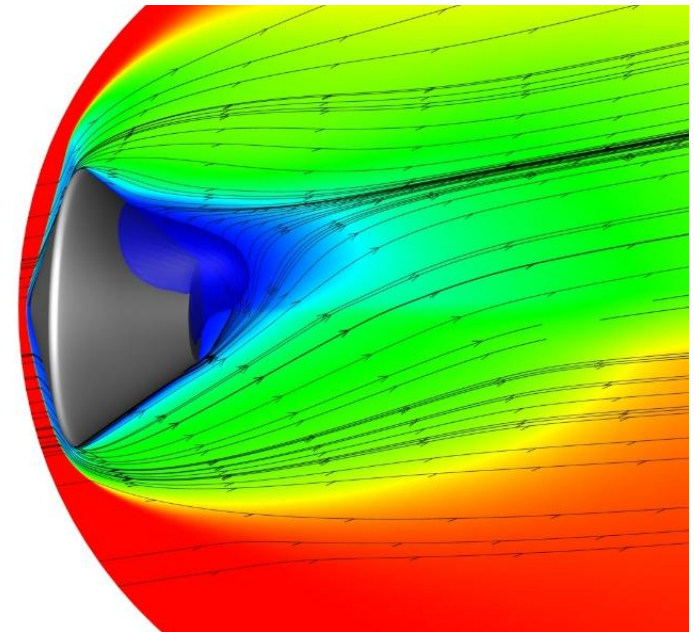
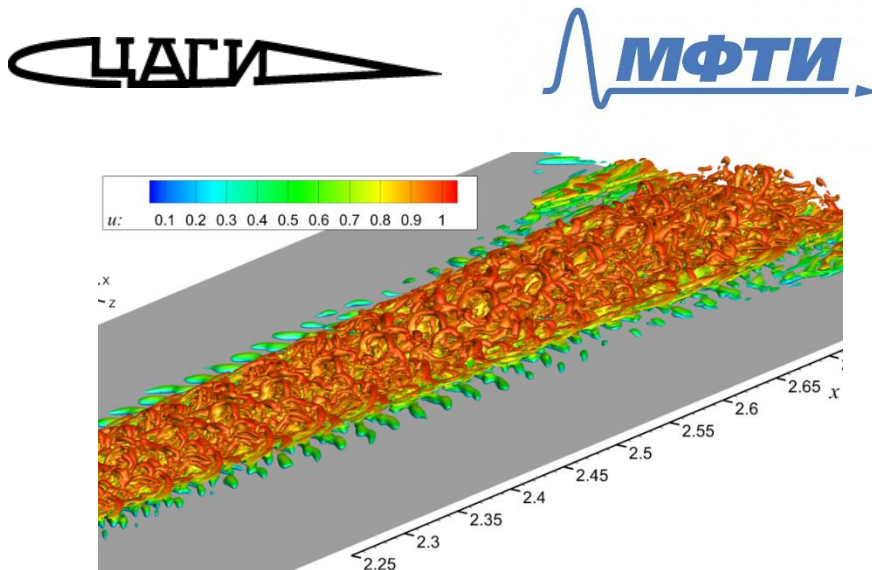


# ПАКЕТ РАСЧЁТНЫХ ПРОГРАММ HSFLOW: МОДЕЛИРОВАНИЕ НАЧАЛА ЛТП НА ГИПЕРЗВУКЕ; МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО- ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

А.В. Новиков, к.ф.-м.н.



# Пакет расчётных программ HSFlow

- HSFlow = High-Speed Flow solver (с) НИО-8 ЦАГИ
- Моделирование течений сжимаемого вязкого газа с помощью численного решения нестационарных уравнений Навье-Стокса и Рейнольдса в двухмерной, осесимметричной и трёхмерной постановках.
- Моделирование неравновесных физико-химических процессов
- Уравнения в консервативной безразмерной форме в криволинейных координатах
- Неявный численный метод конечного объёма второго порядка точности по пространству и времени
- Схема TVD типа Годунова. Реконструкция на грани ячейки minmod и WENO. Распад разрыва по методу Рунге.
- Структурированные многоблочные расчётные сетки

# HSFlow: особенности программной реализации

- Язык программирования: C с элементами C++
- Библиотека PETSc для параллельных матрично-векторных операций.
- Стандарт распределённых вычислений MPI.
- Кроссплатформенный код: поддержка Windows и Linux.
- Концепция модулей-плагинов: уравнения и граничные условия конкретизируются плагинами в виде DLL.

# Расчётные сетки. Формат ввода вывода.

- Структурированные многоблочные сетки
- Стыковка между блоками типа *один-ко-многим* и *узел-в-узел*.
- Формат для хранения расчётных сеток и полей течений – международный стандарт CGNS (CFD General Notation System).
  - Разрабатывается международным комитетом «CGNS Steering Committee» (изначально в 1994 году Boeing и NASA) - <http://cgns.github.io/>

# Метод параллельного решения

- Дискретизация системы в частных производных в каждом блоке независимо

$$\frac{3\mathbf{Q}_{i,j,k}^{n+1} - 4\mathbf{Q}_{i,j,k}^n + \mathbf{Q}_{i,j,k}^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{\mathbf{E}_{i+1/2,j,k}^{n+1} - \mathbf{E}_{i-1/2,j,k}^{n+1}}{\Delta \xi} + \frac{\mathbf{G}_{i,j+1/2,k}^{n+1} - \mathbf{G}_{i,j-1/2,k}^{n+1}}{\Delta \eta} + \frac{\mathbf{F}_{i,j,k+1/2}^{n+1} - \mathbf{F}_{i,j,k-1/2}^{n+1}}{\Delta \zeta} = \mathbf{S}$$

- Распределённый вектор невязок  
нелинейная система сеточных (алгебраических) уравнений:  $\mathbf{F}(\mathbf{X}) = 0$
- Вектор  $\mathbf{X}$  – искомые функции во всех узлах сетки.  
Например для сетки 500млн, вектор содержит  $2.5\text{e}+9$  значений  $> \text{MAX\_INT} = 2.14\text{e}+9$ .  
**Для индексации требуется int64**
- Нелинейная система решается по методу Ньютона  $\mathbf{X}^{[k+1]} = \mathbf{X}^{[k]} - \epsilon_{k+1} \mathbf{D}_{k_0}^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{X}^k)$   
 $\mathbf{D}_{k_0} = (\partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{X})_{k_0}$  матрица Якоби по методу конечных приращений вектора невязки по вектору искомых сеточных переменных (параллельно)
- На каждой итерации Ньютона, решается линейная система уравнений методом GMRes  
 $(\partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{X})_{k_0} \Delta \mathbf{X}^{[k]} = -\epsilon_{k+1} \mathbf{F}(\mathbf{X}^{[k]})$

- Решение с помощью **PETSc**:
  - Операции с распределёнными векторами и матрицами
  - Параллельный метод deflated GMRes (**DGMRES**) с предобуславливателем Block Jacobi

# PETSc: Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation

- Библиотека структур данных и процедур для распределённого (параллельного) решения научных задач, моделируемых уравнениями в частных производных
- Кроссплатформенная (Windows, Linux, etc.)
- Возможно применение в приложениях написанных на C/C++, Fortran, Python
- Использует MPI и BLAS
- Распространение в исходных кодах, свободное использование для любых целей
- <http://www.mcs.anl.gov/petsc/>

# Развитие HSFlow в 2016

- ❑ Реализована модель неравновесных физико-химических процессов для атмосферы Земли (5 реакций) и Марса (12 реакций).
- ❑ Возможность стыковки блоков расчётной области типа один-ко-многим
- ❑ 64х-битные переменные для хранения индексов массивов → преодоление предела в 429млн узлов ( $2^{31}/5$ ).
- ❑ Возможность «замораживания» течения в отдельных блоках → моделирование возмущений только в подобласти.
- ❑ Периодические граничные условия

# Развитие HSFlow в 2016 (продолжение)

- ❑ Применение особенностей CGNS для разделения данных поля течения и координат на отдельные файлы → уменьшение суммарного объёма полей, сохраняемых по времени.
- ❑ Возможность сохранения поля только в заданных сечениях (вдоль сеточных поверхностей, без интерполяции) → уменьшение объёма выходных данных.
- ❑ Программы генерации 3D расчётных сеток больших размеров (более 100млн узлов) → решение проблем типовых сеткопостроителей на таких размерах.
- ❑ Программы извлечения подмножеств из расчётных полей (отдельные блоки, сечения) с возможностью работы в пакетном режиме на кластере.



# ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАЧАЛА ЛАМИНАРНО-ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕХОДА

---

- плоская пластина
- контролируемые начальные возмущения
- гиперзвуковой набегающий поток

# Мотивация

- ❑ Для систематических исследований линейной и нелинейной стадий ЛТП наиболее подходят «контролируемые» эксперименты. Опубликовано довольно мало таких работ для сверхзвуковых течений:
  - ❑ Косинов и др. (1994, 1996):  $M=2$ , пластина, тлеющий разряд
  - ❑ Laddon & Schneider (AIAA-1998-0436):  $M=4$ , конус, тлеющий разряд
  - ❑ Шиплюк и др. (*J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2003), Бунтин и др. (*J. Fluid Mech.*, 2008):  $M = 5.95$ , конус, тлеющий разряд
  - ❑ Casper и др. (AIAA-2011-372, AIAA-2012-281):  $M=6$ , стенки сопла.
  - ❑ Chou and Schneider (AIAA 2015-3076):  $M=6$ , вогнутый конус, температурные возмущения лазером
- ❑ Эксперименты не дают полную картину поля возмущений по причине технической сложности измерений на сверхзвуке.
- ❑ Прямое численное моделирование (ПЧМ / DNS) хорошо подходит для целостного моделирования всех стадий ЛТП.
- ❑ Постоянно действующий источник возмущений реализуется экспериментально, но ранее не исследовался численно.
- ❑ Источник генерирует пространственно неустойчивые возмущения, которые растут и распадаются до турбулентного клина

# Постановка задачи

- 3D уравнения Навье-Стокса для вязкого сжимаемого совершенного газа
- 2 расчётных области:
  - $0 < z < 0.2$  (половина) с ГУ симметрии при  $z=0$
  - $-0.2 < z < 0.2$  (полная) без симметрии
- Расчёт в 2 этапа:
  - Ламинарное стационарное поле (основное)
  - Искусственные возмущения

$$M_{\infty} = 5.373$$

$$Re_{\infty 1} = 17.94 \times 10^6 \text{ м}^{-1}$$

$$L^* = 0.3161 \text{ м}$$

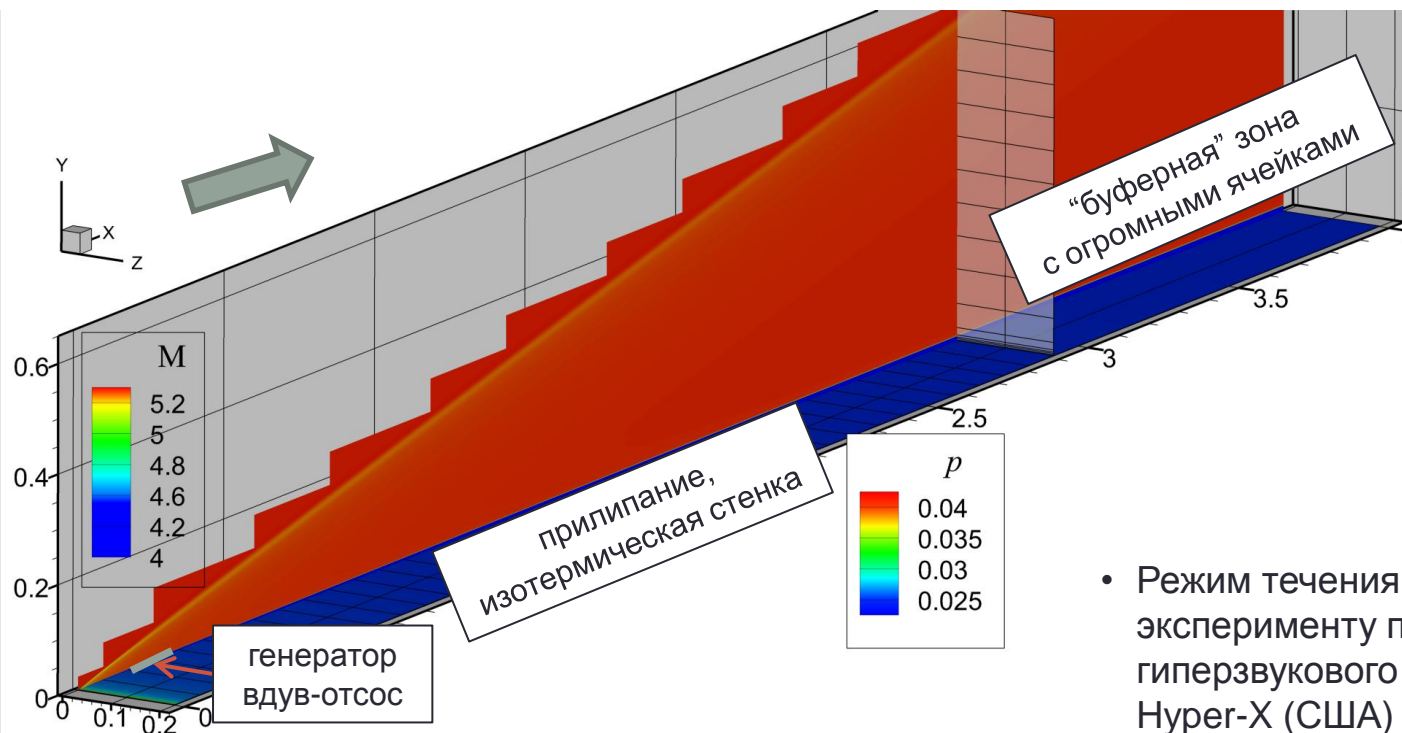
$$Re_{\infty L} = 5.667 \times 10^6$$

$$T_{\infty} = 74.194 \text{ К}$$

$$T_w = 300.0 \text{ К} = 4.043$$

$$T_w/T_{aw} = 0.68$$

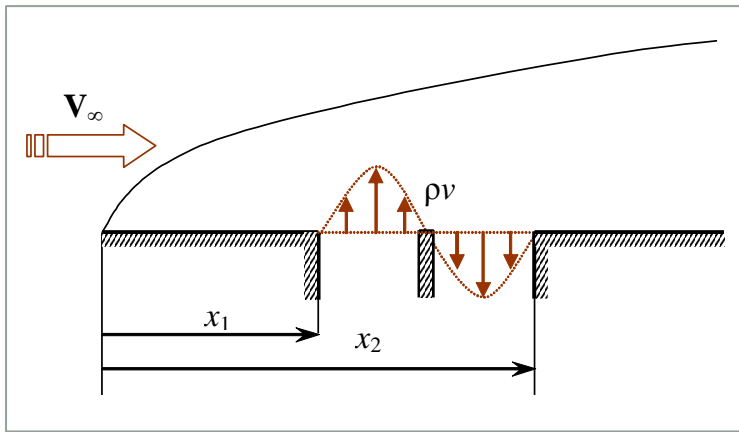
$$\gamma = 1.4; \text{ Pr} = 0.72$$



- Режим течения соответствует трубному эксперименту по исследованию гиперзвукового летательного аппарата Hyper-X (США)

# Генератор возмущений

□ Периодический вдув-отсос через 2 отверстия на стенке



ГУ на вертикальный массовый расход:

$$(\rho v)_w = \varepsilon \sin \left( 2\pi \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \right) \sin \left( \pi \frac{z - z_1}{z_2 - z_1} \right) \sin(\omega_0 t)$$

$$x_1 < x < x_2, \quad z_1 < z < z_2, \quad 0 \leq t < t_1$$

$$x_1 = x_0 - d, \quad x_2 = x_0 + d, \quad z_1 = -\frac{d}{2}, \quad z_2 = \frac{d}{2}$$

## Размер и положение

$$d = 0.00815 \text{ (} d^* = 2.6 \text{ мм)}$$

- $x_0 = 0.044$  : **около передней кромки**

## Амплитуда воздействия:

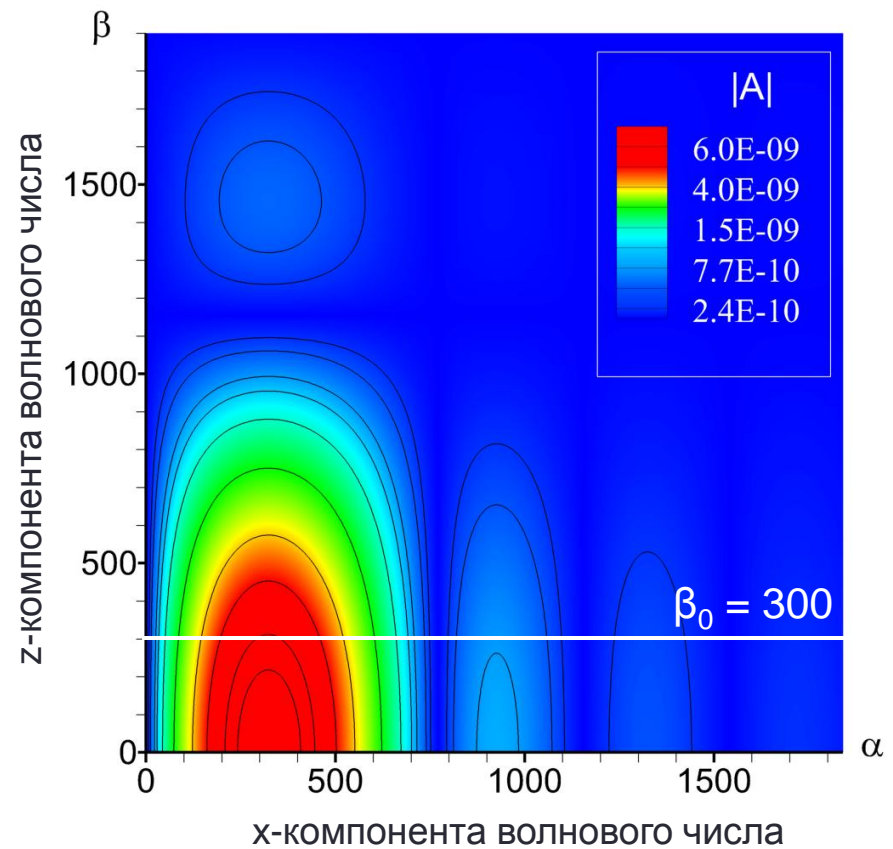
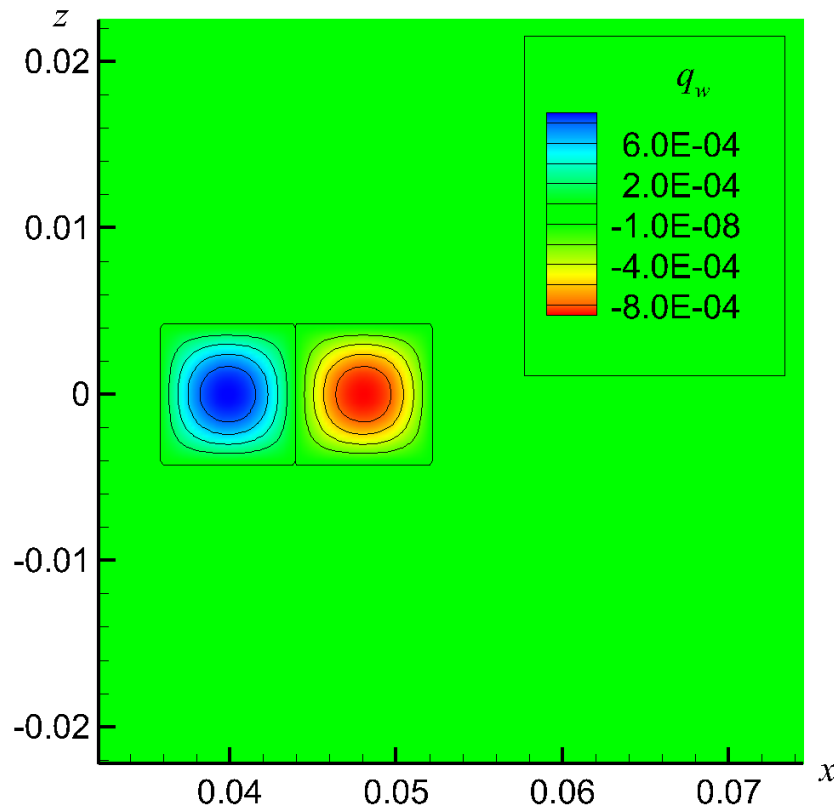
- $\varepsilon = 0.001$  : первоначально линейное развитие возмущений

## Время:

Несущая частота:  $\omega_0 = 125.0$  ( $F_0 = \frac{\omega_0}{\text{Re}_\infty} = 2.21 \times 10^{-5}$ )

Продолжительность:  $t_1 = \infty$  (постоянная работа на фиксированной частоте)

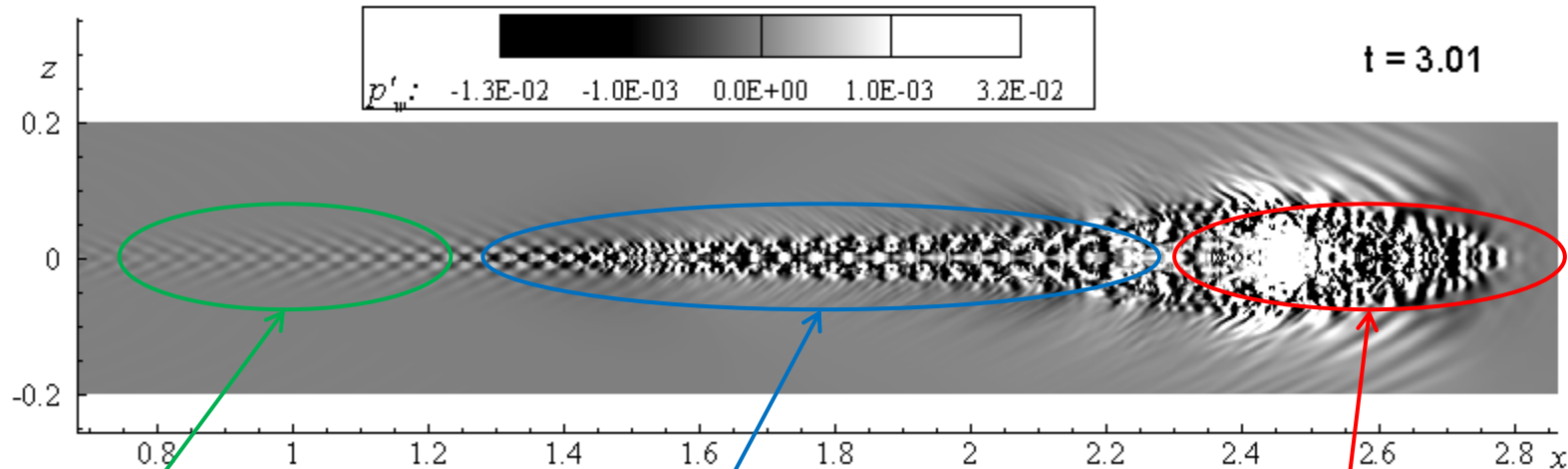
# Генератор возмущений. Форма и спектр



# Параметры численного моделирования

- ❑ Сетка:
  - ❑  **$251 \times 10^6$**  узлов  $6001 \times (126 \dots 376) \times 151$  с условием симметрии
  - ❑  **$501 \times 10^6$**  узлов  $6001 \times (126 \dots 376) \times 301$  без симметрии
  - ❑  $\Delta y = 10^{-4}$ : 120 сеточных линий в ПС
  - ❑  $\Delta x = 5 \times 10^{-4}$ : ~80 узлов на основную длину волны
- ❑ Время:
  - ❑ Шаг:  $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$  (~100 точек на базовый период)
  - ❑ Полное время:  $t = 7.32$  с симметрией;  $t = 3.93$  без симметрии
- ❑ Вычислительные ресурсы Flowmodellium Lab в МФТИ, а также Федерального центра коллективного пользования в НИЦ «Курчатовский институт» с использованием до **1536** процессорных ядер
- ❑ Файлы:
  - ❑ С условием симметрии: поле – 9.34 Гб; сетка – 5.6 Гб
  - ❑ Без симметрии: поле – **18.6 Гб**; сетка – **11.1 Гб**

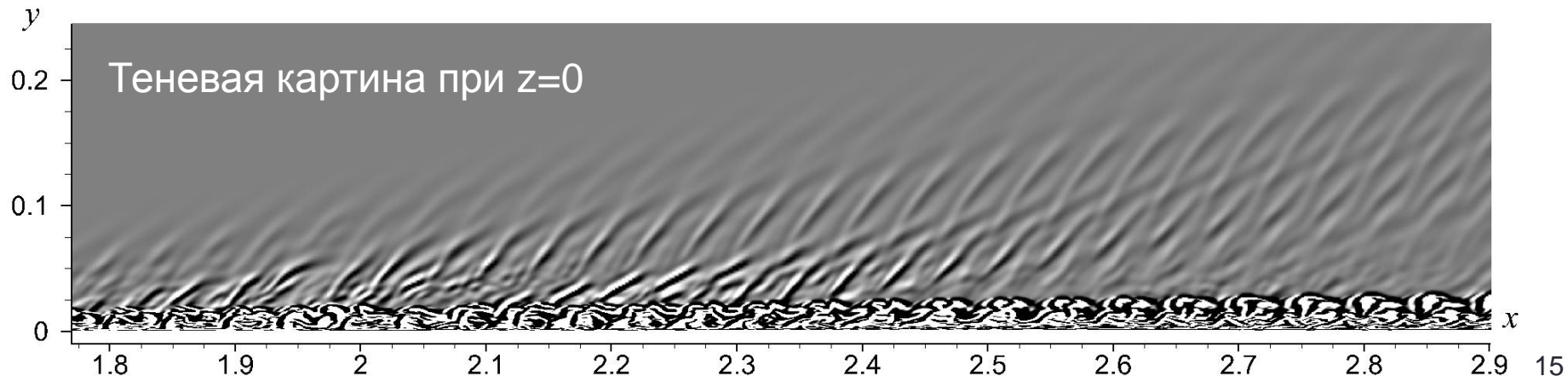
# Мгновенное поле возмущений



Линейная стадия:  
волны первой моды  
Мэка

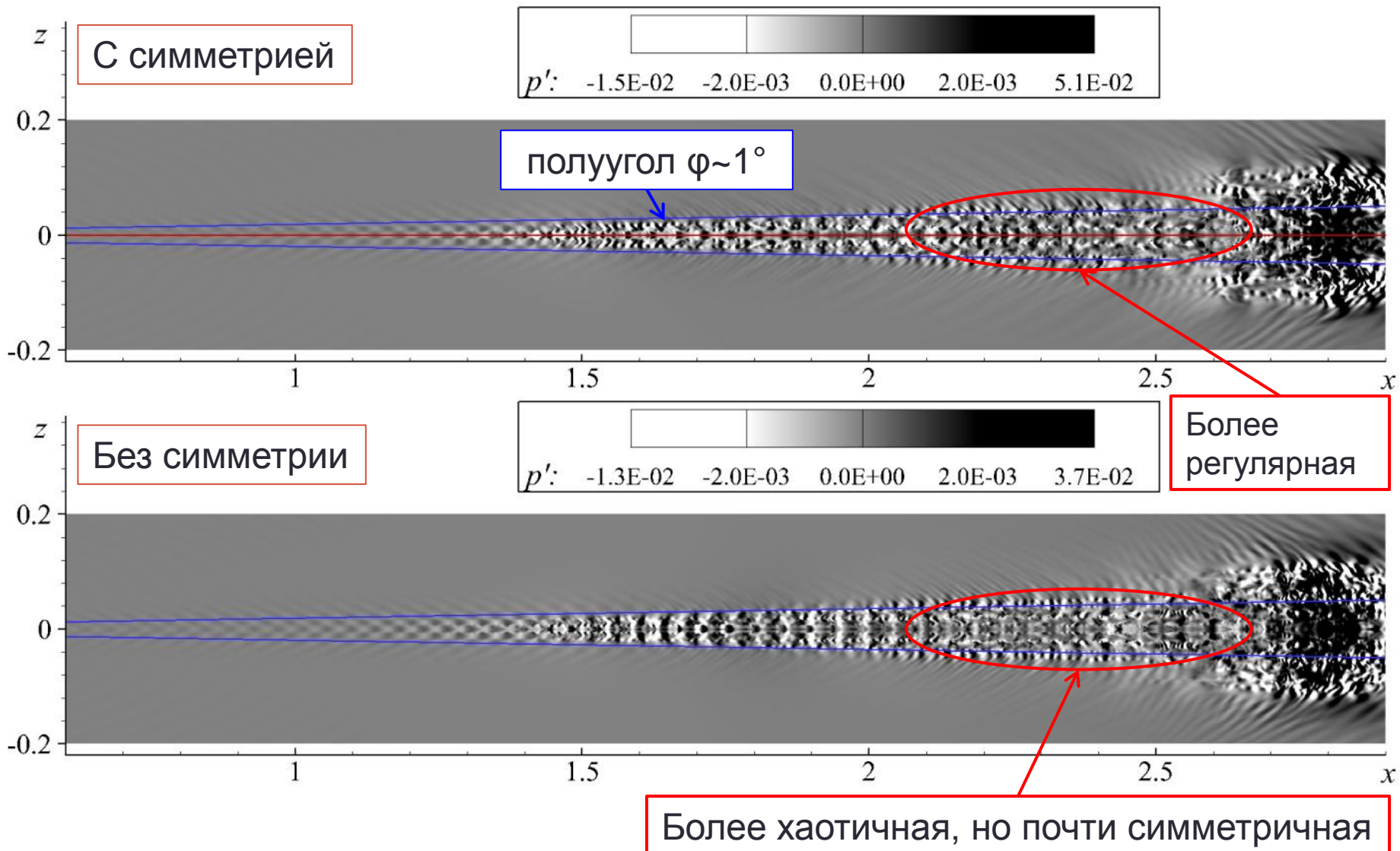
Нелинейная стадия  
 $1.2 < x < 2.25$

“Молодой” турбулентный  
клин  $x > 2.25$





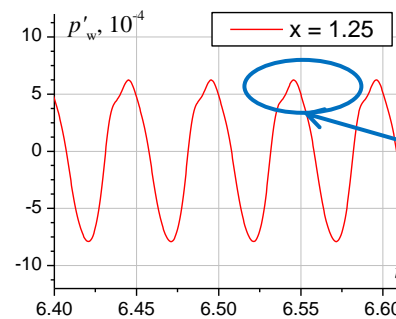
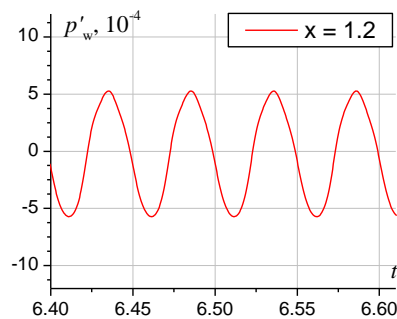
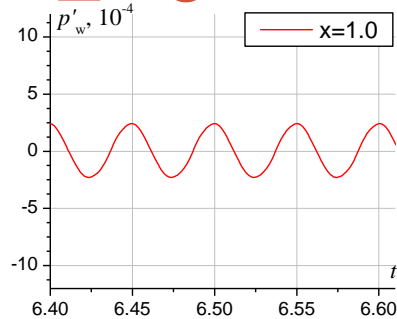
# Возмущения давления на стенке при $t = 3.5$





# Возмущения давления на стенке при

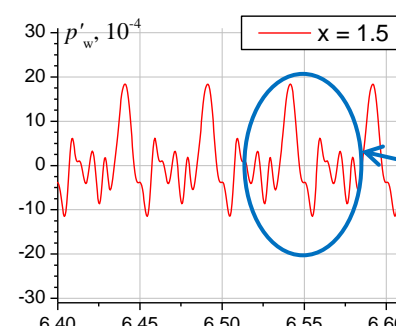
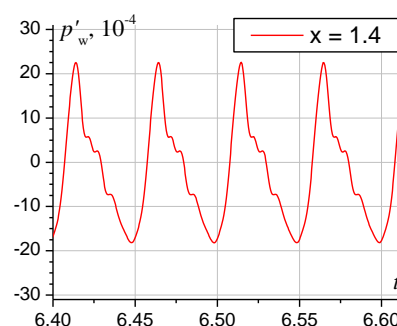
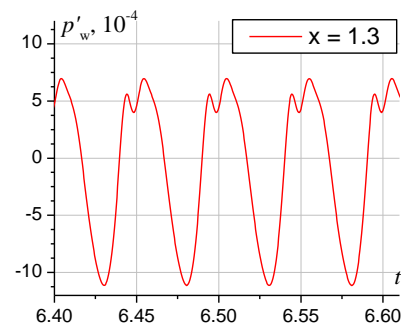
## $z=0$



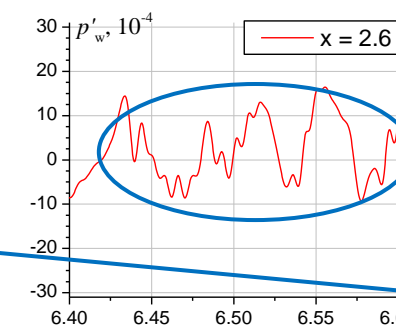
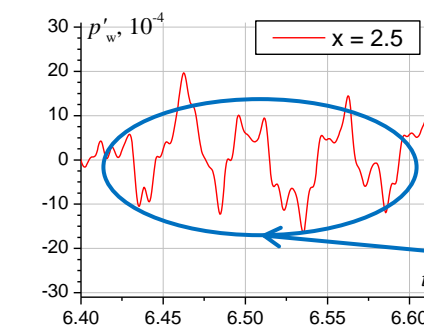
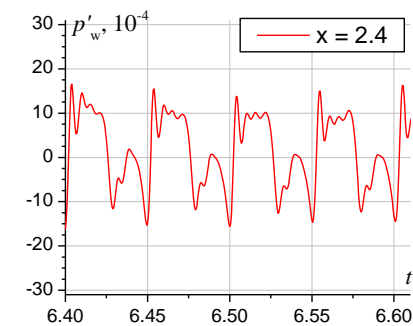
Нелинейные искажения

Критическая амплитуда:

$$\frac{p'_w}{p_e} \approx 3\%$$



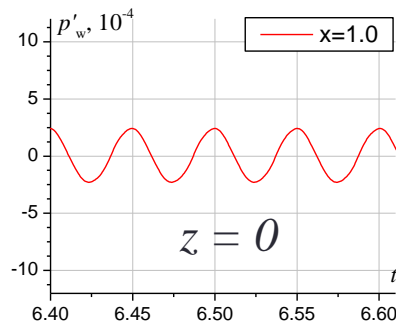
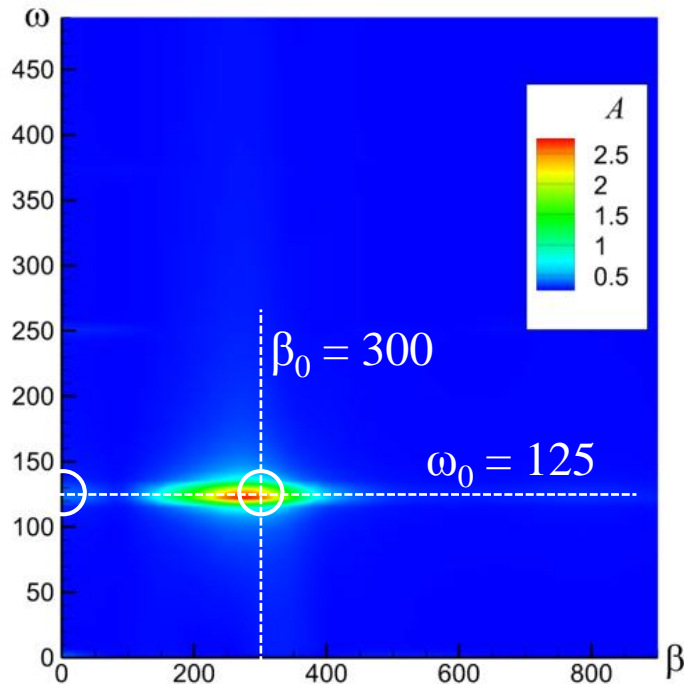
Существенная  
нелинейность



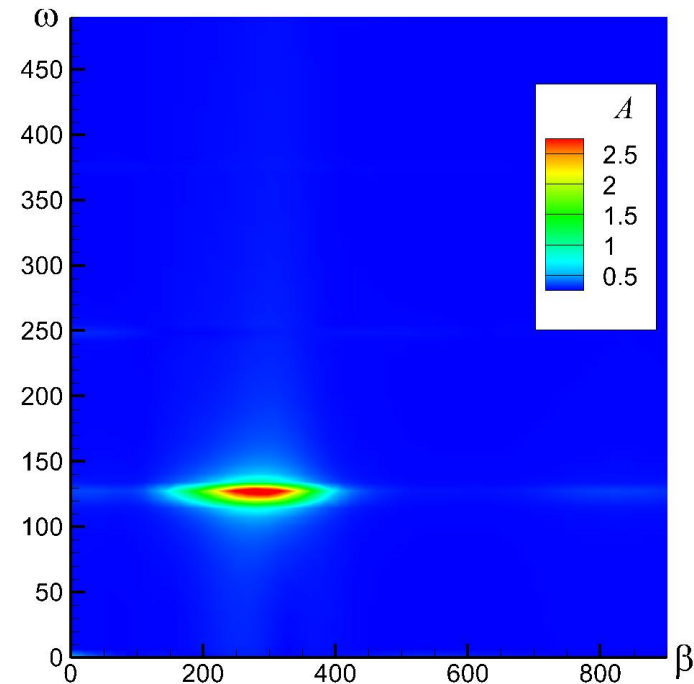
Непериодичность

# Спектр в $x = 1.0$

С симметрией



Без симметрии



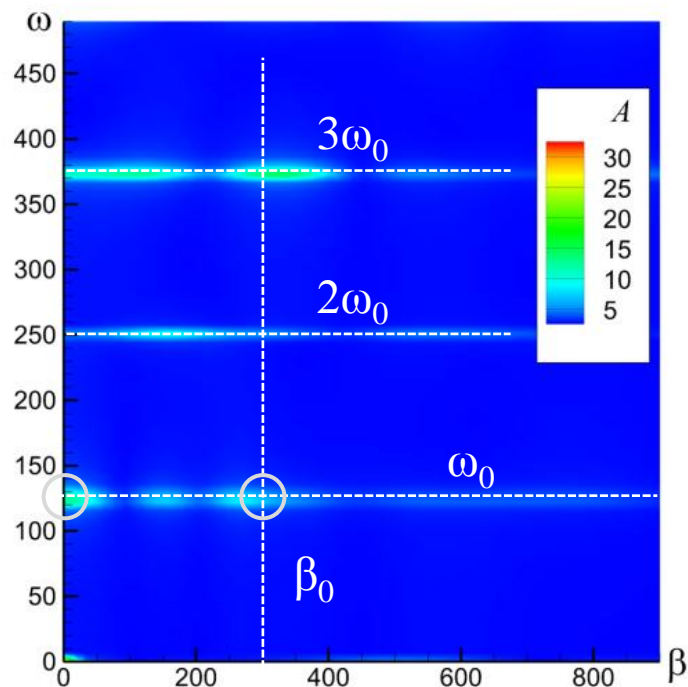
Линейная стадия:  
волны 1<sup>ой</sup> моды, угол  
фронта  $\theta \approx 66^\circ$  ( $\beta \approx$   
300)

# Спектр в $x = 1.5$

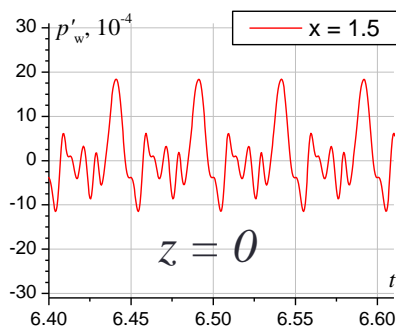
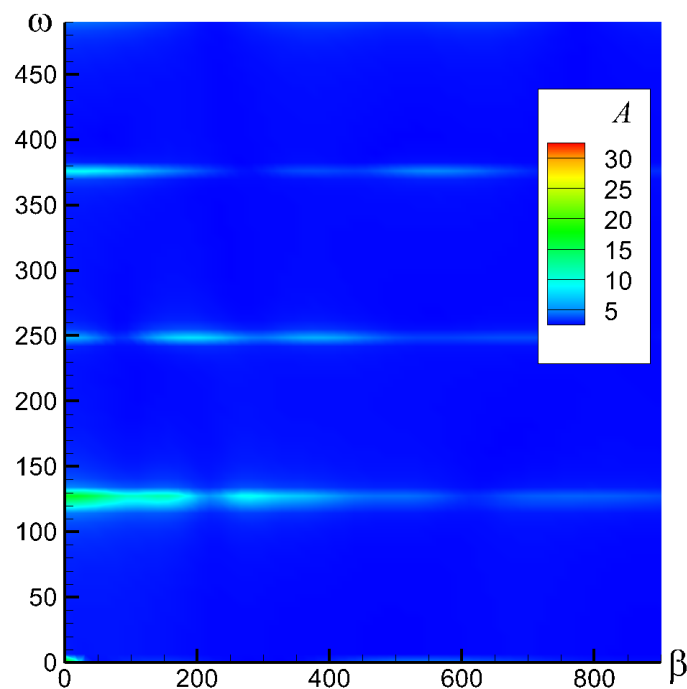
$$\omega_0 = 125$$

$$\beta_0 \approx 300$$

С симметрией

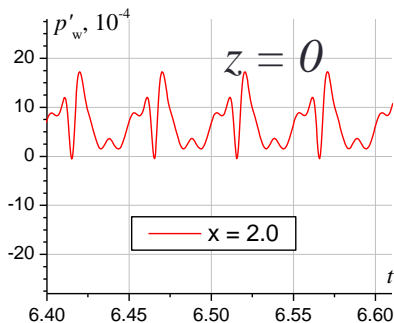
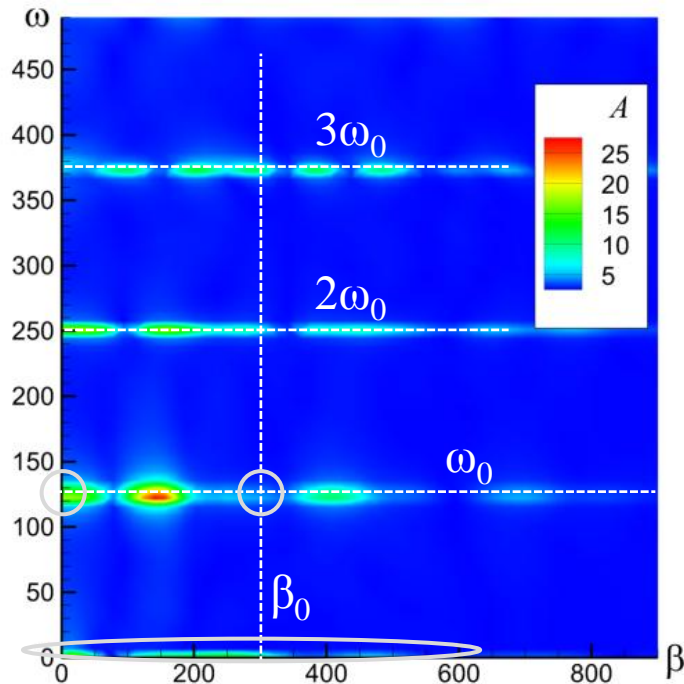


Без симметрии

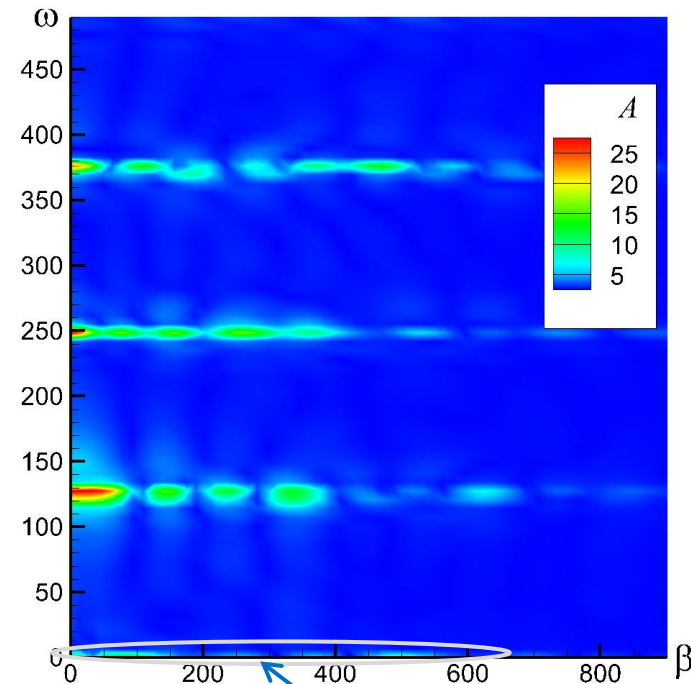


# Спектр в $x = 2.0$

С симметрией



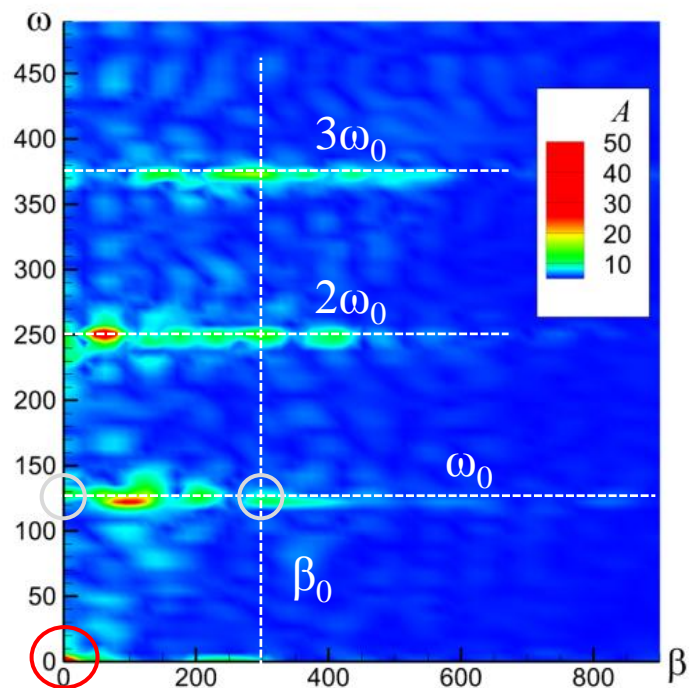
Без симметрии



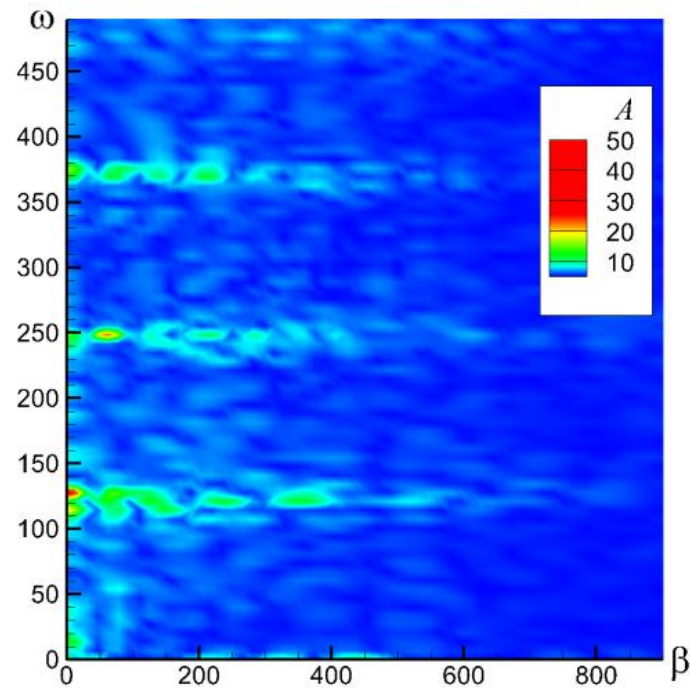
Волны нулевой частоты:  
среднее течение  
перестраивается,  
формируются продольные  
вихри (пристенные полосы)

# Спектр в $x=2.25$

С симметрией

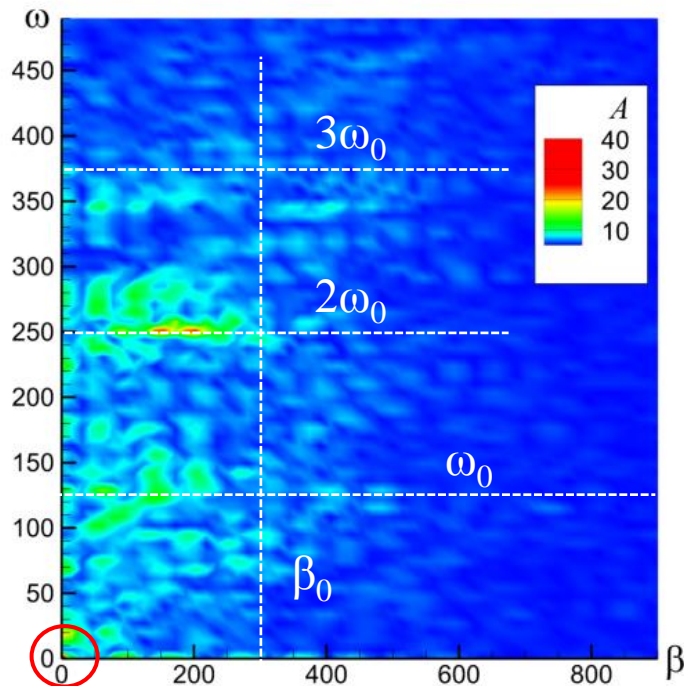


Без симметрии

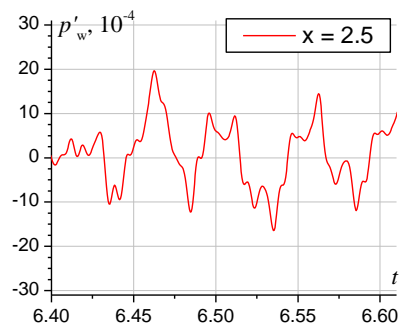
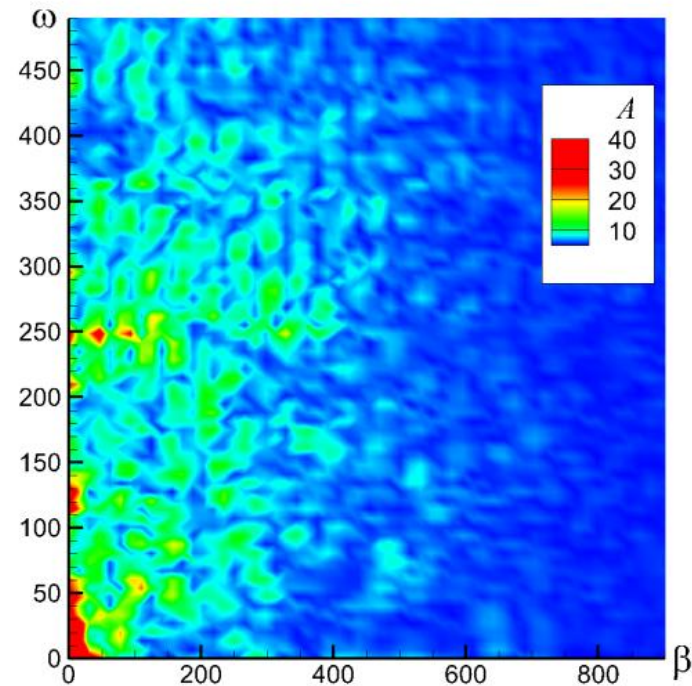


# Wave-train spectrum at $x=2.5$

С симметрией



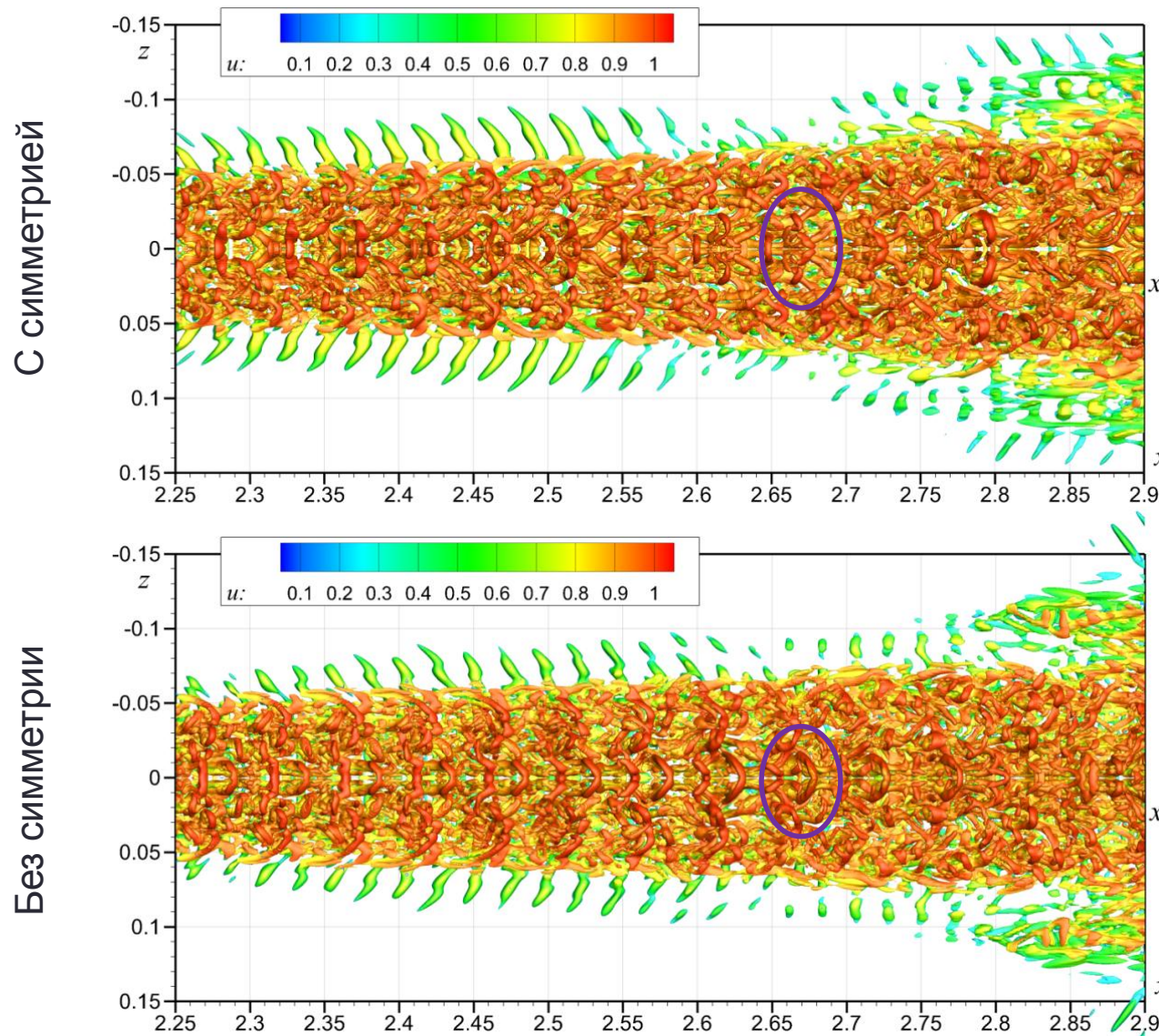
Без симметрии



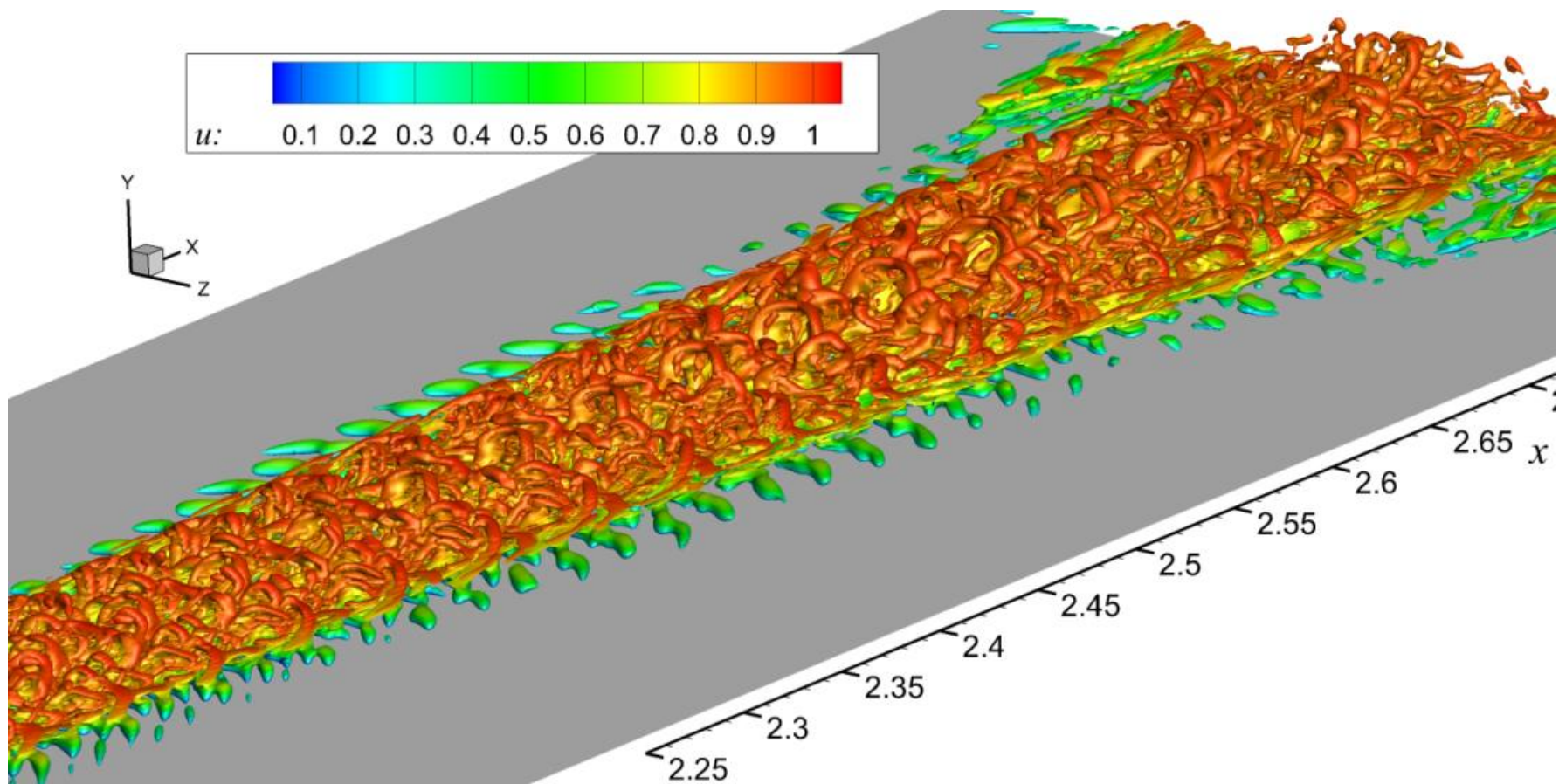
Спектр шире,  
т.е. перемешивание более  
интенсивно



# Вихревые структуры по Q-критерию



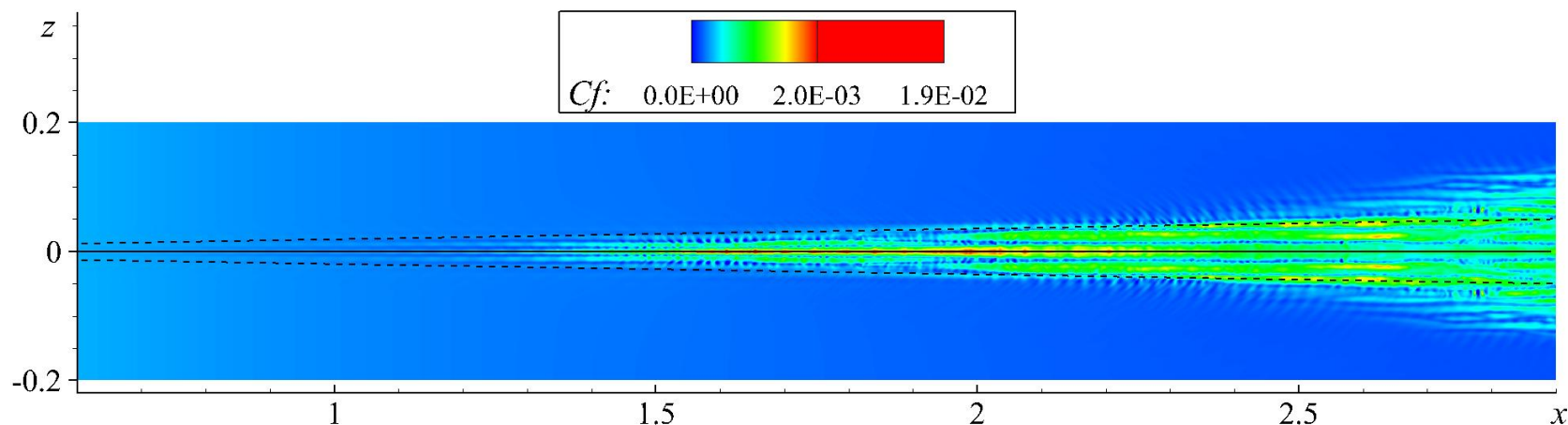
# Вихревые структуры по Q-критерию



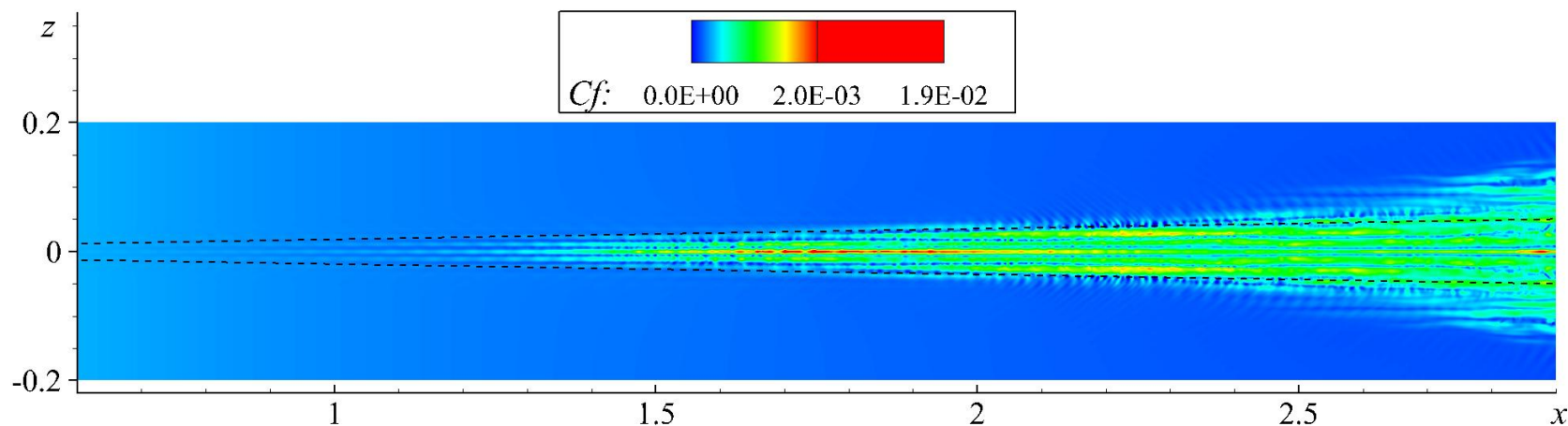


# Поверхностное трение при $t = 3.9375$

С симметрией

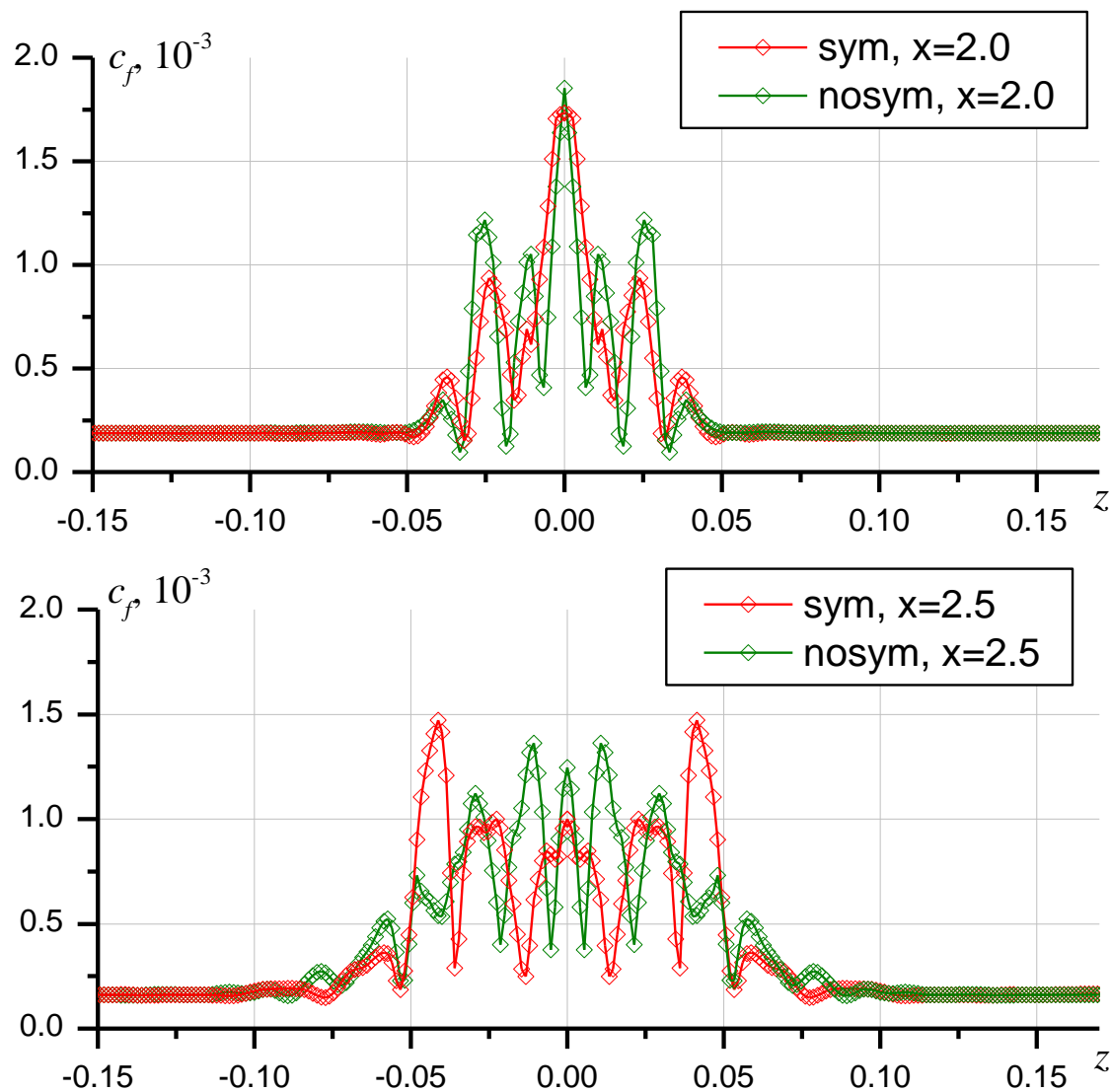


Без симметрии

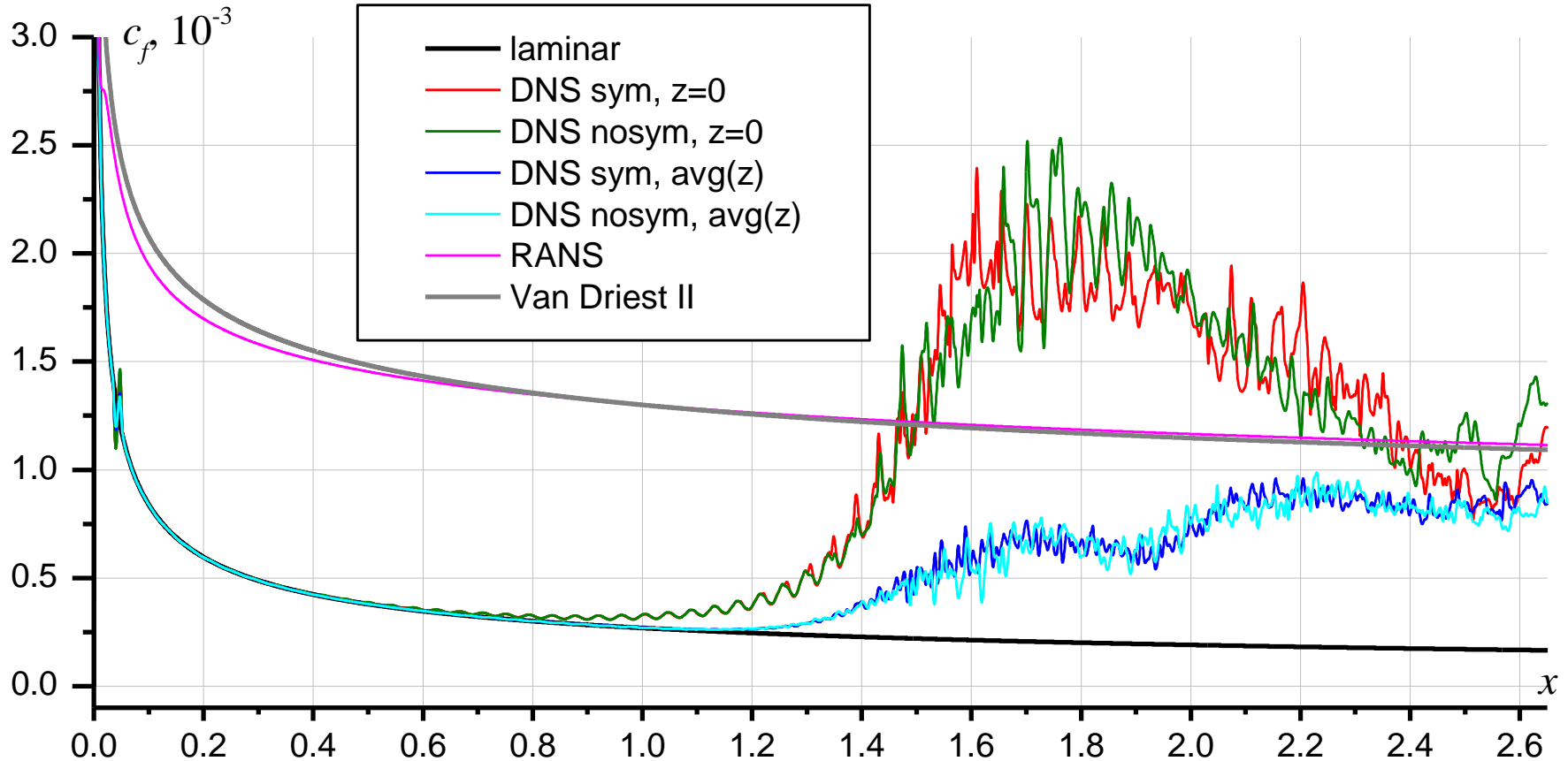


- ☐ Полосчатые структуры
- ☐  $C_f$  растёт начиная с  $x = 1.2$

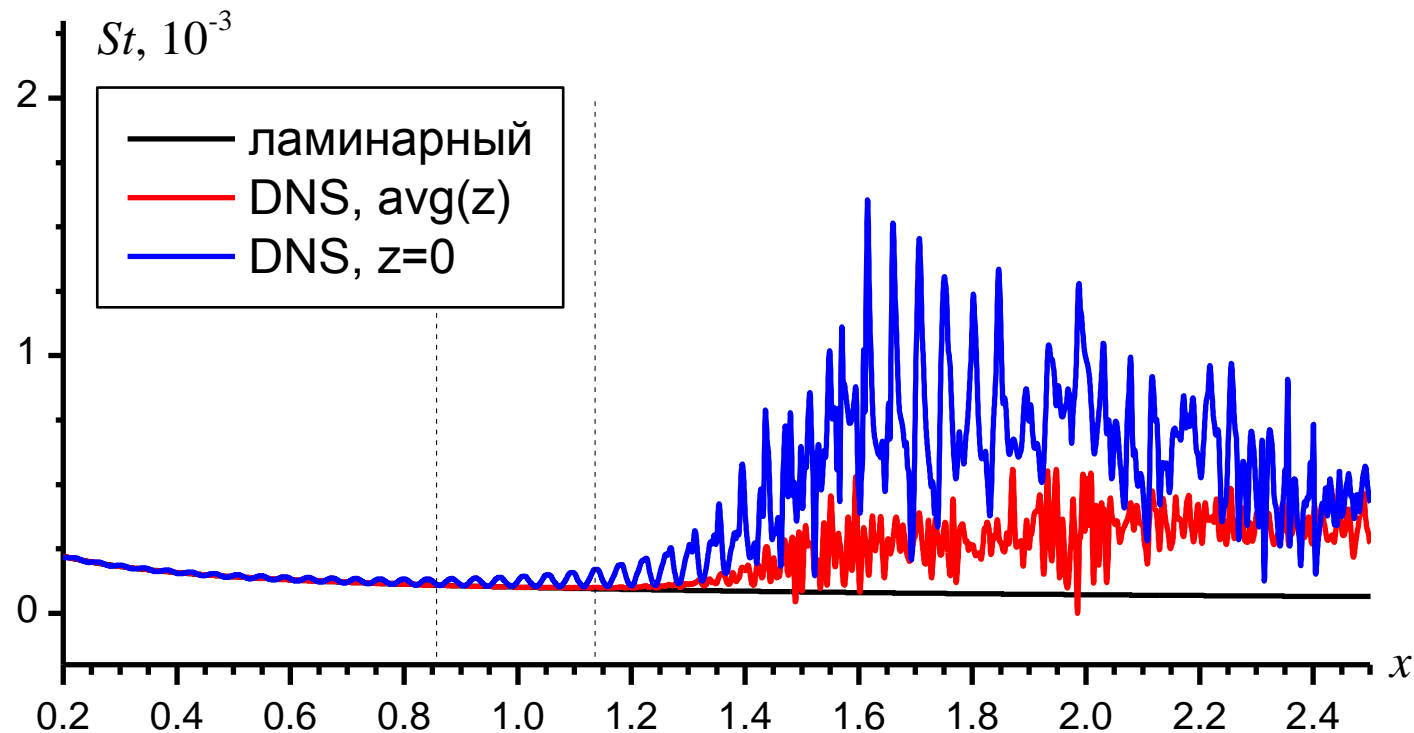
# Поверхностное трение при $t = 3.9375$



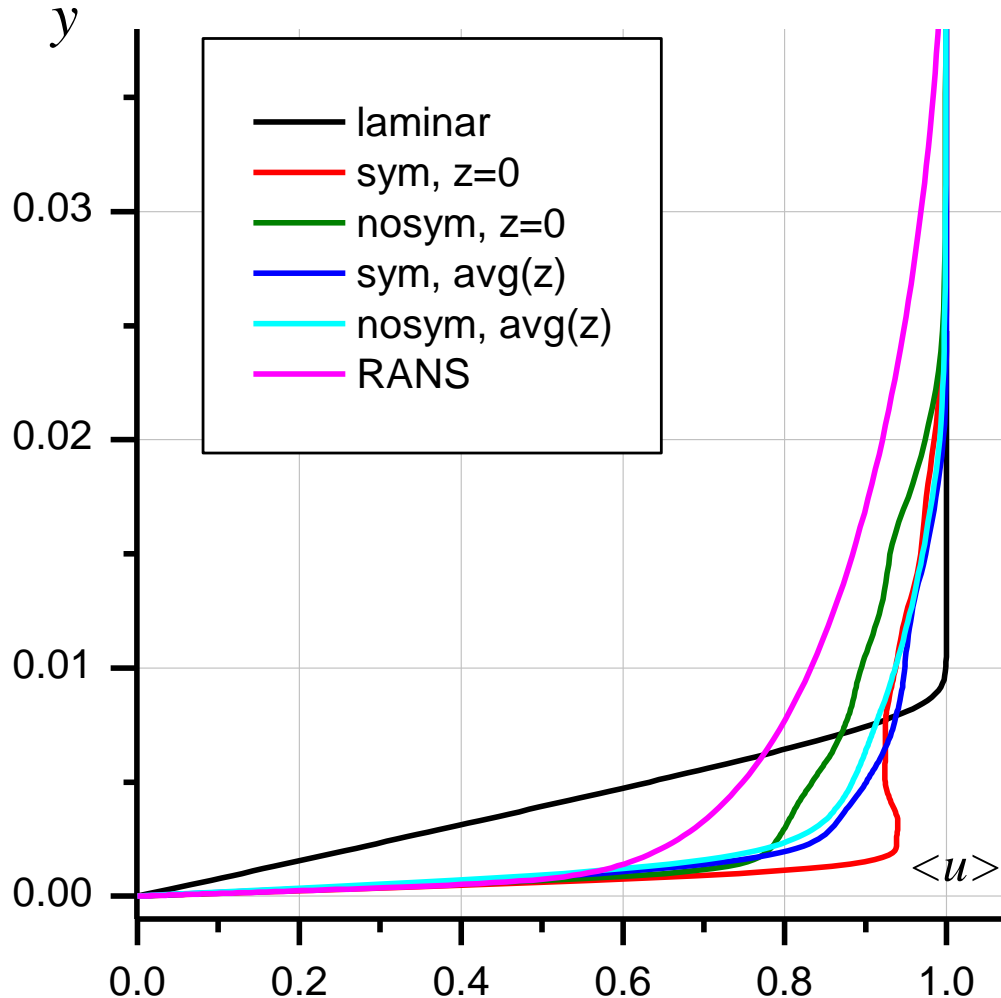
# Поверхностное трение при $t = 3.9375$



# Тепловой поток к поверхности

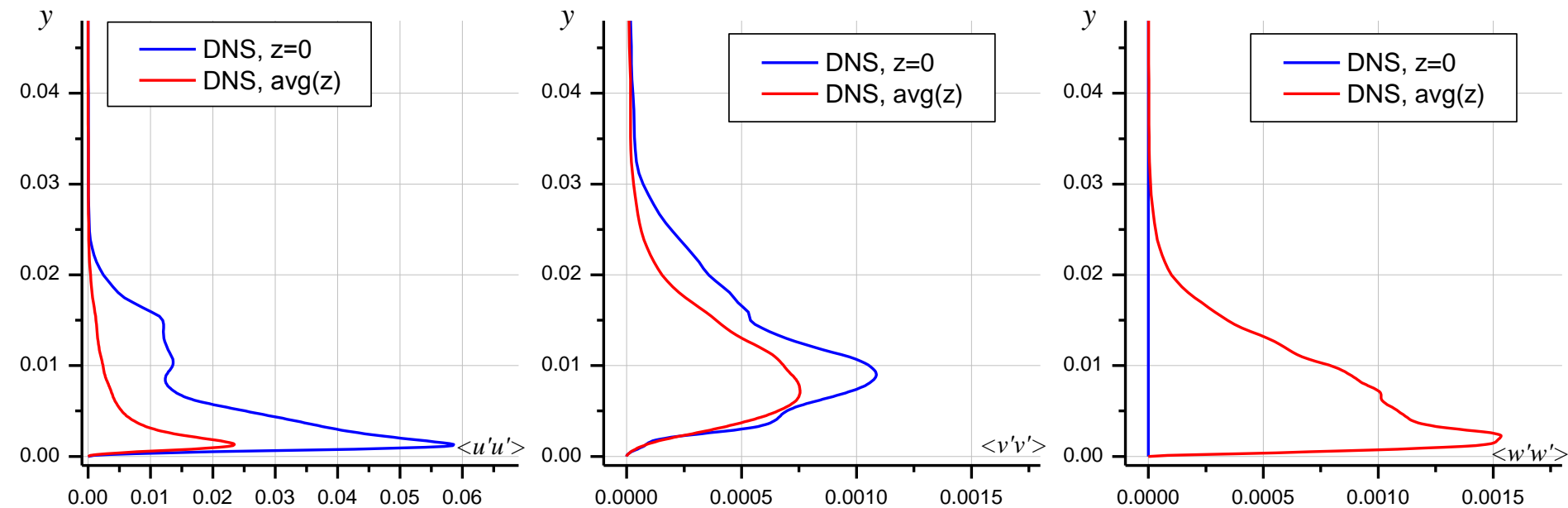


# Профили средней скорости в $x=2.5$



- ❑ Профили имеют сходство с полностью турбулентным ПС
- ❑ Количественно профили отличаются как от турбулентного, так и от ламинарного → **переходный ПС**
- ❑ Влияние ГУ симметрии локально

# Профили пульсаций при $x = 2.5$

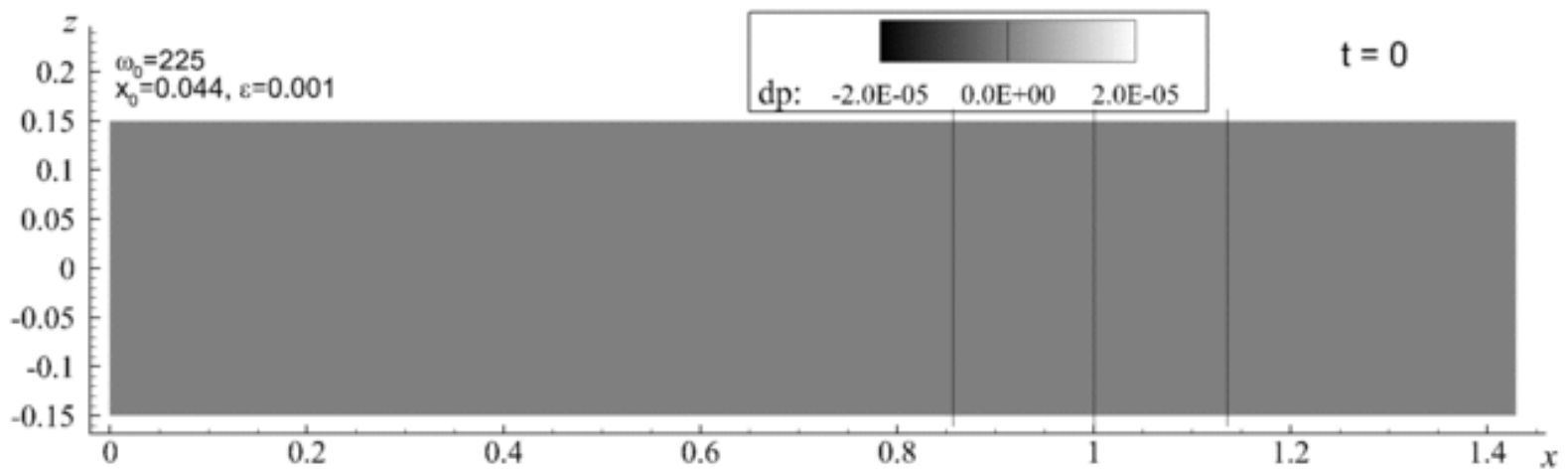
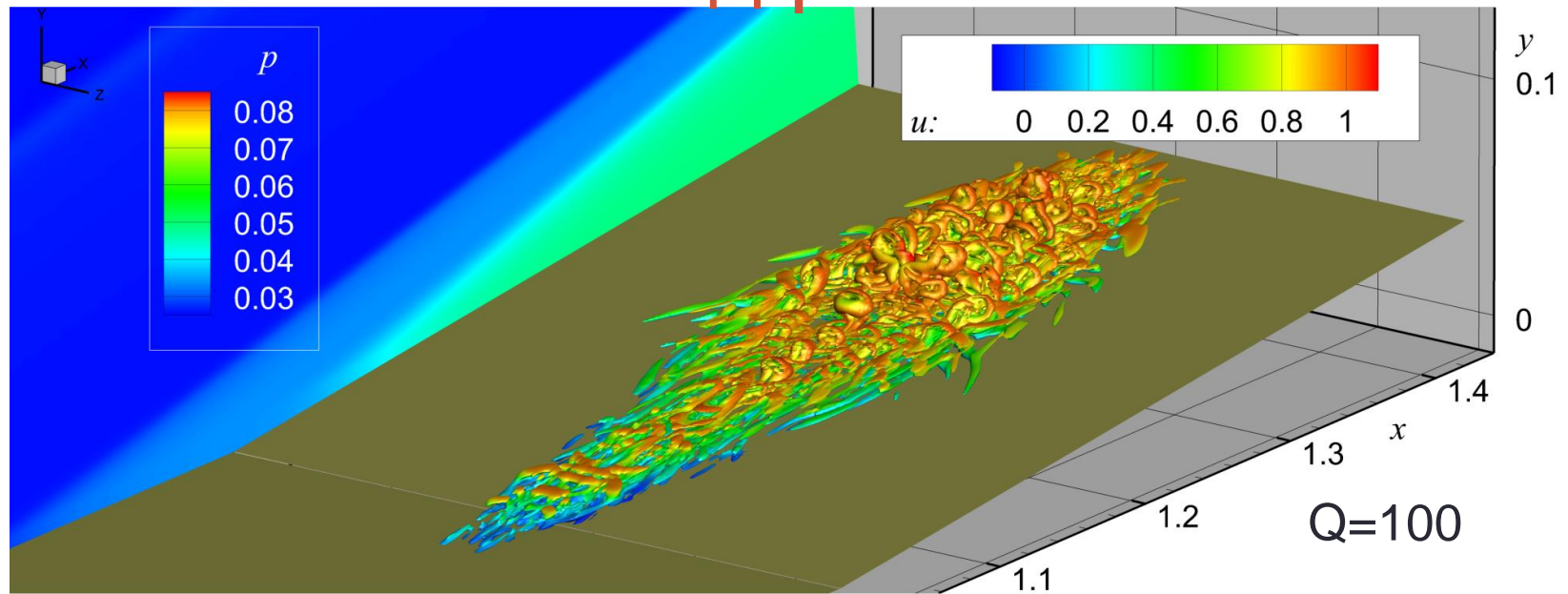


# МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУСТОЙЧИВЫХ 3D ВОЗМУЩЕНИЙ НАД РАМПОЙ

---

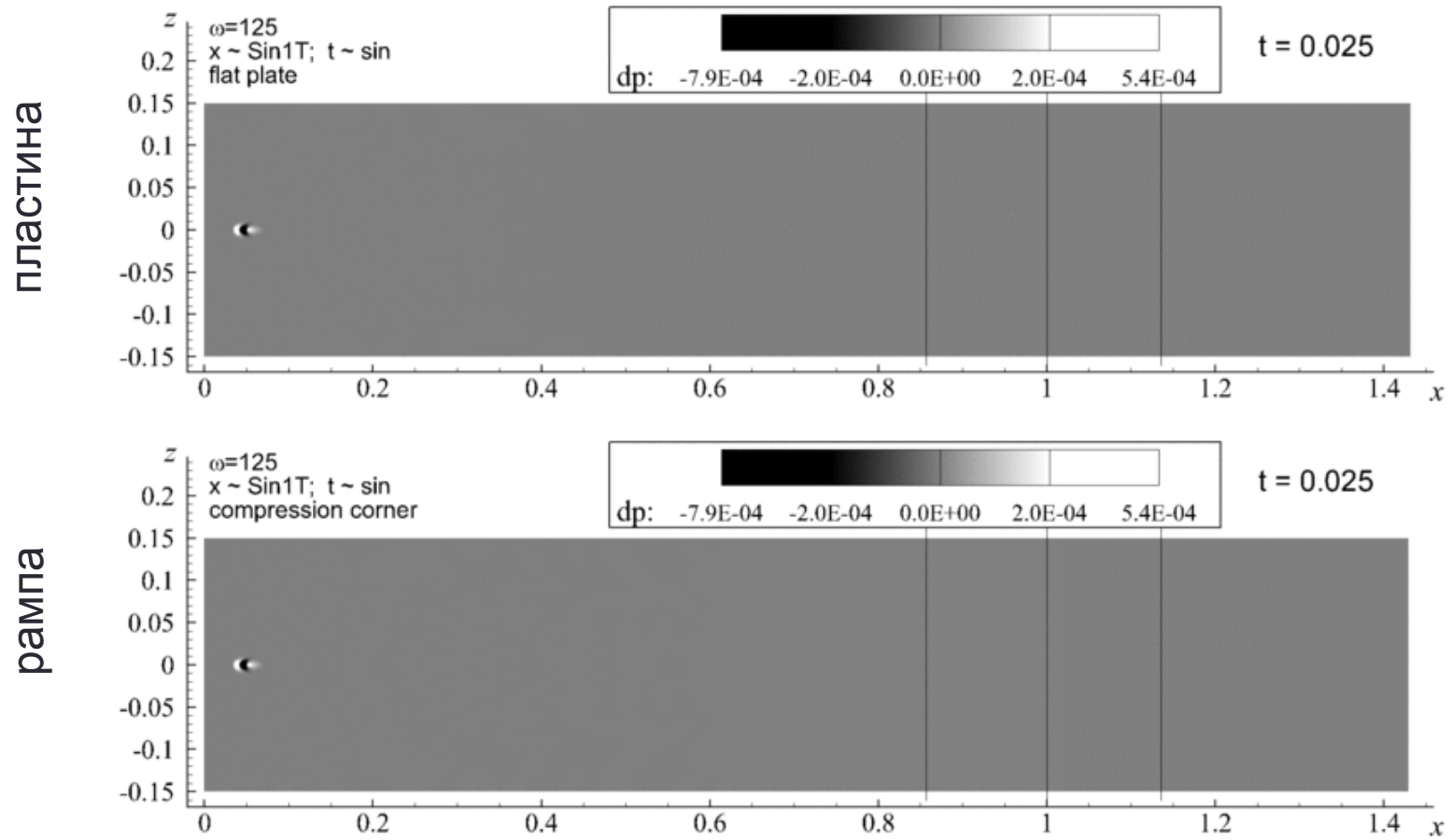
- рампа (угол сжатия)
- контролируемые начальные возмущения
- гиперзвуковой набегающий поток

# Волновой пакет над рампой



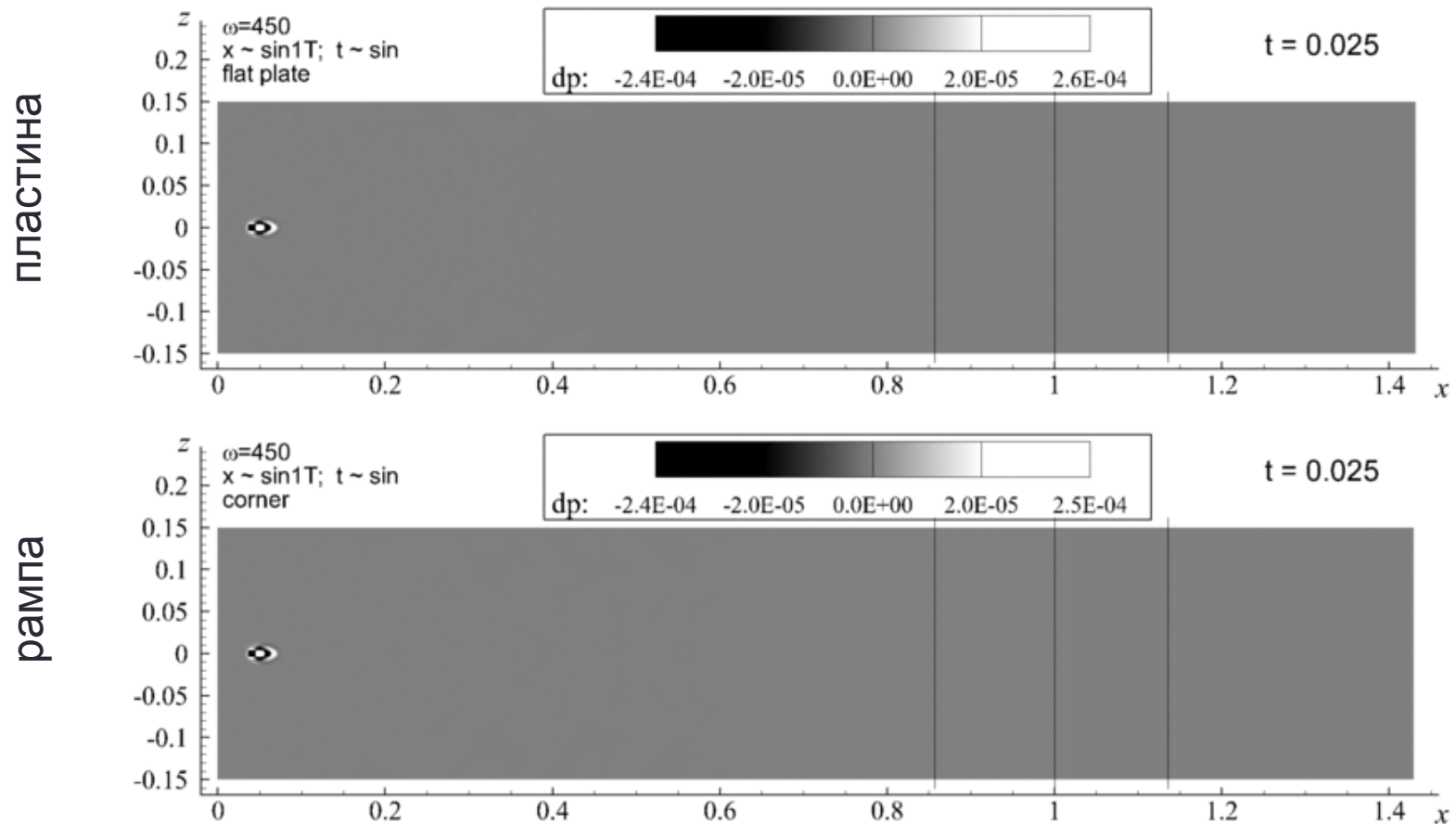


# Возмущения над рампой при 58 кГц



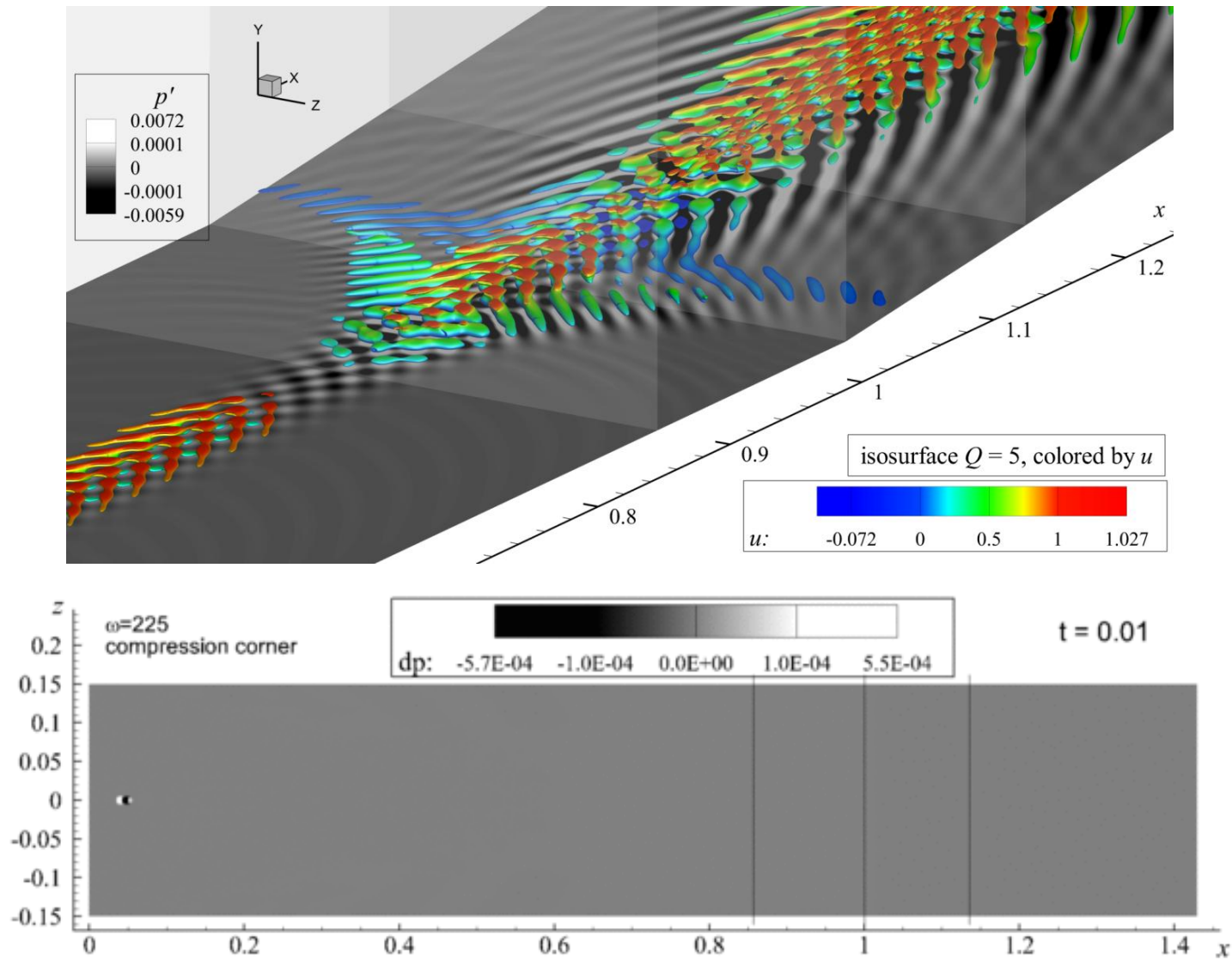
□ Доминирует 1ая мода неустойчивости

# Возмущения над рампой при 210 кГц



- ☐ В головном пакете присутствуют 1ая и 2ая моды неустойчивости
- ☐ После переходного процесса устаноятся плоские волны 2ой моды

# Возмущения над рампой при 105 кГц

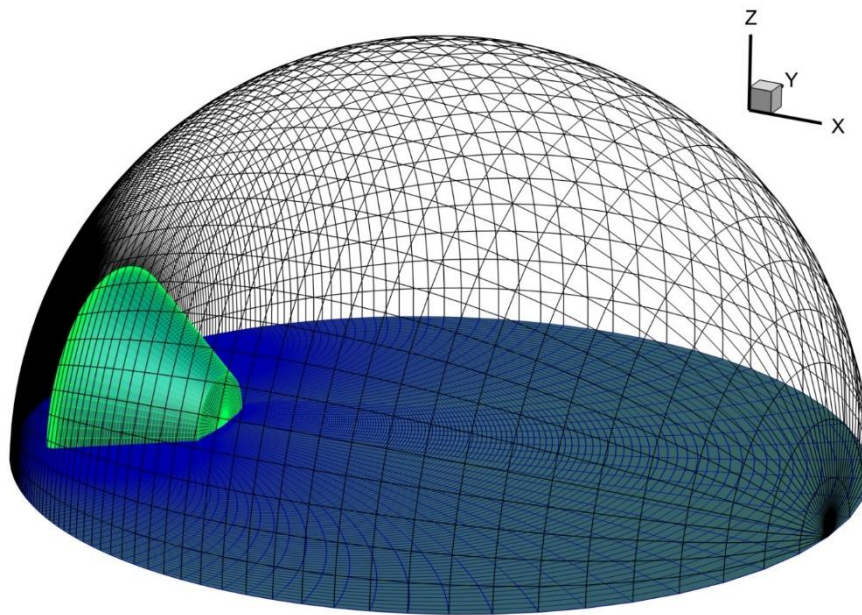


# ОБТЕКАНИЕ СПУСКАЕМОГО АППАРАТА С УЧЁТОМ ФИЗИКО- ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

---

- Спуск в атмосфере Марса
- Форма близкая к аппарату EhoMars
- Гиперзвуковой набегающий поток

# Постановка задачи



- ❑ Форма аппарата ExoMars-2018  
Европейско-Российского проекта
- ❑ Сетка 3.2 млн ячеек

- ❑ 3D уравнения Навье-Стокса для вязкой сжимаемой смеси газов
- ❑ Модель неравновесных физико-химических процессов в атмосфере Марса:
  - ❑ 8 компонент (O, N, NO, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO, C)
  - ❑ 12 реакций диссоциации и обмена
  - ❑ 1 температура

$$H = 69 \text{ км}$$

$$M_{\infty} = 29$$

$$Re_{\infty 1} = 17700$$

➤ Каталитическая поверхность:

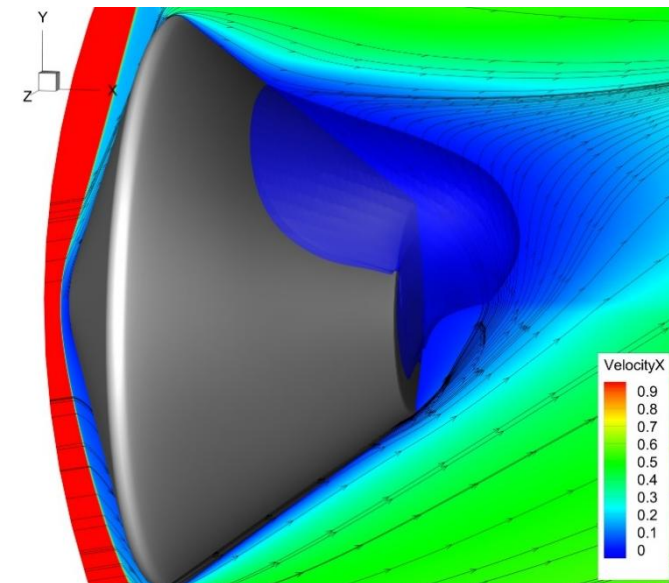
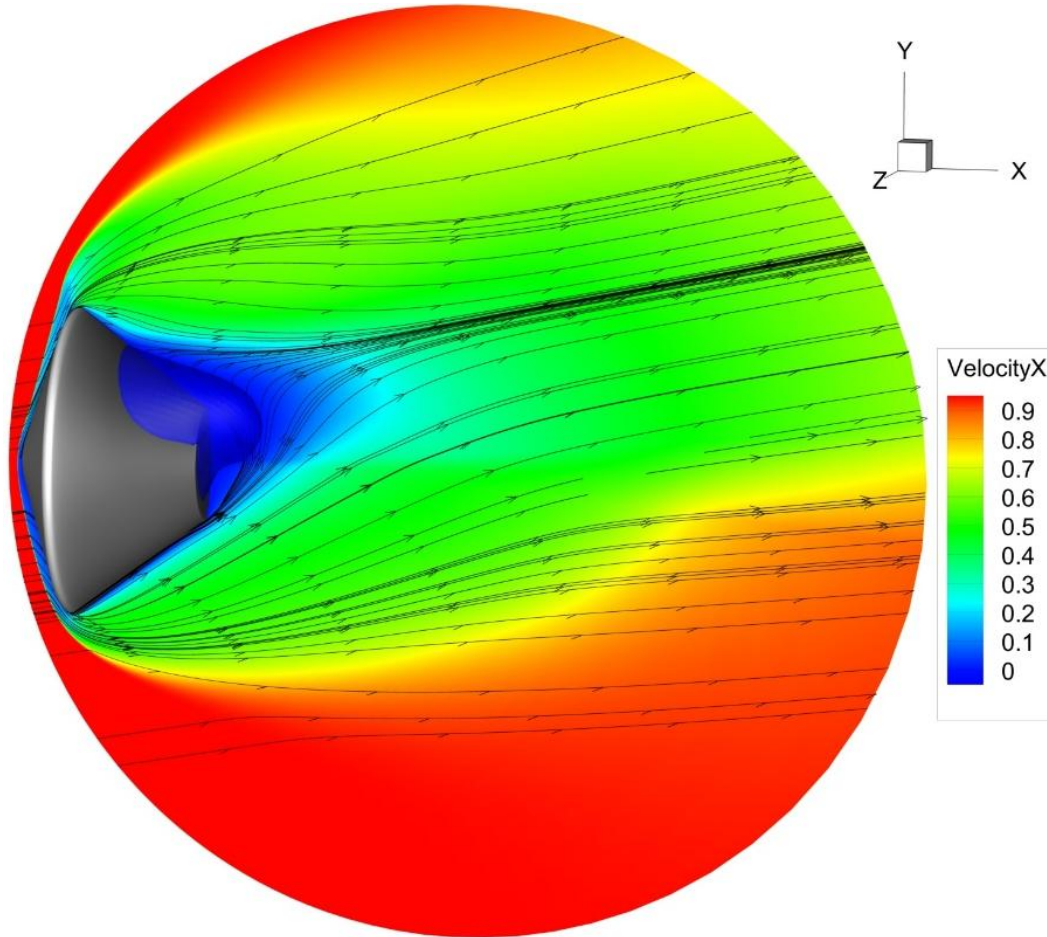
$$C_O|_w = C_N|_w = 0$$

➤ Некаталитическая поверхность:

$$\frac{\partial C_O}{\partial n}\bigg|_w = \frac{\partial C_N}{\partial n}\bigg|_w = 0$$

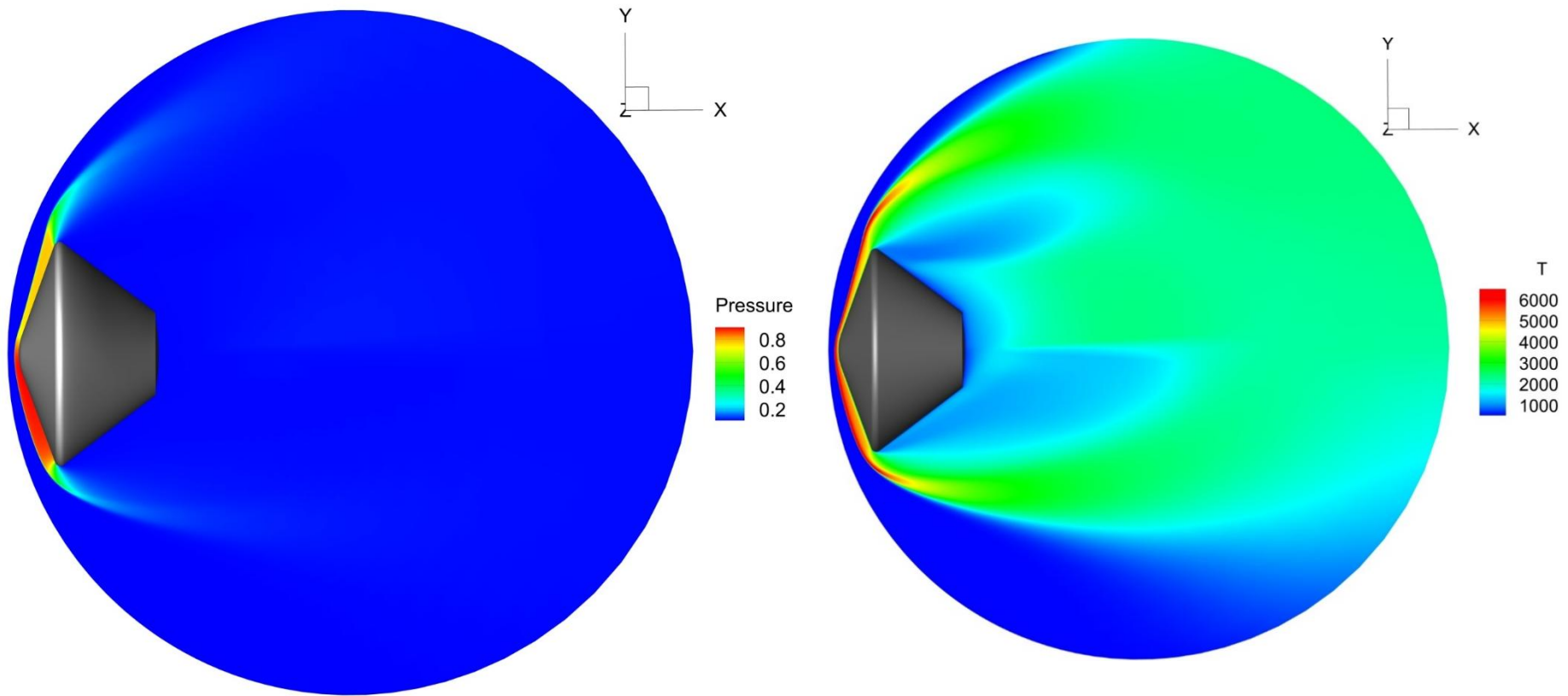
$$\frac{\partial C_{NO}}{\partial n}\bigg|_w = \frac{\partial C_{CO_2}}{\partial n}\bigg|_w = \frac{\partial C_{CO}}{\partial n}\bigg|_w = 0$$

# Продольная скорость и линии тока



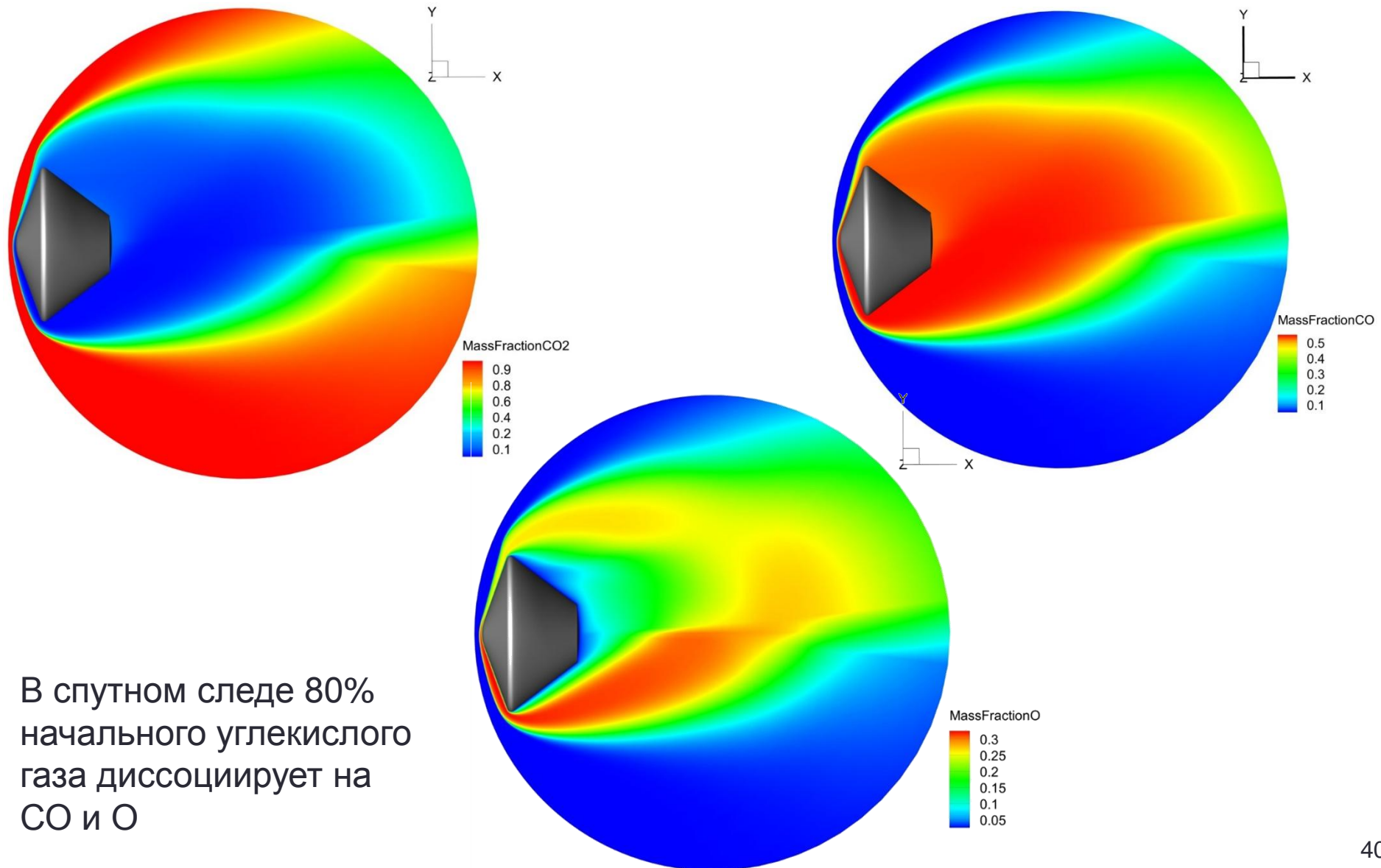


# Поле давления и температуры



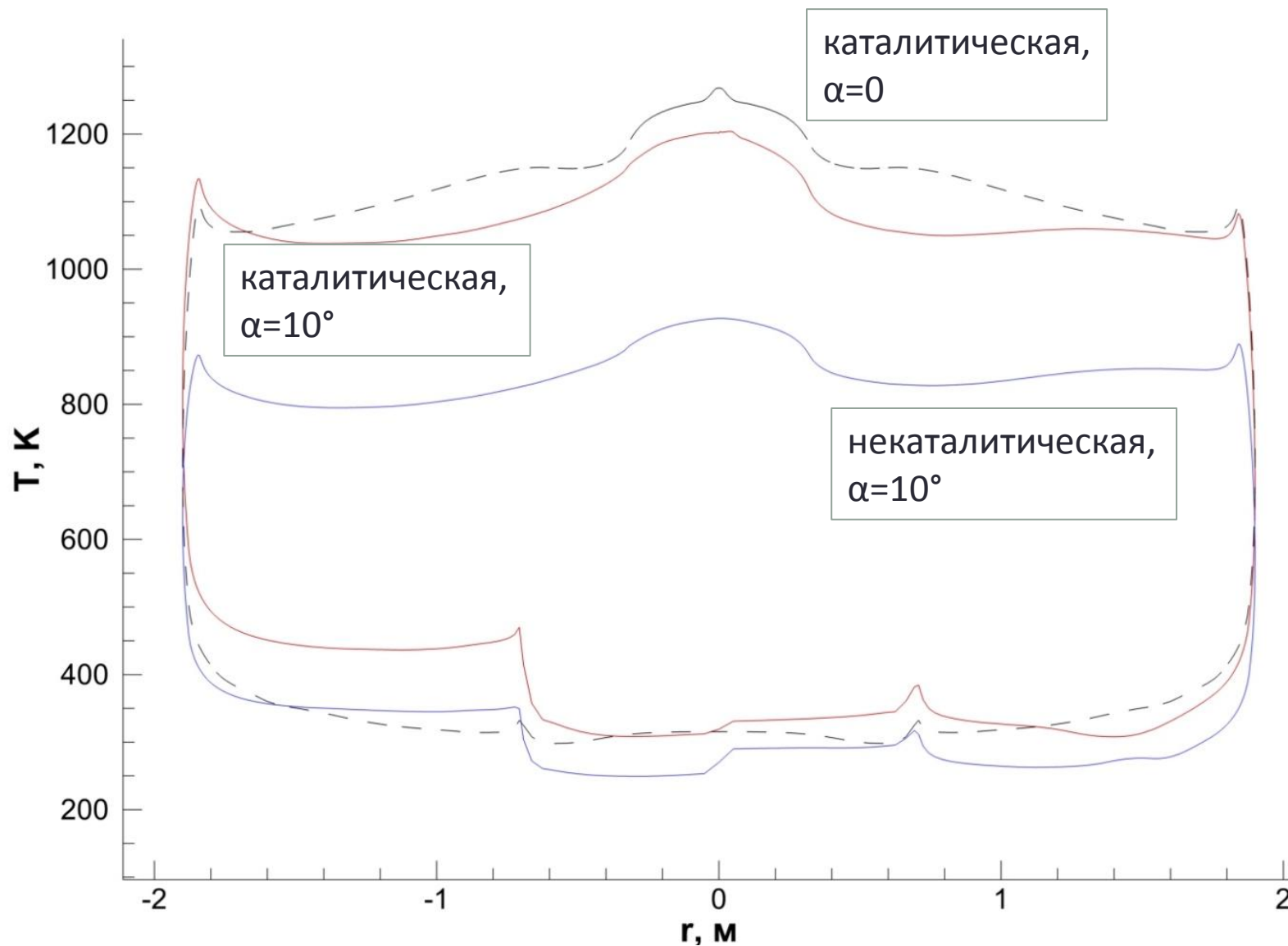


# Концентрации компонент газа



В спутном следе 80% начального углекислого газа диссоциирует на CO и O

# Температура поверхности

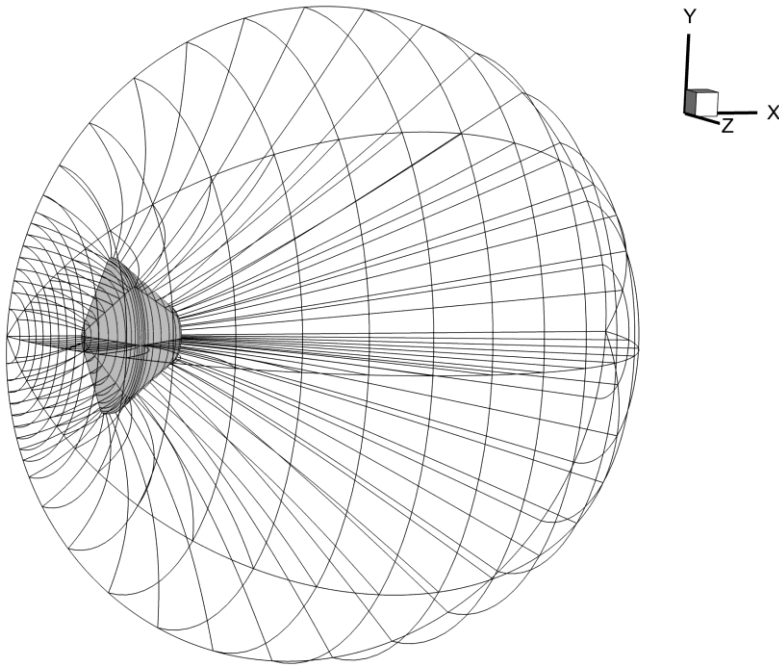


# ТУРБУЛЕНТНОЕ ОБТЕКАНИЕ СПУСКАЕМОГО АППАРАТА

---

- Форма близкая к аппарату ExoMars
- Сверхзвуковой набегающий поток

# Постановка задачи



- ❑ Форма аппарата ExoMars-2018  
Европейско-Российского проекта
- ❑ Сетка 4.3 млн ячеек

- ❑ 3D уравнения Навье-Стокса  
осреднённые по Рейнольдсу для  
вязкого сжимаемого совершенного  
газа
- ❑ Дифференциальная модель  
турбулентности  $q-\omega$  [*Marvin J.G,*  
*Coakley T.J.*, 1990]

$$\mathbf{M}_{\infty} = 1.7, 2.027, 2.5$$

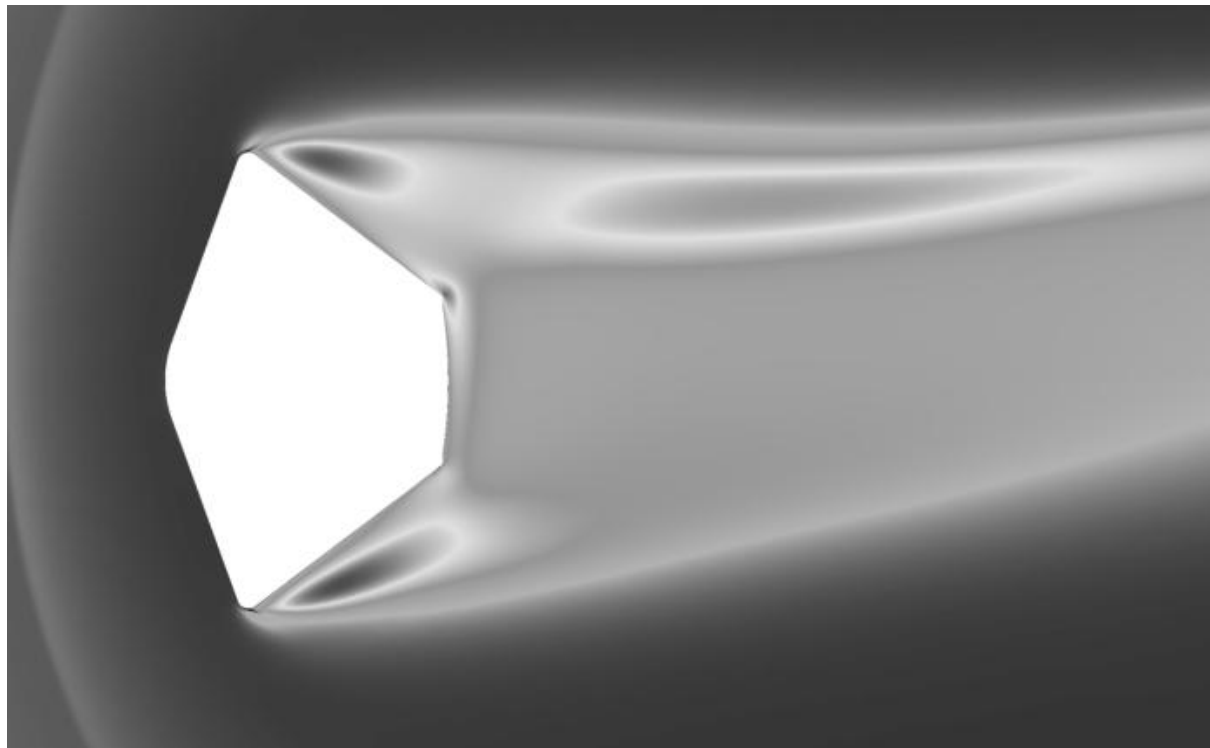
$$\mathbf{Re}_{\infty 1} = 4.1 \times 10^6 \text{ м}^{-1}$$

$$T_{\infty} = 217 \text{ K}$$

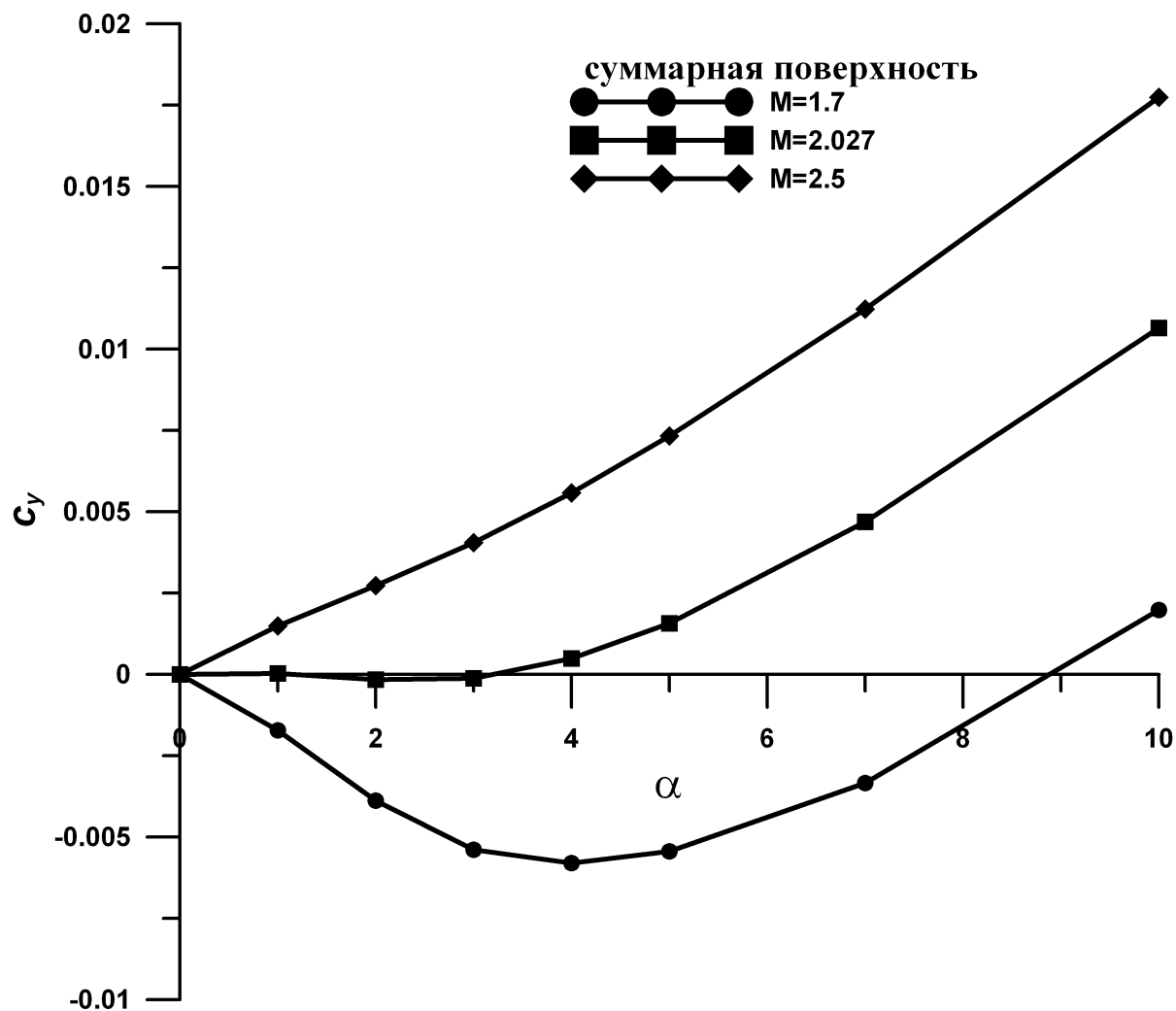
$$T_w = 300 \text{ K}$$

$$\gamma = 1.4; \text{Pr} = 0.72$$

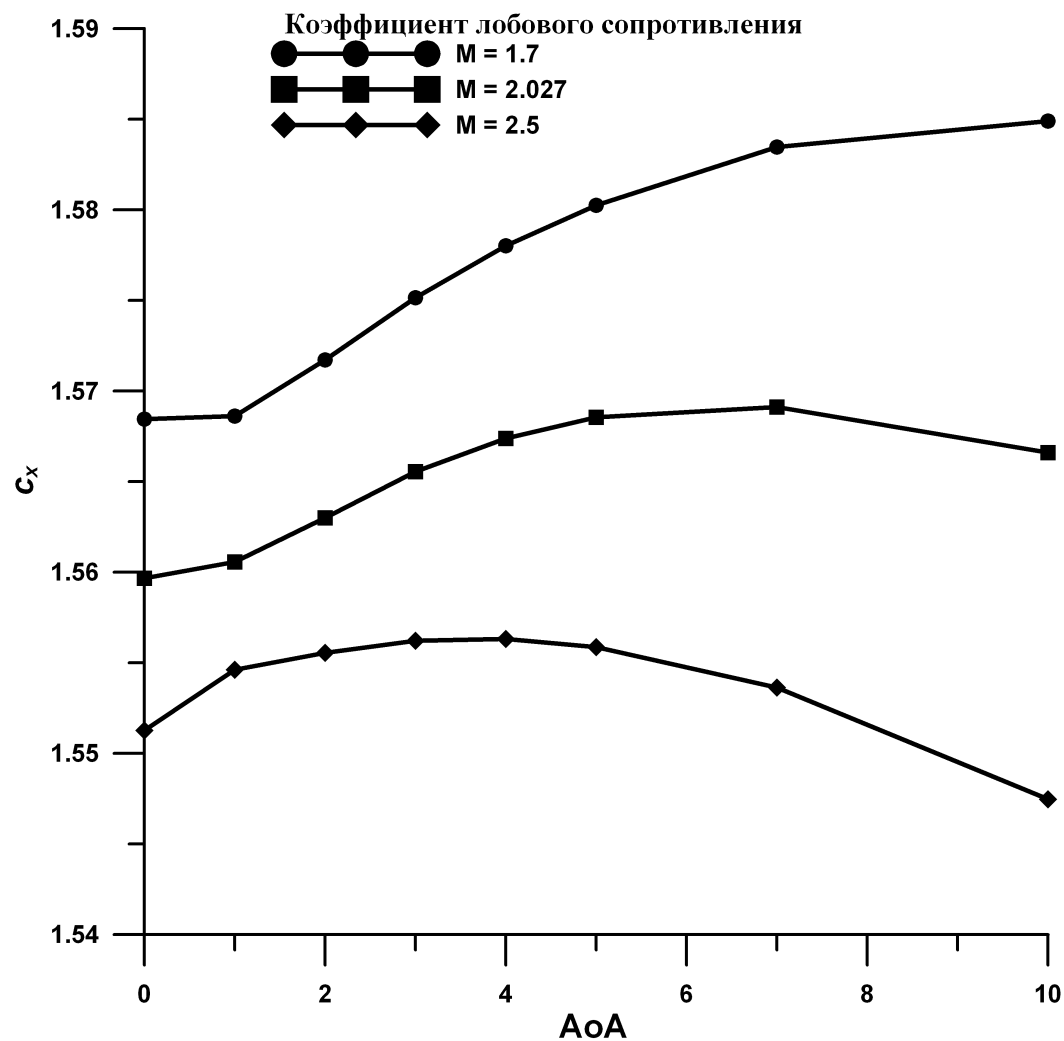
# Кинетическая энергия турбулентных пульсаций



# Коэффициент подъёмной силы



# Коэффициент сопротивления





# Заключение

- ❑ В HSFlow реализована модель неравновесных физико-химических процессов для атмосферы Земли (5 реакций) и Марса (12 реакций). Обеспечена работа с сетками от полумиллиарда узлов.
- ❑ В рамках фундаментальных исследований выполнено прямое численное моделирование начальной стадии ламинарно-турбулентного перехода в гиперзвуковом погранслое на сетке 0.5 миллиарда узлов.
- ❑ Выполнено практически значимое моделирование обтекания спускаемого аппарата ExoMars с учётом физико-химических процессов.
- ❑ Выполнено моделирование турбулентного обтекания спускаемого аппарата ExoMars.