Федеральный исследовательский центр
“Информатика и управление”
Российской Академии Наук

На правах рукописи

Титарев Владимир Александрович

Численное моделирование пространственных течений разреженного газа с использованием суперЭВМ

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2017 год

Работа выполнена в Федеральном исследовательском центре “Информатика и управление” Российской Академии Наук.

Официальные оппоненты:	Дерюгин Юрий Николаевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, г. Саров, главный научный сотрудник
	Зайцев Дмитрий Кириллович, доктор физико-математических наук, доцент, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, профессор кафедры “Гидроаэродинамика, горение и теплообмен”
	Кустова Елена Владимировна, доктор физико-математических наук, доцент, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, профессор кафедры гидроаэромеханики
Ведущая организация:	Институт Теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск

Защита диссертации состоится 12 апреля 2018 года в 11 часов на заседании диссертационного совета Д 002.024.03 при ИПМ им. М.В. Келдыша РАН по адресу 125047, г. Москва, Миусская пл., 4, корп. А.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Автореферат разослан “___”__________ 2018 года.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.024.03

кандидат физ.-мат. наук Корнилина М.А.

Общая характеристика работы

Актуальность работы

Как известно, классические способы моделирования, основанные на уравнениях Навье-Стокса сжимаемого газа, не подходят для описания движений разреженного газа, в котором средняя длина свободного пробега молекул между двумя соударениями становится сравнимой с характерным размером рассматриваемой области течения. Корректное описание течения возможно на основе кинетических подходов: уравнения Больцмана, аппроксимирующих кинетических уравнений, метода прямого статистического моделирования, и других (Коган, 1967; Шахов, 1974; Кошмаров, Рыжов, 1977; Черчиньяни, 1978; Берд, 1981; Веденяпин, 2001). Важной прикладной областью применения теории разреженных газов является исследование медленных течений в различных микроэлектромеханических устройствах (Ho, Tai, 1998), таких как микронасосы и микротурбины, микросопла, системы охлаждения электронных компонентов. При этом течение разреженного газа в прямом канале является наиболее распространенной конфигурацией в микроустройствах; первые экспериментальные измерения расхода массы для круглой трубы принадлежат еще Кнудсену. Анализу решения этой задачи в зависимости от длины и формы каналы, величины перепада давления и других параметров посвящено множество работ, см. например обзоры (Sharipov, Seleznev, 1994; Шарипов, Селезнев, 2008).

Другим традиционным приложением уравнений механики разреженного газа является моделирование аэродинамики и теплообмена космических аппаратов, движущихся в верхних слоях атмосферы. При обтекании космического аппарата, особенно при его входе в атмосферу с большой (гиперзвуковой) скоростью, определяющими являются эффекты разреженности и сильной неравновесности течения, см. например (Ковтуненко и др., 1977; Ivanov, Gimelshein, 1998). Так как экспериментальные исследования данной задачи сопряжены со значительными техническими трудностями, целесообразно основные аэротермодинамические характеристики изучать методами вычислительной физики.

Наиболее популярным в настоящее время способом моделирования течений разреженного газа, в частности решения задач гиперзвуковой аэродинамики, является метод прямого статистического моделирования (ПСМ). В нашей стране его развитием и применением занимаются научные коллективы ИТПМ СО РАН, ИТ СО РАН, МФТИ, ЦАГИ, ЦНИИМаш. Так, в ИТПМ СО РАН создан хорошо известный программный комплекс SMILE (Иванов и др., 1987). Из зарубежных пакетов можно отметить код MONACO (Dietrich, Boyd, 1996). Метод статистического моделирования хорошо подходит для широкого класса стационарных задач аэродинамики для больших и умеренных чисел Кнудсена, включая течения с химическими реакциями, но менее эффективен для решения нестационарных задач и расчета медленных течений.

Альтернативой использованию статистических методов является прямое численное решение кинетического уравнения Больцмана для функции распределения молекул по скоростям. Соответствующие подходы развивались коллективами ВЦ РАН (в настоящее время ФИЦ ИУ РАН), ИТПМ СО РАН, МАИ, МФТИ, ИТ СО РАН, СПбГУ. Основные преимущества данного подхода состоят в возможности построения методов высокого порядка аппроксимации, как для стационарных, так и для нестационарных течений; применимости всех традиционных для вычислительной аэродинамики сжимаемого газа численных методов, подходов к построению расчетных сеток и алгоритмов создания параллельных программ.

До недавнего времени большинство опубликованных результатов по численному решению кинетических уравнений относились к решению задач с простой плоской или осесимметричной геометрией, см. например обзоры (Рыков и др., 1980; Satofuka et al., 1993; Шарипов, Селезнев, 2008). Несмотря на развитие в последние годы методов и пакетов решения пространственных задач (Li, Zhang, 2003; Kolobov et al., 2007; Клосс и др., 2008; Baranger et al., 2014; Colonia et al., 2016), ни один из них не удовлетворяет одновременно всем требованиям, предъявляемым к промышленным пакетам. К таким требованиям относятся масштабируемость программы до десятков тысяч ядер, наличие полностью неявной схемы дискретизации по времени, реализация неоднородной разностной схемы на произвольных блочно-структурированных и неструктурированных сетках, возможность проводить расчеты гиперзвуковых течений.

Настоящая работа направлена на решение этой проблемы путем создания методологии, новых численных алгоритмов и комплексов параллельных программ для математического моделирования трехмерных течений разреженного газа вокруг тел сложной пространственной формы. При этом в ней развивается направление моделирования течений разреженных газов, основанное на использовании кинетических уравнений с приближенными (модельными) интегралами столкновений, что позволяет получить с хорошей точностью основные нужные для практических задач величины, такие как поле течения, расход массы, силовые и тепловые нагрузки.

Цели и задачи диссертационной работы

- Разработка методологии решения пространственных задач механики разреженного газа для течений со сложной геометрией области.
- Разработка нового эффективного численного метода решения кинетического уравнения с приближенными (модельными) интегралами столкновений.
- Создание нового комплекса программ, реализующего данный метод реше-

ния и позволяющего проводить вычисления на современных суперЭВМ с десятками тысяч ядер/гиперпотоков.

- Валидация и верификация кинетических уравнений с приближенными интегралами столкновений в приложении к сложным течениям.
- Численное моделирование течений разреженного газа в микроканалах большой конечной длины и сложной формы.
- Численное моделирование обтекания пространственных тел сложной формы гиперзвуковым потоком разреженного газа.

Методы исследования

В диссертации применяются методы механики разреженного газа, вычислительной математики и параллельных вычислительных технологий. Для программной реализации используется язык Fortran 2003 и средства создания параллельных программ на основе OpenMP и MPI.

Научная новизна

- Предложена методология численного моделирования плоских, осесимметричных и пространственных течений разреженного газа, включающая в себя разработку численного метода, прикладного параллельного пакета программ и проведение серийных расчетов.
- Разработан новый полностью неявный метод решения кинетического уравнения для областей сложной формы на произвольных сетках как в физическом, так и в скоростном пространствах.
- Предложенный численный метод реализован в новых комплексах параллельных программ "*Несветай-2Д*", "*Несветай-3Д*"[1]
- Впервые проведена верификация и валидация результатов численного решения кинетических уравнений с приближенными (модельными) интегралами столкновений на сложных пространственных задачах, включая задачи гиперзвукового обтекания тела потоком разреженного газа.
- Получено решение задачи о стационарном течении разреженного газа через канал произвольной длины и переменной формы поперечного сечения под действием произвольного перепада давления. Показано хорошее согласие расчетов с имеющимися в литературе результатами. Уточнены границы применимости существующих приближенных методик.
- Впервые продемонстрирована возможность получать за приемлемое для практических приложений время численное решение кинетического уравнения

[1]Большой Несветай - название реки в Ростовской области.

для задачи обтекания реалистичной модели спускаемого аппарата для условий задачи, соответствующих входу аппарата в атмосферу Земли с первой космической скоростью.

Практическая ценность работы

Предложенная методология моделирования, разработанные численные методы и параллельный комплекс программ могут быть использованы в работе предприятий аэрокосмического комплекса (РКК "Энергия" им. С.П. Королева) и для проведения фундаментальных исследований в механике разреженного газа. Некоторые из предложенных методов могут применяться для решения уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений.

Достоверность результатов

Разработанный комплекс программ был верифицирован путем сопоставления результатов счета как с экспериментальными данными, так и с расчетами других авторов на основе ПСМ и решения точного уравнения Больцмана. Параллельная эффективность подтверждается серией тестовых расчетов, выполненных при варьировании числа ядер/гиперпотоков в широком диапазоне до 61440 включительно (256 узлов кластера РСК "ПетаСтрим"). Ядро комплекса используется в коде "FlowModellium" (Титарев, Утюжников, 2013) и верифицировано на решении уравнений Навье-Стокса в применении к задачам гиперзвуковой аэродинамики спускаемых аппаратов.

Основные положения диссертации, выносимые на защиту

- Методология численного моделирования пространственных течений разреженного газ на произвольных неструктурированных сетках.
- Новый неявный численный метод решения модельного кинетического уравнения на произвольных неструктурированных сетках, консервативный по интегралу столкновений.
- Комплексы параллельных программ "*Несветай-2Д*", "*Несветай-3Д*" для расчетов двухмерных, осесимметричных и трехмерных задач механики разреженного газа.
- Результаты серии расчетов течений одноатомного разреженного газа в микроканалах произвольной длины и формы сечения.
- Результаты численного моделирования задач внешнего обтекания гиперзвуковым потоком разреженного газа, включая трехмерную модель спускаемого аппарата.

Апробация работы

Основные результаты работы были представлены на большом числе российских и международных конференций, включая "European Workshop on High Order Nonlinear Numerical Methods for Evolutionary PDEs" (HONOM 2011), University of Trento, Italy, April 2011 (*приглашенный доклад*); 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Zaragoza, Spain, July 9-13th, 2012 (*приглашенный доклад*); 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, X'ian, China, July 13-18th, 2014; 15-ая Международная конференция "Супервычисления и математическое моделирование", 13-17 октября 2014 г., Саров; 16-ая Международная конференция "Супервычисления и математическое моделирование", 3-7 октября 2016г., Саров; The German-Russian Conference: Supercomputing in Scientific and Industrial Problems 2017/SSIP, HPC Center, Штутгарт, Германия, 27-29 марта 2017 г.; "HONOM - Conference on High Order Numerical Methods for Evolutionary PDEs", Штутгарт, Германия, 27-31 марта 2017 г. (*приглашенный доклад*); The 29th International Conference on Parallel CFD, the University of Strathclyde, Glasgow, Scotland, 15-17 May 2017 (*приглашенный доклад*).

Реализация и внедрение результатов работы

Исследования проводились во время работы автора в Университетах Тренто (Италия) и Кренфилда (Великобритания) и в рамках научных планов ВЦ им. А.А. Дородницына РАН и ФИЦ "Информатика и Управление" РАН. Работа поддерживалась грантами РФФИ (коды проектов 12-01-00486, 13-01-00522, 14-08-00604, 15-01-07911, 15-07-02986) и грантом Правительства РФ по постановлению № 220 по договору № 11.G34.31.0072, заключенным между Министерством образования и науки РФ, ведущим ученым и МФТИ. Результаты моделирования обтекания геометрии возвращаемого аппарата используются в сотрудничестве с РКК "Энергия" им. С.П. Королева.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 30 работ [1–30] в печатных изданиях, рекомендованных ВАК для опубликования научных результатов докторских диссертаций. Получены два свидетельства о регистрации программы [33],[34]. Полный список публикаций приведен в конце автореферата.

Вклад автора в совместные работы заключался в формулировке тестовых задач [2],[6],[9],[10],[14],[18],[20],[23],[32]; разработке численного метода [14],[6],[17],[20],[23]; написании программного кода [6],[10],[14],[20]; проведении вычислений [4],[6],[8],[13]–[15],[17]–[21], [28],[30]; анализе результатов [14],[23]; совместной разработке численного метода [2],[9],[10],[32]; совместном анализе результатов [2],[4],[6],[8]–[10],[13]–[15],[17]–[21],[26], [28],[30].

Автор выражает искреннюю благодарность всем соавторам и коллегам за сотрудничество. Автор благодарит А.А. Фролову за обсуждение численных подходов и результатов моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа; А.А. Рыжова и А.А. Савельева за помощь в создании многоблочной гексаэдральной

сетки для модели ВКА ЦАГИ; Е.А. Бондаря, П.В. Ващенкова и А.А. Шевырина за предоставленные результаты расчета обтекания модели ВКА ЦАГИ на основе метода ПСМ.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Объем составляет 256 машинописных листа, текст содержит 104 рисунка и 34 таблицы.

Содержание работы

Во введении сформулирована актуальность и практическая значимость задач, решаемых в диссертационной работе.

В главе 1 сформулирован общий подход к математическому моделированию практических задач механики разреженного газа, развиваемый в настоящей работе, описаны принципы построения используемых в работе приближенных (модельных) кинетических уравнений М. Крука (модель БГК, Bhatnagar et al., 1954) и Е.М. Шахова (S-модель, Шахов, 1968), обосновывается выбор конкретного модельного кинетического уравнения.

В разделе 1.1 обсуждаются общие вопросы моделирования течений разреженного газа путем прямого численного решения кинетических уравнений. Развитие методов решения кинетических уравнений и реализующих их комплексов программ должно опираться на общую методологию, которая будет задавать направление развития и формулировать требования к создаваемым программам.

Основные этапы предлагаемой автором методологии включают в себя выбор подходящей математической модели, построение шестимерной сеточной модели задачи, разработка неявного численного метода решения кинетического уравнения и реализующего его параллельного программного комплекса, проведение большой серии верификационных расчетов, проведение основных расчетов, вывод результатов в форматах, пригодных для использования в ведущих программах визуализации, и выдача рекомендаций специалистам-прикладникам.

Предлагаемая методология основана на обобщении идей, активно используемых в настоящее время для моделирования промышленных задач аэродинамики и аэроакустики, но до настоящего времени не применявшихся при решении кинетических уравнений.

В разделе 1.2 представлено краткое описание кинетического уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений. Состояние разреженного газа в точке $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)$ в момент времени t определяется функцией распределения молекул по скоростям $f = f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi})$, где $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ — компоненты вектора молекулярной скорости по направлениям (x_1, x_2, x_3) соответственно. Макроскопические переменные, такие как числовая плотность n, температура T, давление p, средняя скорость газа $\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, u_3)$ и поток тепла $\boldsymbol{q} = (q_1, q_2, q_3)$, выражаются через f в виде интегралов по пространству молекулярных скоростей:

$$
\begin{gathered}
n = \int f d\boldsymbol{\xi}, \quad n\boldsymbol{u} = \int \boldsymbol{\xi} f d\boldsymbol{\xi}, \quad \frac{3}{2} mnR_gT + \frac{1}{2} mnu^2 = \frac{1}{2} m \int \xi^2 f d\boldsymbol{\xi}, \\
\boldsymbol{q} = \frac{1}{2} m \int \boldsymbol{v} v^2 f \, d\boldsymbol{\xi}, \quad \boldsymbol{v} = \boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u}, \quad \rho = mn, \quad p = \rho R_g T, \\
u^2 = u_\alpha u_\alpha, \quad v^2 = v_\alpha v_\alpha, \quad \xi^2 = \xi_\alpha \xi_\alpha, \quad d\boldsymbol{\xi} = d\xi_x d\xi_y d\xi_z.
\end{gathered}
\tag{1}
$$

Здесь m – масса молекулы, R_g – газовая постоянная и предполагается суммирование по повторяющимся греческим индексам в пределах от 1 до 3.

Для одноатомного газа уравнение Больцмана для функции распределения молекул по скоростям в отсутствие внешних сил в общепринятых обозначениях имеет следующий вид (Коган, 1967; Шахов, 1974):

$$
\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = \int (f' f_1' - f f_1) g \, d\sigma d\vec{\xi_1} \equiv I(f, f). \tag{2}
$$

Здесь $I(f, f)$ - больцмановский интеграл столкновений, $d\sigma = bdbd\varepsilon$ – эффективное сечение рассеивания молекул, $g = |\vec{\xi} - \vec{\xi_1}|$ – относительная скорость сталкивающихся молекул.

Трудность численного решения кинетического уравнения (2) в основном состоит в его высокой размерности, присутствии многомерного интеграла столкновений и сложности построения неявных методов продвижения по времени. В настоящее время основным применением программных комплексов, реализующих численное решение точного уравнения Больцмана, является получение высокоточных решений простых задач.

В разделе 1.3 представлено краткое описание принципов построения кинетического уравнения для одноатомного газа с приближенными (модельными) интегралами столкновений М. Крука (БГК) и Е.М. Шахова и приводятся используемые расчетные уравнения.

Кинетические уравнения с приближенными (модельными) интегралами столкновений предлагались многими авторами, см. например (Bhatnagar et al., 1954; Holway, 1966; Рыков, 1975; Andries et al., 2002). В работах (Шахов, 1968; Шахов, 1974) предложена идея построения аппроксимирующей последовательности модельных уравнений, которая состоит в следующем. Заменим в уравнении (2) точный интеграл столкновений $I(f,f)$ некоторой функцией (приближенным интегралом столкновений) $J(f,\boldsymbol{a})$. По аналогии с точным уравнением, J записывается в виде $J = Q^{+} - \nu f$, где Q^{+} – приближенный оператор обратных столкновений, ν – приближенная частота столкновений. Для нахождения вектора неизвестных параметров $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},t)$ используются условия аппроксимации точного интеграла - приближенным:

$$\int \phi(\boldsymbol{\xi}) I(f,f) d\xi = \int \phi(\boldsymbol{\xi}) J(f,\boldsymbol{a}) d\xi, \quad \phi(\boldsymbol{\xi}) = 1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \boldsymbol{\xi}\xi^2, \ldots \tag{3}$$

Первые пять интегралов от $I(f,f)$ в (3) равняются нулю и выражают законы сохранения массы, импульса и энергии сталкивающихся молекул. Если ограничиться только ими, то приходим к модели БГК (Bhatnagar et al., 1954), минусом которой является неверный переход к режиму сплошной среды ввиду неправильного числа Прандтля. Данную модель можно называть кинетическим уравнением пятимоментного приближения (см. (Шахов, 1974), стр. 94).

Для построения более точного приближенного интеграла столкновений необходимо использовать интегралы от $\boldsymbol{\xi}\xi^2$, которые вычисляются аналитически только для так называемых псевдомаксвелловских молекул. В результате получается кинетическое уравнение восьмимоментного приближения, получившее название модели Е.М. Шахова, или S–модели (Шахов, 1968, Шахов, 1974):

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = J, \quad J = \nu(f^{+} - f), \quad \nu = p/\mu, \\
&f^{+} = f_M[1 + (4/5)(1 - \mathrm{Pr}) S_\alpha c_\alpha (c^2 - 5/2)], \quad S_i = (1/n)\int c_i c^2 f d\boldsymbol{\xi}, \\
&f_M = n(2\pi R_g T)^{-3/2} \exp(-c^2), \quad \boldsymbol{c} = \boldsymbol{v}/\sqrt{2R_g T}, \quad c^2 = c_\beta c_\beta.
\end{aligned} \tag{4}$$

Здесь $\mu = \mu(T)$ - вязкость, число Прандтля для одноатомного газа $\mathrm{Pr} = 2/3$. В частном случае при $\mathrm{Pr} = 1$ модель Шахова сводится к модели БГК.

Несмотря на относительную простоту, S-модель является сложным интегро-дифференциальным уравнением высокой размерности, численное решение которого требует развития высокоточных параллельных численных методов.

В разделе 1.4 описывается постановка начальных и граничных условий. Как правило, в качестве начальных условий используется локально - максвелловская функция, соответствующая некоторому начальному распределению макроскопических величин. На границах области в физическом пространстве необходимо задать f для молекул, вектор скорости которых направлен внутрь расчетной области ($\xi_n > 0$). В работе рассматриваются несколько вариантов задания граничных условий на поверхности тела. Основным является условие диффузного отражения с полной тепловой аккомодацией к температуре поверхности T_w. При этом функция распределения отраженных молекул записывается в виде:

$$f_w = \frac{n_w}{(2\pi R_g T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2R_g T_w}\right), \tag{5}$$

где плотность n_w отраженных молекул находится из условия непротекания.

На плоскостях симметрии задачи используется граничное условие зеркального отражения молекул

$$f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) = f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}_1), \quad \boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\xi} - 2\xi_n \boldsymbol{n}. \tag{6}$$

Для задач внешней аэродинамики для набегающего потока задается локально-максвелловская функция. Возможны и другие типы граничных условий.

В разделе 1.5 описывается переход к безразмерной форме уравнения, более удобной для расчетов. Пусть n_*, T_*, l_* — некоторые характерные значения числовой плотности, температуры и пространственной координаты. Введем характерные значения давления и скорости $p_* = mn_* R_g T_*$, $v_* = \sqrt{2R_g T_*}$. Перейдем к безразмерным переменным по формулам:

$$\begin{gathered} \boldsymbol{x}' = \frac{\boldsymbol{x}}{l_*}, \quad t' = \frac{v_*}{l_*} t, \quad n' = \frac{n}{n_*}, \quad p' = \frac{p}{p_*}, \quad T' = \frac{T}{T_*}, \\ \boldsymbol{u}' = \frac{\boldsymbol{u}}{v_*}, \quad \boldsymbol{\xi}' = \frac{\boldsymbol{\xi}}{v_*}, \quad \boldsymbol{q}' = \frac{\boldsymbol{q}}{mn_* v_*^3}, \quad f' = \frac{f}{n_* v_*^3}. \end{gathered} \tag{7}$$

Степень разреженности газа характеризуется параметром разреженности δ, который обратно пропорционален числу Кнудсена Kn, определенному по длине свободного пробега λ_*:

$$\delta = \frac{l_* p_*}{\mu_* v_*} = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{\mathrm{Kn}}, \quad \mathrm{Kn} = \frac{\lambda_*}{l_*}.$$

Далее будем обозначать безразмерные величины теми же буквами, что и размерные, поскольку это не приводит к неоднозначности. Кинетическое уравнение принимает вид:

$$\begin{gathered} \frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = J, \quad J = \nu(f^+ - f), \quad \nu = \frac{\delta p}{\mu}, \quad f_M = \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp(-c^2), \\ f^+ = f_M \left(1 + \frac{8}{5}(1 - \mathrm{Pr}) S_\alpha c_\alpha \left(c^2 - \frac{5}{2}\right)\right), \quad \boldsymbol{S} = \frac{\boldsymbol{q}}{nT^{3/2}}. \end{gathered} \tag{8}$$

Для макроскопических величин получаем:

$$\left(n, n\boldsymbol{u}, \frac{3}{2}nT + nu^2, \boldsymbol{q}\right) = \int \left(1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \frac{1}{2}\boldsymbol{v} v^2\right) f d\boldsymbol{\xi}. \tag{9}$$

В безразмерных переменных граничное условие диффузного отражения (5) переписывается в виде

$$f_w = \frac{n_w}{(\pi T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right), \quad n_w = 2\sqrt{\frac{\pi}{T_w}} N_i, \quad N_i = -\int\limits_{\xi_n<0} \xi_n f d\boldsymbol{\xi}. \tag{10}$$

В разделе 1.6 описываются линеаризованные формулировки кинетического уравнения с приближенным интегралом столкновений Е.М. Шахова (Шахов, 1968).

Глава 2 посвящена описанию разработанного оригинального варинта метода дискретных скоростей решения кинетического уравнения в трехмерном случае.

В разделе 2.1 обсуждаются основные трудности, возникающие при численном решении кинетического уравнения в пространственном случае, формулируются общие требования к численным методам решения и приводится краткое описание предлагаемого метода решения. Трудности решения кинетического уравнения включают в себя высокую размерность; разрывность функции распределения при наличии выпуклых граничных поверхностей; необходимость создания консервативной аппроксимации интеграла столкновений; жесткость уравнения по правой части при $\delta \gg 1$. Предлагаемый в данной работе метод решения представляет собой квазимонотонную полностью неявную схему типа С.К. Годунова, консервативную по приближенному интегралу столкновений. Возможно использование как многоблочных структурированных, так и произвольных неструктурированных сеток независимо как в физическом, так и в скоростном пространствах; при этом дискретизация оператора переноса является неоднородной и может подстраиваться под тип используемых элементов сетки. Перечисленные особенности численного метода решения выгодно отличают его от описанных в литературе подходов (Li, Zhang, 2003; Kolobov et al., 2007; Клосс и др., 2008; Baranger et al., 2014; Colonia et al., 2016) и позволяют создавать на его основе эффективные комплексы параллельных программ.

В разделе 2.2 описывается общий вид метода дискретных скоростей. Введем ограниченную расчетную область и неструктурированную сетку из ячеек V_i в физическом пространстве и узлов $\boldsymbol{\xi}_j$ в скоростном. Функции f, $f^{(S)}$ будем задавать в центрах ячеек скоростной и физической сеток, интерпретируя их для каждой ячейки V_i физического пространства как векторы длины N_ξ с компонентами

$$f_{ij} = f(t, \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\xi}_j), \quad f_{ij}^{(S)} = f^{(S)}(t, \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\xi}_j), \quad \boldsymbol{\xi}_j = (\xi_{1j}, \xi_{2j}, \xi_{3j})$$

Интегрирование по ячейке V_i и стандартная аппроксимация интегралов от потоков и правой части приводит к полудискретной схеме

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}_i}{\partial t} = \boldsymbol{R}_i = -\frac{1}{|V_i|}\sum_{l=1} \boldsymbol{\Phi}_{li} + \boldsymbol{J}_i, \quad \boldsymbol{\Phi}_{li} = \int\limits_{A_{li}} (\boldsymbol{\xi}_{nli} \circ \boldsymbol{f}) dS. \tag{11}$$

Здесь $\boldsymbol{\Xi}_k$ — вектор, компонентами которого являются k-компонента молекулярной скорости во всех узлах сетки: $\boldsymbol{\Xi}_k = (\xi_{k1}, \xi_{k2}, \xi_{k3}, \ldots \xi_{kN_\xi})^T$;, $\boldsymbol{\xi}_{nil} = n_{1l}\boldsymbol{\Xi}_1 + n_{2l}\boldsymbol{\Xi}_2 + n_{3l}\boldsymbol{\Xi}_3$; через $\circ$ обозначена операция покомпонентного умножения двух векторов: $c = a \circ b$ – вектор с компонентами $c_i = a_i b_i$. Формулы (11) определяют общий вид противопоточной схемы на произвольной шестимерной сетке в фазовом пространстве.

В разделе 2.3 приводится описание дискретизации правой части схемы $\boldsymbol{R}_i$, которая включает в себя задание способа вычисления численных потоков схемы $\boldsymbol{\Phi}_{li}$ и модельного интеграла столкновений $\boldsymbol{J}_i$.

Для нахождения потоков схемы $\boldsymbol{\Phi}_{li}$ с помощью квази-монотонной схемы второго порядка аппроксимации необходимо знать значения функции распределения в центре грани. В противопоточных схемах типа С.К. Годунова для каждой грани пространственной сетки имеются два значения функции распределения $\boldsymbol{f}^-$, $\boldsymbol{f}^+$, соответствующие экстраполяции из двух прилегающих ячеек (индексы ячейки и грани опущены для простоты). Для граней сетки, лежащих на границах расчетной области в физическом пространстве, значение $\boldsymbol{f}^+$ находится из граничного условия. Значение потока находится по формуле

$$\boldsymbol{\Phi}_{li} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}_{nli} \circ \left[\boldsymbol{f}^- + \boldsymbol{f}^+ - \mathrm{sign}(\boldsymbol{\xi}_{nli}) \circ (\boldsymbol{f}^+ - \boldsymbol{f}^-)\right] |A_{li}|. \tag{12}$$

Сначала рассмотрим процедуру экстраполяции значений функции распределения на внутренние грани сетки, после чего опишем процедуру аппроксимации граничных условий. В общем случае, реконструкция решения из средних значений внутри ячейки в схеме высокого порядка аппроксимации дается формулой

$$\boldsymbol{f}_{li} = \boldsymbol{f}_i + \boldsymbol{f}_{li}^{\text{correction}}.$$

Для вычисления поправки $\boldsymbol{f}_{li}^{\text{correction}}$ могут использоваться два подхода. В наиболее общем способе величины $\boldsymbol{f}_{li}$ выражаются с помощью метода наименьших квадратов через средние значения в ячейках шаблона реконструкции V_{m_i} по формуле

$$\boldsymbol{f}_{li}^{\text{correction}} = \boldsymbol{\psi}_i^{3d} \cdot \left(\sum_{m=0}^{M} \omega_{iml} \boldsymbol{f}_{m_i} - \boldsymbol{f}_i\right). \tag{13}$$

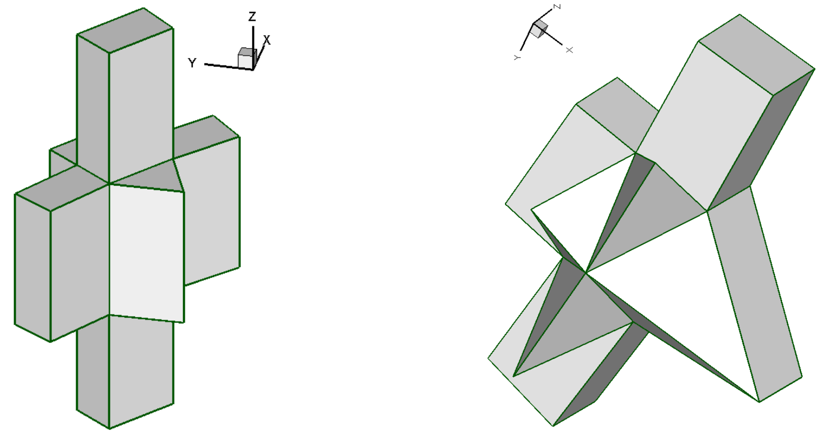


Рисунок 1 – Примеры шаблонов реконструкции (13) на произвольной сетке.

Пример шаблонов реконструкции для метода наименьших квадратов приведен на рис. 1. Коэффициенты ω_{iml} определяются только геометрией сетки и находятся на этапе инициализации счета.

Для гексаэдральных ячеек возможно использование локально-одномерного подхода, в котором значения $\boldsymbol{f}_{li}$ находятся интерполяцией вдоль сеточных линий в направлении нормали к грани:

$$\boldsymbol{f}_{li}^{\text{correction}} = \boldsymbol{\psi}_{li}^{1d}(\boldsymbol{S}_L, \boldsymbol{S}_R)\Delta_l, \tag{14}$$

где Δ_l – расстояние от центра ячейки i до центра грани l; $\boldsymbol{S}_L$ и $\boldsymbol{S}_R$ - левая и правая оценки наклона решения.

Для обоих типов реконструкции функция $\boldsymbol{\psi}$ – т.н. ограничитель наклонов, используемый для подавления паразитных осцилляций на разрывах. Ее значения определяются локальным поведением численного решения.

В рамках описанного метода решения возможно использование неоднородной аппроксимации оператора переноса, в которой метод (14) применяется для гексаэдральных ячеек, в то время как для всех остальных используется (13); в специальных случаях возможно локальное понижение порядка аппроксимации до первого (например, в областях плохого качества расчетной сетки).

Опишем способ вычисления макроскопических величин, обеспечивающий консервативность метода по правой части. Рассмотрим прямую аппроксимацию выражений для макропараметров газа квадратурной формулой второго порядка аппроксимации:

$$(\boldsymbol{U}, \boldsymbol{q}) = \left(n, n\boldsymbol{u}, \frac{3}{2}nT + n\boldsymbol{u}^2, \boldsymbol{q}\right) = \sum_{j}^{N_\xi} \left(1, \boldsymbol{\xi}_j, \xi_j^2, \frac{1}{2}\boldsymbol{v}_j v_j^2\right) f_j \omega_j. \tag{15}$$

Здесь ω_j – величина объема ячейки скоростной сетки. С другой стороны, интегрируя схему с весами 1, $\boldsymbol{\xi}$, ξ^2, мы должны получить дискретный аналог уравнений сохранения массы, импульса и энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{U} + D_h(\boldsymbol{\Pi}) = \boldsymbol{\delta}_{\mathrm{Kn}}, \quad \boldsymbol{\delta}_{\mathrm{Kn}} = \sum_j^{N_\xi}(1, \boldsymbol{\xi}_j, \xi_j^2)^T J_j\omega_j. \tag{16}$$

В идеальном случае (при точном интегрировании) схема должна быть консервативна $\boldsymbol{\delta}_{\mathrm{Kn}} \equiv \mathbf{0}$. Однако при использовании прямой аппроксимации для $\boldsymbol{U}$ мы получаем неконсервативную схему: $|\boldsymbol{\delta}_{\mathrm{Kn}}| \approx (1/\,\mathrm{Kn})O\left(\Delta\xi^2\right)$. Основная идея метода расчета макроскопических величин состоит в прямой аппроксимации условий (3). Вектор простых переменных $\boldsymbol{W} = (n, \boldsymbol{u}, T, \boldsymbol{q})^T$ находится из системы уравнений

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{W}) = \sum_{j=1}^{N_\xi} \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{\xi} \\ \xi^2 \\ \boldsymbol{v}v^2 \end{pmatrix}_j (f^{(S)} - f)_j\omega_j + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ 2\,\mathrm{Pr}\,\boldsymbol{q} \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \tag{17}$$

Данная система решается методом Ньютона. В качестве начального приближения используются значения (15). Для ускорения метода в работе построено приближенное аналитическое выражение для матрицы Якоби, использование которого существенно уменьшает время счета, несмотря на потерю квадратичной сходимости итераций. В частном случае $\mathrm{Pr} = 1$ первые пять уравнений (17) сводятся к использованию законов сохранения (Mieussens, 2000; Gusarov, Smurov, 2002).

Для линеаризованного интеграла столкновений система уравнений (17) значительно упрощается и ее решение находится без итераций. Макроскопические переменные находятся путем матричных умножений без использования итераций.

Важной частью численного метода является алгоритм аппроксимации граничных условий. Чтобы обеспечить расчет граничного условия зеркального отражения от плоскости симметрии (6) скоростная сетка строится таким образом, чтобы обеспечить попадание вектора скорости отраженной молекулы $\boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\xi} - 2\xi_n\boldsymbol{n}$ в узел сетки. После этого расчет граничного условия тривиален: $f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) = f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}_1)$. Далее, для всех граней ячеек сетки, лежащих на поверхности тела интегрированием по $\boldsymbol{\xi}$ вычисляются макроскопические параметры, входящие в выражения для функции распределения отраженных молекул для граничного условия диффузного отражения (10). При заданной температуре поверхности T_w плотность отраженных молекул n_w на каждом шаге по времени

$$n_w = -\frac{N_i}{N_r}, \quad N_i = \sum_{\xi_n<0}(\xi_n f)_j\omega_j, \quad N_r = \frac{1}{(\pi T_w)^{3/2}}\sum_{\xi_n\geq 0}\left[\xi_n \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right)\right]_j\omega_j$$

В результате обеспечивается точное выполнение условия непротекания.

В разделе 2.4 описывается аппроксимация по времени, используемая в методе установления. В работе используется неявная одношаговая схема без итераций на верхнем слое, которая выводится обычным образом

$$\frac{\Delta \boldsymbol{f}_i}{\Delta t} = \boldsymbol{R}_i^{n+1}, \quad \Delta \boldsymbol{f}_i = \boldsymbol{f}_i^{n+1} - \boldsymbol{f}_i^n, \quad \to \frac{\Delta \boldsymbol{f}_i}{\Delta t} = \boldsymbol{R}_i^n + \left(\frac{\partial \boldsymbol{R}}{\partial \boldsymbol{f}}\right) \Delta \boldsymbol{f}_i. \tag{18}$$

Проведем приближенную линеаризацию (18) по времени по формулам

$$\boldsymbol{\Phi}_{li}^{n+1} \approx \boldsymbol{\Phi}_{li}^n + \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{li}^n}{\partial \boldsymbol{f}_i^n} \circ \Delta \boldsymbol{f_i} + \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{li}^n}{\partial \boldsymbol{f}_{i_l}^n} \circ \Delta \boldsymbol{f_{i_l}}, \quad \boldsymbol{J}_i^{n+1} \approx \boldsymbol{J}_i^n - \nu_i^n \Delta \boldsymbol{f_i}.$$

Значения на нижнем слое $\boldsymbol{\Phi}_{li}^n$ находятся с полным порядком аппроксимации по пространству. При дальнейших упрощениях будем полагать, что в левой части численный поток аппроксимируется противопоточной схемой первого порядка. Группируя члены и выделяя в явном виде коэффициент перед Δf_{ij}, получаем

$$\boldsymbol{d}_i \circ \Delta \boldsymbol{f}_i + \Delta t \sum_l \boldsymbol{c}_{il} \circ \Delta \boldsymbol{f}_{i_l} = \Delta t \boldsymbol{R}_i^n. \tag{19}$$

Для решения (19) используется приближенная факторизация разреженной матрицы системы на основе подхода, предложенного в (Yoon and Jameson, 1988; Men'shov, Nakamura, 1995). Система решается в два этапа. Сначала выполняется обратный ход метода, и находятся промежуточные значения $\Delta \boldsymbol{f}_i^*$:

$$\boldsymbol{d}_i \circ \Delta \boldsymbol{f}_i^* = - \sum_{l: i_l < i} \boldsymbol{c}_{il} \circ \Delta \boldsymbol{f}_{i_l}^* + \Delta t \boldsymbol{R}_i^n, \quad i = N_{space}, \dots 1. \tag{20}$$

Затем следует прямой ход метода, который выдает окончательные значения для приращения решения:

$$\boldsymbol{d}_i \circ \Delta \boldsymbol{f}_i = \Delta \boldsymbol{f_i}^* - \sum_{l: i_l > i} \boldsymbol{c}_{il} \circ \Delta \boldsymbol{f_{i_l}}, \quad i = 1, \dots N_{space}. \tag{21}$$

Использование формул (20), (21) не требует хранения в памяти матрицы системы уравнений; выполняемое число операций линейно пропорционально числу пространственных ячеек N_{tot}. Сравнительные расчеты показывают, что один шаг неявного метода требует лишь на 30% больше машинного времени, чем соответствующего явного.

Метод (11) может быть использован для анализа нестационарных решений (Shakhov, Titarev, 2014; Титарев, Шахов, 2017) при замене (18) на явный метод Рунге-Кутты либо схему расщепления по физическим процессам.

В разделе 2.5 описываются метод решения линеаризованного кинетического уравнения для двухмерных течений.

В главе 3 приводится описание созданных автором комплексов параллельных программ "*Несветай-2Д*", "*Несветай-3Д*" . Основное внимание уделяется трехмерному пакету "*Несветай-3Д*" и реализованной в нем двух-уровневой модели параллельных вычислений OpenMP + MPI .

В разделе 3.1 приводится краткое описание разработанных программных комплексов. Пакет программ "*Несветай-2Д*" предназначен для решения плоских задач. Его основными особенностями являются использование расчетных сеток из треугольников и четырехугольников в физическом пространстве; структурированная одноблочная скоростная сетка для интегрирования в пространстве скоростей; одноуровневая модель параллельных вычислений на основе MPI (Gropp et al., 1999).

Пакет программ "*Несветай-3Д*" предназначен для решения осесимметричных и трехмерных задач; при этом решение плоских задач может быть получено с помощью использования пространственной сетки специального вида. Его основные особенности – использование произвольных сеток как физическом, так и в скоростном пространствах, включая многоблочные гексаэдральные сетки и неструктурированные сетки типа тетра-призм; поддержка одноуровневой MPI и двухуровневой OpenMP + MPI моделей параллельных вычислений. Пакет состоит из 20000 строк на Фортран 2003/2008 с элементами объектно - ориентированного программирования (ООП). Параллельная версия комплекса протестирована на суперкомпьютерах Университета Крэнфилда (Великобритания), МСЦ, НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова, СПбПУ Петра Великого и МФТИ.

В разделе 3.2 приводится описание одной из ключевых особенностей программного комплекса "*Несветай-3Д*" – двухуровневой модели параллельных вычислений OpenMP + MPI . Отметим, что многоуровневая модель параллельных вычислений активно развивается в последние годы в приложении к газодинамическим расчетам (Chorley, Walker, 2010; Абалакин и др., 2012; Горобец, 2015).

Каждый уровень параллельной реализации в "*Несветай-3Д*" основан на декомпозиции расчетной сетки. На верхнем уровне используется технология MPI обмена данными между узлами суперЭВМ. При распределении вычислений между узлами суперЭВМ возможны два основных подхода к декомпозиции 6-мерной расчетной сетки. В первом подходе используется декомпозиция расчетной сетки в скоростном пространстве. По-видимому, впервые данная идея использовалась для решения точного уравнения Больцмана с помощью явной разностной схемы в работе (Аристов, Забелок, 2002). Второй подход является традиционным для вычислительной аэродинамики и основан на использовании декомпозиции сетки

Рисунок 2 – Схема OpenMP + MPI модели для MPI-разбиения по скорости.

в физическом пространстве. При таком подходе каждому MPI-процессу соответствует один блок сетки. Как правило, количество ячеек в каждом блоке должно быть близким; допускается дисбаланс в 1-3%. Отметим, что расчет одного временного шага с помощью параллельного многоблочного алгоритма на основе протокола MPI существенным образом отличается от одноблочного алгоритма.

На нижнем уровне организации параллельных вычислений всегда используется разбиение сетки в физическом пространстве на блоки и использование технологии OpenMP. Разбиение строится с помощью вызова стандартных библиотек (Karypis, Kumar, 1998; Капорин, Милюкова, 2011) на этапе инициализации счета. Для большинства шагов метода решения достаточно использовать простые циклы OMP с динамической балансировкой. Однако параллельная многопоточная реализация метода LU-SGS (19) решения системы уравнений для приращения функции распределения требует специальных изменений метода решения для того, чтобы скорость сходимости к стационарному решению не ухудшалась.

Таким образом, реализация OpenMP + MPI подхода позволяет использовать на узле суперЭВМ произвольную комбинацию MPI процессов и OpenMP нитей. С учетом опыта использования одноуровневой MPI-модели можно сделать следующие выводы: MPI-разбиение по пространству не имеет ограничений на размер задачи, в целом лучше масштабируется и более универсальное (подходит для уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений). При этом MPI-разбиение по скорости проще и при использовании OpenMP + MPI подхода масштабируется

Рисунок 3 – Структура программного комплекса “*Несветай-3Д*”.

практически также хорошо. В дальнейшем при проведении расчетов основным будет являться вариант MPI-разбиения в пространстве скоростей как более удобный с практической точки зрения. Блок-схема соответствующей версии параллельного алгоритма представлена на рис. 2.

В разделе 3.3 приводится описание созданного автором трехмерного программного комплекса “*Несветай-3Д*” . Общая структура программного комплекса представлена на рис. 3 и состоит из вычислительного ядра (базовой библиотеки), непосредственно кинетического решателя и препроцессоров сетки. Вычислительное ядро представляет собой набор модулей, реализующих базовые операции, необходимые для проведения расчетов: процедуры чтения пространственных сеток в различных форматах, построение информации о связности сетки; алгоритмы реконструкции скалярных функций методом наименьших квадратов на произвольной сетке; процедуры вывода пространственных и поверхностных данных в формате Tecplot. Кинетический решатель является надстройкой над ядром и реализует разностную схему решения кинетического уравнения. Препроцессоры используются для разбиения расчетной сетки при параллельных вычислениях.

В разделе 3.4 приводится краткое описание пакета программ “*Несветай-2Д*”, который предназначен для численного моделирования плоских стационарных течений одноатомного разреженного газа на основе решения кинетического уравнения с интегралами столкновений БГК и Е.М. Шахова. Программа использует неявный метод решения высокого порядка аппроксимации и реализует одноуровневую модель параллельных вычислений на основе MPI-декомпозиции в пространстве скоростей. Выходные данные могут быть визуализированы в различных программах визуализации, включая Grapher и TecPlot. Основной областью использования "*Несветай-2Д*" является анализ течений разреженного газа через микроканалы бесконечной длины.

В главе 4 представлены результаты численного моделирования стационарных задач течения разреженного газа через микроканалы различной формы и длины.

В разделе 4.1 обсуждаются общие вопросы численного моделирования течений разреженного газа в каналах, приводится общая постановка задачи течения разреженного газа через канал и определяются основные расчетные величины.

Современное состояние вопроса отражено в обзорах (Sharipov, Seleznev, 1998; Шарипов, Селезнев, 2008). Цели проводимых расчетов состояли в построении прямого численного решения задачи об истечении разреженного газа через канал в полной постановке, исследовании влияния концевых эффектов и поперечного сечения на структуру течения и расход газа и сравнении расхода массы с результатами метода ПСМ. Расчеты проводились как для коротких каналов, так и для каналов большой относительной длины.

Сформулируем общую постановку задачи течения разреженного газа из резервуара 1 в резервуар 2 через трубу длины L. В трубе газ течет слева направо от плоского входного сечения к плоскому выходному сечению. Давление в резервуарах 1, 2 обозначим p_1, p_2, температуры полагаем равными $T_1 = T_2$. Боковые стенки резервуаров и трубы поддерживаются при постоянной температуре $T_1 = T_2 = T_w$, на них происходит полная аккомодация импульса и энергии падающих молекул и диффузное отражение с равновесной функцией распределения f_w при той же температуре и с плотностью n_w, определяемой условием непротекания.

Решение задачи зависит от следующих параметров: отношения давлений p_2/p_1 покоящегося газа в резервуарах, параметра разреженности δ, определенного по значениям макроскопических величин в резервуаре высокого давления и характерному размеру входного сечения трубы a, относительной длины L/a, формы поперечного сечения и закона вязкости. В дальнейшем всегда принималось $\mu = \sqrt{T}$, что соответствует закону взаимодействия по модели твердых сфер.

Основной расчетной величиной является безразмерный расход массы $\dot{M}$ через входное сечение трубы. Однако при анализе результатов удобно использовать два коэффициента, представляющих собой нормированные расходы массы. Первый коэффициент Q определяется по формуле (Шахов, 1996; Varoutis et al., 2009):

$$Q = \dot{M}/\dot{M}_0^{\text{отв}}, \quad \dot{M}_0^{\text{отв}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}|A|. \tag{22}$$

Здесь величина $\dot{M}_0^{\text{отв}}$ – расход газа при свободно-молекулярном истечении в вакуум через отверстие единичной площади, форма которого соответствует входному сечению трубы, $|A|$ – площадь входного сечения трубы. Введение второго редуцированного расхода массы вызвано необходимостью сравнивать результаты счета со случаем бесконечно длинной трубы. Данный расход определяется как:

$$M_p = \frac{2}{|A|}\frac{1}{K_p}\dot{M}, \quad K_p = \frac{p_1 - p_2}{L}. \tag{23}$$

Здесь величину K_p можно интерпретировать как некоторый средний градиент давления вдоль трубы. Далее результаты данной главы будут представлять собой продвижение от самого простого случая течения в бесконечной трубе под действием малого постоянного градиента давления либо температуры к истечению газа в вакуум через длинную трубу переменного сечения.

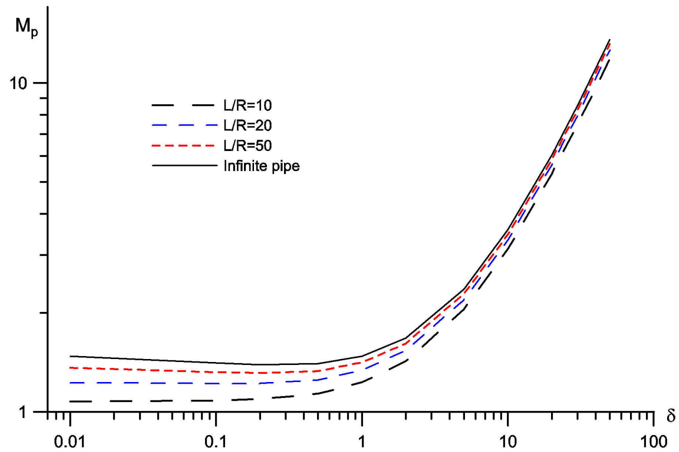
В разделе 4.2 описываются известные в литературе аналитические решения, которые позволяют найти расход массы для предельных случаев: использование интегрального уравнения Клаузинга (Clausing, 1932) для свободномолекулярного случая и метода плоских сечений (Sharipov, Seleznev, 1994). В рамках данного метода в каждом сечении, достаточно удаленном от концов трубы, течение можно рассматривать как течение Пуазейля в бесконечно длинной трубе, обусловленное локальным градиентом давления и параметром разреженности. Условие постоянства полного потока массы (уравнение неразрывности) определяет распределение плотности вдоль трубы внутри интервала, где справедливо приближение плоских сечений; при этом границы интервала заранее неизвестны.

В разделе 4.3 изучается течение в трубе бесконечной длины. Решение задачи строится с помощью "*Несветай-2Д*". Показана высокая точность и вычислительная эффективность разработанного метода решения по сравнению с приведенными в литературе результатами. Приведены результаты расчета расхода газа для каналов с сечением в виде правильного многоугольника в широком диапазоне изменения степени разреженности течения. Показано, что решение задачи сходится к предельному случаю круглой трубы квадратично по числу сторон сечения трубы. При этом для треугольного и четырехугольного форм сечения имеет место существенное отличие расхода массы газа и потока тепла от случая круглой трубы.

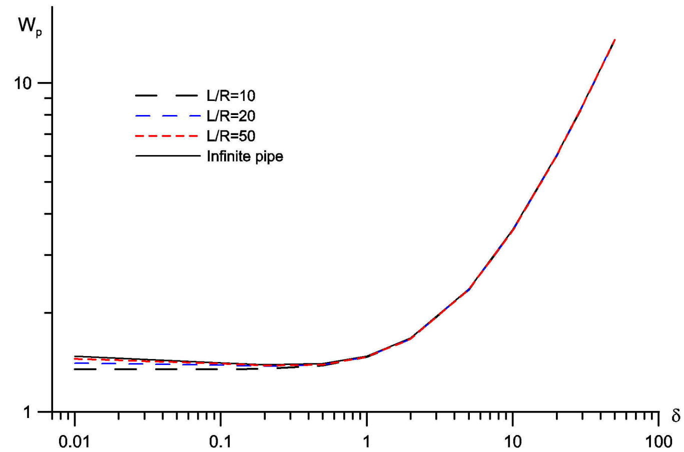
В разделе 4.4 детально рассмотрено решение задачи течения разреженного газа из камеры высокого давления в камеру низкого давления через круглую трубу для случая малого перепада давления на основе численного решения линеаризованного кинетического уравнения.

В расчетах использовалась гексаэдральная пространственная сетка со сгущением к поверхности трубы и ее входному и выходному сечениям. Общее число пространственных ячеек равнялось 150 тысячам, так что полная шестимерная сетка содержала $\approx 0.6 \times 10^9$ узлов. Все расчеты были выполнены на системах

“Чебышёв”, “Ломоносов”, установленных в НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова (Воеводин и др., 2012) с использованием от 64 до 256 ядер. Время расчета одного варианта варьировалось от 6 часов до 14 дней, в зависимости от длины трубы и значения параметра разреженности.



(а) Расход M_p, формула (23)



(б) Расход W_p, формула (24)

Рисунок 4 – Расход массы для линеаризованной задачи о течении газа в трубе.

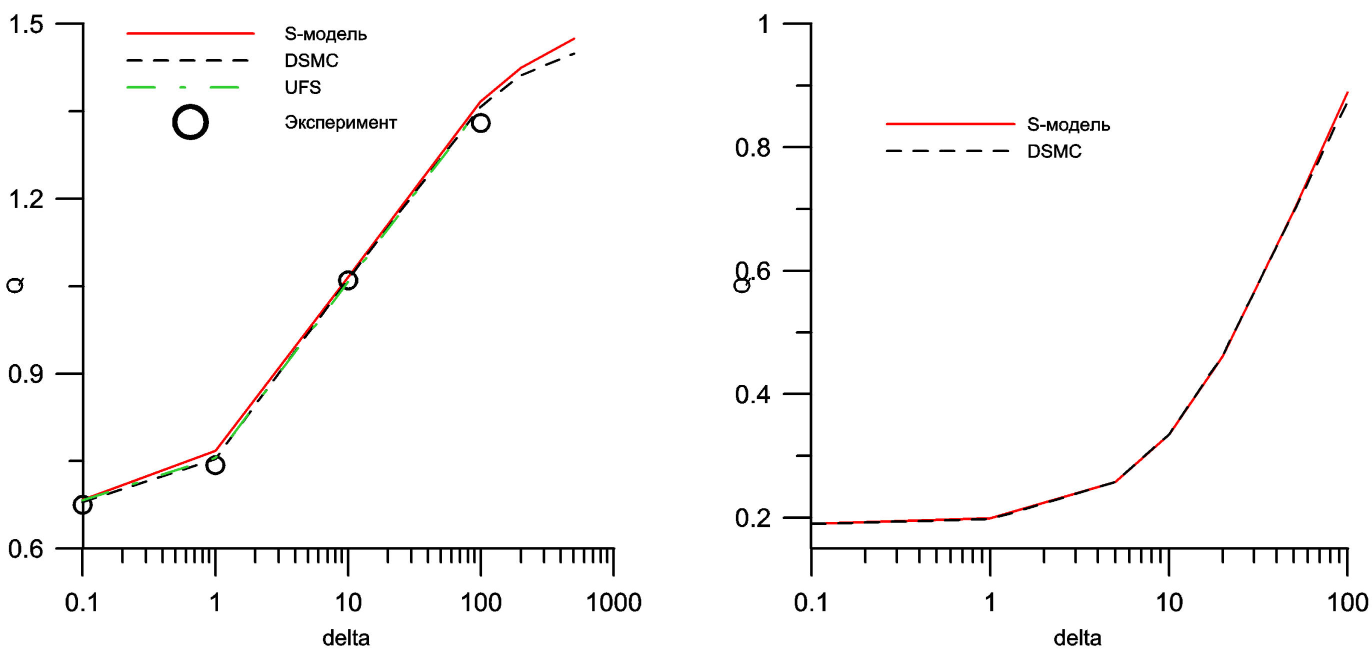
Основным результатом расчетов является безразмерный расход массы M_p в диапазоне значений параметра разреженности $0 \leq \delta \leq 100$. При этом результаты для $L/R = 10$, 20, 50 с учетом концевых эффектов получены впервые. На рис. 4 приведены зависимости M_p от δ для конечной трубы в сравнении с данными для бесконечной трубы $L/R = \infty$, как взятыми из (Graur, Sharipov, 2008), так и независимо полученными автором с помощью своего метода решения. Видно, что для $L/R \geq 20$ кривая расхода имеет выраженный минимум, называемый Кнудсеновским, расположенный около $\delta \approx 0.2$. Однако при этом кривые расхода для разных значений L/R не совпадают для любых δ. Как и в случае короткой трубы, с целью оценки точности счета приведено сравнение с точным свободно-молекулярным решением Клаузинга (непосредственные значения взяты из (Berman, 1965; Berman, 1966)) и получено хорошее согласие.

В работах (Шахов, 1999; Шахов, 2000) было показано, что для достаточно длинных труб течение в серединной части трубы приближается к асимптотическому решению для бесконечной трубы вдали от концов. При выполнении условия $(L/R)\delta \geq 10$ данное поведение течения наблюдается в широком диапазоне значений параметра разреженности. С целью проверки данного наблюдения в настоящей работе используется расход массы, нормированный на градиент давления в центре трубы (Шахов, 1999; Шахов, 2000)

$$W_p = -\frac{1}{d\hat{p}/dx}\dot{M}. \tag{24}$$

Важно подчеркнуть, что для трубы конечной длины значение $d\hat{p}/dx$ всегда отличается от простой формулы $\Delta p/L$ вследствие влияния концевых эффектов и поэтому должно быть получено расчетом. Зависимость W_p от δ и L/R приведена на рис. 4. Видно, что все кривые расхода теперь совпадают при выполнении условия $(L/R)\delta \geq 10$. Таким образом, расход газа линейно зависит от градиента давления в центре трубы, так что величина W_p гораздо лучше описывает качественное поведение решения. Однако если требуется численное значение расхода массы для заданной пары L/R, δ, следует использовать M_p.

В тексте диссертации приведено сравнение результатов вычислений с аналитическим решением задачи Пуайзеля для уравнений Навье-Стокса несжимаемой жидкости. Показано, что в среднем сечении трубы кинетическое решение приближается к решению уравнений Навье-Стокса с увеличением L/R. Однако вблизи выходного сечения различие между двумя профилями достаточно большие для всех L/R.



(а) $L/R = 1$ (б) $L/R = 10$

Рисунок 5 – Сравнение значений расхода массы (22) при истечении в вакуум.

В разделе 4.5 изучается истечение газа через круглую трубу постоянного радиуса для больших перепадов давления, включая случай истечения в вакуум.

Сначала рассматривается так называемая стандартная тестовая задача из работы (Sharipov, 2012), которая соответствует истечению газа в вакуум через короткую трубу $L/R = 1$. В работе построено численное решение на последовательности из трех вложенных пространственных сеток и получен порядок сходимости 1.6, близкий ко второму. На рис. 5 представлено сравнение с расчетами по методу

ПСМ (Varoutis et al., 2008), решением точного уравнения Больцмана с помощью пакета UFS (Aristov et al., 2014), экспериментальными данными (Fujimoto, Usami, 1984). Видно хорошее согласие во всем диапазоне чисел Кнудсена. Вторая серия расчетов относится к случаю трубы умеренной относительной длины $L/a = 10$, для которой получено расхождение с методом DMSC не более 1%. Таким образом, точность моделирования на основе решения модельного уравнения растет с ростом отношения длины трубы к ее радиусу L/R.

В тексте работы показано большое преимущество неявной схемы (до 100 раз) при построении стационарного решения задачи истечения газа из круглой трубы и превосходство двухуровневой OpenMP + MPI модели параллельных вычислений над одноуровневой MPI-моделью.

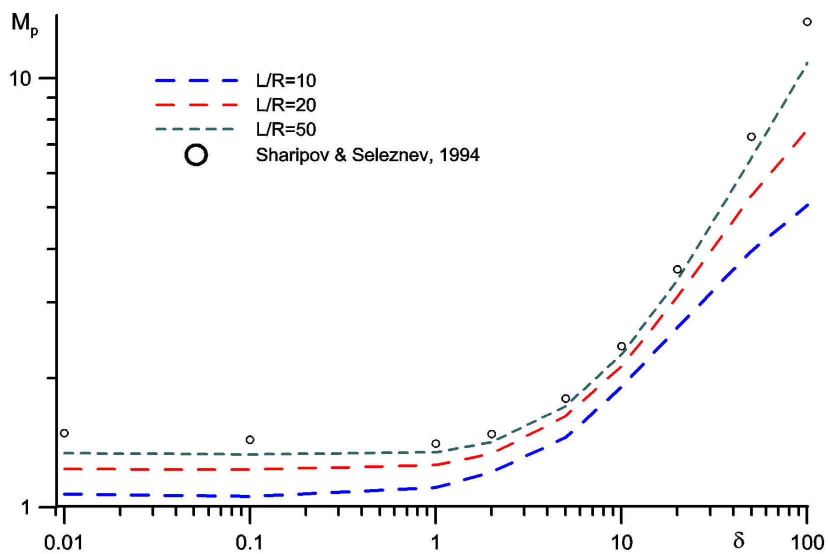
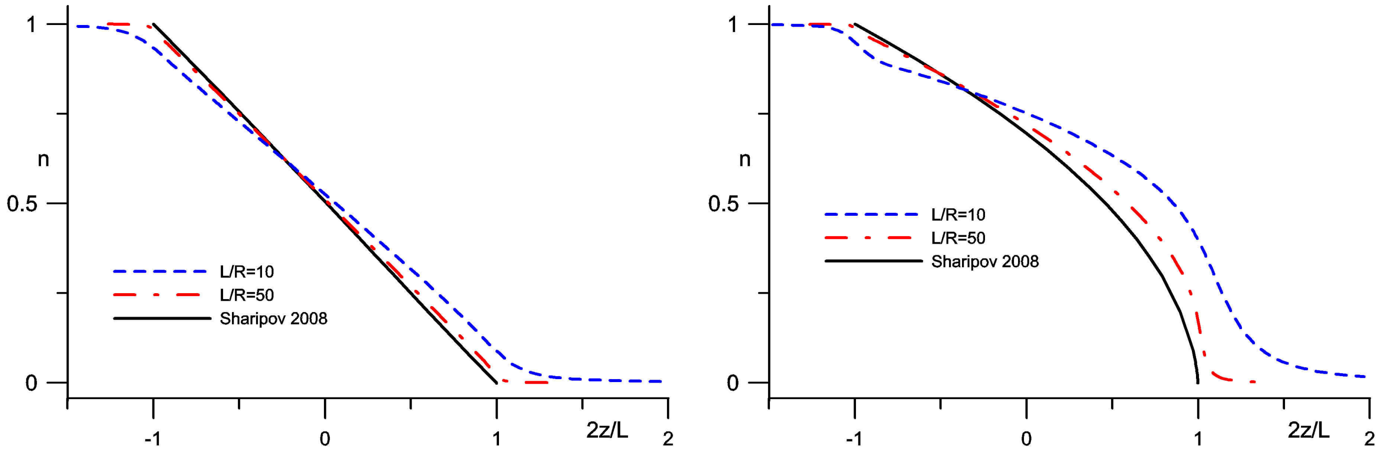


Рисунок 6 – Расход массы M_p, определенный по формуле (23), для задачи истечения газа через круглую трубу в вакуум.

Основным результатом является расчет истечения разреженного газа в вакуум ($p_2 = 0$) для значений относительной длины трубы $L/R = 1$, 10, 20 и 50 в полной геометрической постановке. Получены значения расхода массы в широком диапазоне чисел Кнудсена и относительных длин трубы. Изучено влияние концевых эффектов (упрощенной постановки задачи без одного или обоих резервуаров) на течение в трубе и значение расхода массы. Представлен критерий применимости одномерной теории – приближения плоских сечений (Sharipov, Seleznev, 1994; Шарипов, Селезнев, 2008).

На рис. 6 приведены зависимости величины M_p от относительной длины круглой трубы L/R в сравнении с приближением плоских сечений. Видно, что с увеличением относительной длины расход массы приближается к асимптотическому значению, соответствующему $L/R = \infty$ (методу плоских сечений) для умеренных значений параметра разреженности. Однако для свободномолекулярного режима



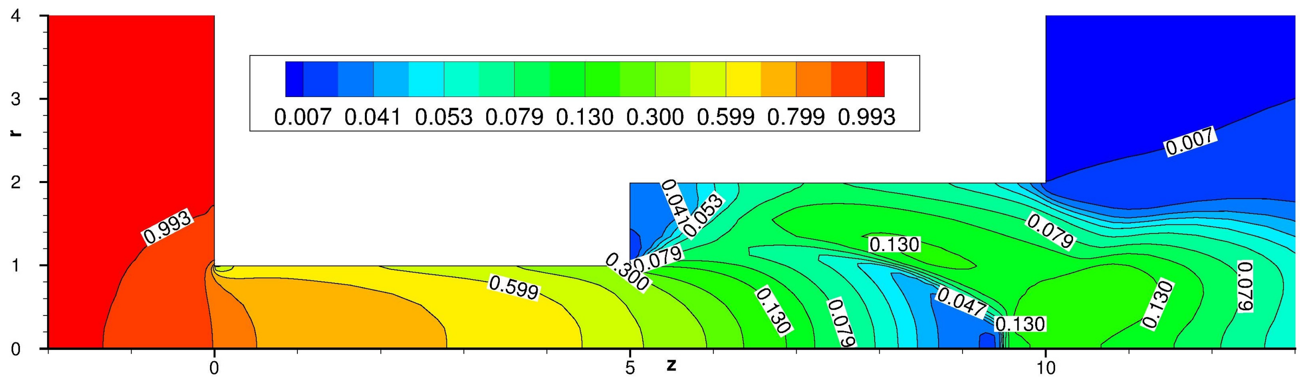
(a) Режим $\delta = 1$ (б) Режим $\delta = 100$

Рисунок 7 – Распределение плотности по оси круглой трубы в сравнении с приближением плоских сечений.

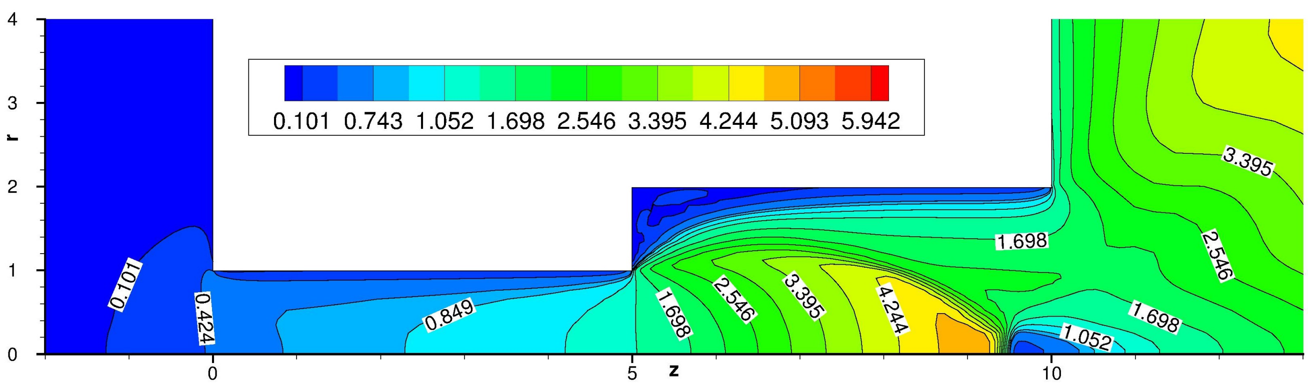
$\delta \ll 1$ и для переходного режима $\delta \geq 50$ сходимость по L/R очень медленная. Кнудсеновский минимум слабо выражен для $L/R = 20$, 50 и не существует для более коротких труб, что согласуется с данными других авторов. На рис. 7 приведены зависимости величины плотности ρ от относительной длины круглой трубы L/R в сравнении с решением задачи по методу плоских сечений для $\delta_1 = 1$, 100. Для случая длинной трубы $L/R = 50$ наблюдается хорошее согласие с одномерной теорией для $\delta = 1$ везде, кроме небольших участков вблизи концов трубы. С ростом δ расчетная кривая становится существенно нелинейной и отходит от одномерного решения. Для более коротких труб одномерная теория неточна для всего диапазона значений δ. В работе показано, что обычное условие $L/R \gg 1$ недостаточно для применимости одномерной теории; следует дополнительно потребовать $\mathrm{Kn} \cdot \mathrm{L} \gg 1$.

В разделе 4.6 рассматривается задача истечения газа в вакуум через длинную коническую трубу. Приведены расчеты расхода массы для отношений входного R_1 и выходного R_2 радиусов $R_2/R_1 = 1.1$, 2, 5, 10, относительной длины трубы $L/R_1 = 5, 10, 20, 50$ и диапазона параметров разреженности $0 \leq \delta_1 \leq 100$. Проведено сравнение со случаем трубы постоянного радиуса. Показано, что коническая геометрия приводит к росту расхода газа и существенному усложнению картины течения. В результате этого приближенный метод плоских сечений нахождения расхода массы теряет свою точность.

В разделе 4.7 приведены результаты численного моделирования течения в вакуум через составную трубу, которая состоит из двух частей одинаковой длины постоянного радиуса; при этом отношение радиусов частей равно 2. Рассматривались варианты $R_2/R_1 = 0.5$ (сужающаяся труба) и $R_2/R_1 = 2$ (расширяюща-



(а) Числовая плотность



(б) Число Маха

Рисунок 8 – Картина течения в составной трубе для $\delta = 1000$ и $L/a = 10$.

яся труба). Наиболее интересным с точки зрения возникающей картины течения является второй случай, в которой вторая секция, примыкающая к вакуумной камере, имеет вдвое больший радиус по сравнению с первой. Интересной особенностью течения в такой трубе является формирование при $\delta \gg 1$ во второй секции диска Маха и зоны возвратного течения. На рисунке 8 показаны линии уровня числа Маха и линии тока для $\delta = 1000$. В области расширяющегося течения газа на оси трубы макроскопические величины следуют по универсальной кривой, слабо зависящей от δ. При этом в течении присутствует волна разрежения Прандтля-Майера, которая отражается от второй части трубы вниз по течению. С ростом значения параметра разреженности (уменьшения числа Кнудсена) структура ударной волны становится более выраженной и позиция маховского диска устанавливается около $z \approx 9$.

В разделе 4.8 приведены результаты расчета истечения в вакуум через трубу переменного прямоугольного сечения. Продемонстрировано преимущество схем второго порядка аппроксимации по пространству над стандартным методом первого порядка. При этом для малых чисел Кнудсена более простая и быстрая локально-одномерная (структурированная) схема оказывается точнее полностью трехмерной универсальной аппроксимации. Показано, что переменность сечения канала приводит к увеличению расхода газа и качественному изменению распределения макроскопических величин вдоль оси канала.

Глава 5 посвящена использованию разработанного пакета "*Несветай-3Д*" для решения задач внешнего гиперзвукового обтекания тел потоком разреженного газа. Расчеты проводились на системах "Ломоносов" НИВЦ МГУ (Воеводин et al., 2012) и "РСК Петастрим" (Semin et al., 2014) МСЦ РАН и СПбПУ Петра Великого.

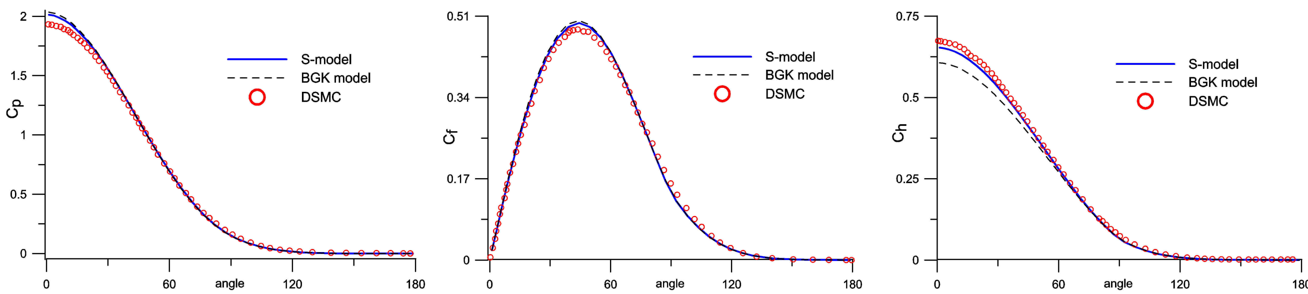
В разделе 5.1 обсуждаются общие вопросы решения кинетического уравнения для случая больших чисел Маха набегающего потока $M \gg 1$, такие как применимость модельных кинетических уравнений Шахова и БГК и построение адаптивной расчетной сетки в скоростном пространстве.

В разделе 5.2 описывается новый алгоритм построения скоростной сетки для расчета гиперзвуковых течений. Как хорошо известно, численное решение кинетических уравнений для $M_\infty \gg 1$ с использованием обычной прямоугольной сетки в скоростном пространстве сильно затруднено в силу быстрого роста числа расчетных узлов. В настоящей работе сначала оценивается требуемый размер расчетной области по формуле $|\xi| \le U_\infty + 3\sqrt{T_0}, \quad T_0 = 1 + \frac{1}{3}M_\infty^2$, где T_0 – температура торможения. Далее вблизи точек $\boldsymbol{\xi} = 0$ и $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{u}_\infty$ (с учетом возможного угла атаки набегающего потока) вводятся кубические подобласти с шагом ячейки $\Delta\xi = 0.5\sqrt{T_w}$ и $\Delta\xi = 0.5$, соответственно. Остальная часть области заполняется тетраэдрами переменного размера; линейный размер растет до $\approx 0.5\sqrt{T_0}$. В результате скоростная сетка для расчета течения с $M_\infty = 25$ содержит не более 50 тысяч узлов.

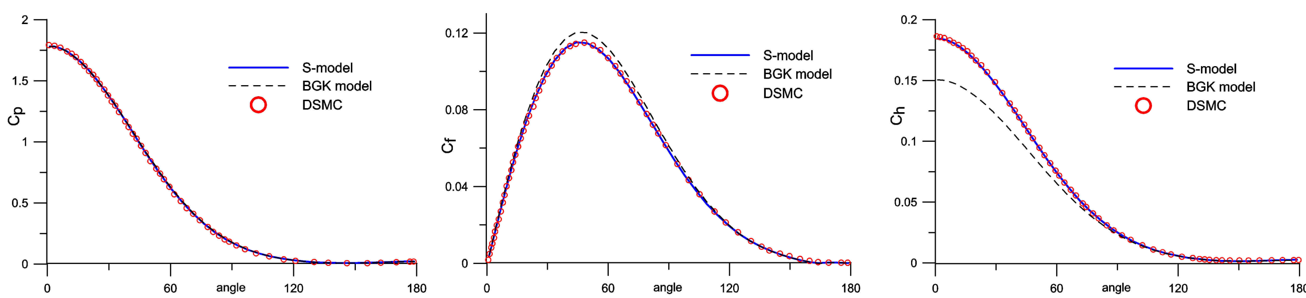
В разделе 5.3 точность модельных уравнений и метода решения оценивается на задаче гиперзвукового обтекания круглого цилиндра на адаптивной скоростной сетке. В безразмерных переменных решение задачи определяется числом Маха набегающего потока M_∞, температурой поверхности T_w, параметром разреженности, вычисленным по радиусу цилиндра, и параметром ω в законе вязкости $\mu = T^\omega$. Используется численный метод второго порядка аппроксимации (14).

Сначала оценивалось влияние выбора скоростной сетки на точность численного решения, в первую очередь на расчет наиболее чувствительной величины - потока энергии на поверхность. Для числа Маха набегающего потока $M = 10.95$ были построены две равномерных подробных сетки и две неравномерных сетки со сгущением к $\xi = 0$ и $\xi = u_\infty$. Число узлов в скоростной сетке менялось от 20 тысяч (наиболее грубая неравномерная сетка) до одного миллиона (равномерная сетка с $\Delta\xi = 1/2$). Полученные результаты показывают очень слабую зависимость решения от скоростной сетки.

Далее проводилось сравнение с результатами решения задачи обтекания цилиндра радиуса 6 дюймов (15.24 см) с помощью DSMC кода MONACO (Dietrich, Boyd, 1996) для аргона и азота, чисел Маха $M_\infty = 10, 25$ и большого диапазона изменения параметра разреженности δ. Наиболее интересными являются расчеты обтекания потоком аргона для $M_\infty = 25$, которые позволяют оценить ошибку, совершаемую при замене точного интеграла столкновений на модельный интеграл столкновений. Использовавшаяся сетка в физическом пространстве состояла из 115×40 ячеек в плоскости x-y и 3 ячеек по оси z. Размер первой ячейки в пристеночном слое $h_n = 10^{-4}$. Скоростная сетка состояла из 35720 узлов. Расчеты проводились на кластере МФТИ с использованием 144 ядер. Решение задачи для $\delta \approx 1$ требует 6 часов времени, для $\delta = 40$ требуется 48 часов.



(а) $\delta = 1.6$ (Kn ≈ 0.56)

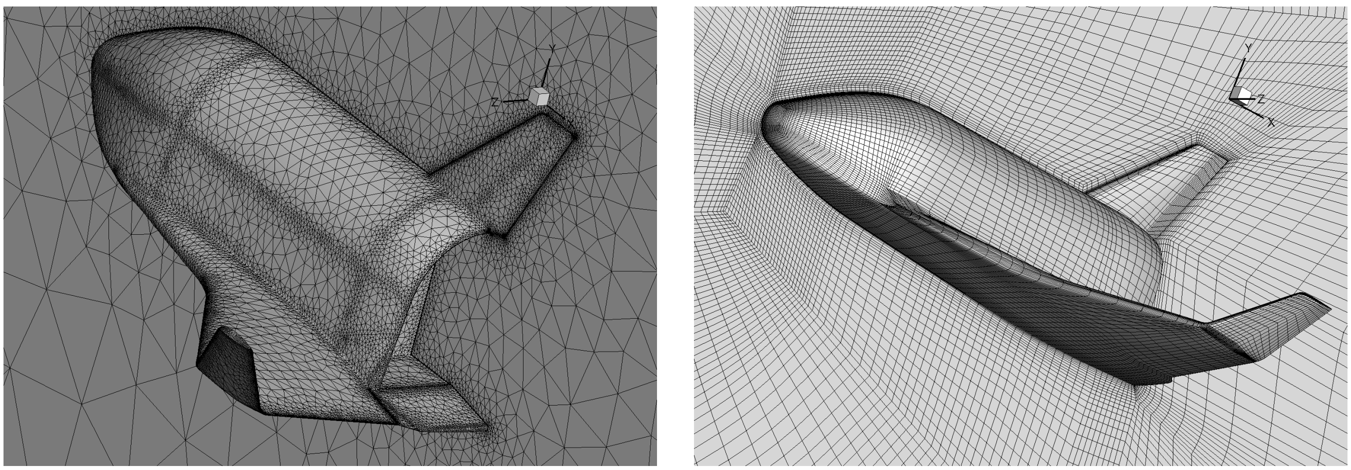


(б) $\delta = 40$ (Kn ≈ 0.0225)

Рисунок 9 – Распределение коэффициентов давления c_p, трения c_f и теплоотдачи c_h по поверхности цилиндра при обтекании аргоном для $M_\infty = 25$.

Задача решалась для значений плотности набегающего потока $\rho_\infty = 1.127 \times 10^{-6}$ кг/м^3 и 2.818×10^{-5} кг/м^3. Во всех случаях размерная скорость набегающего потока $U_\infty = 6585$ м/с, температура потока $T_\infty = 200$K, температура поверхности $T_w = 1500$K. Соответствующие значения параметра разреженности равнялись $\delta = 1.6$ (разреженный режим) и $\delta = 40$ (режим сплошной среды). В безразмерных переменных скорость потока $S_\infty = 22.82$, температура поверхности $T_w = 7.5$, закон вязкости $\mu = T^{0.734}$.

На рис. 9 приведено сравнений распределений коэффициентов давления, трения и теплоотдачи по поверхности цилиндра. Видно отличное согласие расчетов по методу ПСМ (DSMC) и модельному уравнению Е.М. Шахова для обоих значений δ; максимальное различие в передней точке торможения составляет не более 2%. Использование модели БГК приводит к довольно заметной ошибке в профиле температуры и коэффициенте теплоотдачи для $\delta = 40$. Таким образом, впервые показана хорошая точность S-модельного кинетического уравнения в задачах гиперзвукового обтекания затупленных тел, включая задачу расчета теплообмена на поверхности.

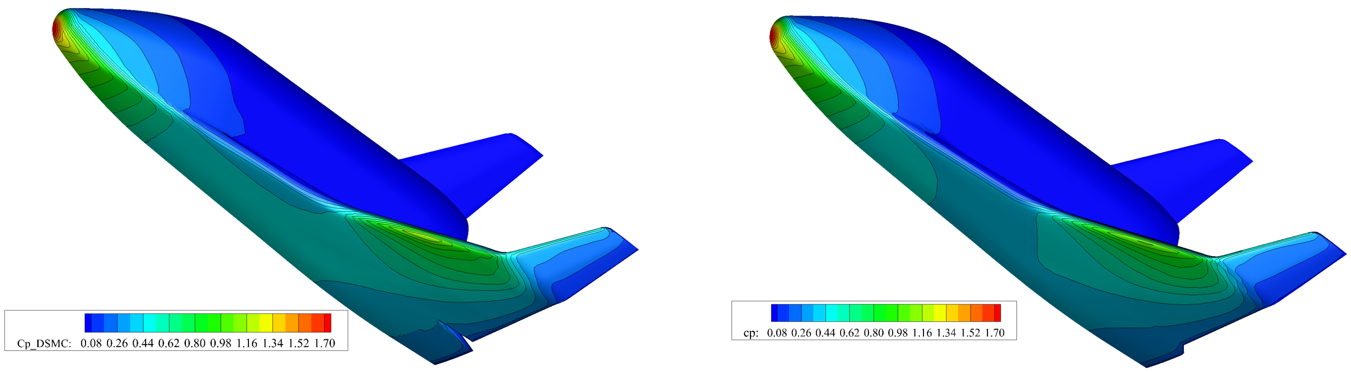


(а) Тетра-призматическая сетка (б) Гексаэдральная сетка

Рисунок 10 – Пространственные сетки для задачи расчета обтекания ВКА ЦАГИ

В разделе 5.4 точность и надежность счета разработанного комплекса программ “*Несветай-3Д*” иллюстрируется на задаче обтекания воздушно-космического аппарата (ВКА) ЦАГИ. Модель ВКА имеет сложную форму и состоит из фюзеляжа с затупленным носком, двух крыльев, вертикального киля и щитка. Общая длина тела со щитком - 10 метров. Ранее, обтекание модели ВКА потоком воздуха в режиме сплошной среды рассматривалось в работе (Ваганов и др., 2009).

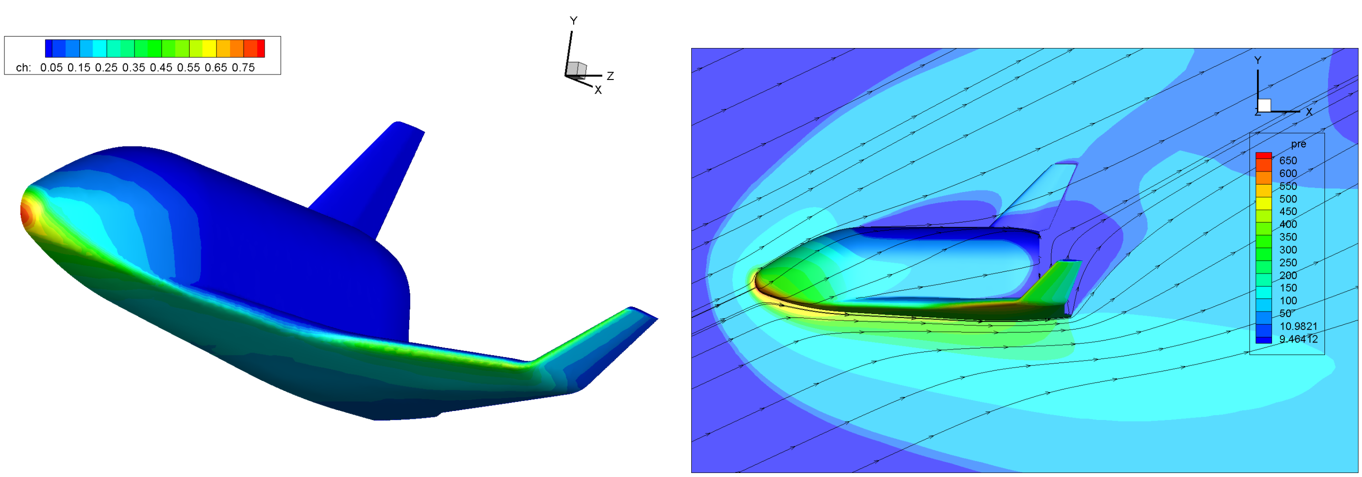
Для проведения расчетов с помощью системы Ansys ICEM CFD были созданы две сеточные модели в физическом пространстве. Они представлены на рис. 10. Первая модель сетки состоит из трех слоев призматических элементов вблизи поверхности тела и пирамид/тетраэдров в остальной части области. Общее число элементов сетки - 401 тысяча, из них 321 тысяча тетраэдров, 79 тысяч призм и 160 пирамид. Решение задачи на данной сетке строится с помощью схемы на основе метода наименьших квадратов (13). Вторая сеточная модель представляет собой многоблочную гексаэдральную сетку, состоящую из 161 блоков с общим числом ячеек 436 тысяч. Для гексаэдральной сетки могут применяться обе схемы второго порядка аппроксимации (13),(14).



(a) расчет кодом SMILE (б) расчет кодом “*Несветай-3Д*”

Рисунок 11 – Сравнение значений c_p для $M_\infty = 10$, $\alpha = 25$, $H = 90$ км и $T_w/T_\infty = 5$.

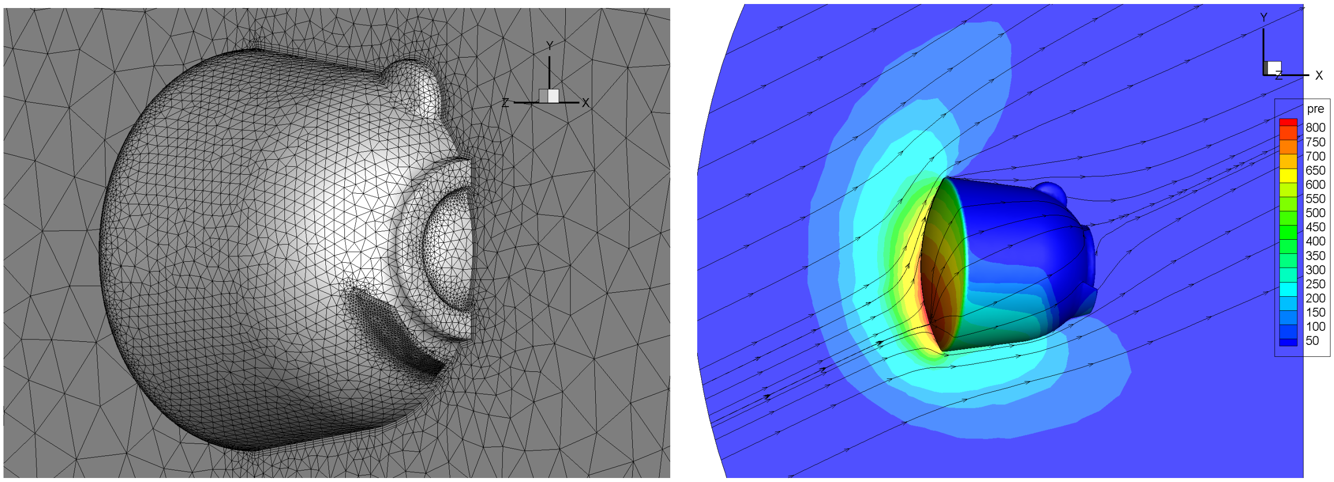
В первой серии расчетов проводилось сравнение с кодом SMILE (Ivanov et al., 2007), вычисления которым проводились Е.А. Бондарем, П.В. Ващенковым и А.А. Шевыриным в рамках проекта РФФИ 15-07-02986. Расчеты проводились для высоты $H = 90$ км в рамках модели одноатомного газа, но для молярной массы 28.8e-3 моль/кг$\cdot$ моль, соответствующей обтеканию воздухом. В расчетах ПСМ не учитывались внутренние степени свободы. Параметры набегающего потока: температура $T = 186.87$ К, давление p=0.1836 Па, числа Маха набегающего потока $M_\infty = 5, 10$. Температура поверхности принималась равной $T_w = 934.35$ К (холодная поверхность). Использовался безразмерный закон вязкости $\mu = T^{0.734}$. Значение параметра разреженности на метр длины $\delta = 38/$м. Расчеты проводились для углов атаки $\alpha = 0$ и 25 градусов.



(а) коэффициент c_h, сетка тетра-призм (б) давление и линии тока, гекса-сетка

Рисунок 12 – Расчет обтекания ВКА для $U_\infty = 7900$ м/с, $\alpha = 25$ и $H = 100$ км.

В приведенных в работе результатах показано хорошее согласие результатов счета для коэффициентов давления и трения. Так, на рис. 11 представлено сравне-



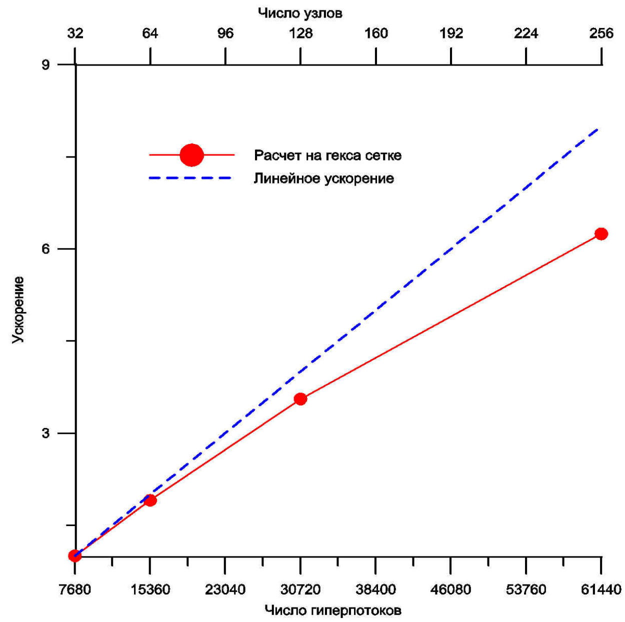
(а) Расчетная сетка (б) Линии уровня давления и линии тока

Рисунок 13 – Расчетная сетка и поле течения для задачи обтекания затупленного сегментально – конического тела с надстройками.

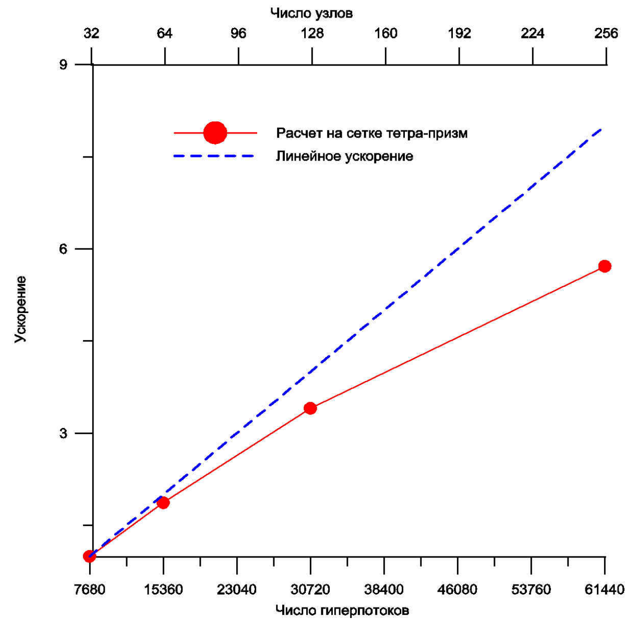
ние для коэффициента давления c_p. Для наиболее сложной в расчете величины, коэффициента теплопередачи c_h, на носке модели расчет ПСМ дает несколько большие значения, которые близки к решению задачи пакетом “*Несветай-3Д*” с помощью менее точной схемы первого порядка. В целом, получено хорошее согласие для расчета по S-модели и методом ПСМ для задачи обтекания трехмерного тела сложной формы на используемой грубой расчетной сетке.

Во второй серии расчетов рассматривалась задача расчета обтекания для высоты полета 100 км, угла атаки 25 градусов и скорости набегающего потока 7900 м/с, которая соответствует входу аппарата в атмосферу с первой космической скоростью (для воздуха $M_\infty = 28$). В данном случае параметр разреженности на метр длины $\delta/\text{м} = 0.71$. В расчетах использовалась модель твердых сфер $\mu = \sqrt{T}$. Расчетная сетка в скоростном пространстве состояла из 45 тысяч узлов, так что при расчете обтекания на гексаэдральной пространственной сетке для скорости потока $U_\infty = 7900$ м/с общее число узлов в 6-мерной сетке равнялось 19,6 миллиардам.

В тексте работы представлено сравнение результатов счета на обеих пространственных сетках. Влияние типа сетки проявляется на распределении коэффициента трения, в то время как для коэффициента давления и теплопередачи использование тетра-призматической сетки дает достаточно аккуратные результаты. В целом, гексаэдральная сетка лучше подходит для проведения расчетов с большими числами Маха набегающего потока, однако ее построение требует достаточно больших трудозатрат (около недели) в виду сложности геометрии тела. Построение тетра-призматической сетки требует нескольких часов, так что такой тип сеток подходит для проведения оценочных расчетов. Некоторые результаты сче-



(а) Гексаэдральная сетка, 9.5 миллиарда ячеек



(б) Сетка тетра-призм, 8.7 миллиарда ячеек

Рисунок 14 – Ускорение счета на примере решении задачи обтекания ВКА.

та иллюстрирует рис. 12. Видна типичная картина обтекания с формирующейся головной ударной волной и зоной сильного падения давления и образования возвратного течения за телом.

В разделе 5.5 приведены результаты расчета обтекания потоком воздуха модели затупленного сегментально – конического тела с надстройками. Из-за сложности геометрии задачи использовалась пространственная сетка типа тетра-призм, состоящая из 326 тысяч элементов, из них 294 тысячи тетраэдров, 32 тысячи призм и 360 пирамид. Параметры задачи совпадают с параметрами расчета модели ВКА для высоты 100 км, приведенными выше. Общее число узлов в 6-мерной сетке равнялось 14,7 миллиардам. На рис. 13 представлены детали сетки и картина течения для $U_\infty = 7900$м/с. Видна типичная картинка обтекания тела гиперзвуковым потоком разреженного газа. Перед передней крышкой аппарата формируется отошедшая ударная волна, в то время как в донной области давление падает до околонулевых значений: перепад давления между передней и задней точками торможения составляет 10^5 раз. Тем не менее, программный комплекс "*Несветай-3Д*" позволяет построить решение задачи.

В разделе 5.6 приведены результаты тестирования масштабируемости параллельной версии кода "*Несветай-3Д*" на задачах внешнего обтекания на различных российских суперЭВМ. Рекордными являются расчеты на системе РСК "Петастрим", установленной в Суперкомпьютерном центре СПбПУ Петра Великого. На рис. 14 представлены результаты тестирования кода на задаче обтекания модели

ВКА для скорости потока 1500 м/с с использованием до 256 узлов кластера, что соответствует 61440 гиперпотокам. Полученная эффективность около 75% находится на уровне лучших примеров из вычислительной аэродинамики (Абалакин и др., 2012). Время счета одного варианта на 256 сопроцессорах равняется 12 часам.

Основные результаты работы

- Разработана новая методология численного моделирования сложных трехмерных задач механики разреженного газа на основе решения кинетических уравнений на суперЭВМ.
- Разработан новый неявный численный метод решения модельного кинетического уравнения, позволяющий моделировать течения разреженного газа на общих неструктурированных сетках для произвольных режимов обтекания. Применение метода к задаче гиперзвукового обтекания тел обеспечивает ускорение счета до 1000 раз по сравнению с общепринятыми схемами решения кинетических уравнений.
- Создан комплекс параллельных программ “*Несветай-3Д*”, позволивший эффективно построить решение трехмерного кинетического уравнения на современных суперЭВМ с использованием рекордного числа процессоров / гиперпотоков (более 60000).
- Построено решение задачи о стационарном течении разреженного газа через канал произвольной конечной длины и сложной формы. Уточнены границы применимости приближения плоских сечений, как для расхода массы, так и для распределения параметров по оси симметрии. Для составной трубы показано формирование диска Маха при достаточно малых числах Кнудсена.
- Впервые проведена количественная оценка точности моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа на основе численного решения модельного кинетического уравнения. Показано, что при больших числах Маха около тела возникают параметры течения, которые соответствуют условию применимости S-модели.
- Впервые построено решение кинетического уравнения для задачи обтекания реалистичных моделей спускаемого аппарата для режима обтекания, соответствующего входу спускаемого аппарата в атмосферу с первой космической скоростью. Для расчетов использовались шестимерные пространственные сетки с общим числом узлов до 19 миллиардов.

Публикации по теме диссертации

1. Titarev V.A. Conservative numerical methods for model kinetic equations // Computers & Fluids. – 2007. – V. 36, № 9. – P. 1446–1459.
2. Dumbser M., Käser M., Titarev V.A., Toro E.F. Quadrature-free non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for nonlinear hyperbolic systems // J. Comput. Phys. – 2007. – V. 226. – P. 204–243.
3. Титарев В.А. Численный метод расчета двухмерных нестационарных течений разреженного газа в областях произвольной формы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2009. – Т. 49, № 7. – С. 1255–1270.
4. Титарев В.А., Шахов Е.М. Консервативный метод высокого порядка для расчета течения Пуазейля разреженного газа в канале произвольного поперечного сечения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2010. – Т. 50, № 3. – С. 563–574.
5. Titarev V.A. Implicit unstructured-mesh method for calculating Poiseuille flows of rarefied gas // Commun. Comput. Phys. – 2010. – V. 8, № 2. – P. 427–444.
6. Titarev V.A., Tsoutsanis P., Drikakis D. WENO schemes for mixed-element unstructured meshes // Commun. Comput. Phys. – 2010. – V. 8, № 3. – P. 585–609.
7. Титарев В.А. Неявный численный метод расчета пространственных течений разреженного газа на неструктурированных сетках // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2010. – Т. 50, № 10. – С. 1811–1826.
8. Титарев В.А., Шахов Е.М. Неизотермическое течение газа в длинном канале на основе кинетической S-модели // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2010. – Т. 50, № 12. – С. 2246–2260.
9. Tsoutsanis P., Titarev V.A., Drikakis D. WENO schemes on arbitrary mixed-element unstructured meshes in three space dimensions // J. Comput. Phys. – 2010. – V. 230. – P. 1585–1601.
10. Titarev V.A., Drikakis D. Uniformly high-order schemes on arbitrary unstructured meshes for advection-diffusion equations // Computers & Fluids. – 2011. – V. 46, № 1. – P. 467–471.
11. Titarev V.A. Implicit high-order method for calculating rarefied gas flow in a planar microchannel // J. Comput. Phys. – 2012.– V. 231, № 1. – P. 109–134.
12. Titarev V.A. Efficient deterministic modelling of three-dimensional rarefied gas flows // Commun. Comput. Phys. – 2012. – V. 12, № 1. – P. 161–192.

13. Titarev V.A., Shakhov E.M. Computational study of a rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum // Vacuum. Special Issue “Vacuum Gas Dynamics: Theory, experiments and practical applications”. – 2012. – V. 86, № 11. – P. 1709–1716.

14. Думбсер М., Титарев В.А., Утюжников С.В. Неявный многоблочный метод решения кинетического уравнения на неструктурированных сетках // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2013. – Т. 53, № 5. – С. 762–782.

15. Титарев В.А., Шахов Е.М. Концевые эффекты при истечении разреженного газа через длинную трубу в вакуум // Известия РАН. Механика жидкости и газа. – 2013. – № 5. – С. 146–158.

16. Titarev V.A. Rarefied gas flow in a circular pipe of finite length // Vacuum. – 2013. – V. 94. – P. 92–103.

17. Титарев В.А., Утюжников С.В., Шахов Е.М. Истечение разреженного газа в вакуум через трубу квадратного сечения, переменного по длине // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2013. – Т. 53, № 8. – С. 1402–1411.

18. Aristov V.V., Shakhov E.M., Titarev V.A., Zabelok S.A. Comparative study for rarefied gas flow into vacuum through a short circular pipe // Vacuum. – 2014. – V. 103. – P. 5–8.

19. Titarev V.A., Shakhov E.M., Utyuzhnikov S.V. Rarefied gas flow through a diverging conical pipe into vacuum // Vacuum. – 2014. – V. 101. – P. 10–17.

20. Titarev V.A., Dumbser M., Utyuzhnikov S.V. Construction and comparison of parallel implicit kinetic solvers in three spatial dimensions // J. Comput. Phys. – 2014. – V. 256. – P. 17–33.

21. Titarev V.A., Shakhov E.M. Rarefied gas flow into vacuum through a pipe composed of two circular sections of different radii // Vacuum. Special Issue “Advances in Vacuum Gas Dynamics”. – 2014. – V. 109. – P. 236–245.

22. Титарев В.А. Программный комплекс “Несветай-3Д” моделирования пространственных течений одноатомного разреженного газа // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Элект. журнал. – 2014. – № 6. – Р. 124–154.

23. Титарев В.А., Утюжников С.В., Чикиткин А.В. OpenMP+MPI параллельная реализация численного метода для решения кинетического уравнения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2016. – Т. 56, № 11. – С. 1949–1959.

24. Titarev V.A. Numerical modeling of high-speed rarefied gas flows over blunt bodies using model kinetic equations // Eur. J. Mech. B Fluids. Special Issue on Non-equilibrium Gas Flows. – 2017. – V. 64. – P. 112–117.

25. Titarev V.A. Application of model kinetic equations to hypersonic rarefied gas flows // Computers & Fluids. Special Issue “Nonlinear flow and transport”. – 2017. – DOI 10.1016/j.compfluid.2017.06.019.

26. Valougeorgis D., Vasileiadis N., Titarev V. Validity range of linear kinetic modeling in rarefied pressure driven single gas flows through circular capillaries // Eur. J. Mech. B Fluids. Special Issue on Non-equilibrium Gas Flows. – 2017. – V. 64. – P. 2–7.

27. Titarev V.A. Direct numerical solution of model kinetic equations for flows in arbitrary three-dimensional geometries // Rarefied Gas Dynamics. Proc. 28th Int. Symp., AIP Conf. Proc. 1501. – 2012. – P. 262–271.

28. Titarev V.A., Shakhov E.M. Rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum // Rarefied Gas Dynamics. Proc. 28th Int. Symp., AIP Conf. Proc. 1501. – 2012. – P. 465–472.

29. Titarev V.A. Efficient numerical solution of the model kinetic equations // Vazquez-Cendon et al., editor, Numerical Methods for Hyperbolic Equations, Taylor & Francis Group, London. – 2013. – P. 293–300.

30. Titarev V.A., Shakhov E.M. Rarefied gas flow into vacuum through a long circular pipe composed of two sections of different radii // Rarefied Gas Dynamics. Proc. 29th Int. Symp., AIP Conf. Proc. 1628. – 2014. – P. 815–823.

31. Титарев В.А. Численное решение кинетических уравнений для высокоскоростных течений разреженного газа // Труды международной конференции “Суперкомпьютерные дни в России”, М.: Изд-во МГУ. – 2015. – С. 521–527.

32. Чикиткин А.В., Титарев В.А., Петров М.Н., Утюжников С.В. Параллельные технологии решения задач аэродинамики в комплексе программ “FlowModellium” // Труды международной конференции “Суперкомпьютерные дни в России”. – М.: Изд-во МГУ, – 2016. – С. 454–461.

33. Титарев В.А. Программный комплекс моделирования плоских течений одноатомного разреженного газа “Несветай-2Д”. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017613173 от 10.04.2017.

34. Титарев В.А. Программный комплекс моделирования трехмерных течений одноатомного разреженного газа “Несветай-3Д”. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017613138 от 10.04.2017.