



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 6 за 2023 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

**В.Е. Борисов, В.Т. Жуков,
М.М. Краснов, Б.В. Критский,
Н.Д. Новикова, Ю.Г. Рыков,
О.Б. Феодоритова**

Программный комплекс
NOISEtte–MCFL для расчета
многокомпонентных
реагирующих течений

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Программный комплекс NOISEtte–MCFL для расчета многокомпонентных реагирующих течений / В.Е. Борисов [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2023. № 6. 23 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2023-6>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2023-6>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

**В.Е.Борисов, В.Т.Жуков, М.М.Краснов, Б.В.Критский,
Н.Д.Новикова, Ю.Г.Рыков, О.Б.Феодоритова**

**Программный комплекс NOISette–MCFL
для расчета многокомпонентных
реагирующих течений**

Москва — 2023

Борисов В.Е., Жуков В.Т., Краснов М.М., Критский Б.В., Новикова Н.Д., Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б.

Программный комплекс NOISEtte–MCFL для расчета многокомпонентных реагирующих течений

Исследовательский программный комплекс NOISEtte–MCFL предназначен для моделирования многокомпонентных газодинамических течений с учетом сопряженного теплообмена. Этот комплекс является функциональным развитием известного аэродинамического кода NOISEtte ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. В основу комплекса положена разработанная оригинальная математическая методология, сочетающая достоинства метода расщепления по физическим процессам и явно-итерационной схемы на базе многочленов Чебышева. Код написан на языке C++ и использует гибридную трехуровневую параллельную структуру, включающую использование технологий MPI, OpenMP и CUDA. Комплекс валидирован и верифицирован на модельных задачах и стандартных тестах. Дополнительно проведено сравнение с результатами расчетов, полученными пакетами ANSYS и OpenFOAM.

Ключевые слова: программный комплекс, химически реагирующая среда, сопряженный теплообмен, многокомпонентные течения, чебышевские итерации

Vitaly Evgenyevich Borisov, Victor Timofeevich Zhukov, Mikhail Mikhailovich Krasnov, Boris Viktorovich Kritskiy, Nataliya Dmitrievna Novikova, Yuri Germanovich Rykov, Olga Borisovna Feodoritova

Software package NOISEtte-MCFL for simulation multicomponent reacting flows

The research software package NOISEtte–MCFL is designed to simulate multicomponent gas dynamic flows with conjugate heat transfer. This package is a functional development of the well-known aerodynamic code NOISEtte of Keldysh Institute of Applied Mathematics. The package is based on the developed original mathematical methodology which combines the splitting algorithm by physical processes and an explicit iterative scheme using Chebyshev polynomials. The NOISEtte–MCFL is written in C++ and uses a hybrid three-level parallel structure, including MPI, OpenMP and CUDA technologies. The package is validated and verified on a set of model problems and standard test cases. Comparison with the results of calculations using ANSYS and OpenFOAM codes is performed.

Key words: software package, chemically reacting medium, conjugate heat transfer, multicomponent flow, Chebyshev iterations

Оглавление

1. Введение	3
2. Математическая модель.....	5
3. Численный метод.....	6
4. Структура программного комплекса.....	12
5. Аспекты параллельной реализации.....	15
6. Валидация и верификация.....	16
7. Заключение.....	19
Библиографический список.....	20

1. Введение

Исследовательский программный комплекс NOISEtte–MCFL предназначен для трехмерного численного моделирования высокоскоростных течений смесей реагирующих газов. В связи со сложностью постановки физического эксперимента развитие методов математического моделирования и компьютерных кодов в указанной области представляет собой одну из актуальных задач современной вычислительной газовой динамики. Исследования в этой области важны при рассмотрении разных практических задач, например, для эффективного проектирования перспективных летательных аппаратов, совершающих высокоскоростной атмосферный полет.

Комплекс NOISEtte–MCFL позволяет моделировать течения сжимаемой среды с учётом сопряженного теплообмена с твердотельными конструкциями. В качестве твердого тела может выступать корпус летательного аппарата, стенка проточного тракта или камеры сгорания двигательной установки. Численное моделирование теплового нагрева аэродинамических конструкций становится неотъемлемым элементом проектирования систем тепловой защиты ЛА на современном этапе развития авиационной и аэрокосмической техники. Будем далее для краткости обозначать рассматриваемый комплекс как MCFL (Multi-Component Flows).

Методика MCFL включает возможность численного решения следующих задач.

1) Обтекание летательных аппаратов (ЛА), и течений в воздухозаборных устройствах (ВЗУ) в рамках традиционной модели вязкого сжимаемого газа (на основе осредненных уравнений Навье-Стокса с моделями турбулентности) в широком диапазоне параметров потока (чисел Маха, Рейнольдса и др.).

2) Обтекание ЛА и расчета течений в ВЗУ на основе модели вязкой сжимаемой многокомпонентной химически реагирующей сплошной среды (MCFL_base).

3) Исследование нестационарных сопряженных процессов газовой динамики и теплообмена в системах газ–твердое тело при нагреве/охлаждении аэродинамических конструкций потоком газа. В газовой области используется полная модель MCFL_base. В твердом теле записывается нестационарное уравнение теплопроводности. На интерфейсе «газ–твердое тело» ставятся условия непрерывности температуры и теплового потока.

Код MCFL реализован на базе известного комплекса NOISEtte [1], разработанного в секторе вычислительной аэродинамики и аэроакустики ИПМ им. М.В.Келдыша РАН. Комплекс NOISEtte ориентирован на использование суперкомпьютеров, основан на современных тенденциях программирования, включает в себя численные методики решения систем уравнений Эйлера и Навье–Стокса для несжимаемых, слабо сжимаемых и сжимаемых сред и предусматривает работу с числами Маха в широком диапазоне значений. Для моделирования турбулентности предусмотрены модели RANS, LES, DES, DDES и IDDES, а также возможность включать авторские варианты, например, модификации модели Спаларта-Аллараса.

Существующая функциональность комплекса NOISEtte позволяет полноценно проводить вычислительный эксперимент с использованием различных методов, осуществлять графический анализ процесса расчета, стандартную и специфическую обработку аэродинамических характеристик, а также визуально представлять полученную информацию.

Код MCFL активно использует всю программную функциональность NOISEtte, к которой относятся функции построения и работы с расчетными сетками, координатные преобразования, системы хранения и обработки данных, функции пре- и постпроцессинга, структуры для двухуровневого распараллеливания MPI+OpenMP. Реализация кода MCFL для графических ускорителей основана на решениях, отличных от принятых в NOISEtte [2, 3].

Основное отличие кода MCFL от комплекса NOISEtte относится к расчетной части, реализующей новую дополнительную функциональность [4].

Методологически комплекс MCFL базируется на оригинальном алгоритме LINS (Local Iterations for Navier-Stokes) интегрирования по времени системы определяющих уравнений. Основу алгоритма LINS составляют явные итерации с использованием многочленов Чебышева первого рода [5]. Первоначально алгоритм разработан и верифицирован для системы уравнений Навье–Стокса [6-8] в рамках традиционной модели вязкого сжимаемого газа. И в настоящий момент перенесен на модель многокомпонентных реагирующих течений [9, 10].

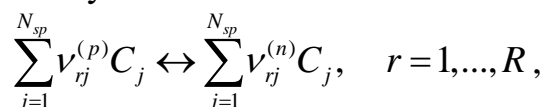
Код MCFL реализован в параллельном варианте в программной среде LINUX на кластерах К-100, К-60 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

2. Математическая модель

Основой математической модели является система уравнений Навье–Стокса, записанная для смеси идеальных газов с учетом диффузии компонентов и химическими реакциями между ними. В настоящий момент для учета турбулентных явлений реализована SST-модель Менгера. Влияние турбулентных эффектов на процесс протекания химических реакций не учитывается.

Химические реакции моделируются как источник в уравнениях для массовых концентраций Y_m компонентов смеси идеальных газов [4]. Расчет химических превращений по химической модели требует решения системы дифференциальных уравнений, каждое из которых описывает изменение по времени концентрации отдельного реагента и составляется на основе закона действующих масс.

Предполагается, что химические превращения подчиняются следующему механизму:



который представляет R обратимых реакций между N_{sp} компонентами смеси, здесь C_j – химический символ компонента, $\nu_{rj}^{(p)}, \nu_{rj}^{(n)}$ – стехиометрические коэффициенты j -го реагента и j -го продукта r -й реакции. Константа скорости реакции рассчитывается по закону Аррениуса [12]. Использование иных подходов к расчету констант скоростей реакции возможно, но требует специальных усилий.

Система уравнений замыкается заданием для всех компонентов смеси теплофизических параметров как функций температуры. К ним относятся удельная энтальпия h_m , энтропия s_m и теплоемкость при постоянном давлении $C_{p,m}$, а также коэффициенты переноса: динамическая вязкость μ_m , коэффициенты теплопроводности λ_m и диффузии компонента относительно смеси D_m , через которые выражаются соответствующие усредненные величины для всей смеси.

Математическая теория многокомпонентной диффузии и методы расчета транспортных характеристик диффузионного переноса хорошо развиты, простое изложение этой теории можно найти, например, в [12].

Вычисление теплофизических свойств веществ выполняется по заранее построенным аппроксимационным полиномам высокого порядка относительно температуры [13–15]. При этом предполагается, что аппроксимация может

отличаться для различных температурных отрезков и обычно осуществляется в двух интервалах: для описания низко- и высокотемпературных процессов.

Кроме отдельных газодинамических расчетов, комплекс MCFL позволяет также решать задачу сопряженного теплообмена на многоблочных неструктурированных сетках, отвечающих декомпозиции расчетной области на газовые и твердотельные подобласти. Численный анализ аэродинамического нагрева представляет собой связанную задачу теплообмена между газовым потоком и твердым телом через границу раздела.

В этой задаче возникают новые объекты – некоторый набор газовых и твердотельных областей, отделенных друг от друга интерфейсными границами, на которых задаются условия идеального контакта в виде непрерывности температуры и теплового потока по нормали к поверхности раздела. На многоблочных сетках, построенных для системы газовых и твердотельных подобластей, программа реализует подход сквозного счета, при котором одновременно решается уравнение энергии в совокупной области. В этом подходе аппроксимация условий сопряжения вытекает из консервативной дискретизации уравнения энергии, единого для контактирующих теплопроводных областей [16, 17].

3. Численный метод

Для дискретизации основных уравнений применяется метод конечных объемов на неструктурированных сетках, состоящих из многогранников с призматическими слоями вблизи тел с граничными условиями прилипания. Код MCFL, будучи наследником комплекса NOISEtte, работает с сетками, ячейками которых могут быть тетраэдры, пирамиды, гексаэдры и призмы в 3D случае или треугольники и четырехугольники в 2D случае. Описание возможных геометрических конфигураций можно найти, например, в [1]. Сеточные функции предполагаются заданными в узлах сетки.

Вычислительное ядро схемы интегрирования по времени строится на основе расщепления исходной системы уравнений на гиперболическую и параболическую подзадачи. Поэтому общая схема расчета одного шага по времени состоит из гиперболического этапа и двух параболических этапов.

На первом параболическом этапе происходит учет вязкости смеси и диффузии компонентов смеси. Реализация этого этапа состоит в интегрировании на шаге по времени трех уравнений для импульса и N_{sp} уравнений диффузии компонентов. Система уравнений диффузии линейно зависима, как это следует из определения основных переменных и закона сохранения массы [4, 12]. Поэтому одно из уравнений системы можно исключить из рассмотрения, заменив его алгебраическим соотношением, вытекающим из условия: масса закрытой физической системы сохраняется и она равна сумме масс компонентов этой

системы. Но мы такого исключения не делаем, интегрируя переопределенную систему и используя алгебраическое соотношение для контроля точности.

Второй параболический этап является завершающим. На этом этапе решается уравнение для полной энергии с учетом всех выполненных этапов. Данное уравнение записывается в виде нестационарного уравнения теплопроводности, причем функция источника включает аппроксимацию членов $\nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{u})$, $\nabla \cdot \vec{J}$, отвечающих производству тепла за счет вязкого трения и диффузии компонентов соответственно. Подробно ознакомиться с алгоритмическими особенностями данного подхода можно в работах [16, 17].

Обе параболические подсистемы интегрируются по времени с помощью явно-итерационной схемы LINS [6–8].

Замечательным свойством предлагаемого алгоритма является тот факт, что гиперболический этап использует конвективный шаг по времени $\tau = \tau_{conv}$ (с некоторым коэффициентом запаса), а параболический этап интегрируется с этим же временным шагом, включая случай $\tau_{conv} > \tau_{diff}$ доминирования диффузионных процессов над конвективными. Избежать обременительного по объему вычислений ограничения $\tau \sim h^2$ на шаг по времени позволяет специальная явно-итерационная схема, основанная на многочленах Чебышева первого рода [5]. При построении чебышевского многочлена необходимо задать верхнюю границу λ_{max} спектра диффузионного сеточного оператора, знание нижней границы спектра не требуется. В качестве приближенной оценки λ_{max} сверху можно взять величину $\lambda_{max} = 2/\tau_{diff}$, что равносильно оценке максимального собственного числа, получаемой по теореме Гершгорина о кругах спектра [18]. Если диффузия не доминирует над конвекцией, то предложенная схема автоматически переходит в явную схему.

Результирующая схема для каждой параболической подсистемы имеет структуру предиктор-корректор и обеспечивает выполнение законов сохранения. Локальность и простая алгоритмическая структура этой схемы делают ее идеальной для использования в массивно-параллельных вычислениях.

Компьютерный код NOISEtte (и MCFL как его наследник) реализует смешанный метод аппроксимации, а именно: члены конвективного переноса аппроксимируются с использованием метода конечных объемов, а для вычисления диффузионных потоков на гранях контрольного объема применяется метод конечных элементов с использованием линейных финитных базисных функций [19].

Для вычисления конвективных потоков на гранях контрольного объема используется точное решение задачи Римана для совершенного идеального многокомпонентного газа. Точное решение имеет то преимущество, что позволяет

учесть особенности течений с сильными ударными волнами. Известной проблемой схем Годуновского типа для уравнений многокомпонентной газовой динамики является возникновение в ряде случаев осцилляций поля давления на контактных границах между газами с существенно различающимися показателями адиабаты, что требует внесения модификаций в схему расчета конвективных частей системы.

Для преодоления этого недостатка в коде MCFL дополнительно реализована модифицированная схема Годунова на основе метода двойного потока («double flux method»), используемая при расчете конвективной части системы, подробно описанная и исследованная в работах [20, 21]. Суть метода заключается в корректировке процедуры расчета Годуновского потока для уравнения энергии через грани ячейки. А именно, на каждой грани вместо одного потока с общими для грани параметрами вычисляются два разных потока для ячеек по разную сторону от грани при фиксации ряда параметров из ячеек. Таким образом, расчет энергии происходит по схеме «предиктор-корректор» с вычислением давления на этапе предиктора.

Алгоритм решения сопряженной задачи основан на одновременном решении аэродинамической задачи для газовой области и тепловой задачи для тела в рамках единой нестационарной постановки. Согласование параметров теплообмена поверхности раздела газовой области и твердого тела обеспечивается автоматически, так как на одном шаге по времени наряду с основной системой газодинамических уравнений сквозным образом интегрируется нестационарное уравнение теплопроводности с коэффициентами, определяемыми теплофизическими свойствами газа и тела.

Логика всего алгоритма для решения сопряженной задачи не меняется. Она включает в себя расщепление на гиперболический и параболический этапы и применение явно-итерационной схемы чебышевского типа для решения каждого параболического этапа.

Предполагается, что расчетная сетка согласована с поверхностью контакта. Каждая интерфейсная точка имеет кратность, равную числу областей, сходящихся в ней. Кратные точки имеют одинаковые координаты, но обладают набором переменных и теплофизических параметров, отвечающих набору областей, которых они представляют. После обхода всех областей интерфейсные точки обрабатываются специальным образом с помощью достаточно простого алгоритма, определяющего однозначные значения переменных.

Приведем алгоритмы одного временного шага решения сопряженной задачи в случае явной схемы и явно-итерационной схемы локальных итераций. Основные переменные, отвечающие соответственно интерфейсу, газовой области и твердому телу, будем обозначать нижними индексами f , g , s .

Для простоты будем считать, что интерфейсная точка имеет кратность 2, т.е. принадлежит одновременно двум областям – газовой области и твердому телу. Данное предположение никоим образом не нарушает общности алгоритма и его логики.

При описании алгоритма приняты следующие обозначения:

ρ	плотность	$кг/м^3$
u	скорость	$м/с^2$
Y_m	массовая доля компонента m	
W_m	молярная масса компонента m	$кг/моль$
ε	внутренняя энергия единицы объема	$Дж/м^3$
e	внутренняя энергия единицы массы	$Дж/кг$
h	энтальпия	$Дж/кг$
N_{sp}	количество компонент в смеси	
Ω	дуальный объем	$м^3$
R	универсальная газовая постоянная	$Дж/(кг \cdot K)$
$a_{i,m}$	Janaf – коэффициенты	
c	удельная теплоемкость	$Дж/(кг \cdot K)$
C_p	удельная теплоемкость при постоянном давлении	$Дж/(кг \cdot K)$

Алгоритм явной схемы решения сопряженной задачи	
1.	Известны значения на временном слое t_n $U_g^n \equiv \rho_g^n (1, u_1, u_2, u_3, e + 0.5 \cdot u_k u_k, Y_m)^n, m = 1, \dots, N_{sp},$ $U_s^n \equiv \rho_s^n, (\varepsilon = \rho e)_s^n.$
2.	Решаем уравнение теплопроводности в газовой области и в твердом теле. На границе раздела «газ–твердое тело» ставится условие адиабатической стенки.
3.	Решаем уравнения Навье-Стокса в газовой области без учета теплопроводности.
4.	На интерфейсе рассчитываем внутреннюю энергию ε_f и температуру T_f $\varepsilon_f = (\Omega_g \varepsilon_g + \Omega_s \varepsilon_s) / (\Omega_g + \Omega_s), T_f = Newton(T_g, T_s, \varepsilon_f)$ (метод Ньютона), $T_f^{k+1} = T_f^k - \frac{(h_g - R_g T) \rho_g \gamma_g + c T \rho_s \gamma_s - \varepsilon_f}{(C_p(T) - R_g) \rho_g \gamma_g + c \rho_s \gamma_s},$

	$R_g = R \sum_{m=1}^{N_{sp}} (Y_m/W_m),$ $h_g = R(d_0 + d_1T + d_2T^2 + d_3T^3 + d_4T^4 + d_5T^5),$ $d_0 = \sum_{m=1}^{N_{sp}} \frac{Y_m}{W_m} a_{5,m}, \quad d_k = \frac{1}{k!} \sum_{m=1}^{N_{sp}} (Y_m/W_m) a_{k-1,m}, \quad k = 1 \div 5.$ $C_p = R(b_0 + b_1T + b_2T^2 + b_3T^3 + b_4T^4), \quad b_k = \sum_{m=1}^{N_{sp}} a_{k,m} (Y_m/W_m), \quad k = 1 \div 4.$
5.	Рассчитываем энергию $E^{n+1} = (0.5\rho u_i u_i + \varepsilon)^{n+1}$ и температуру T^{n+1} .

Ниже приведен алгоритм схемы LIINS для задачи сопряженного теплообмена в одномерном случае при дискретизации на равномерной сетке с шагом h . Параметры схемы LINS (число итераций и итерационные параметры) для диффузионно-вязкого и теплового этапа – разные.

Алгоритм схемы локальных итераций для решения сопряженной задачи	
1.	<p>Конвективный этап – метод Годунова (только для газовой области)</p> $\frac{\rho_{conv} - \rho}{\tau_{conv}} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0,$ $\frac{\rho_{conv} u_{conv} - \rho u}{\tau_{conv}} + \frac{\partial (\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0,$ $\frac{\rho_{conv} E_{conv} - \rho E}{\tau_{conv}} + \frac{\partial (\rho u (E + p))}{\partial x} = 0,$ $\frac{\rho_{conv} Y_m^{conv} - \rho Y_m}{\tau_{conv}} + \frac{\partial (\rho u Y_m)}{\partial x} = 0.$ <p>Результат: $\rho_g^{n+1} = \rho_{conv}$.</p>
2.	<p>Диффузионно-вязкий этап – локальные итерации LINS (только для газовой области). На границе газ–твердая стенка ставятся краевые условия прилипания и равенства нулю диффузионных потоков.</p> $\frac{\partial \rho u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right),$ $\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \rho D_m \frac{\partial Y_m}{\partial x}, \quad m = 1, \dots, N_{sp},$

	$(\rho u)^p = \frac{1}{1 + \tau_{conv} b_p} \left\{ (\rho u)_{conv} + \tau_{conv} b_p (\rho u)^{p-1} + \frac{\tau_{conv}}{\Omega_g} \cdot \Delta_{visc}^2 (u^{p-1}) \right\}, \Omega_g = h,$ $\Delta_{visc}^2 (u) \simeq h \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \frac{\mu \Delta u}{h} (x + 0.5h) - \frac{\mu \Delta u}{h} (x - 0.5h),$ $\Delta u (x + 0.5h) = u(x + h) - u(x); \quad \Delta u (x - 0.5h) = u(x) - u(x - h),$ $(\rho Y_m)^p = \frac{1}{1 + \tau_{conv} b_p} \left\{ (\rho Y_m)_{conv} + \tau_{conv} b_p (\rho Y_m)^{p-1} + \frac{\tau_{conv}}{\Omega_g} \Delta (\rho D_m \Delta Y_m^{p-1}) \right\},$ $\Delta (\rho D_m \Delta Y_m^{p-1}) \simeq h \frac{\partial}{\partial x} \rho D_m \frac{\partial Y_m}{\partial x}$ $= \frac{\rho D_m \Delta (Y_m^{p-1})}{h} (x + 0.5h) - \frac{\rho D_m \Delta (Y_m^{p-1})}{h} (x - 0.5h),$ <p>b_p – итерационные параметры, $p = 1, \dots, p_{LINS}$.</p> <p>Результат: $(u_1, u_2, u_3, Y_m)_g^{n+1}$, $m = 1, \dots, N_{sp}$.</p>
3.	<p>«Теплопроводный» этап – локальные итерации (вся расчетная область).</p> $\varepsilon^q = \frac{1}{1 + \tau_{conv} d_q} \left\{ \varepsilon_{base} + \tau_{conv} d_q \varepsilon^{q-1} + \frac{\tau_{conv}}{\rho \Omega} \left(\Delta (T^{q-1}) + g \right) \right\},$ $T^m = \frac{\varepsilon^m - BK}{AK} \left(\varepsilon(T) \cong \varepsilon(T_n) + (T - T_n) \times \frac{\partial \varepsilon}{\partial T}(T_n) = AK \times T + BK \right),$ $AK = (\Omega_g AK_g + \Omega_s AK_s) / (\Omega_g + \Omega_s), \quad BK = \varepsilon(T_n) - AK \times T_n,$ $g = \left(f - \bar{\rho} \frac{\bar{u}^2 - u_{conv}^2}{2 \tau_{conv}} \right) \times \Omega, \quad f \simeq \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{\partial J}{\partial x},$ <p>d_q – итерационные параметры (в общем случае не совпадают с b_p).</p> <p>Выполняем $q = 1, \dots, q_{LINS}$ итераций.</p> <p>Замечание 1. Вязкие и диффузионные источники тепла $(\mu u \cdot u_x)_x$, $\partial J / \partial x$ рассчитываются по значениям временного слоя t_n.</p> <p>Замечание 2. Переменная ε_{base} в сеточных узлах газовой области совпадает с переменной ε_g, полученной на конвективном этапе, а в твердом теле – с переменной ε_s, взятой с нижнего слоя. В узлах</p>

	<p>интерфейсной границы двузначный набор значений превращается в однозначный по формуле $\varepsilon_f = \varepsilon(T) = (\Omega_g \varepsilon_g + \Omega_s \varepsilon_s) / (\Omega_g + \Omega_s)$.</p> <p>Замечание 3. При расчете интерфейсных значений применяется процедура, описанная в п.4 алгоритма явного шага.</p> <p>Результат: ε^{n+1}</p>
4.	<p>Рассчитываем энергию $E^{n+1} = (0.5\rho u_i u_i + \varepsilon)^{n+1}$ и температуру T^{n+1} .</p>

4. Структура программного комплекса

Программный комплекс разрабатывается на базе платформы NOISEtte [1], которая имеет модульную структуру, состоит из базового ядра и позволяет подключать внешние библиотеки и модули.

Каждый модуль, который планируется использовать, должен быть включён в программный комплекс во время его компиляции. В частности, подключение модуля MCFL во время компиляции задаётся переменной препроцессора *USE_MODULE_MCFL*. Если эта переменная при компиляции задана, то при запуске программного комплекса будет вызываться функция *MCFL_Connect_Module*, которая сделает всю необходимую инициализацию модуля MCFL.

При инициализации модуля добавляется точка входа *MCFL_BeforeReadParams*, которая вызывается перед чтением основных параметров программного комплекса. Кроме того, к внешним модулям (программам) *Mesh* и *Postproc* добавляются утилиты *MultiProblemLink* и *ConvRecovery* соответственно.

Первое, что делает функция *MCFL_BeforeReadParams* – считывает из файла “INPUT/params.txt” параметр MCFL. Если этот параметр не задан или его значение равно нулю, то больше ничего не делается, так как это означает, что модуль MCFL на этапе исполнения отключен.

Если модуль MCFL подключен (значение параметра MCFL равно 1), то делается дальнейшая инициализация модуля MCFL.

Функция *MCFL_MainReadParams* (вызывается после чтения параметров и заголовка сетки) проверяет корректность задания всех параметров и читает дополнительные параметры модуля MCFL. Они берутся из файла INPUT/component.txt. Если число подобластей больше одной, то дополнительно подключается подмодуль *MultiProblem*, который считывает свои параметры из файла MESH/multiProbTopo2.txt.

В настоящее время программный модуль MCFL может быть условно разделен на три части: MCFL–base, MCFL–chem, MCFL–mprob.

Блок MCFL–base используется для описания многокомпонентных течений газовых смесей на основе осредненных уравнений Навье–Стокса с учетом дополнительных эффектов, связанных с компонентным составом смеси. Реализованы и верифицированы два способа интегрирования по времени – явная схема и явно-итерационная схема LINS, которая является авторской разработкой. Применение этой схемы на каждом шаге интегрирования по времени с $\tau_{conf} = O(h)$ эквивалентно определенному числу явных шагов, асимптотически равному $O(1/\sqrt{h})$. Это значит, что по сравнению с традиционной явной схемой эффективный размер временного шага LINS составляет $O(h^{3/2})$, что подтверждается результатами практических расчетов.

В основу модуля MCFL–chem положена авторская библиотека Libchem, реализующая решение уравнений химической кинетики, связь которой с основной программой осуществляется с помощью функций модуля. Исходная система уравнений является жесткой из-за сильного различия во временных масштабах происходящих процессов. В силу этого при использовании для временных аппроксимаций явных разностных схем из соображений устойчивости допустимый шаг интегрирования сильно ограничен. Схема решения MCFL–chem базируется на явно-неявных алгоритмах совместно со схемами расщепления по физическим процессам: конвективная и диффузионная части системы считаются по явной схеме, блок с уравнениями химической кинетики – по неявной схеме. Поскольку уравнения химической кинетики решаются в каждой ячейке изолированно от остальных, такой подход допускает эффективную параллельную реализацию.

Библиотека Libchem реализует функционал «химического реактора», т.е. выполняет решение уравнений химической кинетики вида $y' = f(y)$ при наличии тех или иных ограничений, таких как постоянство объема, давления или потока тепла. Уравнения реактора с постоянным давлением специально записаны относительно массовых долей, поскольку этот вид позволяет записать систему в компактной форме, удобной для интегрирования. В случае использования в кинетической схеме реакций нестандартного вида требуется модификация используемого реактора для каждого конкретного случая.

Модуль MCFL–chem и библиотека Libchem написаны на языке программирования C++. Интегрирование осуществляется с помощью одного из методов BDF семейства неявных многошаговых методов интегрирования жестких систем ОДУ, для чего подключена библиотека CVODE [22]. Для жестких задач библиотека CVODE включает формулы неявного обратного дифференцирования (BDF) с переменным порядком. Нелинейные системы в неявных интеграторах решаются приближенно на каждом шаге интегрирования с использованием модифицированного метода Ньютона. Для реализации методов библиотека

CVODE предоставляет возможность выбора предобусловленного итерационного алгоритма крыловского типа (GMRES, BiCGStab) в качестве линейного решателя.

Расчет якобианов системы производится методом автоматического дифференцирования с помощью функций библиотеки Adept [23]. Подробное описание функционала блока MCFL-chem можно посмотреть в [11].

Приведем некоторые технические детали этой библиотеки, полезные пользователю. Основные классы и функции библиотеки реализованы в файле libchem.cpp. Класс AdeptFunc осуществляет расчет правой части ОДУ и якобиана. Класс CVODESolver собственно осуществляет решение ОДУ. С помощью классов Element, Species, Reaction, BaseReactor осуществляется вычисление правой части ОДУ. Классы находятся в одноименных файлах *.hpp. Класс Element содержит имя и молярные массы компонентов химического элемента. Класс Species описывает чистое вещество, производит расчет теплофизических свойств. Класс Reaction описывает химическую реакцию, содержит формулу реакции, вычисляет прямые и обратные скорости реакций, разность энтальпий и разность энтропий.

reactors.hpp содержит различные типы химических реакторов и производит сборку правой части ОДУ. Предусмотрены следующие реакторы:

AdiabaticReactorConstVU – реакция происходит при постоянном объеме и без притока тепла;

AdiabaticReactorConstP – реактор, в котором поддерживается постоянное давление;

AdiabaticReactorConstVT – реактор с постоянными объемом и температурой.

Реакторы AdiabaticReactorConstP и AdiabaticReactorConstVT не являются адиабатическими. Такие названия использованы только для работы одного скрипта на этапе компиляции.

Дополнительно реализован специальный реактор с кинетикой горения углеводородного топлива AdiabaticReactorConstVUTSAGI, который включает одну одностороннюю (прямую) глобальную реакцию разложения углеводородного топлива и одиннадцать двусторонних реакций между компонентами [24].

В файле formulas.hpp содержатся формулы для вычисления скоростей реакций.

Блок MCFL-mprob предназначен для решения сопряженных задач. В этом случае необходимо разбить задачу на блоки, построить сетку в каждом блоке и осуществить их склейку. Для реализации этого процесса существует утилита *MultiProblemLink*, которая конкатенирует сетки всех блоков и формирует общую сетку. Интерфейсные точки при этом дублированы и их кратность произвольна. Еще раз отметим, что сетка согласована с геометрией границы контакта и конформна.

Дополнительно создается файл `multiProbToro2.txt`, определяющий топологию задачи. Он имеет следующую структуру:

- число блоков;
- маркер решаемых в блоке уравнений: `ns` – Навье-Стокс; `hc` – теплопроводность;
- число узлов в каждой области;
- общее число интерфейсных узлов;
- перечисление связанных интерфейсных узлов (по строкам).

Кроме того, написана утилита *ConvRecovery*, которая

1. осуществляет переход от `NOISETTE` к `MCFL_base`;
2. осуществляет переход от `MCFL_base` к `MCFL_mProb`.

Указанная утилита позволяет в ряде задач проводить установление внешнего обтекания по схемам, реализованным в программном комплексе `NOISEtte`, а затем переводить задачу в формат `MCFL`.

Начальным и важным вопросом любого численного моделирования является построение поверхностных и объемных сеток. Простейшие сетки, часто необходимые для модельных тестовых примеров, могут быть построены с помощью собственных средств комплекса `NOISEtte`. Сетки для геометрически сложных объектов строятся с помощью коммерческого пакета построения трехмерных сеток `PointWise` (лицензия `Customer number: EU035`) [25].

5. Аспекты параллельной реализации

Параллельная реализация кода `MCFL` частично наследует гибридную параллельную структуру программного комплекса `NOISEtte`, который использует `MPI` для модели с распределенной памятью и `OpenMP` для модели с общей памятью.

Для работы на графических ускорителях `GPU` программный код `MCFL` использует технологию `CUDA`, для чего разработана специальная библиотека функционального программирования для языка `C++` [26, 27], которая позволяет всю специфику вычислительного устройства (`CPU` или `CUDA`) поместить внутрь библиотеки и сделать пользовательский исходный код полностью платформонезависимым. Эта библиотека реализована в стиле, близком к стилю языка `Haskell` [28], так как он представляется одним из наиболее продвинутых современных функциональных языков программирования, основанных на современной математической теории (теории категорий). Этот язык широко распространён и активно поддерживается мировым научным сообществом. Данная библиотека существенно опирается на понятия функтора, аппликатива и монады, которые оказались удобным средством для переноса численных задач на графические ускорители `CUDA`. Сеточные выражения, определенные как функторы, аппликативы и монады, можно строить, комбинируя сложные функции

из простых, что является также сильной стороной функционального программирования.

6. Валидация и верификация

Для валидации и верификации комплекса MCFL использованы модельные задачи и стандартные тесты. Для части задач проведено сравнение с результатами из открытых источников, для других задач проведены сравнительные расчеты по доступным кодам: Ansys Fluent (License Ansys Hybrid 12032019_05255_603_AM, Customer № 511564 KIAM RAS) с подключаемым модулем для решения задач химической кинетики Chemkin [15] и открытому программному комплексу OpenFOAM [29].

В первых двух задачах нас интересовали вопросы надежности и эффективности явно-итерационной схемы LINS, ее преимущества по сравнению с другими схемами в случае решения системы уравнений Навье-Стокса сжимаемого вязкого теплопроводного газа.

1. Задача о нестационарном течении газа при подогреве границы.

В рамках уравнений Навье-Стокса рассматривается процесс тепловой конвекции – нестационарном течении совершенного газа при внезапном подогреве границы, см. [7, 30]. Газ с коэффициентами теплопроводности и вязкости, зависящими от температуры по формуле Сазерленда, с постоянными начальными плотностью, температурой и нулевой скоростью заключен в замкнутую область между двумя стенками, одна из которых поддерживается при постоянной высокой температуре, а вторая – при постоянной более низкой температуре. Расчеты проведены на прямоугольных сгущающихся сетках с помощью явной схемы и явно-итерационной схемы LINS [7]. Развитие и перемещение волн плотности, давления, температуры и скорости моделировалось до момента столкновения с противоположной стенкой. Также проведены расчеты на установление. Точность численных решений контролировалась сопоставлением результатов расчетов с различными шагами по времени и пространству. Нестационарные и стационарные численные решения продемонстрировали сеточную сходимость и графическое совпадение с результатами из [30], где в качестве схемы интегрирования по времени использован метод продольно-поперечных прогонок.

В этой задаче стационарное состояние газа определяется только перепадом температур на стенках и зависимостью коэффициента теплопроводности от температуры. В стационарном состоянии газ покоится (давление постоянно, скорость равна нулю), но пространственные профили температуры и плотности являются переменными в силу зависимости коэффициента теплопроводности от температуры по формуле Сазерленда.

2. Задача о сверхзвуковом течении в канале переменного сечения.

Рассмотрим задачу сверхзвукового течения сжимаемого вязкого теплопроводного

газа в плоском канале переменного сечения [31]. Систематические расчеты на разных сетках выполнены для канала с адиабатическими стенками (теплоизолированными) с числом Маха на входе $M_\infty = 4$ и с числом Рейнольдса $Re = 10^4$ (вычисляется по параметрам невозмущенного потока и характерному линейному размеру). Для построения сетки в пограничных слоях выделяются зоны толщиной 20% от высоты области и строится сетка, сгущающаяся к соответствующей твердой стенке по геометрической прогрессии. Представленные в [9] результаты демонстрируют характерные особенности установившегося течения в канале с наличием замкнутых областей отрывного течения, взаимодействующих ударных волн и веера волн разрежения. В [9] изучены свойства явно-итерационной схемы в сравнении с явной и неявной схемами.

3. Задача о распространении акустических волн, возникающих на границе раздела газов [32]. Расчеты диффузионного перемешивания инертной газовой смеси проводятся на основе системы уравнений Навье-Стокса, обобщенной на случай многокомпонентной среды. Рассматривается двухкомпонентная среда, состоящая из водорода и кислорода, разделенных в начальный момент времени контактной границей (слева от границы расположен кислород, справа – водород). Исследуется изменение концентраций кислорода и водорода во времени. Уравнение состояния – смесь идеальных газов. В покоящемся в начальный момент газе возникают акустические волны давления, генерируемые скачком плотности на интерфейсе «кислород–водород» в условиях диффузионного перемешивания. Из-за наличия диффузии возникает контактный «разрыв», который со временем размазывается в окрестности начального положения интерфейса. Налево и направо бегут акустические волны со скоростями $V_L = 550$ м/с и $V_R = 2200$ м/с, отвечающими скоростям звука в кислороде и водороде соответственно в заданных диапазонах температуры и давления. Эта задача служила для оценки влияния контактных разрывов в решениях [9], а также для проверки метода «двойного потока» [20, 21], который в задачах-тестах с ударными волнами хорошо зарекомендовал себя для исключения нефизичных осцилляций давления на контактных границах в многокомпонентном случае. Проведенные численные исследования демонстрирует работоспособность разработанного метода, результаты расчетов хорошо согласуются с данными расчетов других авторов и лабораторными экспериментами.

4. Расчет многокомпонентного течения в камере сгорания. Постановка задачи изложена в [24]. Результаты расчетов многокомпонентного течения по схеме LINS приведены в [10], аналогичные результаты расчетов с помощью программного комплекса OpenFOAM даны в [33]. Рассмотрена модельная камера сгорания со ступенчатым расширением. Эта модель в течение многих лет численно и экспериментально изучалась в ЦАГИ [34]. Камера включает узкую

часть с углом расширения $0,5^\circ$ (изолятор) и, после ступенчатого расширения, широкую часть постоянного сечения. Число Маха на входе в камеру сгорания $M \approx 2,5$. Впрыск углеводородного топлива осуществляется через несколько отверстий, расположенных выше по потоку от уступа. Для инициирования горения в эксперименте используется пневмодроссель, расположенный у выхода из канала.

Пневмодроссель создает струю воздуха высокого давления перпендикулярно стенке. Это приводит к запираанию канала и возникновению сильного скачка уплотнения, распространяющегося вверх по течению. Взаимодействие ударной волны с толстыми пограничными слоями приводит к возникновению псевдоскачка – продолжительной области торможения потока с серией ударных волн и отрывом пограничных слоев. В отрывных зонах возникает горение, что приводит к усилению псевдоскачка и его дальнейшему распространению влево, к месту впрыска топлива. После зажигания пневмодроссель выключается.

Дросселирование приводит к длительному переходному процессу, результатом которого может стать стабилизация горения или исчезновение пламени в зависимости от обогащения газофазного топлива. Это течение исследовано численно в рамках совместного проекта ЦАГИ–РАН с использованием различных численных технологий, разработанных в ЦАГИ, Институте химической физики им. Н.Н. Семенова, ИПМ им. М.В. Келдыша.

Серия задач 5. В процессе тестирования модуля MCFL–chem рассмотрены задачи, описывающие горение водорода в воздухе в различных постановках. Для всех задач предполагалось, что многокомпонентный газ является смесью совершенных идеальных газов, для которых известны полиномиальные зависимости теплофизических параметров от температуры. С результатами тестирования можно ознакомиться в работе [11], где представлена серия валидационных и верификационных расчетов. Результаты сравнивались с опубликованными в литературе данными, а также с расчетами, проведенными с помощью программного комплекса Ansys Fluent с подключаемым модулем для решения задач химической кинетики Chemkin.

Рассматривалась 9-компонентная смесь веществ, между которыми могут протекать 20 элементарных реакций, кинетический механизм известен; при расчете транспортных свойств компонентов использован потенциал Ленарда-Джонса. Проведены тесты: 1) реализация химического реактора, который описывает горение водорода в одной изолированной ячейке; 2) горение водорода в покоящейся среде: тест состоял в зажигании неравномерно нагретой и покоящейся в начальный момент стехиометрической смеси водорода и воздуха, которая в дальнейшем начинала двигаться к границам области; 3) горение водорода в движущейся среде: это тест обобщает результат предыдущей задачи на случай движущейся смеси.

Задача 6. В качестве тестовой для задачи сопряженного теплообмена выбрана задача обтекания плоской пластины конечной толщины сверхзвуковым потоком с числом Маха, равным 3. Подробно результаты численного моделирования изложены в работе [16]. Пластина обтекается газом с верхней стороны. Полубесконечная геометрия в горизонтальном направлении моделируется с использованием условий периодичности на левой и правой сторонах области. Нижняя сторона пластины поддерживается при заданной постоянной температуре. Боковые границы пластины – адиабатические стенки. Верхняя граница газовой области – изотермическая стенка с заданной постоянной температурой. Газ покоится, затем мгновенно в начальный момент ускоряется от состояния покоя до постоянной скорости U_∞ (постоянного числа Маха M_∞). Для получения аналитического решения рассматриваемой задачи используется преобразование Дородницына с уточнением Стюартсона при некоторых упрощающих предположениях. Это преобразование позволяет отделить уравнение энергии от уравнений непрерывности и импульса, и придать уравнениям пограничного слоя форму, близкую к форме уравнений пограничного слоя несжимаемой жидкости. В [35] это преобразование распространено на случай сопряженного теплообмена. Полученное приближенное аналитическое решение использовано для верификации MCFL методики. Приведенный тест широко используется в оценке методик решения задач сопряженного теплообмена, так как он четко определяет роль физических параметров в поведении решения в окрестности интерфейса, и по этой причине является основополагающим для проверки численных методов, требующихся для анализа геометрически сложных задач.

Полученные результаты позволяют сделать вывод об успешной валидации и верификации используемой математической модели и численного метода для моделирования течений реагирующих газовых смесей.

Вычисления проводились с помощью гибридного суперкомпьютера К-60, установленного в Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

7. Заключение

Исследовательский код NOISEtte–MCFL дает возможность численного решения внешних и внутренних задач термо-аэродинамики как в рамках традиционной модели вязкого сжимаемого газа (на основе уравнений Навье-Стокса), так и основе модели вязкой сжимаемой многокомпонентной химически реагирующей сплошной среды. Кроме того, программа расширена и развита для решения задач сопряженного теплообмена, связанных с нагревом аэродинамических конструкций потоком газа.

В основу принятых в программе решений положены новые исследования по развитию явно-итерационных методов для решения задач газовой динамики, задач сопряженного теплообмена в условиях декомпозиции расчетной области на блоки (твердое тело – газовая смесь). Такая декомпозиция обеспечивает на многоблочной сеточной структуре эффективную реализацию построенных алгоритмов в целях их функционирования на системах с различными механизмами параллелизма. Эта сторона методики требует дополнительных усилий по совершенствованию работы с многоблочными структурами на неструктурированных трехмерных сетках.

Авторы выражают благодарность коллегам, активно помогающим и способствующим развитию кода – А.В. Горобцу, П.А. Бахвалову, В.Г. Бобкову, А.П. Дубеню.

Библиографический список

1. Абалакин И.В., Бахвалов П.А., Горобец А.В., Дубень А.П., Козубская Т.К. Параллельный программный комплекс NOISEtte для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики // Вычислительные методы и программирование. 13 (2012) 110-125
2. Gorobets A., Bakhvalov P. Heterogeneous CPU+GPU parallelization for high-accuracy scale-resolving simulations of compressible turbulent flows on hybrid supercomputers // Computer Physics Communications. 2022, Vol 271, 108231
3. Gorobets Andrey V. Adapting a scientific CFD code to industrial applications on hybrid supercomputers // Supercomputing frontiers and innovations. 2022, Vol 9, № 4. <https://doi.org/10.14529/jsfi220405>
4. Жуков В.Т., Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б. Математическая модель течения многокомпонентной смеси газов с учетом возможности возникновения жидкой фаз // Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. №183. 36 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-183>
5. Zhukov V.T., Explicit methods of numerical integration for parabolic equations // Mathematical Models and Computer Simulations, № 3, 311–332 (2011). <https://doi.org/10.1134/S2070048211030136>
6. Явное интегрирование по времени уравнений Навье-Стокса с помощью метода локальных итераций // Жуков В.Т. [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, 2019, №12, 32 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2019-12>
7. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Об одном подходе к интегрированию по времени системы уравнений Навье–Стокса // ЖВМ и МФ. 2020. Т. 60, № 2. С. 267-280

8. Zhukov V.T., Feodoritova O.B. Explicit-Iteration Scheme for Time Integration of the Navier–Stokes Equations // Demidenko, G., Romenski, E., Toro, E., Dumbser, M. (eds) Continuum Mechanics, Applied Mathematics and Scientific Computing: Godunov’s Legacy, 2020. https://doi.org/10.1007/978-3-030-38870-6_52
9. Feodoritova O.B., Novikova N.D., Zhukov V.T. An explicit iterative scheme for 3D multicomponent heat conducting flow simulation // J. of Physics: Conference Series, V. 2028, Fourth Virtual Workshop on Numerical Modeling in MHD and Plasma Physics: Methods, Tools, and Outcomes (MHD-PP-2021) 12-14 October 2021, Novosibirsk, Russia. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2028/1/012022>
10. Borisov V.E., Feodoritova O.B., Novikova N.D., Rykov Yu.G., Zhukov V.T. Computational Model for high-Speed Multicomponent Flows // Mathematica Montisnigri. 2020, Vol XLVIII. 48:32–42. <https://doi.org/10.20948/mathmontis-2020-48-4>
11. Борисов В.Г., Критский Б.Г., Рыков Ю.Г. Программный модуль MCFL-Chem для расчета высокоскоростных течений смеси реагирующих газов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022, №21, 40 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-21>
12. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987
13. Chase M.W. NIST-JANAF thermochemical tables, fourth edition // J. Phys. Chem. Ref. Data, Monogr., 1998, № 9
14. Burkat A., Ruscic B. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables. Technion Report TAE 960 and ANL Report ANL-05/20, 2005. <https://burcat.technion.ac.il/>
15. Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A. The CHEMKIN Thermodynamic Data Base. Sandia National Laboratories, Report SAND87-8215B, 1990
16. Feodoritova O.B., Krasnov M.M. and Zhukov V.T. A Numerical Method for Conjugate Heat Transfer Problems in Multicomponent Flows // J. of Physics: Conference Series, Vol. 2028, Fourth Virtual Workshop on Numerical Modeling in MHD and Plasma Physics: Methods, Tools, and Outcomes (MHD-PP-2021) 12-14 October 2021, Novosibirsk, Russia. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2028/1/012024>
17. Feodoritova O.B., Novikova N.D., Zhukov V.T. Development of numerical methodology for unsteady fluid-solid thermal interaction in multicomponent flow simulation // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2023, № 1, to be appear

18. Гершгорин С.А. *Über die Abgrenzung der Eigenwerte einer Matrix* // Изв. АН СССР, отд. физ.-мат. наук, 1931, с. 749–754
19. Bakhvalov P.A., Surnachev M.D. *Method of averaged element splittings for diffusion terms discretization in vertex-centered framework* // *Journal of Computational Physics* 450 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110819>
20. Борисов В.Е., Рыков Ю.Г. Точный римановский солвер в алгоритмах решения задач многокомпонентной газовой динамики // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2018. № 96. 28 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-96>
21. Борисов В.Е., Рыков Ю.Г. Моделирование течений многокомпонентных газовых смесей с использованием метода двойного потока // *Матем. Моделирование*, 2020, Т.32, № 10, с. 3–20. <https://doi.org/10.20948/mm-2020-10-01>
22. Cohen S.D., Hindmarsh A.C. *CVODE, a Stiff/Nonstiff ODE Solver in C* // *Computers in Physics*, 1996. Vol. 10, № 2, pp. 138–143. <https://doi.org/10.1063/1.4822377>
23. Hogan R.J. *Fast reverse-mode automatic differentiation using expression templates in C++* // *ACM Trans. Math. Softw.*, 2014. Vol. 40, № 4, art. 26, pp. 1–16. <https://doi.org/10.1145/2560359>
24. Гудич И.Г., Власенко В.В., Жуков В.Т., Мануковский К.В., Новикова Н.Д., Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б. О расчетах модельной высокоскоростной камеры сгорания // *Горение и взрыв*. 2016. Т. 9, № 3, с. 57–65
25. PointWise URL: <https://www.pontwise.com>
26. Краснов М.М., Феодоритова О.Б. Применение библиотеки функционального программирования для распараллеливания вычислений на графических ускорителях с технологией CUDA // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2022. № 51. 36 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-51>
27. Krasnov Mikhail M., Feodoritova Olga B. *Functional programming libraries for graphics accelerators* // *Supercomputing frontiers and innovations*. 2022, Vol. 9, № 4, pp. 28-37. <https://doi.org/10.14529/jsfi220403>
28. Haskell language. URL: <https://www.haskell.org>
29. OpenFoam. URL: <https://www.openfoam.com>
30. Полежаев В.И. Численное решение уравнений Навье-Стокса для течения и теплообмена в замкнутой двумерной области / *Дисс. на соискание ученой степени канд. технических наук*. М.: НИИТП. 1967, 196 с.

31. Башкин В.А., Егоров И.В. Численное исследование задач внешней и внутренней аэродинамики. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. 332 с. ISBN 978-5-9221-1524-7
32. Billet G., Abgrall R. An adaptive shock-capturing algorithm for solving unsteady reactive flows // *Computers and Fluids*. 2003, Vol. 32, № 10, pp. 1473-1495. [https://doi.org/10.1016/S0045-7930\(03\)00004-5](https://doi.org/10.1016/S0045-7930(03)00004-5)
33. Zhukov V.T., Novikova N.D., Feodoritova O.B. On the numerical simulation of combustion in a scramjet combustor using OpenFOAM // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2019, Vol. 11, № 2, pp. 266-276. <https://doi.org/10.1134/S2070048219020170>
34. Ivankin M., Nikolaev A., Sabelnikov V., Shiryaeva A., Talyzin V., Vlasenko V. Complex Numerical-Experimental Investigations of Combustion in Model High-Speed Combustor Ducts // *Acta Astronautica*. 2019, Vol. 158, pp. 425–437. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2018.11.046>
35. Pozzi A., Tognaccini R. Time singularities in conjugated thermo-fluid-dynamic phenomena // *J. Fluid Mech.* 2005, Vol. 538, pp. 361-376. <https://doi.org/10.1017/S002211200500529X>