPU используется технология CUDA. Все расчеты выполняются на одном модуле NVidia Tesla M2050.

Расчет одного шага по времени разделяется на несколько процедур, которые выполняются на GPU: вычисление глобального минимального шага по времени в связи с ограничением для явной схемы; заполнение фиктивных ячеек с целью задания граничных условий; вычисление градиентов функций в центрах ячеек; расчет в каждой ячейке функции ограничителя для обеспечения монотонности схемы; расчет на каждой грани конвективных и вязких численных потоков; суммирование для каждой ячейки потоков и вычисления значений в центре ячеек на следующем временно́м слое. Эти процедуры выполняются последовательно на GPU, но в каждой из них для всех ячеек или граней обработка ведется параллельно.

В случае плоских течений используются сетки толщиной в одну ячейку. В этом случае при расчете шага по времени не учитывается размер ячейки в направлении оси z (задаются граничные условия симметрии), а значения производных и скорости в координатном направлении z обнуляются. Такой подход позволяет использовать общую вычислительную процедуру как для решения плоских, так и трехмерных задач.

В осесимметричном случае строится трехмерная сетка для сектора в несколько градусов, а на гранях сектора задаются граничные условия симметрии. При этом вблизи оси симметрии появляются ячейки с соотношением сторон намного большим единицы. При использовании явных схем приосевые ячейки вносят существенное ограничение на глобальный шаг по времени. Для осесимметричных задач предлагается использовать систему уравнений, которая отличается от системы уравнений для плоских течений только наличием источникового члена. Строится плоская сетка толщиной в одну ячейку и используется подход, реализованный для плоских задач, а при вычислении значений в центре ячейки на следующем временно́м слое добавляется источниковый член, который аппроксимируется явным образом.

3.3. Химическая кинетика. В системе уравнений (2) вводятся обозначения

$$x_1 = \ln \chi_1, \quad x_2 = \ln \chi_2, \quad \ldots, \quad x_{N_s} = \ln \chi_{N_s}, \quad x_{N_s+1} = \nu_\Sigma^0/\nu_\Sigma.$$

Логарифмируя уравнения химического равновесия, получим

$$\begin{aligned} &\sum_k^{N_s} \phi_i^k e^{x_k} - \chi_i^0 x_{N_s+1} = 0 \quad (i = 1, \dots, N_e); \\ &\sum_k^{N_s} \eta_k^l x_k + \beta^l \ln p_\Sigma - \ln K_p^l = 0, \quad \beta^l = \sum_k^{N_s} \eta_k^l \quad (l = 1, \dots, N_l); \\ &\sum_k^{N_s} e^{x_k} - 1 = 0. \end{aligned} \tag{4}$$

Полученная система уравнений является нелинейной и решается итерационным методом, в котором значения переменных на новой итерации вычисляются следующим образом:

$$\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x} + \Delta \boldsymbol{x},$$

где $\boldsymbol{x}$ — решение на предыдущей итерации, $\Delta \boldsymbol{x}$ — изменение вектора решения между итерациями. Линеаризуя систему уравнений (4) при помощи разложения в ряд в окрестности решения $\boldsymbol{x}$ и ограничиваясь первыми членами в разложении, получим

$$\begin{aligned} &\sum_k^{N_s} \phi_i^k \chi_k \Delta x_k - \chi_i^0 \Delta x_{N_s+1} = -\left(\sum_k^{N_s} \phi_i^k \chi_k - \chi_i^0 x_{N_s+1} \right) \quad (i = 1, \dots, N_e); \\ &\sum_k^{N_s} \eta_k^l \Delta x_k = -\left(\sum_k^{N_s} \eta_k^l x_k + \beta^l \ln p_\Sigma - \ln K_p^l \right) \quad (l = 1, \dots, N_l); \\ &\sum_k^{N_s} \chi_k \Delta x_k = -\left(\sum_k^{N_s} \chi_k - 1 \right). \end{aligned}$$

Линеаризованная система является линейной относительно приращений и записывается в матричной форме

$$A \Delta \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \tag{5}$$

где A — матрица коэффициентов, $\boldsymbol{b}$ — вектор правых частей. В качестве начального приближения решения полагается, что $\chi_k = 1$. Решая систему уравнений (5) относительно приращений, найдем решение на итерации $n + 1$ в виде

$$\boldsymbol{x}^{n+1} = \boldsymbol{x}^n + (1 + \theta) \Delta \boldsymbol{x},$$

где θ — коэффициент нижней релаксации, который используется для обеспечения устойчивости численной процедуры.

Для решения системы уравнений (2) необходимо задать общее давление смеси p_Σ и температуру T. В результате решения находится химический состав реагирующей смеси, выраженный в мольных долях χ_k. Молекулярный вес и удельная энтальпия смеси находятся из соотношений

$$M_\Sigma = \sum_k^{N_s} M_k \chi_k, \quad h = \frac{1}{M_\Sigma} \sum_k^{N_s} H_k \chi_k,$$

где M_k — молекулярный вес компонента смеси k.

Система уравнений расчета равновесного состава газовой смеси (2) или (4) является нелинейной и требует многократного численного решения при расчете течений газа, поэтому является наиболее затратной процедурой. В работе [21] рассматривается модель воздуха, учитывающая реакции диссоциации кислорода и азота, реакцию образования окиси азота, возможность появления электронного компонента в силу одинарной и двойной ионизации кислорода, азота и аргона: e^-, N, O, Ar, N_2, O_2, NO, N^+, O^+, Ar^+, N^{++}, O^{++}, Ar^{++}. Для уменьшения количества вычислений при определении химического состава и термодинамических параметров делаются некоторые допущения. Основное допущение состоит в строго последовательном протекании физико-химических процессов — сначала происходит реакция диссоциации кислорода, за ней — реакции диссоциации азота и однократной ионизации средневзвешенной смеси этих газов. При рассмотрении каждой последующей реакции предыдущая считается полностью завершенной. Различие результатов, полученных в рамках полного и упрощенного подходов, не превышает нескольких процентов.

Такой подход при численной реализации работает только при $T > 300$ К, иначе возникают ошибки деления на нуль. Это связано с ошибками округления и конечной точностью вычислений при реализации алгоритма. Из этих же ограничений необходимо выполнять расчеты с двойной процессорной точностью. Для случая $T \leqslant 300$ К предполагается, что все реакции отсутствуют, и вводится переключатель, производя расчеты по соотношениям совершенного газа с постоянными коэффициентами.

4. Результаты расчетов. Возможности разработанного вычислительного алгоритма демонстрируются на примере обтекания сферы и гиперзвукового летательного аппарата.

4.1. Равновесный состав воздуха. Решение полной системы расчета равновесного состава (2) проводится для модели воздуха, состоящего из 11 компонентов. Модель не учитывает двойную ионизацию, но учитывает возможность появления электронного компонента в силу ионизации окиси азота: e^-, N, O, Ar, N_2, O_2, NO, N^+, O^+, Ar^+, NO^+. Предполагается, что недиссоциированный воздух по молярному составу представляет собой смесь, состоящую из 78% N_2, 21% O_2 и 1% Ar.

Зависимости состава воздуха от температуры приведены на рис. 1 и 2 при давлении, равном 1013.25 Па. Примерно до температуры 2500 К происходит увеличение концентрации окиси азота NO, затем идет уменьшение ее концентрации, а также концентраций молекул кислорода и азота. Это происходит вследствие процессов диссоциации. До температуры 5000 К образование электронов происходит из-за ионизации окиси азота, затем включаются механизмы ионизации кислорода, азота и аргона.

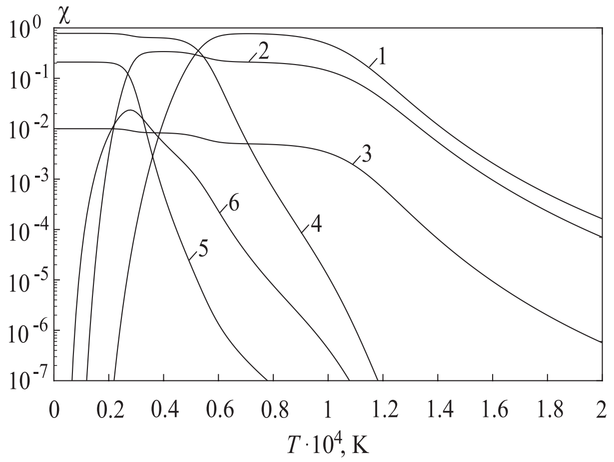


Рис. 1. Зависимость равновесного состава воздуха от температуры при давлении 0.01 атм: 1) N, 2) O, 3) Ar, 4) N_2, 5) O_2, 6) NO

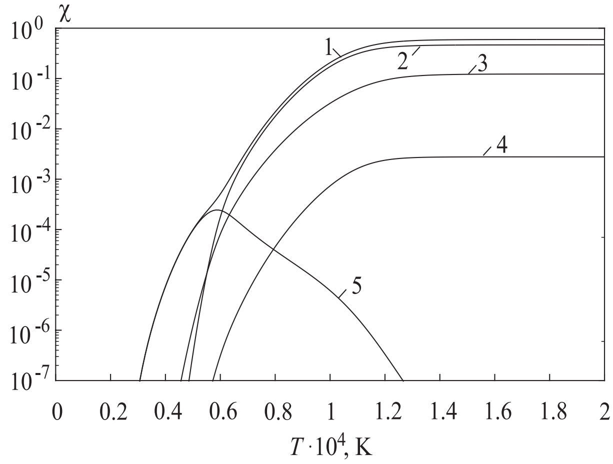


Рис. 2. Зависимость равновесного состава воздуха от температуры при давлении 0.01 атм: 1) e, 2) N^+, 3) O^+, 4) Ar^+, 5) NO^+

Сравнение результатов расчета молекулярного веса и удельной энтальпии с использованием 11-компонентной модели воздуха по полной системе уравнений (2) и явных аналитических формул из работы [21] приводится на рис. 3. Различие в расчетах начинается тогда, когда температура становится выше 15 000 К. Это связано с тем, что в модели 11-компонентного воздуха, в отличие от модели Крайко (линия 4), не учитывается двойная ионизация. В модели Крайко не учитывается ионизация NO. Это вносит существенную погрешность в вычисления концентрации электронов при малых температурах (около 3000 К), но при этом довольно слабо влияет на погрешность расчета термодинамических параметров.

Зависимости теплоемкости воздуха от температуры, рассчитанные с использованием 11-компонентной модели воздуха и явных аналитических формул, показаны на рис. 4. Зависимости показателей адиабаты γ и γ^* от температуры, рассчитанные с помощью аналитических формул Крайко, приводятся на рис. 5. Данные для показателя адиабаты хорошо согласуются с расчетами, приведенными в [16–18].

4.2. Обтекание сферы. Рассмотрим обтекание сферы диаметром $D = 12.7$ мм гиперзвуковым потоком воздуха с учетом равновесных химических реакций. Выбор сферы обусловлен подробными исследованиями данной формы тела в различных работах [28–30]. Выбранные параметры потока соответствуют значениям в эксперименте по определению отхода головной ударной волны от сферы при обтекании воздухом [28]. Давление невозмущенного потока полагается равным $p_\infty = 666.61$ Па, а температура —

$T_\infty = 293$ K (при этих условиях плотность составляет $\rho_\infty = 7.9 \times 10^{-3}$ кг/м^3). Число Маха варьируется в диапазоне $\mathrm{M}_\infty = 7.10$–17.77, что соответствует скорости полета $V_\infty = 2438.4$–6705.6 м/с.

Схема расчетной области приводится на рис. 6. Внешняя граница расчетной области удалена от сферы на 4 мм в точке торможения и на 8.65 мм в верхней точке. Задача решается в осесимметричной постановке. На входной границе задаются граничные условия сверхзвукового втекания в расчетную область, а на выходной границе — условия сверхзвукового вытекания. На стенке используются граничные условия прилипания и проскальзывания для скорости. Поверхность сферы полагается теплоизолированной. В направлении оси z используются условия повторения течения.

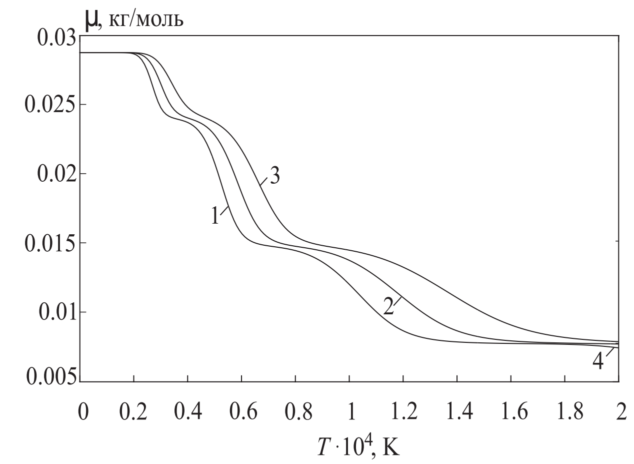


Рис. 3. Зависимость молекулярного веса воздуха от температуры при давлении 0.01 (1), 0.1 (2), 1 атм (3). Линия 4 соответствует модели Крайко при давлении 0.01 атм

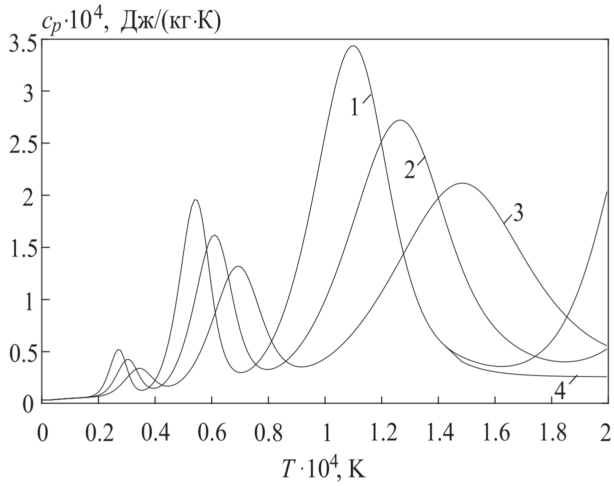


Рис. 4. Зависимость теплоемкости воздуха, рассчитанной по модели Крайко, от температуры при давлении 0.01 (1), 0.1 (2), 1 атм (3). Линия 4 соответствует полной модели при давлении 0.01 атм

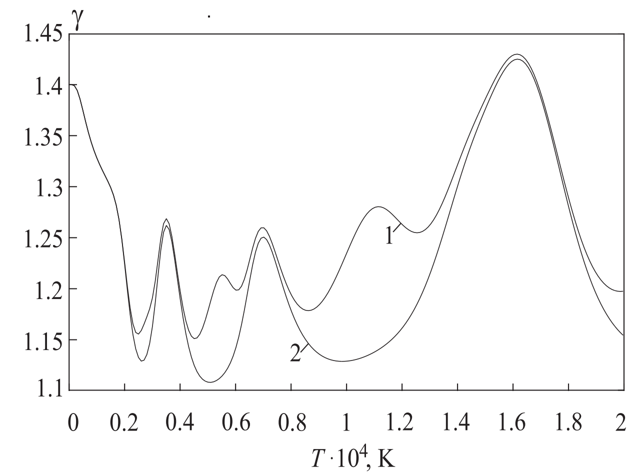


Рис. 5. Зависимость показателя адиабаты воздуха γ (линия 1) и эффективного показателя адиабаты γ_* (линия 2) от температуры при давлении 0.01 атм

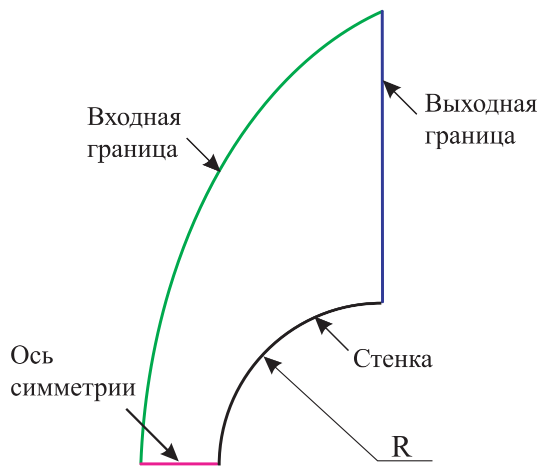


Рис. 6. Схема расчетной области

Расчетная сетка состоит из $400 \times 400 = 160\,000$ гексагональных ячеек. При увеличении или уменьшении количества ячеек сетки изменяется видимая толщина ударной волны. Это происходит потому, что на разрывах схема расчета потоков переключается на первый порядок аппроксимации по пространству, и ударная волна размазывается на несколько ячеек.

При сверхзвуковом обтекании сферы в лобовой области линии уровня температуры имеют округлую форму в виде волн, расходящихся от лобовой точки. Головной скачок уплотнения представляет собой высокоградиентную область изменения параметров, которая визуально определяется как зона стягивания изолиний. При гиперзвуковом обтекании из-за большой разреженности газа фронт ударной волны, в

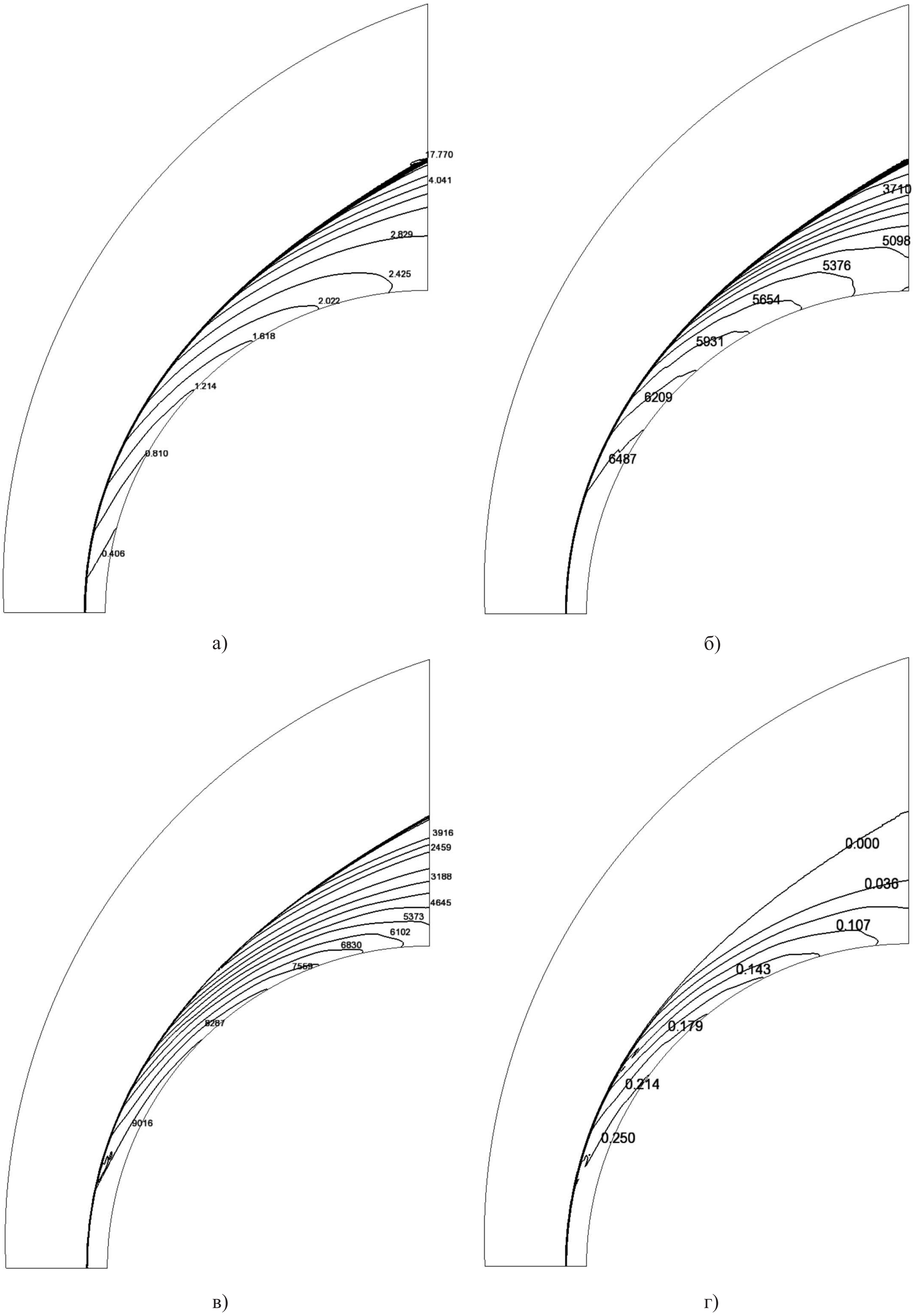


Рис. 7. Линии уровня числа Маха (а), температуры (б), теплоемкости при постоянном давлении (в) и концентрации атомарного азота (г) при $M = 17.77$

том числе головного скачка, имеет конечную толщину, а точность моделирования этой структуры определяется качеством вычислительного алгоритма (подходы, всегда обеспечивающие узость фронта скачка, являются неприемлемыми).

Результаты расчетов при фиксированном числе Маха, равном $\mathrm{M} = 17.77$, представлены на рис. 7. Распределения давления и температуры являются характерными для сверхзвукового обтекания, когда их максимумы находятся в точке торможения потока, а минимумы — в подветренной области. Учет реальных свойств газа приводит к тому, что температура в точке торможения оказывается ниже температуры, рассчитанной по модели совершенного газа.

Зависимость безразмерной толщины ударного слоя от числа Маха показывает рис. 8. Линия 1 соответствует зависимости безразмерного расстояния до ударной волны от числа Маха при использовании предположения о полностью равновесных химических реакциях. Линия 2 показывает интерполированные экспериментальные данные из работы [28] с соответствующими оценками ошибок измерений. Линия 3 соответствует результатам расчета при использовании модели нереагирующего совершенного газа с постоянным показателем адиабаты ($\gamma = 1.4$). Для совершенного газа относительная толщина ударного слоя находится из соотношения [3]

$$\frac{\Delta}{D} = K\varepsilon, \quad \varepsilon = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\left(1 + \frac{2}{\gamma - 1}\,\frac{1}{\mathrm{M}_\infty^2}\right).$$

Параметр ε представляет собой отношение плотностей в невозмущенном потоке и в ударном слое ($\varepsilon = \rho_\infty/\rho_s$), а коэффициент пропорциональности равен $K = 0.39$–0.41. Для низких скоростей поток можно считать замороженным, а различия данных физического и вычислительного эксперимента связаны с неравновесными эффектами в газе [28]. При $\mathrm{M} = 14$ кривая равновесного расчета (линия 1) наиболее близко подходит к экспериментальным данным (линия 2) и приближается к ним при более высоких числах Маха набегающего потока.

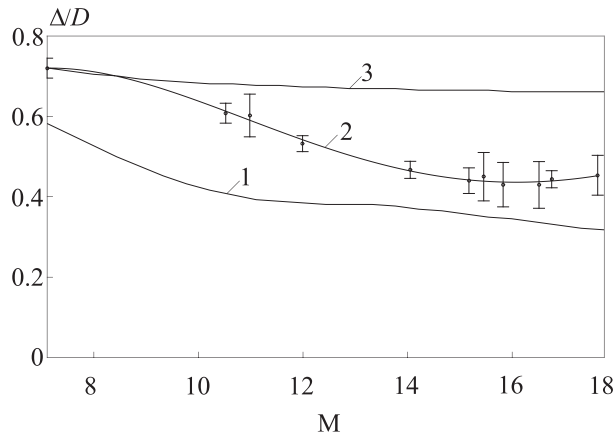


Рис. 8. Зависимость безразмерной толщины ударного слоя от числа Маха

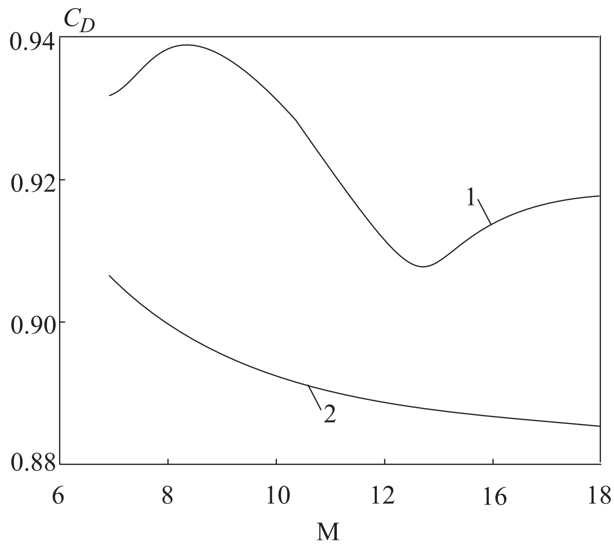
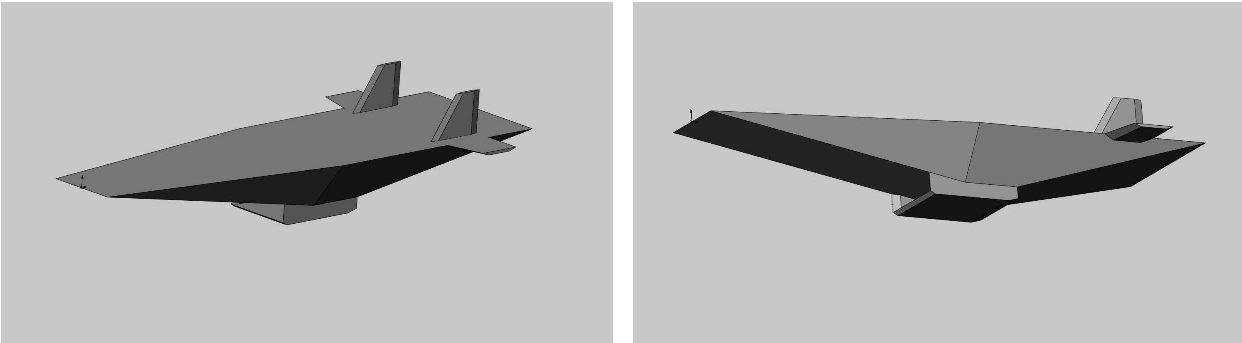


Рис. 9. Зависимость коэффициента сопротивления сферы от числа Маха при использовании модели реального (линия 1) и совершенного (линия 2) газа

В сильной ударной волне, возникающей перед затупленным теплом, происходит преобразование кинетической энергии набегающего потока во внутренние степени свободы молекул воздуха (вращательные и колебательные), что приводит к заметному снижению температуры в сжатом слое и уменьшению отхода фронта ударной волны от поверхности.

Зависимость коэффициента сопротивления сферы $C_D = 2F_D/\big(\rho_\infty V_\infty^2 S\big)$, где $S = \pi D^2/4$ — площадь миделевого сечения, от числа Маха приводится на рис. 9. Линия, соответствующая расчету по равновесной модели (линия 1), располагается выше линии, полученной в расчете по модели совершенного газа (линия 2). В отличие от модели реального газа, модель совершенного газа дает монотонную зависимость коэффициента сопротивления от числа Маха.

4.3. Обтекание гиперзвукового летательного аппарата. Рассмотрим обтекание гиперзвукового летательного аппарата при нулевом угле атаки. Реализованная модель приблизительно соответствует гиперзвуковому летательному аппарату X-43 [31–33]. Воздухозаборник располагается за системой косых скачков уплотнения, создаваемых носовой частью летательного аппарата, и число Маха потока на входе в воздухозаборник существенно снижается. В такой компоновке силовая установка не может рассматриваться как самостоятельный узел, поскольку параметры газа на входе в двигатель определяются условиями обтекания носовой части корпуса. Подробные данные о геометрии данного летательного аппарата в открытом доступе, по-видимому, отсутствуют [12]. В соответствии с данными работы [33], размеры аппарата выбираются равными 3.66×1.5 м^2. Условия расчета соответствуют числу Маха M $= 10$ на высоте 30 км. Давление воздуха на данной высоте полагается равным $p = 1172$ Па, а температура — $T = 227$ К. При заданных условиях скорость полета составляет $V = 2976.62$ м/с.



а) б)

Рис. 10. Общий вид летательного аппарата. Фрагменты (а) и (б) соответствуют различным углам зрения

Планер гиперзвукового летательного аппарата без силовой установки и оборудования показан на рис. 10. Задача решается в трехмерной постановке для половины расчетной области, размеры которой выбираются равными $6 \times 4 \times 2$ м^3. На входной границе задаются граничные условия сверхзвукового втекания в расчетную область, а на выходной границе — условия сверхзвукового вытекания. На стенке используются граничные условия прилипания и скольжения для скорости. Поверхность тела полагается теплоизолированной. На боковых гранях расчетной области (в направлении оси z) применяются условия скольжения.

Неструктурированная расчетная сетка строится при помощи пакета Numeca HEXPRESS (рис. 11), что позволяет получить качественную частично ортогональную сетку с управляемым сгущением узлов в областях бóльших градиентов искомых функций. Такие сетки могут содержать ячейки с количеством граней до 24. Расчетная сетка состоит из 16 миллионов ячеек и 48 миллионов граней.

Расчеты производятся на одном ядре центрального процессора Xeon E5-2680 v3 и одном расчетном модуле NVidia Tesla K40. Некоторые характеристики используемого оборудования указываются в табл. 1. При этом время загрузки данных сетки в память с диска составляет 140 с. На GPU выделяется память (всего 9089.54 Мб) под данные о сетке (3846.49 Мб), значения переменных в центрах ячеек на двух временны́х слоях (1865.254 Мб), градиенты переменных в центрах ячеек (994.802 Мб) и численные потоки в центрах граней (2382.99 Мб).

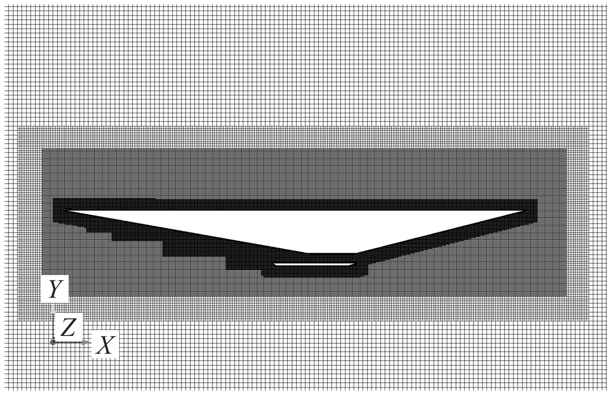


Рис. 11. Расчетная сетка в плоскости симметрии

В картине обтекания наблюдаются головная ударная волна и ударная волна от клина на нижней части фюзеляжа перед воздухозаборником. За счет формы носовой части фюзеляжа формируется скачок уплотнения перед входом в воздухозаборник. Торможение потока на входе происходит лишь частично, так что на протяжении остальной части канала движение рабочего тела остается сверхзвуковым. Структура течения в проточном тракте представляет собой систему отраженных ударных волн. Задняя поверхность корпуса за воздухозаборником играет роль сопла и предназначена для ускорения сверхзвукового потока газа, выходящего из двигателя.

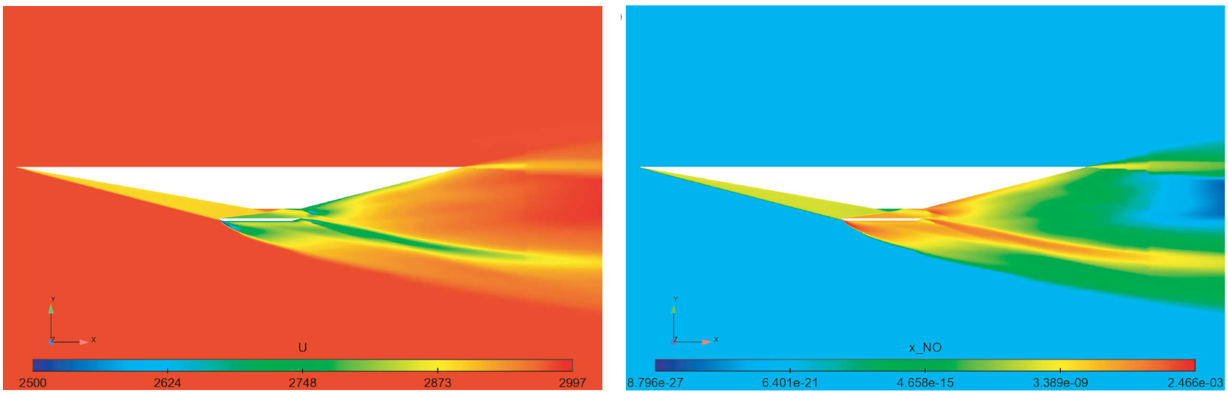
При изменении угла атаки структура течения практически не изменяется. Отличия заключаются в том, что при увеличении угла атаки возникает разрежение над верхней поверхностью модели, увеличивается давление на нижней поверхности и давление потока, входящего в двигатель. При ненулевом угле атаки ударная волна подходит ближе к передней кромке воздухозаборника, что позволяет ему захватывать бо́льшую часть потока.

Таблица 1

Параметры вычислительных устройств

Модель	Xeon E5-2680 v3	Tesla K40
Год выпуска	2014	2013
Частота, МГц	2500	745
Количество АЛУ	12	2880
Пиковая производительность, ГФлопс (одинарная точность)	960	4291–5040
Пиковая производительность, ГФлопс (двойная точность)	480	1430–1680
Ширина шины памяти, бит	48	384
Объем ОЗУ, Гб	64	12
Пропускная способность шины памяти, Гб/с	68	288

Распределения модуля скорости и молярной концентрации окиси азота в плоскости симметрии приводятся на рис. 12. В связи с тем, что корпус имеет хорошо обтекаемые формы, температура газа возрастает не слишком сильно и происходит сравнительно небольшое образование окиси азота, в то время как другие компоненты практически не образуются.



а) б)

Рис. 12. Линии уровня модуля скорости (а) и молярной концентрации окиси азота (б) в плоскости симметрии

Таблица 2

Сравнение длительности выполнения шага по времени

Схема расчета потока	Совершенный газ			Модель Крайко	
	CPU	GPU	Ускорение	CPU	GPU
Схема Годунова	141.107	13.213	10.68	—	32.033
Схема Русанова	100.304	10.945	9.16	—	29.647

Распределение температуры на поверхности корпуса приводится на рис. 13. В поперечных сечениях представлены контуры градиента плотности, которые характеризуют положение скачков уплотнения. Наиболее высокая температура наблюдается на входе в воздухозаборник.

Распределение давления на поверхности корпуса приводится на рис. 14. В поперечных сечениях представлены линии тока, построенные по двум компонентам скорости, которые характеризуют положение вихревых структур.

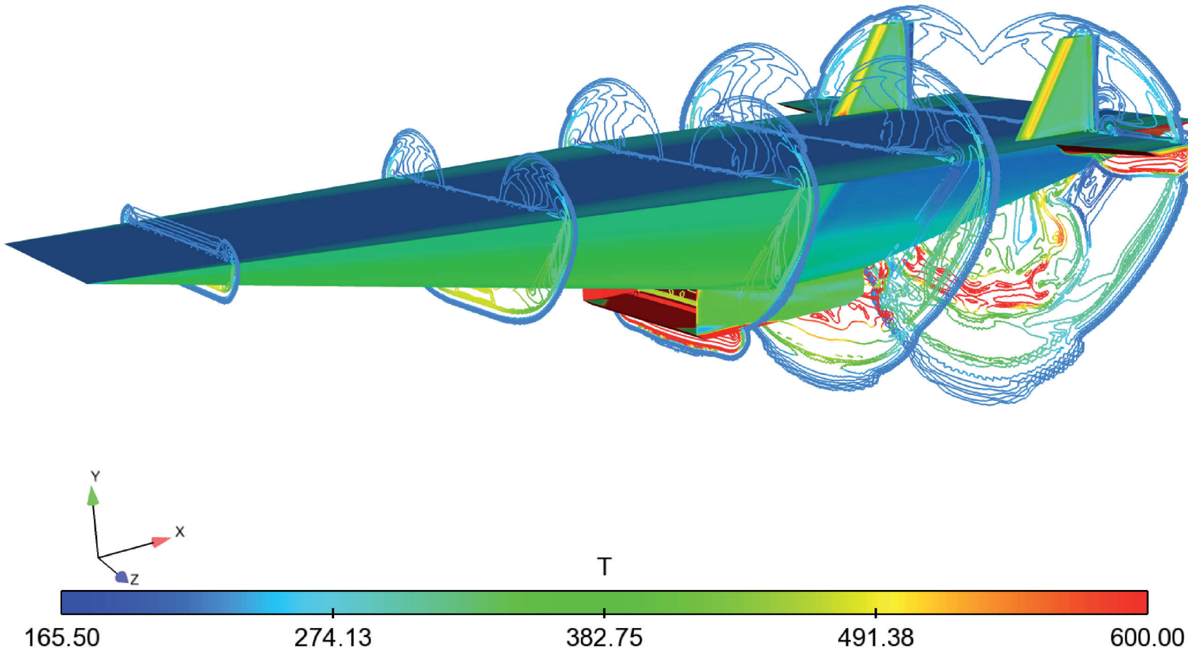


Рис. 13. Распределение температуры по поверхности корпуса и линии уровня градиента плотности в поперечных сечениях

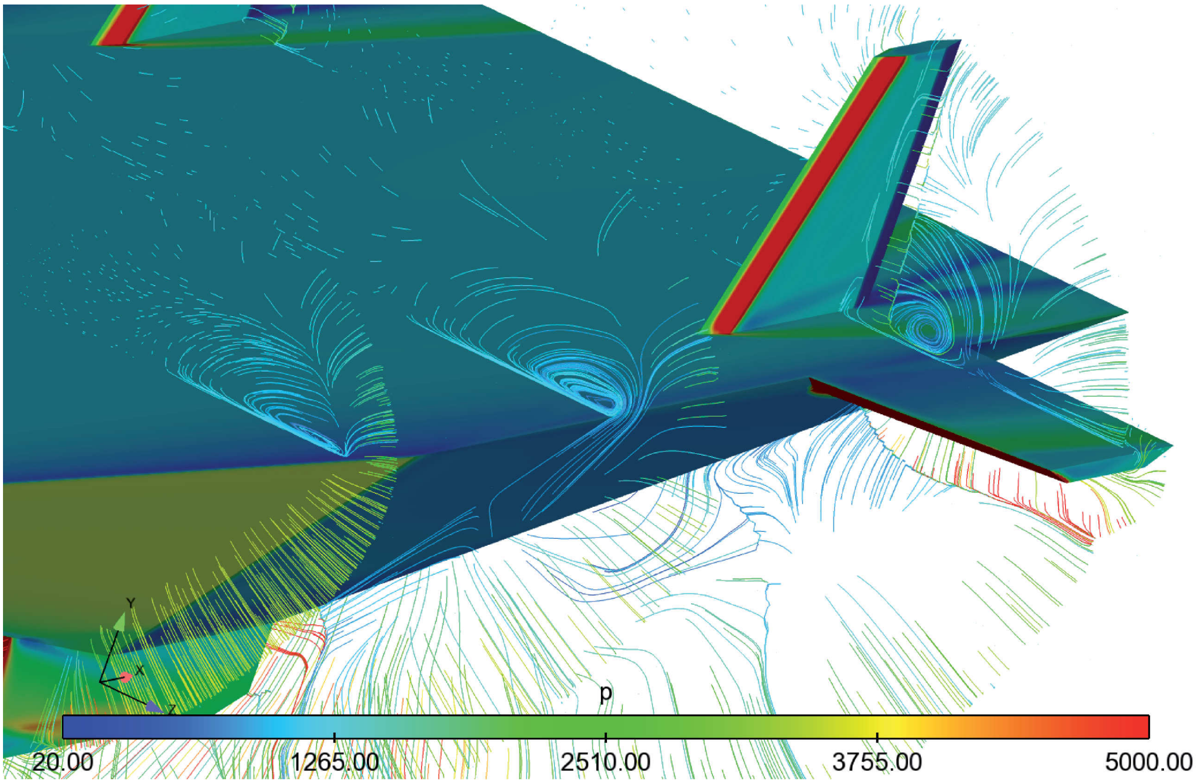


Рис. 14. Распределение давления по поверхности корпуса и линии тока в поперечных сечениях

Для тестирования производительности на центральном процессоре реализован похожий алгоритм расчета по модели совершенного газа без учета химических реакций. В табл. 2 приводится время выполнения одного шага по времени с осреднением по 10 итерациям для различных настроек расчетного модуля. Для тестирования выбирается явная схема Рунге–Кутты третьего порядка для дискретизации по времени. Потоки на гранях контрольного объема рассчитываются при помощи схемы Годунова или схемы Русанова [24]. В качестве термодинамической модели воздуха используется модель совершенного газа и модель Крайко [21]. Использование GPU позволяет получить почти десятикратное ускорение по сравнению с одним ядром CPU. Вместе с тем, тип разностной схемы оказывает сравнительно слабое влияние на ускорение счета. Схема Русанова немного проигрывает схеме Годунова в расчетах на GPU.

5. Заключение. Разработана математическая модель, предназначенная для численного моделирования гиперзвукового обтекания тел произвольной формы с учетом равновесных физико-химических процессов в высокотемпературном воздухе. Для дискретизации уравнений газовой динамики реализован метод конечных объемов на неструктурированных сетках, состоящих из многогранников произвольной формы, а для ускорения вычислений применяются графические процессоры общего назначения. Приведены решения ряда задач физико-химической газовой динамики, связанных с моделированием обтекания сферы и гиперзвукового летательного аппарата при различных условиях в невозмущенном потоке. Результаты расчетов сопоставлены с некоторыми экспериментальными и расчетными данными, имеющимися в литературе.

Достигнуто практически десятикратное ускорение счета при использовании GPU по сравнению с расчетами на CPU. При этом тип используемой разностной схемы оказывает сравнительно слабое влияние на ускорение счета. Полученные результаты представляют интерес для управления обтеканием волновым сопротивлением гиперзвуковых летательных аппаратов при помощи различных подходов.

Карпенко А.Г. выражает благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований (РФФИ) за поддержку по гранту № 16–38–60142. Исследования были проведены с использованием вычислительной техники Ресурсного центра “Вычислительный центр СПбГУ”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Anderson J.D.* Hypersonic and high-temperature gas dynamics. Reston: AIAA Press, 2006.
2. *Суржиков С.Т.* Расчетное исследование аэротермодинамики гиперзвукового обтекания затупленных тел на примере анализа экспериментальных данных. М.: ИПМех РАН, 2011.
3. *Головачев Ю.П.* Численное моделирование течений вязкого газа в ударном слое. М.: Наука, 1996.
4. *Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001.
5. *Суржиков С.Т.* Метод расчета сверхзвукового обтекания сферы на основе AUSM конечно-разностных схем // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия 3: Машиностроение. 2005. № 3. 7–33.
6. *Quirk J.J.* A contribution to the great Riemann solver debate // International Journal for Numerical Methods in Fluids. 1994. **18**, N 6. 555–574.
7. *Тарнавский Г.А., Алиев А.В.* Особенности аэродинамики высокоскоростного полета: компьютерное моделирование гиперзвукового обтекания головной части объекта // Вычислительные методы и программирование. 2008. **9**. 371–394.
8. *MacCormack R.W.* Carbuncle computational fluid dynamics problem for blunt-body flows // Journal of Aerospace Information Systems. 2013. **10**, N 5. 229–239.
9. *Юрьев А.С., Пирогов С.Ю., Рыжов Е.В.* Управление обтеканием тел с использованием подвода лазерной энергии в высокоскоростные потоки газа. Санкт-Петербург: Профессионал, 2006.
10. *Kulkarni V., Hegde G.M., Jagadeesh G., Arunan E., Reddy K.P.J.* Aerodynamic drag reduction by heat addition into the shock layer for a large angle blunt cone in hypersonic flow // Physics of Fluids. 2008. **20**. doi 10.1063/1.2944982.
11. *Lashkov V.A., Karpenko A.G., Khoronzhuk R.S., Mashek I.Ch.* Effect of Mach number on the efficiency of microwave energy deposition in supersonic flow // Physics of Plasmas. 2016. **23**. doi 10.1063/1.4949524.
12. *Борисов В.Е., Луцкий А.Е., Северин А.В., Ханхасаева Я.В.* Активное воздействие на обтекание гиперзвуковых летательных аппаратов. Препринт № 137 ИПМ им. М.В. Келдыша. М., 2016.
13. *Волков К.Н., Дерюгин Ю.Н., Емельянов В.Н., Козелков А.С., Карпенко А.Г., Тетерина И.В.* Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках. М.: Физматлит, 2013.
14. *Chase M.W., Curnutt J.L., McDonald R.A., Syverud A.N.* JANAF thermochemical tables // Journal of Physical and Chemical Reference Data. 1978. **7**, N 3. 793–940.
15. *Глушко В.П.* Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание. М.: Наука, 1978.
16. *Предводителев А.С., Ступоченко Е.В., Самуйлов Е.В. и др.* Таблицы термодинамических функций воздуха (для температур от 6000 до 12000 K и давлений от 0.001 до 1000 атм). М.: Изд-во АН СССР, 1957.

17. *Предводителев А.С., Ступоченко Е.В., Плешанов А.С. и др.* Таблицы термодинамических функций воздуха (для температур от 12000 до 20000 К и давлений от 0.001 до 1000 атм). М.: Изд-во АН СССР, 1959.
18. *Предводителев А.С., Ступоченко Е.В., Самуйлов Е.В. и др.* Таблицы термодинамических функций воздуха (для температур от 200 до 6000 К и давлений от 0.00001 до 100 атм). М.: Изд-во АН СССР, 1962.
19. *Левин В.А., Громов В.Г., Афонина Н.Е.* Численное исследование влияния локального энергоподвода на аэродинамическое сопротивление и теплообмен сферического затупления в сверхзвуковом потоке газа // Прикладная механика и техническая физика. 2000. **41**, N 5. 171–179.
20. *Крайко А.Н.* Аналитическое представление термодинамических функций воздуха // Инженерный журнал. 1964. **4**, № 3. 548–550.
21. *Крайко А.Н., Макаров В.Е.* Явные аналитические формулы, определяющие равновесный состав и термодинамические функции воздуха для температур от 200 до 20000 К // Теплофизика высоких температур. 1996. **34**, № 2. 208–219.
22. *Брыков Н.А., Волков К.Н., Емельянов В.Н., Тетерина И.В.* Течения идеального и реального газа в каналах переменного сечения с нестационарным локализованным подводом энергии // Вычислительные методы и программирование. 2017. **18**. 20–40.
23. *Toro E.F.* Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction. Berlin: Springer, 1999.
24. *Русанов В.В.* Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1961. **1**, № 2. 267–279.
25. *Barth T.J., Jespersen D.C.* The design and application of upwind schemes on unstructured meshes // AIAA Paper. 1989. N 89-0366.
26. *Emelyanov V.N., Karpenko A.G., Kozelkov A.S., Teterina I.V., Volkov K.N., Yalozo A.V.* Analysis of impact of general-purpose graphics processor units in supersonic flow modeling // Acta Astronautica. 2017. **135**. 198–207.
27. *Emelyanov V., Karpenko A., Volkov K.* Development and acceleration of unstructured mesh-based CFD solver // Progress in Flight Physics. 2017. **9**. 387–408.
28. *Lobb R.K.* Experimental measurement of shock detachment distance on spheres fired in air at hypervelocities // High Temperature Aspects of Hypersonic Flow. Oxford: Pergamon Press, 1964. 519–527.
29. *Жлуктов С.В., Смехов Г.Д., Тирский Г.А.* Вращательно-колебательно-диссоциационное взаимодействие в многокомпонентном неравновесном вязком ударном слое // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 1994. № 6. 166–180.
30. *McIntyre T.J., Bishop A.I., Rubinsztein-Dunlop H., Gnoffo P.A.* Comparison of experimental and numerical studies of ionizing flow over a cylinder// AIAA Journal. 2003. Vol. 41, N 11. 2157–2161.
31. *Huebner L.D., Rock K.E., Ruf E.G., Witte D.W., Andrews E.H.* Hyper-X flight engine ground testing for flight risk reduction // Journal of Spacecraft and Rockets. 2001. **38**, N 6. 844–852.
32. *Reubush D.E., Nguyen L.T., Rausch V.L.* Review of X-43A return to flight activities and current status // AIAA Paper. 2003. N 2003-7085.
33. *Mirmirani M., Wu C., Clark A., Choi S., Fidan B.* Airbreathing hypersonic flight vehicle modeling and control, review, challenges, and a CFD-based example // Proceeding of the Workshop on Modeling and Control of Complex Systems, 30 June–1 July 2005, Ayia Napa, Cyprus. 2005.

Поступила в редакцию
11.10.2017

Numerical Simulation of Gas Dynamic and Physical-Chemical Processes in Hypersonic Flows Past Bodies

K. N. Volkov[1], V. N. Emelyanov[2], and A. G. Karpenko[3]

[1] *Ustinov Baltic State Technical University, Faculty of Rocket and Space Engineering; ulitsa Pervaya Krasnoarmeiskaya 1, St. Petersburg, 190005, Russia; Dr. Sci., Leading Scientist, e-mail: dsci@mail.ru*

[2] *Ustinov Baltic State Technical University, Faculty of Rocket and Space Engineering; ulitsa Pervaya Krasnoarmeiskaya 1, St. Petersburg, 190005, Russia; Dr. Sci., Professor, e-mail: vlademelyanov@gmail.com*

[3] *St. Petersburg State University, Faculty of Mathematics and Mechanics; Universitetskii prospekt 28, St. Petersburg, 198504, Russia; Ph.D., Associate Professor, e-mail: aspera.2003.ru@mail.ru*

Received October 11, 2017

Abstract: Numerical simulation of gas dynamic and physical-chemical processes in hypersonic flows past bodies of various shapes is considered. The mathematical model includes the gas dynamics equations of real gases and the equations of chemical kinetics describing equilibrium processes in high-temperature air. The finite volume method and various finite difference schemes for the discretization of convective fluxes are used to discretize the governing equations. The capabilities of the numerical procedure are demonstrated by the solution of a number of problems in physical-chemical gas dynamics. The calculations are performed using general-purpose graphics processor units. The computational time achieved with the use of various finite difference schemes and the approaches to describe the properties of high-temperature air are discussed.

Keywords: aerodynamics, hypersonic flow, computational fluid dynamics, real gas, finite volume method, shock wave, dissociation.

References

1. J. D. Anderson, *Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics* (AIAA Press, Reston, 2006).

2. S. T. Surzhikov, *Numerical Study of Aerothermodynamics of Hypersonic Flow over Blunt Bodies by the Example of Experimental Data Analysis* (Inst. for Problems in Mechanics, Moscow, 2011) [in Russian].

3. Yu. P. Golovachev, *Numerical Simulation of Viscous Gas Flows in Shock Layers* (Nauka, Moscow, 1996) [in Russian].

4. A. G. Kulikovskii, N. V. Pogorelov, and A. Yu. Semenov, *Mathematical Aspects of Numerical Solution of Hyperbolic Systems* (Fizmatlit, Moscow, 2001; CRC Press, Boca Raton, 2001).

5. S. T. Surzhikov, "A Numerical Method for Hypersonic Flow over a Sphere Using the AUSM Finite-Difference Schemes," Vestn. Bauman Mosk. Tekh. Univ., Ser. 3: Mashinostroenie, No. 3, 7–33 (2005).

6. J. J. Quirk, "A Contribution to the Great Riemann Solver Debate," Int. J. Numer. Methods Fluids **18** (6), 555–574 (1994).

7. G. A. Tarnavsky and A. V. Aliev, "Specific Features of High-Speed Flight Aerodynamics: Computer Simulation of Hypersonic Flow around the Head of an Object," Vychisl. Metody Programm. **9**, 371–394 (2008).

8. R. W. MacCormack, "Carbuncle Computational Fluid Dynamics Problem for Blunt-Body Flows," J. Aerospace Inf. Sys. **10** (5), 229–239 (2013).

9. A. S. Yur'ev, S. Yu. Pirogov, and E. V. Ryzhov, *Control of Flow over Bodies Using the Laser Energy Input into High-Speed Gas Flow* (Professional, St. Petersburg, 2006) [in Russian].

10. V. Kulkarni, G. M. Hegde, G. Jagadeesh, et al., "Aerodynamic Drag Reduction by Heat Addition into the Shock Layer for a Large Angle Blunt Cone in Hypersonic Flow," Phys. Fluids **20** (2008). doi 10.1063/1.2944982

11. V. A. Lashkov, A. G. Karpenko, R. S. Khoronzhuk, and I. Ch. Mashek, "Effect of Mach Number on the Efficiency of Microwave Energy Deposition in Supersonic Flow," Phys. Plasmas **23** (2016). doi 10.1063/1.4949524

12. V. E. Borisov, A. E. Lutsky, A. V. Severin, and Ya. V. Khankhasaeva, *Active Impact on the Flow around Hypersonic Flying Vehicles*, Preprint No. 137 (Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow, 2016).

13. K. N. Volkov, Yu. N. Deryugin, V. N. Emel'yanov, A. S. Kozelkov, A. G. Karpenko, and I. V. Teterina, *Acceleration of Gasdynamic Calculations on Unstructured Grids* (Fizmatlit, Moscow, 2013) [in Russian].

14. M. W. Chase, J. L. Curnutt, R. A. McDonald, and A. N. Syverud, "JANAF Thermochemical Tables," J. Phys. Chem. Ref. Data **7** (3), 793–940 (1978).

15. V. P. Glushko (Ed.), *Thermodynamic Properties of Individual Substances* (Nauka, Moscow, 1978) [in Russian].

16. A. S. Predvoditelev, E. V. Stupochenko, E. V. Samuilov, I. P. Stakhanov, A. S. Pleshanov, and I. B. Rozhdestvenskii, *Tables of Thermodynamic Functions of Air for the Temperature Range 6000–12000◦ K and Pressure Range 0.001–1000 atm* (Izd. Akad. Nauk SSSR, Moscow, 1957; Infosearch, London, 1958).

17. A. S. Predvoditelev, E. V. Stupochenko, A. S. Pleshanov, et al., *Tables of Thermodynamic Functions of Air for the Temperature Range 12000–20000◦ K and Pressure Range 0.001–1000 atm* (Izd. Akad. Nauk SSSR, Moscow, 1959) [in Russian].

18. A. S. Predvoditelev, E. V. Stupochenko, E. V. Samuilov, et al., *Tables of Thermodynamic Functions of Air for the Temperature Range 200–6000◦ K and Pressure Range 0.00001–100 atm* (Izd. Akad. Nauk SSSR, Moscow, 1962) [in Russian].

19. V. A. Levin, V. G. Gromov, and N. E. Afonina, "Numerical Analysis of the Effect of Local Energy Supply on the Aerodynamic Drag and Heat Transfer of a Spherically Blunted Body in a Supersonic Air Flow," Zh. Prikl. Mekh. Tekh. Fiz. **41** (5), 171–179 (2000) [J. Appl. Mech. Tech. Phys. **41** (5), 915–922 (2000)].

20. A. N. Kraiko, "Analytic Representation of Thermodynamic Functions of Air," Inzh. Zh. **4** (3), 548–550 (1964).

21. A. N. Kraiko and V. E. Makarov, "Explicit Analytic Formulas Defining the Equilibrium Composition and Thermodynamic Functions of Air for Temperatures from 200 to 20000 K," Teplofiz. Vys. Temp. **34** (2), 208–219 (1996) [High Temp. **34** (2), 202–213 (1996)].

22. N. A. Brykov, K. N. Volkov, V. N. Emelyanov, and I. V. Teterina, "Flows of Ideal and Real Gases in Channels of Variable Cross Section with Unsteady Localized Energy Supply," Vychisl. Metody Programm. **18**, 20–40 (2017).

23. E. F. Toro, *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction* (Springer, Berlin, 1999).

24. V. V. Rusanov, "The Calculation of the Interaction of Non-Stationary Shock Waves with Barriers," Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. **1** (2), 267–279 (1961) [USSR Comput. Math. Math. Phys. **1** (2), 304–320 (1962)].

25. T. J. Barth and D. C. Jespersen, "The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes," AIAA Paper No. 89-0366 (1989).

26. V. N. Emelyanov, A. G. Karpenko, A. S. Kozelkov, et al., "Analysis of Impact of General-Purpose Graphics Processor Units in Supersonic Flow Modeling," Acta Astronaut. **135**, 198–207 (2017).

27. V. Emelyanov, A. Karpenko, and K. Volkov, "Development and Acceleration of Unstructured Mesh-Based CFD Solver," Progress in Flight Physics **9**, 387–408 (2017).

28. R. K. Lobb, "Experimental Measurement of Shock Detachment Distance on Spheres Fired in Air at Hypervelocities," in *The High Temperature Aspects of Hypersonic Flow* (Pergamon, Oxford, 1964), pp. 519–527.

29. S. V. Zhluktov, G. D. Smekhov, and G. A. Tirskii, "Rotation–Vibration–Dissociation Interaction in a Multicomponent Nonequilibrium Viscous Shock Layer," Izv. Ross. Akad. Nauk, Mekh. Zhidk. Gaza, No. 6, 166–180 (1994) [Fluid Dyn. **29** (6), 876–887 (1994)].

30. T. J. McIntyre, A. I. Bishop, H. Rubinsztein-Dunlop, and P. A. Gnoffo, "Comparison of Experimental and Numerical Studies of Ionizing Flow over a Cylinder," AIAA J. **41** (11), 2157–2161 (2003).

31. L. D. Huebner, K. E. Rock, E. G. Ruf, et al., "Hyper-X Flight Engine Ground Testing for Flight Risk Reduction," J. Spacecr. Rockets **38** (6), 844–852 (2001).

32. D. E. Reubush, L. T. Nguyen, and V. L. Rausch, "Review of X-43A Return to Flight Activities and Current Status," AIAA Paper No. 2003-7085 (2003).

33. M. Mirmirani, C. Wu, A. Clark, et al., "Airbreathing Hypersonic Flight Vehicle Modeling and Control, Review, Challenges, and a CFD-Based Example," in *Proc. Workshop on Modeling and Control of Complex Systems, Ayia Napa, Cyprus, June 30–July 1, 2005*, 15 pp.