К.Н. Волков
В.Н. Емельянов

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ЗАДАЧАХ МЕХАНИКИ ЖИДКОСТИ И ГАЗА

К.Н. Волков
В.Н. Емельянов

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ЗАДАЧАХ МЕХАНИКИ ЖИДКОСТИ И ГАЗА

УДК 532.529
ББК 22.253
В 67

Издание осуществлено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проекту 11-08-07049

Волков К. Н., Емельянов В. Н. **Вычислительные технологии в задачах механики жидкости и газа.** — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. — 468 с. — ISBN 978-5-9221-1438-7.

Разрабатываются методы и алгоритмы решения задач механики жидкости и газа, а также соответствующие программные средства и технологии, обсуждаются методы ускорения расчетов с помощью параллелизации и векторизации вычислений. Даются рекомендации по программированию и интерпретации получаемой информации, графической и статистической обработке результатов расчетов. Приводятся результаты расчетов турбулентных течений и теплообмена в инженерных приложениях.

Для специалистов в области механики жидкости и газа, вычислительной газовой динамики, вычислительной математики, теплофизики, аэрокосмической техники и энергомашиностроения, а также для студентов старших курсов и аспирантов соответствующих специальностей.

ISBN 978-5-9221-1438-7

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие

Несмотря на интенсивное развитие вычислительной техники и успехи, достигнутые в области построения численных методов, разработке соответствующего математического и программного обеспечения, включая параллельные вычислительные технологии, методы декомпозиции расчетной области и методы балансировки нагрузки процессоров, проблема моделирования течений жидкости и газа и теплообмена в технических и технологических приложениях остается одной из наиболее сложных и важных.

Развитие информационных технологий, предназначенных для численного решения задач газодинамики и теплообмена, тесно связано с прогрессом вычислительной техники и развитием пакетов прикладных программ. К настоящему времени накоплен обширный фонд вычислительных алгоритмов, предназначенных для численного моделирования течений жидкости и газа, описываемых уравнениями Эйлера и Навье–Стокса. Широкое распространение получили многочисленные программные продукты, в том числе коммерческие.

Коммерческие пакеты представляют собой сложные многокомпонентные системы, имеющие трехступенчатую структуру: сеточный генератор, расчетный модуль, графический интерпретатор результатов. В пакеты включаются широкие наборы математических моделей управляющих физических процессов, конечно-разностных схем, методов решения систем разностных уравнений, из элементов которых конструируется решение той или иной задачи. Многие пакеты допускают эксплуатацию не только на персональных компьютерах и рабочих станциях, но и на многопроцессорных вычислительных системах. Широкое распространение вычислительных пакетов создает иллюзию того, что они позволяют решить любые задачи. Однако используемые в них наборы математических моделей и конечно-разностных схем далеки от совершенства, поскольку научные изыскания по ним не закончены.

В создании пакетов наблюдается стремление к охвату всего многообразия моделей, причем математическая сторона вопроса доминирует над здравым физическим смыслом. Современное состояние науки не способно ответить на ряд важных вопросов о приемлемости некоторых моделей, взятых по отдельности или в сочетании.

Тематика монографии связана с разработкой и эффективной реализацией математического и программного обеспечения, предназначенного для моделирования турбулентных течений и конвективного теплообмена в технических и технологических приложениях на современных многопроцессорных вычислительных системах в рамках объектно-ориентированного подхода к построению твердотельной, сеточной и вычислительной моделей, обобщение и анализ результатов расчетов течений и теплообмена в компонентах технических устройств различного назначения.

Систематизация и обобщение полученных результатов позволяет выделить ряд проблем, решение которых имеет важное значение для развития методов численного моделирования течений газообразных и жидких сред и конвективного теплообмена в инженерных приложениях.

Монография состоит из Введения, 5 глав, Заключения, приложений и списка литературы. Книга разбита на главы, разделы и подразделы. Формулы, рисунки и таблицы нумеруются внутри каждой главы (указывается номер главы и порядковый номер).

Во Введении излагаются вопросы, связанные с принципами построения математических моделей течения жидких и газообразных сред, их программной реализацией и внедрением расчетных методов в инженерную практику.

В главе 1 рассматриваются вопросы разработки программного обеспечения, предназначенного для численного моделирования течений вязкого сжимаемого газа или вязкой несжимаемой жидкости, описываемых уравнениями Эйлера или Навье–Стокса. Формулируется ряд требований к вычислительной процедуре, претендующей на расчет нестационарных течений в сложных пространственных областях, а также приводится ее системное и функциональное наполнение. Основные концептуальные положения, принятые при реализации программного кода, иллюстрируются парадигмами объектно-ориентированного программирования. Обсуждаются инструментальный характер разработанных программных средств, структура организации классов и их практическая реализация. Определяются основные объекты и классы для данной проблемной области, их свойства и механизмы взаимодействия друг с другом.

В главе 2 приводятся особенности дискретизации уравнений Эйлера и Навье–Стокса, описывающих нестационарные двух- и трехмерные течения жидкости и газа на неструктурированных сетках при помощи метода конечных объемов. Обсуждаются особенности реализации граничных условий для искомых функций и конструирования разностной сетки, а также детали дискретизации производных по времени и по пространству. Система разностных уравнений решается многосеточным методом. Для ускорения сходимости итерационного процесса при моделировании низкоскоростных течений применяется метод блочного предобусловливания. Обсуждаются структура матрицы предобусловливания для схем различного порядка и способ учета граничных условий.

В главе 3 приводится структура линейных и нелинейных конечно-разностных схем в исходных и нормализованных переменных, а также приводится структура ограничителя потока для ряда разностных схем на неравномерной сетке. Формулируются основные критерии, предъявляемые к разностных схемам, и исследуются их свойства на основе диаграммы нормализованных переменных и разностного шаблона, зависящего от локального направления потока на грани контрольного объема. Выделяются разностные схемы, удовлетворяющие условию монотонности, условию TVD и ряду дополнительных требований. Предлагается подход, позволяющий записать разностные схемы в единой форме на неструктурированной сетке с использованием диаграммы нормализованных переменных. Сравнение характеристик различных разностных схем осуществляется на примере решения ряда модельных задач газовой динамики и газодинамических процессов.

В главе 4 излагается ряд вопросов, связанных с решением задач механики жидкости и газа на многопроцессорных вычислительных системах. Обсуждаются методы геометрической декомпозиции расчетной области, методы статической и динамической балансировки нагрузки процессоров, способы распределения данных по процессорам, а также особенности параллельной реализации численных методов, применяемых для решения подзадач. Проводится тестирование программного кода и его составных частей на многопроцессорных вычислительных системах и исследуется производительность программного кода в зависимости от размера задачи и числа процессоров.

В главе 5 обсуждается применение современных вычислительных технологий для решения прикладных задач. Рассматриваются факторы, оказывающие влияние на эффективность реализации моделей и способы расширения границ их применимости. Проводится сравнение результатов численного моделирования, полученных в рамках различных моделей и подходов.

В Заключении формулируются основные выводы и некоторые направления дальнейших исследований.

В приложениях приводятся особенности линеаризации уравнений Навье–Стокса в примитивных, консервативных и симметризованных переменных.

Список литературы дается в конце книги в алфавитном порядке (сначала русскоязычные издания, затем публикации, вышедшие за рубежом на английском языке).

Разработки и результаты, приведенные в монографии, были получены авторами в Балтийском государственном техническом университете «Военмех» им. Д. Ф. Устинова (Санкт-Петербург), университете Суррея (University of Surrey, Guildford, United Kingdom) и университете Кингстона (Kingston University, London, United Kingdom).

Особую благодарность авторы выражают академику РАН А. М. Липанову за поддержку и постоянное внимание к работе. Стимулирующее влияние на издание книги оказали многочисленные обсуждения на конференциях и семинарах, а также встречи и беседы с нашими коллегами.

Полученные результаты и программные разработки использованы на кафедре плазмогазодинамики и теплотехники Балтийского государственного технического университета «Военмех» им. Д. Ф. Устинова при подготовке лабораторных практикумов по специальностям «Гидродинамика» и «Авиационная и аэрокосмическая теплотехника» (курсы «Численное моделирование в механике жидкости и газа», «Динамика вязкой жидкости», «Моделирование высокоинтенсивных процессов», «Математическое моделирование процессов в аэрокосмической технике», «Двухфазные течения»).

Авторы будут благодарны за замечания и уточнения, которые можно присылать на адрес кафедры плазмогазодинамики и теплотехники Балтийского государственного технического университета (190005, Санкт-Петербург, ул. 1-я Красноармейская, д. 1) или на электронные адреса k.volkov@kingston.ac.uk, vlademelyanov@gmail.com.

К. Н. Волков
В. Н. Емельянов

Введение

Математическое моделирование и вычислительные технологии находят широкое применение в практике инженерных исследований и промышленном конструировании. Одной из наиболее важных и сложных областей применения математического моделирования и вычислительных технологий является газовая динамика и теплообмен.

Математическое моделирование и вычислительный эксперимент

Под математической моделью понимаются основные закономерности и связи, присущие изучаемому явлению и выраженные в виде формул, уравнений, наборов правил или соглашений, записанных в математической форме. Математические модели являются одним из основных инструментов познания человеком явлений окружающего мира.

Общепринятым подходом при разработке современных технологий решений краевых задач математической физики является их замена сеточными уравнениями, обеспечивающая приближенное решение задачи. Системы сеточных уравнений решаются как прямыми, так и итерационными методами.

Методология математического моделирования, сформулированная А. А. Самарским и выраженная в виде триады модель–алгоритм–программа, получила свое развитие в виде технологии вычислительного эксперимента. Вычислительный эксперимент представляет собой одну из информационных технологий, предназначенных для изучения явлений окружающего мира, когда натурный эксперимент оказывается дорогим или сложным.

Информационные технологии, поддерживающие вычислительный эксперимент, включают в себя методы построения математических моделей силами конечных пользователей информационных систем (специалистов в своей предметной области, а не профессиональных математиков и программистов), информационную поддержку их деятельности для поиска и выбора алгоритмов и программ численного решения задачи, методы и средства контроля точности вычислений и правильности работы применяемых программных средств.

Использование вычислительного эксперимента как средства решения сложных прикладных проблем имеет в случае каждой конкретной задачи свои специфические особенности. Тем не менее, четко просматриваются общие характерные черты, позволяющие говорить о единой структуре этого процесса.

В ходе вычислительного эксперимента выявляются границы применимости математической модели, которые позволяют прогнозировать эксперимент в естественных условиях. Широкое применение компьютеров в математическом моделировании, достаточно мощная теоретическая и экспериментальная база позволяют говорить о вычислительном эксперименте как о новой технологии и методологии в научных и прикладных исследованиях.

Использование вычислительного эксперимента ограничивается теми математическими моделями, которые участвуют в проведении исследования. По этой причине вычислительный эксперимент не может полностью заменить натурный эксперимент, и выход из этого положения состоит в их разумном сочетании. В проведении сложного эксперимента используется широкий спектр математических моделей: прямые задачи, обратные задачи, оптимизированные задачи, задачи идентификации.

Вычислительные технологии

Вычислительные технологии состоят в применении математического моделирования для решения фундаментальных научных проблем и разработки технологических процессов в промышленности. В тех случаях, когда технологические процессы описываются хорошо известными математическими моделями, для их описания имеются эффективные вычислительные алгоритмы и пакеты прикладных программ. Технология вычислительного эксперимента позволяет также создавать новые программы и совершенствовать средства общения человека с компьютером.

С появлением персональных компьютеров стало возможным развитие информационной технологии вычислительного эксперимента, которая предусматривает поддержку пользовательского интерфейса и поиск нужных алгоритмов и программ с помощью персональных компьютеров. Для обеспечения предельно возможных вычислительных мощностей (разделяемые ресурсы) используется идея организации распределенных вычислений в гетерогенной сетевой среде (метакомпьютинг, сетевые grid-технологии, облачные вычисления). Расчеты, а также подготовка исходных данных и обработка результатов расчетов проводятся при помощи многопроцессорных вычислительных систем.

Основные этапы

Все этапы технологического цикла вычислительного эксперимента тесно связаны между собой и служат получению с заданной точностью за короткое время адекватного количественного описания поведения изучаемого реального объекта в тех или иных условиях. Слабость в одном звене влечет за собой слабость в остальных звеньях технологии.

В наиболее общем виде этапы вычислительного эксперимента представляются в виде последовательности технологических операций: построение и преобразование математической модели, планирование вычислительного эксперимента, построение программной реализации модели, отладка и тестирование программной реализации, проведение и документирование вычислительного эксперимента.

Для проведения крупномасштабных научных исследований используется технология, основанная на модульном представлении математических моделей, вычислительных алгоритмов, программных и технических средств. Создаются программные комплексы и проблемно-ориентированные пакеты прикладных программ многоцелевого назначения. Характерная особенность пакетов состоит в возможности их постоянного развития и расширения благодаря включению новых модулей, реализующих новые возможности.

Вычислительная газовая динамика

Задачи, связанные с расчетом течений жидкостей и газов, играют важную роль во многих научных и инженерных приложениях, включая моделирование обтекания тел, исследование эффектов генерации и поглощения шума в газотурбинных двигателях, разработку теплообменников и тепловых накопителей энергии, моделирование горения и течений с химическими реакциями, распространение загрязняющих веществ, прогнозирование погоды, моделирование экологических проблем.

Достигнутый уровень понимания природы протекающих процессов и развитие численных методов, рост мощности и снижение относительной стоимости компьютеров, доступность коммерческого программного обеспечения делают возможным внедрение в инженерную практику современного подхода к математическому моделированию течений и теплообмена вязкого сжимаемого газа, который использует средства вычислительной газовой динамики (Computational Fluid Dynamics, CFD). Вычислительная газовая динамика позволяет работать в таких областях, как гидро- и газодинамика, тепло- и массоперенос, многофазные потоки, химические реакции, горение, турбулентность, акустика, сопротивление материалов и других.

Вычислительная газовая динамика представляет собой вычислительную технологию, предназначенную для исследования процессов в области течения теплообмена газообразных и жидких сред, которая позволяет просчитать и оценить характеристики и эффективность отдельных компонентов и всей конструкции в целом без изготовления реальных образцов деталей и постановки натурного эксперимента, включая процессы и явления, сложнодоступные для натурного эксперимента. Виртуальный эксперимент позволяет провести оптимизацию технологических процессов в короткие сроки, перебирая многочисленные варианты работы и позволяя предсказать различные сценарии развития процесса при варьировании исходных данных, а также увеличивая эффективность уже разработанного процесса.

Течения жидкости или газа описываются системой уравнений, включающей в себя уравнение неразрывности, уравнение сохранения импульса, уравнение сохранения энергии и уравнение состояния. Уравнение сохранения импульса имеет различный вид в зависимости от наличия или отсутствия трения (уравнения Навье–Стокса для потоков с наличием трения или уравнения Эйлера для течений без трения). В зависимости от условий задачи, среда рассматривается как сжимаемая или несжимаемая (в этом случае уравнения упрощаются). В зависимости от особенностей решаемой задачи, уравнения Навье–Стокса или уравнения Эйлера дополняются уравнениями модели турбулентности, уравнениями химической кинетики и другими соотношениями.

С математической точки зрения уравнения Навье–Стокса являются системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных 2-го порядка, имеющих аналитическое решение лишь в очень простых случаях (течения при малых числах Рейнольдса, например, течение Пуазейля в трубе). Для широкого спектра природных и технологических процессов задача решается при помощи численных методов. Производные, стоящие в уравнениях, заменяются конечными разностями, построенными на малых пространственных и временны́х интервалах. Существуют различные методы дискретизации основных уравнений (метод конечных разностей, метод конечных объемов, метод конечных элементов и другие).

Любое применение методов CFD состоит из последовательных этапов, которые выполняются с использованием специального программного обеспечения. На этапе 1 формируется геометрия модели, формулируются необходимые физические условия, производится построение сетки, задаются начальные и граничные условия. На этапе 2 машина, подчиняясь заданному алгоритму, численно решает основные уравнения с точки зрения базовых физических параметров (скорость, давление, плотность, температура), а также записывает результаты решения в память. На этапе 3 результаты решения отображаются в виде графиков, таблиц, а также контурных и векторных схем, привязанных к исходной геометрии.

Список задач, решаемых методами CFD, постоянно расширяется. Появляются новые модели для описания физических явлений и процессов, совершенствуются численные методы, растет производительность компьютерной техники.

Использование методов CFD

Стратегическое направление развития методов проектирования изделий различного назначения состоит в создании и совершенствовании информационной поддержки жизненного цикла изделий и внедрение технологии управления жизненным циклом изделия (Product Lifecycle Management, PLM). Основной принцип технологии PLM заключается в том, что информация, возникающая на каком-либо этапе жизненного цикла изделия, сохраняется в интегрированной информационной среде и становится доступной всем участникам этого и других этапов. Разрабатывается полный сценарий жизненного цикла изделия как элемента комплекса.

Использование методов CFD при проектировании изделий позволяет не только улучшить основные показатели эффективности их работы при обеспечении приемлемой механической надежности, но и создать конструкции, практически не нуждающиеся в доработке, что сокращает период ввода изделия в эксплуатацию и повышает его конкурентоспособность. К важным вопросам относятся численная оптимизация, включение мелких деталей в расчетную модель, интеграция методов CFD с предварительными газодинамическими расчетами и программными комплексами расчета теплового и напряженно-деформированного состояния.

Существует два ключевых критерия, по которым оценивается эффективность разрабатываемых средств проектирования: качество и масштаб рассматриваемой модели и простота в использовании, степень интеграции и надежность.

Проектирование узлов и деталей осуществляется приблизительно по одной и той же схеме.

Создается эскизный проект, который начинается с изучения технического задания. Утверждается общая концепция проектируемого изделия, выбираются методы улучшения показателей его эффективности и исследуется поведение системы при работе на нерасчетных режимах. Определяются основные геометрические параметры конструкции и потенциально достижимый уровень эффективности. Дополнительными целевыми факторами являются компактность конструкции, экономичность и вес, что требует быстрой и точной оценки влияния ограничивающих факторов на этой стадии проектирования. Ошибки, допущенные на этой стадии, невозможно исправить позднее.

Ключевым средством достижения точности и скорости проектирования является полная интеграция расчетных технологий в процесс проектирования. Цель заключается не в исключении отдельных стадий проектирования, а в их ускорении.

Между процессами проектирования и расчета существует четкое разграничение. Этап проектирования состоит в определении приемлемой как с конструктивной, так и с технологической точек зрения геометрии конструкции. Расчетный этап посвящен анализу полученных результатов. Существенную трудность реализации расчетного этапа представляет большой объем информации, который требует интерпретации.

Многопроцессорные вычислительные системы

Многопроцессорные системы, объединяющие десятки и сотни процессоров, позволяют выполнить бóльшие объемы вычислений за короткое время. С их помощью возможно проведение вычислительных экспериментов, направленных на решение естественно-научных и технологических задач с высокой точностью.

Существует несколько классов многопроцессорных систем. Наиболее распространенными являются системы с общей памятью SMP (Symmetric Multi-Processing) и системы с распределенной памятью или массивно-параллельные системы MPP (Massively Parallel Processing). Системы SMP состоят из нескольких однородных процессоров и массива общей памяти. Все процессоры имеют доступ к любой точке памяти с одинаковой скоростью. Системы MPP представляют собой множество вычислительных узлов, объединенных компьютерной сетью и имеющих один или несколько процессоров и локальную память, недоступную напрямую другим узлам. Соответственно этим классам существуют технологии параллельного программирования, существенно различающиеся между собой: интерфейс прикладного программирования OpenMP и интерфейс обмена данными MPI (Message Passing Interface).

Системы с распределенной памятью, на которые ориентирована технология MPI, имеют более широкое применение, чем системы с общей памятью. Системы SMP имеют ряд ограничений, связанных с ограничениями по числу процессоров, высокой стоимостью и низким соотношением цены и производительности. Системы MPP намного превосходят по производительности системы с общей памятью. Широкое распространение MPP-систем обусловливается простотой построения малобюджетного варианта такой системы из обычного офисного компьютерного оборудования, что позволяет многим исследовательским группам иметь собственный параллельный компьютер (кластер).

Быстрый рост производительности многопроцессорных вычислительных систем привел к новому этапу развития вычислительного эксперимента, а также к проблеме перехода на многопроцессорные системы. Переход связан с адаптацией существующих алгоритмов и последовательных комплексов программ, рассчитанных на однопроцессорный режим, к параллельным вычислениям.

Одной из проблем является балансировка загрузки (обеспечение равномерной загрузки процессоров при параллельных вычислениях), а также минимизация межпроцессорного обмена данными.

Другой проблемой, которая возникает при параллельных вычислениях, является необходимость обеспечения масштабируемости алгоритма. Эффективность параллельных вычислений снижается, когда число процессоров превосходит некоторое количество, свойственное данному алгоритму или размеру задачи. Время, затрачиваемое на обмен данными, с ростом числа процессоров превышает время, затрачиваемое на вычисления. Ситуация осложняется в случае моделирования несжимаемых течений, когда возмущения из любой точки мгновенно влияют на всю расчетную область, требуя передачи информации между всеми процессорами, а не только между соседями по декомпозиции, как в случае со сжимаемыми течениями.

Современные параллельные вычислительные системы с распределенной памятью существенно различаются между собой по производительности, числу процессоров, латентности сети и другим параметрам. Системы варьируются от малобюджетных кластеров на основе офисного компьютерного оборудования до суперкомпьютеров с высокопроизводительной сетью и тысячами процессоров.

Увеличение производительности за счет параллельных вычислений существенно усложняет программирование, увеличивает время разработки программного обеспечения и требует специальных знаний. Добиться масштабируемости становится таким же важным параметром программного обеспечения, как и переносимость.

Организация программного кода

Для принятия конструкторских решений возникает необходимость создания гибких средств математического моделирования, ориентированных на конкретные объекты, с возможностью широкого варьирования их конструктивных схем.

Для описания движений газообразных и жидких сред привлекаются различные математические модели из механики, термодинамики, химии и других областей. Разнообразные математические модели требуют применения различных методов вычислительной математики, что в рамках традиционного программирования приводит к сложному и трудно модифицируемому программному коду.

Одним из подходов, обеспечивающих структурирование математической модели и упрощение ее программной реализации, является объектно-ориентированный подход, в котором реальный процесс или система представляется в виде совокупности объектов, взаимодействующих друг с другом. Выделение совокупности объектов и отношений между ними позволяет построить объектную модель газодинамического процесса и разработать на ее основе программные средства для исследования соответствующих свойств технической системы и принятия решений.

Объектно-ориентированный подход использует лучшие идеи, воплощенные в структурном подходе, и сочетает их с новыми концепциями (инкапсуляция, наследование, полиморфизм), которые позволяют оптимально организовать программный код. При создании программных средств моделирования газодинамических процессов подбираются подходящие объекты, которые относятся к различным классам, соблюдая разумную степень детализации, определяются интерфейсы классов и иерархия наследования, устанавливаются существенные отношения между классами.

Имеющиеся публикации

Многие задачи газовой динамики и теплообмена, с которыми в настоящее время приходится сталкиваться исследователям и инженерам, не поддаются аналитическому решению, и возможность их теоретического анализа состоит в получении численного решения. Математическое моделирование позволяет учесть мультидисциплинарный характер протекающих процессов, сложную геометрию конструкции, а также провести в сравнительно короткое время большое количество расчетов для выбора оптимального варианта.

Существенный вклад в развитие вычислительных технологий внесли научные группы, работающие в Институте математического моделирования РАН им. М. В. Келдыша, Институте вычислительных технологий СО РАН, Вычислительном центре им. А. А. Дородницына РАН, Санкт-Петербургском государственном политехническом университете, Центральном институте авиационного моторостроения им. П. И. Баранова, Институте теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Институте прикладной механики УрО РАН, Институте теоретической и прикладной механики СО РАН им. С. А. Христиановича и др. Среди зарубежных научных центров следует отметить Imperial College, University of Manchester, University of Cambridge (Великобритания), University of Tolouse, ONERA (Франция), Centre for Turbulence Research при University of Stanford (США). Указанные списки организаций и научных центров не претендуют на полноту и могут быть в существенной степени расширены.

Течения рабочего тела описываются уравнениями Эйлера и Навье–Сокса для несжимаемой или сжимаемой жидкости. Анализ этих уравнений, поиск способов замыкания, построение численных (в том числе, параллельных) алгоритмов их решения представлены в работах А. А. Самарского, О. М. Белоцерковского [1]), Б. Н. Четверушкина, Т. Г. Елизаровой, В. А. Гущина, В. В. Воеводина, Вл. В. Воеводина, А. М. Липанова, Ю. Ф. Кисарова, И. Г. Ключникова [2]), Е. М. Смирнова, Д. К. Зайцева [3]), И. А. Белова, С. А. Исаева [4]) и многих других. Достаточно полный обзор работ и вопросы математического моделирования турбулентных течений рассматриваются в ряде публикаций, среди

---

[1]) *Белоцерковский О. М.* Численное моделирование в механике сплошных сред. — М.: Физматлит, 1994. — 444 с.

[2]) *Липанов А. М.*, *Кисаров Ю. Ф.*, *Ключников И. Г.* Численный эксперимент в классической гидромеханике турбулентных потоков. — Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 2001. — 160 с.

[3]) *Смирнов Е. М.*, *Зайцев Д. К.* Метод конечных объемов в приложении к задачам гидрогазодинамики и теплообмена в областях сложной геометрии // Научно-технические ведомости СПбГТУ. 2004. № 2. С. 70–81.

[4]) *Белов И. А.*, *Исаев С. А.* Моделирование турбулентных течений. — СПб: Изд-во БГТУ, 2001. — 108 с.

которых отметим книгу коллектива авторов, вышедшую под редакцией А. В. Ермишина и С. А. Исаева [1]), и книгу Ю. А. Быстрова, С. А. Исаева, Н. А. Кудрявцева, А. И. Леонтьева [2]).

Нельзя обойти вниманием книгу К. Флетчера [3]), переведенную на русский язык. Анализ задач проводится с позиций получения численного решения, выделяются актуальные нерешенные проблемы. Приводятся программы на Фортране, реализующие излагаемые методы. Несмотря на время, прошедшее со времени публикации этой книги, многие из задач, методов и алгоритмов остаются по-прежнему актуальными и служат основой для построения более эффективных подходов.

Книга А. А. Самарского и Ю. П. Попова [4]) посвящена систематическому изложению методов построения, исследования и реализации разностных схем для численного решения нестационарных задач газовой динамики, а также исследованию внутренних диссипативных и дисперсионных свойств разностных схем для уравнений гиперболического типа.

В книге Т. Г. Елизаровой [5]) излагаются современные математические модели и основанные на них численные методы решения задач динамики газа и жидкости. Предлагаемые разностные схемы оригинальны, обладают высокой точностью, просты в плане программной реализации и эффективны для расчетов на многопроцессорных вычислительных системах. Данные схемы позволяют проводить численное моделирование разнообразных нестационарных течений, в частности, рассчитывать дозвуковые и сверхзвуковые течения вязкого газа, микротечения и течения разреженного газа, а также течения вязкой несжимаемой жидкости.

В книге, вышедшей под редакцией А. В. Ермишина и С. А. Исаева, рассматриваются методы физического и численного моделирования применительно к задачам управления обтеканием тел. Детально представлены методические разработки по многоблочным вычислительным технологиям для расчета многосвязных двумерных ламинарных и турбулентных течений на пересекающихся разномасштабных сетках.

---

[1]) Управление обтеканием тел с вихревыми ячейками в приложении к летательным аппаратам интегральной компоновки (численное и физическое моделирование) / Под ред. А. В. Ермишина и С. А. Исаева. — М.: Изд-во МГУ, 2001. — 360 с.

[2]) Численное моделирование вихревой интенсификации теплообмена в пакетах труб / Ю. А. Быстров, С. А. Исаев, Н. А. Кудрявцев, А. И. Леонтьев. — СПб: Судостроение, 2005. — 392 с.

[3]) *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкостей. — М.: Мир, 1991. — 504 с.

[4]) *Самарский А. А.*, *Попов Ю. П.* Разностные методы решения задач газовой динамики. — М.: Наука, 1992. — 424 с.

[5]) *Елизарова Т. Г.* Математические модели и численные методы в динамике жидкости и газа. — М.: Изд-во МГУ, 2005. — 224 с.

Излагаются результаты тестовых и параметрических исследований обтекания вязкой несжимаемой жидкостью кругового цилиндра и толстого профиля, а также движения жидкости в каналах с вихревыми ячейками.

В книге Ю. А. Быстрова, С. А. Исаева, Н. А. Кудрявцева, А. И. Леонтьева представлены многоблочные вычислительные технологии, предназначенные для решения задач вихревой интенсификации теплообмена, а также результаты их верификации и численных исследований (течение в каверне с подвижной крышкой, обтекание и теплообмен кругового цилиндра, обтекание профиля).

Ряд результатов, полученных на кафедре гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного технического университета, приводится в обширной статье Е. М. Смирнова, А. И. Кириллова, В. В. Риса [1]). Для расчетов используется метод искусственной сжимаемости, заключающийся в добавлении в уравнения неразрывности и импульсов производных по псевдовремени от давления и компонент скорости.

Книга Б. М. Берковского и В. К. Полевикова [2]) посвящена методическим и практическим аспектам численного исследования конвективных процессов. Книга охватывает все стадии вычислительного эксперимента, начиная от описания математической модели и заканчивая обсуждением численных результатов. Значительное внимание уделяется построению и обоснованию разностных схем с улучшенными свойствами устойчивости и аппроксимации. Предлагаются простые алгоритмы стабилизации вычислительного процесса при больши́х числах Рэлея и корректировки сетки.

Книга С. Г. Черного, Д. В. Чиркова, В. Н. Лапина, В. А. Скороспелова, С. В. Шарова [3]) посвящена моделированию трехмерных течений в турбомашинах. Инструментом исследования является численный метод решения пространственных уравнений Эйлера и Рейнольдса для несжимаемой жидкости. Обобщается опыт численного решения этих уравнений с помощью метода конечных объемов и современных схем высокого порядка аппроксимации. Значительное внимание уделяется построению экономичных алгоритмов решения дискретных уравнений. Рассматриваются вопросы геометрической поддержки расчетов, связанные с созданием геометрических моделей элементов проточной части, построением сеток, обеспечением взаимообмена параметрами потока

---

[1]) *Смирнов Е. М., Кириллов А. И., Рис В. В.* Опыт численного анализа пространственных турбулентных течений в турбомашинах // Научно-технические ведомости СПбГТУ. 2004. № 2. С. 55–70.

[2]) *Берковский Б. М., Полевиков В. К.* Вычислительный эксперимент в конвекции. — Минск: Изд-во «Университетское», 1988. — 168 с.

[3]) *Черный С. Г., Чирков Д. В., Лапин В. Н., Скороспелов В. А., Шаров С. В.* Численное моделирование течений в турбомашинах. — Новосибирск: Наука, 2006. — 202 с.

между ними. Изучаются основные особенности течений в проточных трактах турбомашин.

Важным направлением в визуализации данных многопроцессорных вычислений является использование технологии клиент–сервер. Особенности технологий данного класса рассматриваются в книге М. В. Якобовского [1]. В качестве сервера выступает высокопроизводительная многопроцессорная система, которая обслуживает клиентов, работающих на персональных компьютерах. Сервер производит все расчеты и пересылает подготовленные данные клиентским частям общей системы, которые занимаются графическим отображением данных и передачей полученных от пользователя запросов на обработку.

Опыт применения многопроцессорных систем, наряду с открываемыми новыми перспективами, рассматриваются в обзорной статье Б. Н. Четверушкина [2]. Перечисляются требования, предъявляемые к алгоритмам, которые используются при решении задач на многопроцессорной вычислительной технике (внутренний параллелизм, равномерная загрузка процессоров, минимизация обмена информацией между процессорами во время расчета, логическая простота алгоритма, получение правильных результатов при вычислениях с высокой точностью на подробных пространственно-временны́х сетках).

Итерационные методы решения систем разностных уравнений рассматриваются в книге А. А. Самарского [3], а также в книге А. А. Самарского и Е. С. Николаева [4]. Проблема построения эффективных алгоритмов решения систем сеточных уравнений не нашла окончательного решения и для однопроцессорных вычислений. Набор алгоритмов, допускающих решение сеточных уравнений на многопроцессорных системах с распределенной памятью, является немногочисленным, хотя и здесь имеются алгоритмы, которые, несмотря на сложность предъявляемых к ним требований, таких, как минимизация обменов между процессорами и логическая простота, позволяют в ряде случаев добиваться неплохих результатов.

Параллельные итерационные методы обсуждаются в книге Б. Н. Четверушкина [5]. Обсуждается эффективность распараллеливания различных вычислительных алгоритмов и даются рекомендации по их практической реализации.

---

[1] *Якобовский М. В.* Распределенные системы и сети. — М.: Изд-во МГТУ «СТАНКИН», 2000. — 118 с.

[2] *Четверушкин Б. Н.* Высокопроизводительные многопроцессорные вычислительные системы // Вестник РАН. 2002. Т. 72, № 9. С. 786–794.

[3] *Самарский А. А.* Теория разностных схем. — М.: Наука, 1989. — 616 с.

[4] *Самарский А. А.*, *Николаев Е. С.* Решение систем сеточных уравнений. — М.: Наука, 1976. — 590 с.

[5] *Четверушкин Б. Н.* Кинетически-согласованные схемы в газовой динамике. — М.: Изд-во МГУ, 1999. — 232 с.

Книга В. В. Воеводина и Вл. В. Воеводина [1] посвящена обсуждению ключевых проблем современных параллельных вычислений. С единых позиций рассматриваются архитектуры параллельных вычислительных систем, технологии параллельного программирования, численные методы решения задач. Вместе со строгим описанием основных положений теории информационной структуры программ и алгоритмов, книга содержит богатый справочный материал, необходимый для организации эффективного решения больших задач на компьютерах с параллельной архитектурой. Широкий круг работ по параллельным вычислительным технологиям представляет в сборнике научных трудов, вышедшем под редакцией Вл. В. Воеводина [2].

В книге С. В. Востокина [3] описывается метод представления вычислительных процессов, возникающих при решении задач численного моделирования с использованием параллельных и распределенных вычислительных систем, на основе графической объектно-ориентированной модели. Приводится обзор современных приемов организации вычислений на высокопроизводительной технике и предлагается формальная спецификация вычислительной модели. Рассматривается метод построения каркасных библиотек для распараллеливания задач численного моделирования.

Среди публикаций, вышедших на английском языке, отметим книгу T. Barth [4], в которой рассматривается дискретизация уравнений Навье–Стокса на неструктурированных сетках, а также книгу J. H. Ferziger и M. Peric [5], посвященную анализу и численному исследованию большого количества прикладных задач.

Широкий круг численных методов, особенностей их реализации и инженерных приложений в различных областях техники рассмотрен в книгах К. Н. Волкова и В. Н. Емельянова. В этих книгах рассматриваются задачи, связанные с моделированием крупных вихрей внутренних турбулентных течений [6], решение задач двухфазной гидро- и газодина-

[1] *Воеводин В. В., Воеводин Вл. В.* Параллельные вычисления. — СПб.: БХВ-Петербург, 2002. — 608 с.

[2] Численные методы, параллельные вычисления и информационные технологии / Под ред. Вл. В. Воеводина. — М.: Изд-во МГУ, 2008. — 320 с.

[3] *Востокин С. В.* Графическая объектная модель параллельных процессов и ее применение в задачах численного моделирования. — Самара: Изд-во Самарского научного центра РАН, 2007. — 286 с.

[4] *Barth T. J.* Aspects of unstructured grids and finite-volume solvers for the Euler and Navier–Stokes equations // VKI Lecture Series. 1994. No. 1994-05. 152 p.

[5] *Ferziger J. H., Peric M.* Computational methods for fluid dynamics. — Springer, 2001. — 431 p.

[6] *Волков К. Н., Емельянов В. Н.* Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений. — М.: Физматлит, 2008. — 364 с.

мики [1]), приложения современных информационных и вычислительных технологий к задачам расчета течений и теплообмена в проточных частях и вращающихся кавернах газовых турбин и компрессоров [2]) и газодинамических трактах ракетных двигателей твердого топлива [3]).

Статьи по тем или иным вопросам, связанным с численным моделированием течений и теплообмена, публикуются во многих изданиях по механике жидкости и газа («Вычислительная математика и математическая физика», «Математическое моделирование», «Вычислительные методы и программирование», «Вычислительные технологии», «Теплофизика и аэромеханика», «Прикладная механика и техническая физика»). Имеются специализированные международные научные журналы, посвященные проблематике численного моделирования течений и теплообмена в различных предметных областях, а также специализированные международные научные конференции, проводимые ECCOMAS, EUROMECH, ERCOFTAC, ASME и другими организациями.

Важный этап при построении математических моделей составляют систематический обзор и обобщение имеющихся данных и результатов, критический анализ возможностей использования известных решений и полученных результатов и разработка на этой основе более правильных физических представлений, а также методических и расчетных рекомендаций.

В перечисленных книгах и изданиях практически остались не затронутыми ряд важных вопросов, связанных с объектно-ориентированным подходом к реализации вычислительных алгоритмов. Недостаточно полно оказались освещенными вопросы статической и динамической балансировки нагрузки процессоров. За рамками перечисленных публикаций остались формулировка и численная реализация математической модели на неструктурированных сетках, которые широко используются в практических расчетах, позволяя провести дискретизацию основных уравнений в расчетных областях любой формы.

В монографии излагаются оригинальные разработки и результаты, полученные авторами. Особенность предлагаемой книги состоит в том, что авторы не углубляются в теоретическое обоснование излагаемых методов. Вместе с тем, подробно описывается техника применения каждого метода, а также анализируются его положительные и отрицательные качества. Изложение подкрепляется и иллюстрируется результатами численных расчетов.

---

[1]) *Волков К. Н.*, *Емельянов В. Н.* Течения газа с частицами. — М.: Физматлит, 2008. — 598 с.

[2]) *Волков К. Н.*, *Емельянов В. Н.* Течения и теплообмен в каналах и вращающихся полостях. — М.: Физматлит, 2010. — 488 с.

[3]) *Волков К. Н.*, *Емельянов В. Н.* Газовые течения с массоподводом в каналах и трактах энергоустановок. — М.: Физматлит, 2011. — 464 с.

Глава 1
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ИХ РЕАЛИЗАЦИЯ

Течения жидкостей и газов играют ключевую роль в рабочих процессах многих технических устройств. Математические модели газодинамических процессов основаны на фундаментальных законах сохранения массы, количества движения и энергии. В модели включаются также уравнения для термодинамических величин, уравнения состояния и уравнения для тепловых потоков.

При построении математических моделей газодинамических процессов возникает необходимость определения оптимальных методов численного решения систем уравнений, способов и алгоритмов описания геометрических границ течения, степени точности, необходимой для получения достоверных результатов, возможных возмущающих факторов и их предварительной оценки. Проблема выбора методов расчета обусловлена отсутствием универсальных методов и алгоритмов, подходящих для решения любого вида задач.

Численное моделирование в газовой динамике представляет собой динамически развивающуюся отрасль, тесно связанную с прогрессом вычислительной техники и созданием пакетов прикладных программ. Развитие систем параллельной обработки данных вносит изменения в сегменты математического моделирования и порождает ряд новых проблем в методологии получения, обработки, хранения и передачи данных большого объема.

Имеется обширный фонд вычислительных алгоритмов, предназначенных для численного моделирования течений, описываемых нестационарными уравнениями Эйлера или Навье–Стокса в пространственных областях сложной конфигурации. Широкое распространение получили многочисленные коммерческие и свободно распространяемые программные продукты.

В данной главе рассматриваются вопросы разработки и формулируются требования к программному обеспечению, предназначенному для численного моделирования нестационарных пространственных течений вязкого сжимаемого газа, описываемых уравнениями Навье–Стокса, а также приводится его системное и функциональное наполнение.

Основные концептуальные положения, принятые при реализации программного кода, иллюстрируются парадигмами объектно-ориентированного программирования. Обосновывается выбор системы объектов, которые лежат в основе построения классов программного комплекса и выражают основные предметные понятия и их свойства. С каждым из выделенных понятий связывается базовый класс, а с обобщенной постановкой — проблемный класс. Базовые классы не ориентированы на конкретную область применения и носят универсальный характер. Проблемно-ориентированные классы представляют собой высокоуровневые конструкции, которые характеризуются узкой областью применения и строятся в результате обобщения группы вычислительных методов. Обсуждаются инструментальный характер разработанных программных средств, структура организации классов и их практическая реализация.

1.1. Роль математического моделирования

Развитие численных методов, совершенствование вычислительной техники и появление новых компьютерных технологий привело к формированию нового направления — математического моделирования, которое представляет собой математический метод исследования процессов, происходящих в реальном мире, и включает в себя построение математических моделей (систем уравнений), создание численных методов решения этих уравнений и их компьютерную реализацию (рис. 1.1).

Уровень понимания реального физического явления (предыстория, динамика развития, возможность прогнозирования реакций на различные возмущения) детерминирует процесс его математического моделирования, позволяет использовать подходящие физико-математические модели, конструировать вычислительные алгоритмы, создавать компьютерные программы и проводить анализ полученных решений.

Технология вычислительного эксперимента предполагает разработку физической и математической модели решаемой задачи, построение дискретной модели и ее программную реализацию, а также эксплуатацию готового программного комплекса и анализ результатов расчетов. Разработка физической модели в существенной степени зависит от доступных ресурсов вычислительной техники, а содержание дискретной модели — от архитектуры компьютеров.

Рассмотрим концепцию математического моделирования научных задач с детерминированной последовательностью ключевых этапов [94].

1. Построение физической модели.

Создание физической модели заключается в разделении общего процесса на главные, второстепенные и несущественные подпроцессы,

Рис. 1.1. Математическое моделирование

а также в определении доминирующих факторов при варьировании параметров в диапазоне их возможного изменения. Уровень сложности физической модели реального физического явления определяет дальнейшую цепочку моделирования и влияет на его результаты.

2. Построение математической модели.

В соответствии с выбранной или принятой физической моделью формируется математическая модель физического явления, под которой понимается корректная, с точки зрения формальной математики, задача. В физической модели отбрасываются параметры, оказывающие несущественное влияние на физическое явление. Формализация физической модели осуществляется с помощью известных физических законов и математического аппарата, отражая ее физические свойства уравнениями и граничными условиями.

Выписывается система уравнений (алгебраическая, дифференциальная или интегро-дифференциальная) с размерностью, соответствующей уровню модели физического процесса, проводится постановка начальных и граничных условий. Для количественного описания процесса вводятся те или иные системы координат и используются какие-либо системы единиц.

Обоснование модели связывается с математическими доказательствами ее внутренней непротиворечивости (теоремы существования и единственности решения, анализ свойств основных уравнений, построение точных и автомодельных решений и их исследование).

3. Теоретический анализ математической модели.

Проводится исследование корректности постановки и анализ единственности решения, что позволяет разрабатывать устойчивые численные методы и прогнозировать особенности решения.

4. Конструирование вычислительного алгоритма.

На основании принятой физико-математической модели создается вычислительный алгоритм (переход от непрерывного представления математической задачи к ее дискретному аналогу), ориентированный на тот или иной тип компьютерных систем.

5. Программирование.

Программная реализация состоит в эскизном проектировании, конструировании, построении и отладке программы (препроцессор, вычислительный модуль, состоящий из ряда подпрограмм для решения отдельных задач, постпроцессор), обеспечивающих расширяемость, масштабируемость и переносимость программного обеспечения. Свойство расширяемости предполагает гибкость создаваемых конструкций (дополнение программного комплекса новыми сегментами или совершенствование уже разработанных не приводит к кардинальному пересмотру и переработке модуля в целом). Масштабируемость подразумевает способность настраиваться на существующие ресурсы с их максимальным использованием. Переносимость — способность модуля к функционированию в программной и аппаратной среде с вариацией ее свойств.

6. Организация полученных данных.

При решении бóльших задач возникает проблема структурирования, представления, хранения и передачи информации. Распространение технологий параллельного счета вызывает появление новых проблем обработки информации. Используются графические системы, обеспечивающие визуализацию полученной цифровой информации. Табличная информация поддерживает графическую и позволяет провести уточнение решения, переводя его из глобального качественного и общего количественного в детально-количественное.

7. Анализ результатов.

Внутренний контроль результатов подразумевает их верификацию, включая в себя цикл экспериментов для контроля за выполнением фундаментальных законов сохранения. Контроль за точностью выполнения законов сохранения определяет степень пригодности выбранных физико-математических моделей.

Внешний контроль включает в себя сравнение полученных результатов с экспериментальными данными и результатами других алгоритмов.

8. Принятие решения.

Принимается решение о завершении или продолжении разработки. Выбирается сегмент моделирования, требующий доработки, пересмотра или изменения.

9. Завершение исследования.

Расширяется область понимания с возможностью генерации новых представлений о природе изучаемого явления. Создаются новые научные теории и на их основе реализуются прикладные разработки.

Данная схема не является простой последовательностью перечисленных действий, но обладает и обратной связью [94].

Физико-математические модели газодинамических процессов разбиваются на три группы: системы дифференциальных уравнений в частных производных, системы обыкновенных дифференциальных уравнений, системы алгебраических трансцендентных уравнений. Решение ряда задач не представляет сложности и осуществляется известными методами. Решение других задач требует разработки и реализации специализированных математических моделей и вычислительных алгоритмов.

Методы математического моделирования позволяют получать частные решения дифференциальных уравнений и не подменяют теоретические подходы, предназначенные для получения общих решений. Математическое моделирование не претендует на открытие новых физических явлений, а лишь помогает понять характеристики явления в тех или иных условиях. Результаты численного моделирования не подменяют данные физического эксперимента, а дополняют их.

Роль математического моделирования постоянно возрастает, что обусловливается снижением коммерческой стоимости вычислительной техники, включая многопроцессорные системы обработки данных, и сокращением объемов дорогостоящего натурного эксперимента за счет увеличения объемов численного моделирования.

1.2. Системное и функциональное наполнение программного обеспечения

Средства автоматизации инженерного анализа, основанные на численных методах, стали неотъемлемой частью процесса проектирования изделий различного назначения. Многие из таких разработок реализованы в виде специализированных программных комплексов (вычислительных пакетов), позволяющих проводить моделирование сложных и дорогих для натурного эксперимента процессов.

Пакеты прикладных программ, ориентированные на решение задач газовой динамики и теплообмена, включают в себя различные функциональные и системные компоненты (рис. 1.2). Функциональные компоненты связаны с формулировкой математической модели и разработкой численного алгоритма ее решения, а системные компоненты ориентированы на компьютерную реализацию вычислительного алгоритма.

Описание течений жидкости и газа на основе уравнений Эйлера (невязкая среда) или Навье–Стокса (вязкая среда) имеет богатую историю и не нуждается в детальном обосновании. В некоторых случаях

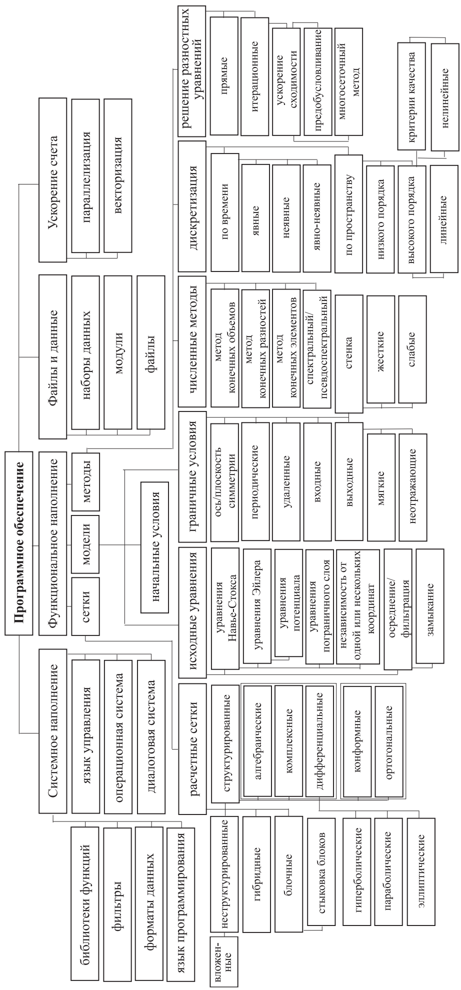

Рис. 1.2. Системное и функциональное наполнение программного обеспечения, предназначенного для решения задач механики жидкости и газа

допускается применение упрощенных или усеченных моделей, связанных с геометрическими или физическими особенностями задачи.

Разработка вычислительного алгоритма сводится к построению расчетной сетки, дискретизации основных уравнений, решению системы разностных уравнений, оценкам точности, устойчивости и сходимости численного метода. Компьютерная реализация вычислительного алгоритма подразумевает написание программного комплекса, его отладку на тестовых задачах, проведение параметрических расчетов и обработку полученных результатов с проверкой их соответствия реальному физическому процессу, а также уточнение исходной модели в случае необходимости [32].

Достаточно привлекательными выглядят перспективы численного моделирования течений жидкости и газа и со стороны совершенствования многопроцессорных вычислительных систем [6, 7, 29, 101].

1.3. Моделирование газодинамических процессов

Формулировка математической модели включает выбор системы координат, запись основных дифференциальных уравнений, постановку начальных и граничных условий. При построении модели следует учитывать геометрические (размерность задачи) и физические (модели физических процессов) факторы. Основные допущения состоят в указании размерности процесса и идеализации теплофизических свойств рабочего тела.

1.3.1. Размерность модели. Допущение о размерности течения принимается в соответствии с предварительными оценками характеристик потока. Идеализация геометрической формы расчетной области позволяет понизить размерность решаемой задачи. Правомерность использования того или иного приближения требует предварительного сопоставления результатов, полученных в рамках совокупности математических моделей для простых течений.

Нульмерные (термодинамические) модели используют допущение о возможности осреднения параметров газа по внутреннему объему расчетной области (скоростями газа и производными газодинамических параметров по пространственным координатам пренебрегается). При этом возникает также необходимость принятия допущений, конкретизирующих теплообмен со стенками (физический принцип воздействия и вклад различных составляющих теплового потока в его суммарную величину). Осреднение газодинамических параметров по объему сводит исходную задачу к интегрированию системы обыкновенных дифференциальных уравнений с соответствующими начальными условиями или системе алгебраических уравнений. Расчет скорости выполняется с использованием уравнений движения в одномерной постановке.

Применение одномерных моделей обеспечивает более точный расчет газодинамических параметров по сравнению с нульмерными моделями.

При записи уравнений газовой динамики производными по поперечным координатам пренебрегается. Единственность решения обеспечивается заданием начальных и граничных условий.

Двумерные модели применяются для описания течений в плоских и осесимметричных областях. Двумерные модели позволяют рассчитать скорости рабочего тела в осевом и радиальном направлениях, а также учесть некоторые особенности, обусловленные несимметричностью конструкции. Выделение подобластей, обладающих свойством плоской или осевой симметрии, сокращает объем вычислительной работы. Решение уравнений, записанных в приближении плоской или осевой симметрии, осложняется тем, что границы расчетной области представляют собой сложные криволинейные поверхности. Для обеспечения точности счета не ниже той, которая достигается при расчетах течений в областях с прямолинейными границами, и упрощения постановки граничных условий используется преобразование координат, приводящее криволинейную расчетную область в прямоугольную [1, 99, 104].

Промежуточным звеном при переходе от двух- к трехмерным моделям являются зонные модели, в которых допускается присутствие участков различной размерности, состыкованных друг с другом. Недостаток зонных моделей состоит в необходимости состыковки подобластей, имеющих различную топологическую структуру.

Развитие компьютерной техники делает возможным уточнение распределений газо- и термодинамических параметров трехмерных течений. Принципиальные методические трудности в формулировке моделей, описывающих пространственные течения вязкого теплопроводного газа в областях сложной геометрии, и численных схем, реализующих расчет таких течений, отсутствуют [105, 106].

Для снижения трудоемкости расчетов и требований к вычислительным ресурсам представляет интерес построение упрощенных моделей. Упрощенные подходы развиваются на основе предварительных данных о характере и свойствах течения.

1.3.2. Уровень физической сложности. Уровень сложности математических моделей изменяется в широких пределах — от простейших моделей, позволяющих получить аналитические соотношения, которые применяются в инженерных расчетах, до моделей, появление которых стимулирует прогресс вычислительной техники и ориентированных на использование современных вычислительных технологий. Получается набор математических моделей, алгоритмов и программ, подчиненных решению основной задачи и обеспечивающих эксплуатацию программного комплекса в широком диапазоне варьируемых параметров, а также реализованных совокупностью различных методик, применение которых представляется в равной степени правомерным для решаемых задач. Выполняется частичное перекрытие различных численных методик при одинаковых исходных данных, а гибкое изменение физической постановки задачи позволяет исследовать характер протекающих процессов и выяснить роль различных факторов в формировании картины течения.

Среди физических факторов, значимость которых устанавливается принимаемыми допущениями, следует отметить сжимаемость, вязкость и теплопроводность рабочего тела, эффекты турбулентного тепломассопереноса, наличие частиц конденсированной фазы и их взаимодействие между собой, взаимодействие газовой фазы со стенками.

Смесь газов рассматривается либо как единый компонент, либо моделируется совокупностью нескольких континуумов. Теплофизические свойства среды являются функциями давления, температуры, относительных массовых концентраций компонентов.

Простейшей и наиболее широко используемой на практике математической моделью является модель, в которой предполагается, что рабочее тело представляет собой идеальный газ. Течение идеального газа описывается уравнениями Эйлера.

Модели, основанные на использовании уравнений Эйлера, не учитывают вязкость и теплопроводность рабочего тела. При использовании модели идеального газа влияние вязких эффектов устанавливается с привлечением данных физического эксперимента.

Течение вязкого теплопроводного газа описывается уравнениями Навье–Стокса в сочетании с основными термодинамическими и реологическими законами. При учете физико-химических процессов газодинамические уравнения дополняются уравнениями баланса соответствующих составляющих внутренней энергии газа, уравнениями неразрывности для компонентов газовой смеси и уравнением переноса излучения.

Для турбулентного режима течения свойственна зависимость вязкости и теплопроводности от локальных характеристик потока, что усложняет решение задачи и приводит к разработке моделей турбулентности. Модели турбулентности классифицируются по числу дифференциальных уравнений, решаемых в дополнение к уравнениям Навье–Стокса (алгебраические модели, модели с одним, двумя и бóльшим числом уравнений). Большинство моделей турбулентности используют концепцию вихревой вязкости Буссинеска, которая связывает слагаемые, описывающие турбулентный перенос количества движения и энергии, с локальными градиентами физических переменных [44, 48].

Достоинство математических моделей, учитывающих в уравнениях движения эффекты вязкости, теплопроводности и турбулентного переноса, состоит в отсутствии необходимости привлечения экспериментальных данных, определяющих взаимодействие рабочего тела со стенками. При учете в моделях газовой динамики вязких и теплопроводных свойств рабочего тела не возникает необходимости в разработке дополнительных моделей для расчета тепловых потоков в направлении границ течения (они определяются решением уравнений газовой динамики с соответствующими граничными условиями).

1.3.3. Упрощенные формы записи. Течения идеального газа описываются уравнениями Эйлера, а течения вязкого газа — уравнениями Навье–Стокса. Характерной особенностью уравнений Эйлера и Навье–Стокса является их нелинейность. Несмотря на то что существующий уровень вычислительной техники позволяет использовать полную постановку начально-краевой трехмерной задачи, практическая реализация такого подхода остается трудоемкой [106].

На практике находят применение более простые математические модели, основанные на упрощении основных уравнений и позволяющие снизить требования к вычислительным ресурсам. Во многих практически важных задачах число независимых переменных уменьшается из-за специального характера движения.

В случае установившегося движения в любые моменты времени t_1 и t_2 рассматриваемого интервала времени все характеристики движения являются одинаковыми, и время перестает быть существенным параметром задачи. Все производные по времени в исходных уравнениях равняются нулю, и нет необходимости в начальных условиях.

В зависимости от размерности решаемой задачи, используется трехмерная формулировка исходных уравнений или их сокращенный вариант — свойство независимости от одной или нескольких пространственных координат.

Выбор координатных осей x, y и z таким образом, чтобы параметры потока во всех плоскостях $z = \mathrm{const}$ являлись одинаковыми, делает возможным исключение переменной z из исходных уравнений и понижение размерности задачи (плоско-параллельное течение). В случае осевой симметрии вместо координат x, y, z, t существенными аргументами искомых функций являются координаты x, r, θ, t (при отсутствии закрутки потока $\partial/\partial\theta = 0$), а в случае центральной симметрии — координаты r, t. При решении ряда задач оказывается справедливым коническое приближение уравнений Навье–Стокса, основанное на предположении о постоянстве характеристик течения вдоль лучей, проведенных из вершины обтекаемого тела (полюса конического течения).

Для безвихревых течений уравнения Эйлера сводятся к уравнению потенциала скорости [3]. Методы нелинейной теории потенциала скорости применяются для расчетов обтекания трансзвуковым и сверхзвуковым потоком тел с относительно небольшими углами наклона поверхности к набегающему потоку, когда изменение энтропии не приводит к искажению картины течения.

Находят применение методы теории пограничного слоя, основанные на разбиении области течения на невязкую зону и пограничный слой [107] (течение описывается уравнениями Прандтля). Недостатками подходов, основанных на теории пограничного слоя, являются необходимость разделения течения на области невязкого и вязкого течений, а также сращивание решений. Модель пограничного слоя неприменима для случая сильного вязко-невязкого взаимодействия [80].

Моделирование течений с преимущественным направлением развития потока (течения в пограничных слоях или струях) проводится на основе параболизованных уравнений Навье–Стокса, интегрирование которых осуществляется при помощи маршевой процедуры.

Широкий класс практически важных течений вязкого газа характеризуется малыми (по сравнению со звуковой) скоростями и значительными изменениями температуры [55] (процессы теплообмена, проточные импульсно-периодические лазеры, эпитаксиальные реакторы). Для описания таких течений используются гипозвуковые уравнения Навье–Стокса, получаемые в пределе малых значений числа Маха и параметра гидростатической сжимаемости.

Наличие набора газодинамических моделей различной степени сложности делает возможным многостороннюю верификацию численных методов, облегчая их интеграцию в общий пакет прикладных программ.

Численное моделирование на основе полных уравнений Навье–Стокса вытесняет формально более простые модели. Наблюдается переход от простых моделей к изучению реальных процессов не только в том, что касается свойств рабочего тела, в частности, вязкости и теплопроводности, но и при описании реальной и не упрощенной геометрии расчетной области [32].

1.3.4. Модель вязкой несжимаемой жидкости. Подходы к описанию течений вязкой несжимаемой жидкости основаны на использовании переменных скорость–давление (физические переменные), переменных функция тока–вихрь скорости или скорость–вихрь скорости (преобразованные переменные) [1, 99].

Постановка задачи в физических переменных позволяет сравнительно легко распространить методы расчета плоских течений на трехмерный случай. Однако уравнение неразрывности для несжимаемой жидкости содержит лишь составляющие скорости, в связи с чем нет прямой связи с давлением, которая для сжимаемых течений осуществляется через плотность. Трудности реализации подхода связаны с определением давления на стенке.

Для исключения давления вводятся функция тока и завихренность. Функция тока вводится таким образом, чтобы удовлетворить уравнению неразрывности. Давление из уравнений изменения количества движения исключается при помощи перекрестного дифференцирования, что приводит к уравнению переноса завихренности. Распределение вихря описывается уравнением, которое имеет параболический тип по времени и эллиптический тип по пространственным координатам. Уравнение переноса вихря, в котором отсутствуют вязкие члены, допускает простой интеграл (теорема Гамильтона), согласно которому $\omega/r^n = \mathrm{const}$. Вихрь во внутренних точках определяется через его значения на границе области в точке, соответствующей той же линии тока [3].

Введение функции тока и уравнения переноса вихря позволяет избежать явного использования уравнения неразрывности. Обобщение такого подхода на трехмерный случай не столь очевидно: в пространственном случае функция тока не существует, и для описания потока используются вихрь скорости и векторный потенциал [99]. Использование векторного потенциала приводит к решению на каждом временно́м слое трех параболических и трех эллиптических уравнений, что усложняет задачу [1].

При использовании переменных скорость–вихрь скорости решаются уравнение переноса вихря и уравнение неразрывности, которые замыкаются соотношениями, связывающими вихрь скорости с ее производными [43]. Дифференцирование уравнения неразрывности и соотношений, определяющих вихрь скорости, приводит к уравнениям эллиптического типа относительно составляющих скорости [79].

Трудности расчета в преобразованных переменных связаны с необходимостью определения значений вихря скорости на стенке. Физическая постановка задачи дает ясную формулировку граничных значений для составляющих скорости, а вихрь, являясь кинематической характеристикой поля скорости, этими условиями не определяется. На практике обычно используется подход, связанный с локализацией и последовательным уточнением граничных значений. Вихрь скорости на стенке находится из разложения функции тока в ряд Тейлора [1, 79], а для обеспечения устойчивости итерационного процесса используется нижняя релаксация. Другой подход основан на привлечении теоремы Стокса о циркуляции. Для обеспечения сходимости требуется больше времени, чем при решении задачи в примитивных переменных [99]. Разностные схемы, не использующие граничные условия для вихря на стенке, при прочих равных условиях обладают большей эффективностью [8].

Турбулентное течение и теплообмен вязкой несжимаемой жидкости описываются на основе системы уравнений, включающей уравнение неразрывности, уравнение изменения количества движения, уравнение изменения температуры и уравнения k–ε модели турбулентности.

Компоненты тензора турбулентных напряжений вычисляются на основе обобщенной гипотезы Колмогорова–Буссинеска. Для вычисления турбулентного теплового потока используется соотношение, записанное в форме закона Фурье.

Уравнения, описывающие течение, записываются в виде одного обобщенного уравнения переноса

$$\frac{\partial \rho\Phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(v_j\Phi) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}\right) + S_\Phi, \tag{1.1}$$

где $\Phi = \rho,\ v_i,\ T,\ k,\ \varepsilon$. Выражения для зависимой переменной Φ, коэффициента переноса Γ_Φ и источникового члена S_Φ приводят-

Таблица 1.1. Выражения для скалярной переменной, коэффициента переноса и источникового члена

Φ	ρ	v_i	T	k	ε
Γ_Φ	0	$\nu+\nu_t$	$\dfrac{\nu}{\mathrm{Pr}}+\dfrac{\nu_t}{\mathrm{Pr}_t}$	$\nu+\dfrac{\nu_t}{\sigma_k}$	$\nu+\dfrac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon}$
S_Φ	0	$-\dfrac{\partial}{\partial x_i}\left(p+\dfrac{2}{3}k\right)$	0	P	$\dfrac{\varepsilon}{k}(c_{\varepsilon 1}P-c_{\varepsilon 2}\varepsilon)$

ся в табл. 1.1. Слагаемое, описывающее порождение турбулентности, имеет вид

$$P=\nu_t\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)\frac{\partial v_i}{\partial x_j}.$$

По повторяющимся индексам производится суммирование.

Коэффициент турбулентной вязкости выражается через кинетическую энергию турбулентности и скорость ее диссипации при помощи формулы Колмогорова–Прандтля $\nu_t=c_\mu k^2/\varepsilon$. Турбулентному числу Прандтля присваивается постоянное значение ($\mathrm{Pr}_t=0{,}9$).

Уравнения, записанные в форме (1.1), пригодны для описания и ламинарных течений, если исключить из рассмотрения уравнения модели турбулентности и положить $\nu_t=0$.

1.3.5. Модель вязкой сжимаемой жидкости. В декартовой системе координат (x,y,z) нестационарное течение вязкого сжимаемого газа описывается уравнением

$$\frac{\partial Q}{\partial t}+\frac{\partial F_x}{\partial x}+\frac{\partial F_y}{\partial y}+\frac{\partial F_z}{\partial z}=H. \qquad (1.2)$$

Уравнение (1.2) дополняется уравнением состояния совершенного газа

$$p=(\gamma-1)\rho\left[e-\frac{1}{2}\left(v_x^2+v_y^2+v_z^2-\omega^2r^2\right)\right].$$

Вектор консервативных переменных Q и векторы потоков F_x, F_y, F_z имеют следующий вид:

$$Q=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho v_x\\ \rho v_y\\ \rho v_z\\ \rho e\end{pmatrix},\quad F_x=\begin{pmatrix}\rho v_x\\ \rho v_x v_x+p-\tau_{xx}\\ \rho v_x v_y-\tau_{xy}\\ \rho v_x v_z-\tau_{xz}\\ (\rho e+p)v_x-v_x\tau_{xx}-v_y\tau_{xy}-v_z\tau_{xz}+q_x\end{pmatrix},$$

$$F_y=\begin{pmatrix}\rho v_y\\ \rho v_y v_x-\tau_{yx}\\ \rho v_y v_y+p-\tau_{yy}\\ \rho v_y v_z-\tau_{yz}\\ (\rho e+p)v_y-v_x\tau_{yx}-v_y\tau_{yy}-v_z\tau_{yz}+q_y\end{pmatrix},$$

$$F_z = \begin{pmatrix} \rho v_z \\ \rho v_z v_x - \tau_{zx} \\ \rho v_z v_y - \tau_{zy} \\ \rho v_z v_z + p - \tau_{zz} \\ (\rho e + p) v_z - v_x \tau_{zx} - v_y \tau_{zy} - v_z \tau_{zz} + q_z \end{pmatrix}.$$

Неинерциальность системы отсчета учитывается при помощи введения в источниковый член H кориолисовой и центробежной сил:

$$H = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho\,\omega(y\,\omega + 2v_z) \\ \rho\,\omega(z\,\omega - 2v_y) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Компоненты тензора вязких напряжений и составляющие вектора теплового потока находятся из соотношений

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

Здесь t — время; ρ — плотность; r — радиус; v_x, v_y, v_z — составляющие скорости в координатных направлениях x, y, z соответственно; ω — угловая скорость вращения; p — давление; e — полная энергия единицы массы; T — температура; γ — отношение удельных теплоемкостей.

Уравнение (1.2) пригодно для описания как ламинарных, так и турбулентных течений.

При моделировании турбулентных течений в рамках решения уравнений Рейнольдса, уравнение (1.2) дополняется уравнениями модели турбулентности. При этом эффективная вязкость μ_e вычисляется как сумма молекулярной μ и турбулентной μ_t вязкостей, а эффективная теплопроводность λ_e выражается через вязкость и число Прандтля:

$$\mu_e = \mu + \mu_t, \quad \lambda_e = c_p\left(\frac{\mu}{\mathrm{Pr}} + \frac{\mu_t}{\mathrm{Pr}_t}\right).$$

Молекулярному и турбулентному числам Прандтля присваиваются постоянные значения (для воздуха $\mathrm{Pr} = 0{,}72$, $\mathrm{Pr}_t = 0{,}9$).

При использовании метода моделирования крупных вихрей уравнение (1.2) дополняется соотношениями, позволяющими вычислить подсеточную вязкость [44]. При этом эффективная вязкость μ_e вычисляется как сумма молекулярной μ и подсеточной μ_s вязкостей, а эффективная теплопроводность λ_e выражается через вязкость и число Прандтля:

$$\mu_e = \mu + \mu_s, \quad \lambda_e = c_p\left(\frac{\mu}{\mathrm{Pr}} + \frac{\mu_s}{\mathrm{Pr}_s}\right).$$

Подсеточному числу Прандтля присваивается постоянное значение (для воздуха $\mathrm{Pr}_s = 0{,}9$).

Для получения значений молекулярной вязкости в зависимости от температуры используется закон Сазерленда

$$\frac{\mu}{\mu_*} = \left(\frac{T}{T_*}\right)^{3/2} \frac{T_* + S_0}{T + S_0},$$

где $\mu_* = 1{,}68 \cdot 10^{-5}$ кг/(м·с), $T_* = 273$ К и $S_0 = 110{,}5$ К для воздуха.

1.3.6. Начальные условия. В момент времени $t = 0$ задаются начальные распределения искомых функций. При решении статистически стационарных задач методом установления удачный выбор начальных условий снижает затраты компьютерного времени, а неудачный — увеличивает или не обеспечивает получения стационарного решения вследствие выхода процесса установления на осциллирующий режим (периодический, квазипериодический или апериодический).

В случае нестационарных расчетов средние значения искомых функций задаются, исходя из данных физического эксперимента (достижения полной сходимости численного решения не требуется). На средние значения накладываются случайные флуктуации, функция плотности вероятности которых во времени подчиняется нормальному закону распределения с нулевым математическим ожиданием и заданной дисперсией [44].

1.3.7. Граничные условия. При решении полных уравнений Навье–Стокса требуется задание граничных условий на всех границах расчетной области.

Граничные условия на входной и выходной границах задаются в зависимости от соотношения между скоростью потока и скоростью звука (проверяются знаки собственных чисел якобиана λ_i, где $i = 1, \ldots, 5$). Различные граничные условия приводятся в табл. 1.2 (под α понимается направление потока).

На границе, через которую жидкость поступает в расчетную область, обычно задается распределение скорости или расход рабочей среды, направление потока, распределения полного давления и полной

Таблица 1.2. Граничные условия для уравнений Навье–Стокса на входной и выходной границах

Условие	Скорость	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	Параметры
Дозвуковые входные	$-c < \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0$	−	−	−	+	−	p_0, T_0, α
Дозвуковые выходные	$0 < \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < c$	+	+	+	+	−	p
Сверхзвуковые входные	$-\infty < \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < -c$	−	−	−	−	−	Q
Сверхзвуковые выходные	$c < \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < +\infty$	+	+	+	+	+	—