

Численное моделирование ударно-волновых структур в сверхзвуковых потоках неравновесного колебательно-возбужденного газа

© С.С. Храпов, А.В. Хоперсов, Н.С. Храпов

Волгоградский государственный университет,
Волгоград, Россия
e-mail: khrapov@volsu.ru

Поступило в Редакцию 6 мая 2025 г.
В окончательной редакции 10 июня 2025 г.
Принято к публикации 10 июня 2025 г.

Рассмотрена динамика двумерных течений неравновесного газа с учетом релаксационных процессов, вязкости и теплопроводности. На основе численного газодинамического метода MUSCL реализован параллельный вычислительный алгоритм, позволяющий с высоким пространственным разрешением изучать нелинейные волновые структуры, возникающие в неравновесной среде из-за развития газодинамических неустойчивостей. Показано существенное повышение (в 100–1000 раз) производительности вычислений при использовании параллельных версий вычислительного кода для GPUs. Проведено численное моделирование ударно-волновых структур в плоском двумерном канале с инжекцией сверхзвуковой струи неравновесного газа.

Ключевые слова: неравновесный газ, сверхзвуковые струи, ударные волны, численные методы, параллельные вычисления на GPUs.

DOI: 10.61011/JTF.2025.12.61777.247-25

Введение

Сверхзвуковые неравновесные газодинамические течения могут возникать в соплах реактивных двигателей [1,2] и при гиперзвуковом обтекании аэродинамических поверхностей [3,4]. Неравновесность среды обусловлена различием статической и колебательной температур в газе [5]. За счет различных физических процессов (электрические и СВЧ разряды, ударные волны при гиперзвуковом обтекании, быстрое охлаждение сверхзвуковых струй) колебательная температура газа, связанная с колебательными энергетическими уровнями многоатомных молекул, может в несколько раз превышать статическую температуру газа [4,6,7]. В этом случае релаксационные процессы начинают оказывать существенное влияние на динамику и структуру газодинамических течений [8–12]. При определенных условиях неравновесный колебательно-возбужденный газ может становиться акустически активным и в нем на нелинейной стадии развития акустической и тепловой неустойчивостей формируются ударные волны (УВ) с различной структурой [10,11]: пилообразная система слабых УВ и квазистационарная система ударно-волновых импульсов (УВИ).

Важным фактором при численном моделировании неравновесных газодинамических течений с высоким пространственным разрешением является производительность вычислительного кода, которая влияет как на время получения результата, так и на полноту численных решений при массовых расчетах с различными значениями параметров модели [13,14].

Целью настоящей работы является разработка и апробация эффективного вычислительного инструмента, обладающего высоким пространственным разрешением и точностью, для исследования нелинейных волновых структур, формирующихся в сверхзвуковых неравновесных течениях колебательно-возбужденных газов на различных стадиях развития газодинамических неустойчивостей (акустической, тепловой, тангенциального разрыва скорости, гофрировочной неустойчивости УВ). Для разработки двумерной численной модели использовался метод газодинамического моделирования MUSCL (Monotone Upwind Scheme for Conservation Laws) [15], адаптированный для интегрирования двумерных уравнений динамики неравновесного газа [10,11]. Параллельный код численной модели реализован с использованием технологий CUDA и GPUDirect для гибридных вычислительных систем (суперкомпьютеров) с графическими процессорами (CPU–multi-GPU) [16].

1. Математическая модель колебательно-возбужденного газа

Будем рассматривать динамику неравновесного колебательно-возбужденного газа, которая в двумерной области (x, y) характеризуется скоростью течения $\mathbf{u} = \{u, v\}$, плотностью Q , давлением p , статической T и колебательной T_V температурами. В неравновесном колебательно-возбужденном газе $T_V > T$. Динамику неравновесного газа с учетом вязкости, теплопроводности, колебательно-поступательной релаксации (VT -релаксация), нагрева и охлаждения будем описывать следующей

системой уравнений газодинамики в консервативной форме [4,10,11]:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \boldsymbol{\Phi}, \quad (1)$$

где

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \varrho \\ \varrho u \\ \varrho v \\ E \\ \varrho \varepsilon_V \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \varrho u \\ \varrho u^2 + p - \sigma_{xx} \\ \varrho uv - \sigma_{xy} \\ (E + p)u - \kappa \nabla_x T - u\sigma_{xx} - v\sigma_{xy} \\ \varrho \varepsilon_V u \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \varrho v \\ \varrho uv - \sigma_{xy} \\ \varrho v^2 + p - \sigma_{yy} \\ (E + p)v - \kappa \nabla_y T - v\sigma_{yy} - u\sigma_{xy} \\ \varrho \varepsilon_V v \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Phi} = \varrho \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\dot{\varepsilon}_V \\ \dot{\varepsilon}_V \end{pmatrix},$$

$E = \varrho (0.5|\mathbf{v}|^2 + \varepsilon)$, ε — удельная внутренняя энергия (поступательные и вращательные степени свободы), ε_V — удельная колебательная энергия, σ_{xx} , σ_{xy} , σ_{yy} — компоненты тензора вязких напряжений, κ — коэффициент теплопроводности, $\nabla = \{\nabla_x, \nabla_y\} = \left\{\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}\right\}$, $\dot{\varepsilon}_V$ — удельная мощность колебательно-поступательного обмена энергией, для расчета которой воспользуемся формулой Ландау–Теллера: $\dot{\varepsilon}_V = (\varepsilon_V^\epsilon - \varepsilon_V)/\tau$, где $\varepsilon_V^\epsilon \equiv \varepsilon_V(T)$ — удельная колебательная энергия в равновесном состоянии при $T_V = T$, τ — время колебательной релаксации. Удельную колебательную энергию газа ε_V , зависящую от соответствующей колебательной температуры T_V , представим в виде [4,10,11]:

$$\varepsilon_V(T_V) = \frac{\mathcal{R}}{M} \sum_{\ell=1}^{N_V} \frac{r_\ell \theta_\ell}{\exp(\theta_\ell/T_V) - 1},$$

где N_V — количество колебательных мод, θ_ℓ — характеристическая колебательная температура ℓ -моды, r_ℓ — степень вырождения ℓ -моды.

Время колебательной релаксации представим в следующем обобщенном виде [10,11]:

$$\tau = \frac{p_A T^n}{p} \frac{\exp\{a_0 + a_1 T^{-1/3} + a_2 T^{-2/3} + a_3 T^{1/3}\}}{1 - m \exp(-\theta_*/T)},$$

где p_A — атмосферное давление, θ_* — минимальная из характеристических температур колебательных мод [17], калибровочные коэффициенты модели релаксации a_i , n и m [4,10,11,17].

Систему уравнений (1) замыкаем уравнением состояния идеального газа: $p = \mathcal{R} \varrho T / M$, $\varepsilon = p / [(\gamma - 1)\varrho]$, где M и γ — молярная масса и показатель адиабаты газа, \mathcal{R} — универсальная газовая постоянная.

2. Численный метод и параллельный алгоритм

Численное решение системы уравнений (1) строится на основе метода MUSCL [10,11,15].

После дискретизации непрерывных величин $\mathbf{U}(x, y, t)$ в узлах пространственно-временной сетки: $\mathbf{U}(x, y, t) \rightarrow \mathbf{U}(x_i, y_j, t_n) \equiv \mathbf{U}_{i,j}^n$, где $t_{n+1} = t_n + \Delta t_n$ ($n = 0, 1, \dots$ — временной слой), Δt — временной шаг, $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ ($i = 0, \dots, N_x + 4$), $y_{j+1} = y_j + \Delta y$ ($j = 0, \dots, N_y + 4$), $\Delta x = L_x/N_x$ и $\Delta y = L_y/N_y$ — размеры пространственных ячеек, L_x и L_y — размеры расчетной области, N_x и N_y — количество расчетных ячеек по x - и y -координатам соответственно. Представим численный алгоритм метода MUSCL в виде

$$\mathbf{U}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{U}_{i,j}^n + \Delta t_n \left(\frac{\hat{\mathbf{F}}_{i-1/2,j} - \hat{\mathbf{F}}_{i+1/2,j}}{\Delta x} + \frac{\hat{\mathbf{G}}_{i,j-1/2} - \hat{\mathbf{G}}_{i,j+1/2}}{\Delta y} + \hat{\boldsymbol{\Phi}}_{i,j} \right), \quad (2)$$

где дробные индексы $i \pm 1/2$ и $j \pm 1/2$ соответствуют границам ячеек расчетной сетки ($x_{i \pm 1/2} = x_i \pm \Delta x/2$, $y_{j \pm 1/2} = y_j \pm \Delta y/2$), $\hat{\mathbf{F}}_{i \pm 1/2,j} = \frac{1}{\Delta t_n} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_{i \pm 1/2,j}(t) dt$, $\hat{\mathbf{G}}_{i,j \pm 1/2} = \frac{1}{\Delta t_n} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{G}_{i,j \pm 1/2}(t) dt$, $\hat{\boldsymbol{\Phi}}_{i,j} = \frac{1}{\Delta t_n} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \boldsymbol{\Phi}_{i,j}(t) dt$. В каждый момент времени значения газодинамических потоков $\hat{\mathbf{F}}_{i \pm 1/2,j}$ и $\hat{\mathbf{G}}_{i,j \pm 1/2}$ вычисляются на границах расчетных ячеек с использованием приближенных методов решения задачи Римана HLL/HLLC [18]. Второй порядок точности в методе MUSCL достигается благодаря использованию алгоритма предиктор-корректор для продвижения по времени и кусочно-линейной реконструкции сеточных функций с применением TVD-ограничителей (Total Variation Diminishing) [15].

Для повышения производительности численного моделирования сверхзвуковых газодинамических течений неравновесного газа на расчетных сетках с десятками и сотнями миллионов ячеек наш алгоритм метода MUSCL (2) был распараллелен с использованием технологий OpenMP-CUDA и GPUDirect, применяемых в гибридных вычислительных системах с несколькими графическими процессорами (CPU–multi-GPUs). Применение GPUDirect позволяет обеспечить более быстрый прямой обмен данными между GPUs, минуя CPU, благодаря интерфейсу NVLINK [14,16,19]. Реализованный параллельный OpenMP-CUDA алгоритм для вычислительных систем CPU–multi-GPUs позволяет ускорить расчеты в 100–1000 раз по сравнению с параллельными версиями кода для CPU [19].

3. Результаты численного моделирования

В численной модели (2) перейдем к безразмерным величинам: $\bar{f} = f/l_f$, где l_f — характерный масштаб величины f . Характерные масштабы численной модели в соответствии с [10,11,19]: $l_t = t_0$, $l_u = c_0$, $l_{xy} = c_0 \tau_0$, $l_T = T_0$, $l_p = p_0$, $l_\varrho = \varrho_0/\gamma$, где нижний индекс $\ll 0 \gg$ соответствует начальным пространственно однородным распределениям газа, $c_0 = \sqrt{\gamma p_0/\varrho_0}$ — скорость звука.

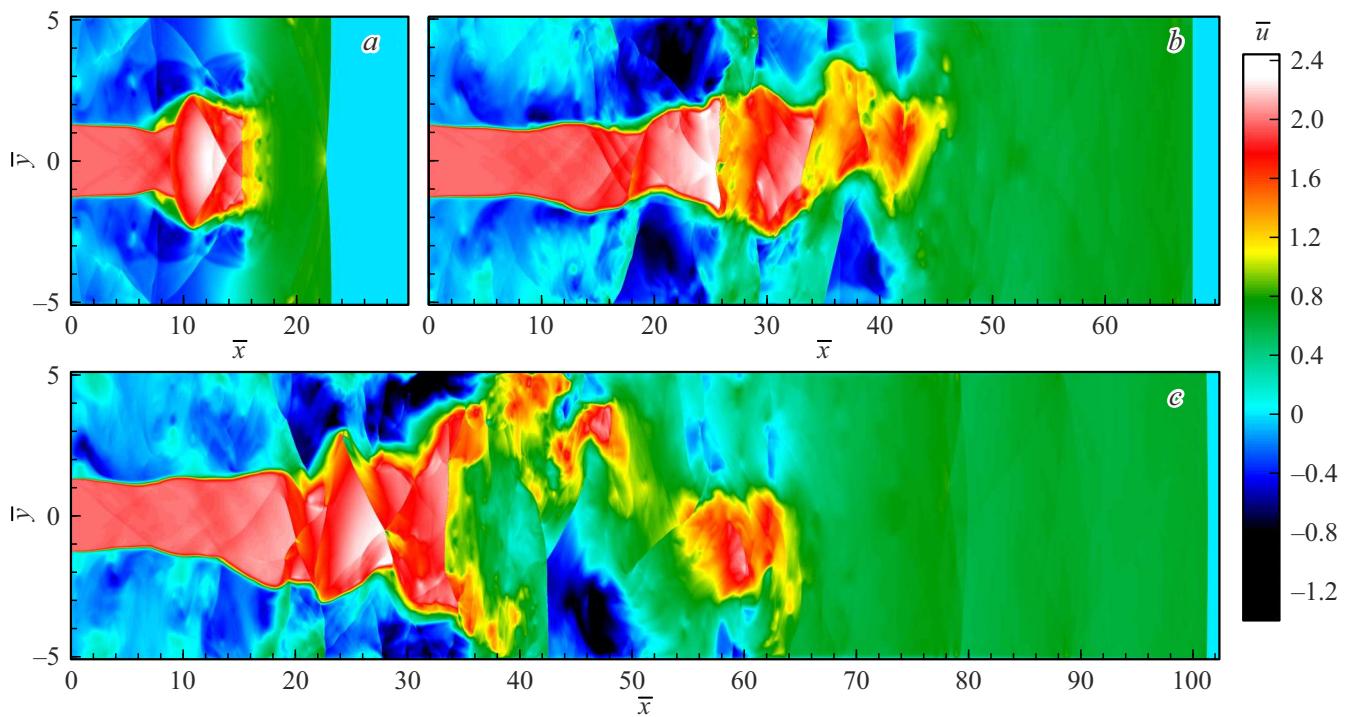


Рис. 1. Эволюция ударно-волновой структуры течения в плоском канале при инжекции неравновесной колебательно-возбужденной газовой струи. В различные моменты времени показаны распределения скорости \bar{u} : *a* — $\bar{t} = 20$; *b* — $\bar{t} = 60$; *c* — $\bar{t} = 90$.

Исследование нелинейной динамики газодинамических неустойчивостей в неравновесном газе (см. [10–12,19]) требует использования в численных моделях высокого пространственного разрешения, которое определяется оптимальным значением шага расчетной сетки: $\Delta\bar{x} = \Delta\bar{y} = 0.01$.

Рассмотрим модельную задачу об истечении сверхзвуковой струи неравновесного колебательно-возбужденного газа ($\bar{T}^{(jet)} = 0.3$, $\bar{T}_V^{(jet)} = 3$, $\bar{p}^{(jet)} = 1$, $\bar{u}^{(jet)} = 2$) в плоский канал с покоящимся равновесным газом ($\bar{T}^{(ch)} = \bar{T}_V^{(ch)} = 0.3$, $\bar{p}^{(ch)} = 1$, $\bar{u}^{(ch)} = 0$). Струя втекает на левой границе расчетной области с числом Маха $M \approx 3.65$, а на правой границе задаются условия свободного протекания. На охлаждаемых стенках канала (верхняя и нижняя границы расчетной области) задаются условия типа «твёрдая стенка» (непротекание с прилипанием) и поддерживается постоянная температура поверхности $\bar{T}_{ex} = 0.3$. Значения безразмерных параметров математической модели выбираются в соответствии с базовыми моделями [10,11,19]: $\gamma = 1.4$, $\bar{a}_1 = 10$, $\bar{a}_2 = \bar{a}_3 = n = m = 0$, $\bar{\theta}_* = \bar{\theta}_1 = 6$. Размеры канала $\bar{L}_x = 102.4$ и $\bar{L}_y = 10.24$, а соответствующее количество расчетных ячеек $N_x = 1024$ и $N_y = 10240$. Общее количество расчетных ячеек $N = 10485760$. Поперечный размер струи $\bar{D}_y^{(jet)} = 2.56$ или $N_y^{(jet)} = 256$. Инжекция сверхзвуковой струи происходит вдоль средней линии канала с незначительным смещением вниз на величину $\Delta\bar{y}$, что необходимо для развитие неустойчивых изгибных мод струи.

На рис. 1 показана динамика развития ударно-волновых структур в плоском канале при истечении сверхзвуковой струи неравновесного газа. На начальной стадии эволюции (рис. 1,*a*) сначала формируется УВ, связанная со сверхзвуковым истечением газа в неподвижную среду, а затем за фронтом этой УВ в области струйного истечения образуются ударно-волновые структуры, обусловленные развитием неустойчивых мод струи (Кельвина–Гельмгольца и отражательных акустических гармоник). Причем интенсивность этих ударно-волновых структур в неравновесной струе оказывается выше, чем в равновесной струе [19]. Это связано с акустической активностью неравновесного колебательно-возбужденного газа, которая приводит к развитию акустической неустойчивости [10–12,19]. В процессе дальнейшей эволюции (рис. 1,*b*, *c*) наряду с симметричными (пинч) модами струи развивается неустойчивость и антисимметричные (изгибные) моды струи, которая приводит к искривлению струйного течения и разрушению струи в области $\bar{x} > 50$. На нелинейной стадии развития неустойчивые моды струи формируют в канале сложную систему УВ.

Детальная ударно-волновая и вихревая структура течения в момент времени $\bar{t} = 90$ показана на рис. 2. Сложную систему УВ и вихрей удобно анализировать на светотеневых картах распределения газодинамических величин (рис. 2, *a*), которые позволяют выделять неоднородности течения за счет визуализации градиентов этих величин (аналог шлирен-метода в физических

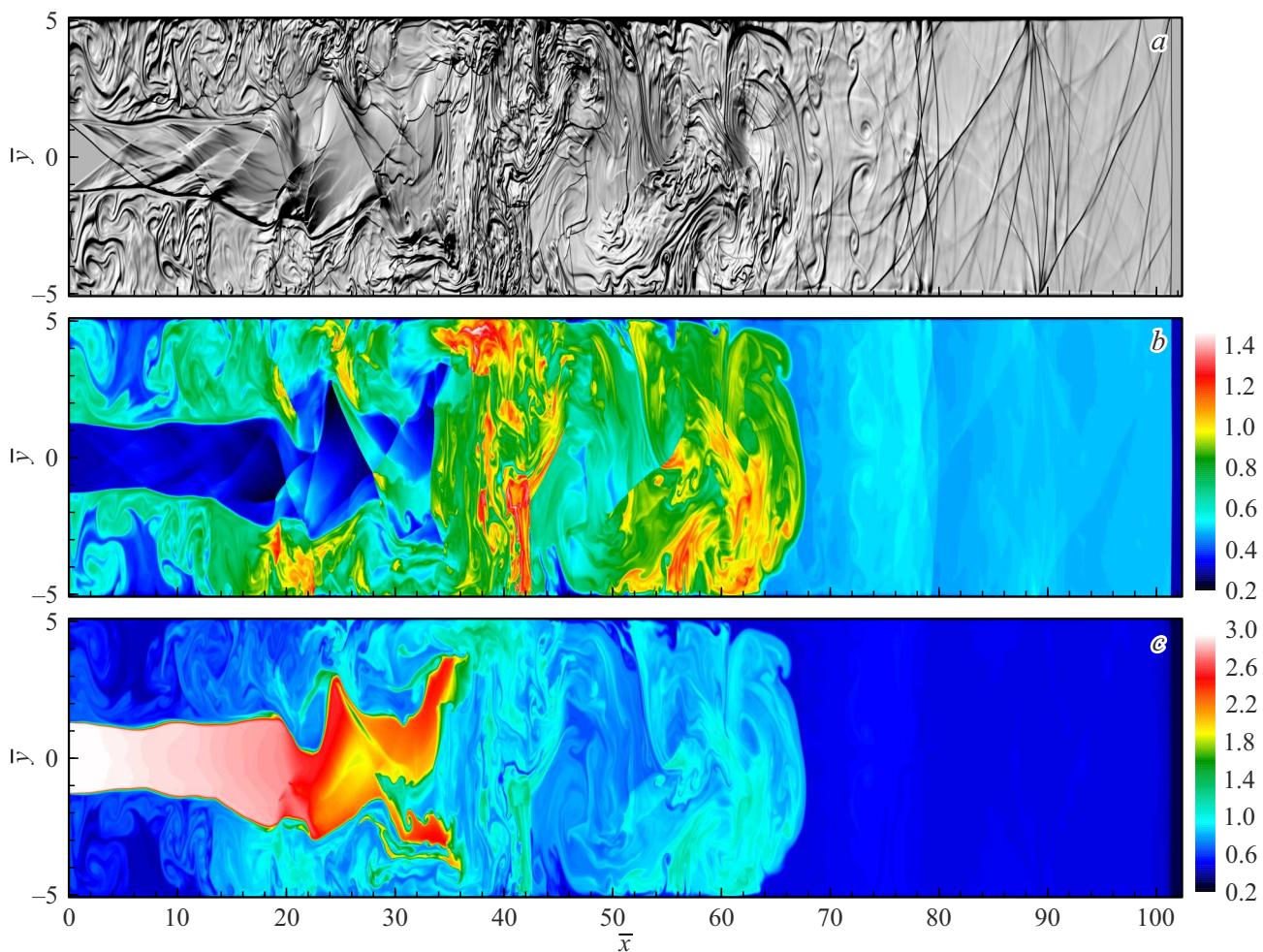


Рис. 2. Структура течения (вихревая и ударно-волновая) в плоском канале при инжекции неравновесной колебательно-возбужденной газовой струи. В момент времени $\bar{t} = 90$ показаны распределения: *a* — плотности \bar{q} (светотеневое представление); *b* — температуры \bar{T} ; *c* — колебательной температуры \bar{T}_V .

экспериментах). По распределению статической (\bar{T}) и колебательной (\bar{T}_V) температур на рис. 2, *b*, *c* также хорошо выделяются вихревые структуры и косые УВ (только для \bar{T}). Характерной особенностью неравновесных струйных истечений наряду с более высокой интенсивностью ударно-волновых и вихревых структур является существенный тепловой разогрев газа в области разрушения струи ($35 < \bar{x} < 65$), обусловленный перекачкой колебательной энергии в тепловую за фронтом УВ и в зоне интенсивных вихревых течений. Как видно из рис. 2, *b*, *c*, в области ($\bar{x} > 70$) течение газа становится практически равновесным $\bar{T}_V \sim \bar{T}$.

Производительность вычислительного кода удобно анализировать с помощью времени обработки одной расчетной ячейки в численном алгоритме t_{cell} . В нашей параллельной OpenMP–CUDA–GPUDirect реализации вычислительного кода для GPUs это время для $N=10\,485\,760$ составляет: $t_{cell}^{(1GPU)}=1.8$ ns, $t_{cell}^{(2GPU)}=0.95$ ns, $t_{cell}^{(4GPU)}=0.49$ ns, $t_{cell}^{(8GPU)}=0.27$ ns. Лучшее время обработки одной расчетной ячейки в параллельной OpenMP версии кода для CPUs (40 ядер) — $t_{cell}^{(CPU)}=325$ ns.

Отметим, что наш параллельный OpenMP–CUDA–GPUDirect код может быть масштабирован для моделирования более сложных трехмерных течений неравновесного газа. При этом наши оценки показывают, что время обработки одной расчетной ячейки увеличивается в 1.5–1.7 раза из-за появления дополнительного уравнения на z -компоненту скорости, а также дополнительных вычислений наклонов при кусочно-линейной реконструкции сеточных функций и потоков консервативных величин \mathbf{U} в z -направлении. В двумерной версии кода объем необходимой памяти GPU составляет ~ 240 байт на одну расчетную ячейку и при переходе на трехмерную реализацию уже потребуется ~ 384 байт на ячейку.

Выводы

На основе численного газодинамического метода MUSCL реализована параллельная OpenMP–CUDA–GPUDirect версия вычислительного кода для моделирования двумерных сверхзвуковых течений неравновесного колебательно-возбужденного газа с различными

моделями времени VT-релаксации на гибридных суперкомпьютерах с графическими процессорами (CPU–multi-GPU). В работе были использованы суперкомпьютеры NVIDIA DGX-1 (ВолГУ) и Ломоносов 2 (Volta 1,2 — МГУ) с графическими процессорами NVIDIA V100. Переход на параллельную версию кода для GPUs позволил ускорить расчеты в 180–1200 раз по сравнению с параллельным кодом для CPUs.

Проведена апробация разработанного параллельного алгоритма метода MUSCL на двумерной задаче численного моделирования динамики сверхзвуковых течений неравновесного колебательно-возбужденного газа в плоском канале. Показано, что при истечении неравновесной сверхзвуковой струи в покоящийся равновесный газ в канале формируется сложная ударно-волновая и вихревая структура, интенсивность которой оказывается более высокой по сравнению со случаем инжекции равновесных струй. Кроме того, в области разрушения струи из-за развития газодинамических неустойчивостей пинч и изгибных мод происходит значительный разогрев газа, обусловленный перекачкой колебательной энергии в тепловую за счет интенсивных релаксационных процессов.

Полученные в работе результаты численного моделирования динамики сверхзвуковых течений неравновесного колебательно-возбужденного газа и обнаруженные в численных моделях ударно-волновые и вихревые структуры могут быть полезны при разработке новых типов детонационных реактивных двигателей и газодинамических лазеров [7], а также экспериментальных энергетических установок для генерации мощных ударно-волновых импульсов [20].

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (РНФ) № 23-71-00016 (<https://rscf.ru/project/23-71-00016/>) с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М.В. Ломоносова.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Ф.А. Максимов. Физико-химическая кинетика в газовой динамике, **26** (1), 1160 (2025). <http://chemphys.edu.ru/issues/2025-26-1/articles/1160/>
- [2] R. Seleznev. Fluid Dynamics, **58**, 1584 (2023). DOI: 10.1134/S0015462823602607
- [3] И.А. Широков, Т.Г. Елизарова. Физико-химическая кинетика в газовой динамике, **26** (1), 1173 (2025). <http://chemphys.edu.ru/issues/2025-26-1/articles/1173/>
- [4] S.T. Surzhikov. Fluid Dynamics, **58** (1), 113 (2023). DOI: 10.1134/S0015462822700033
- [5] А.И. Осипов, А.В. Уваров. УФН, **162** (11), 1 (1992). DOI: 10.3367/UFNr.0162.199211a.0001
- [6] Г.Г. Антонов, В.Б. Ковшечников, Ф.Г. Рутберг. ЖТФ, **86** (5), 96 (2016).
- [7] А.В. Авдеев, А.С. Борейшо, И.А. Киселев, А.В. Морозов, А.Е. Орлов. Фотоника, **14** (8), 648 (2020). DOI: 10.22184/1993-7296.FRos.2020.14.8.648.661
- [8] А.И. Осипов, А.В. Уваров. УФН, **166** (6), 639 (1996).
- [9] V.G. Makaryan, N.E. Molevich. Plasma Sources Sci. Technol., **16** (1), 124 (2007). DOI: 10.1088/0963-0252/16/1/017
- [10] S.S. Khrapov. Fluid Dynamics, **59** (4), 899 (2024). DOI: 10.1134/S0015462824602584
- [11] С.С. Храпов. Физико-химическая кинетика в газовой динамике, **25** (7), 1151 (2024). <http://chemphys.edu.ru/issues/2024-25-7/articles/1151/>
- [12] С.С. Храпов, Г.С. Иванченко, В.П. Радченко, А.В. Титов. ЖТФ, **93** (12), 1727 (2023). DOI: 10.61011/JTF.2023.12.56805.f213-23
- [13] J. McKevitt, E.I. Vorobyov, I. Kulikov. J. Parallel Distributed Computing, **195**, 104977 (2025). DOI: 10.1016/j.jpdc.2024.104977
- [14] A. Radhakrishnan, H. Le Berre, B. Wilfong, J.-S. Spratt, M. Rodriguez, T. Colonius, S.H. Bryngelson. Comp. Phys. Commun., **302**, 109238 (2024). DOI: 10.1016/j.cpc.2024.109238
- [15] B. van Leer. J. Comp. Phys., **32** (1), 101 (1979).
- [16] S.S. Khrapov, A.V. Khoperskov. Supercomp. Frontiers and Innovations, **11** (3), 27 (2024). DOI: 10.14529/jsfi240302
- [17] Э.А. Ковач, С.А. Лосев, А.Л. Сергиевская, Н.А. Храпак. Физико-химическая кинетика в газовой динамике, **10**, 332 (2010). <http://chemphys.edu.ru/issues/2010-10/articles/332/>
- [18] E.F. Toro, M. Spruce, W. Speares. Shock Waves, **4** (1), 25 (1994).
- [19] С. Храпов. Математическая физика и компьютерное моделирование, **28** (1), 60 (2025). <https://mp.jvolsu.com/index.php/ru/component/attachments/download/1223>
- [20] V. Radchenko, S. Khrapov, A. Khoperskov. in 2024 6th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA). IEEE Xplore (Lipetsk, Russian Federation, 2024), p. 533. DOI: 10.1109/SUMMA64428.2024.10803831